



Universidad Nacional de Río Cuarto  
Facultad de Ingeniería

## PROGRAMA ANALÍTICO

**DEPARTAMENTO: TECNOLOGÍA QUÍMICA**

**CARRERA: INGENIERÍA QUÍMICA**

**ASIGNATURA: FISICOQUÍMICA**

**CÓDIGO: 9131**

**AÑO ACADÉMICO: 2017**

**PLAN DE ESTUDIO: 1994**

**UBICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIO: 1ER. CUATRIMESTRE DE 3er. AÑO**

**DOCENTE A CARGO: Dr. Joaquín A. Orejas – Profesor Titular**

**EQUIPO DOCENTE: Dr. Joaquín A. Orejas – Profesor Titular  
Dr. Marcelo David Flores – Jefe de Trabajos Prácticos  
Mic. Carlos Bettera – Jefe de Trabajos Prácticos  
Alumno Mariano J. Barjacoba – Ayudante de Segunda**

**RÉGIMEN DE ASIGNATURAS:**

<i>Aprobada</i>	<i>Regular</i>
-	0405
-	9129
-	0408

**ASIGNACIÓN DE HORAS:**

Semanales: 8

Totales → Teóricas: 92  
          → Prácticas → Resolución de problemas y explicación Laboratorio: 16  
                      → Laboratorio: 12  
                      → Proyecto: -  
                      → Trabajo de campo: -

**CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: Obligatoria**

**OBJETIVOS DE LA ASIGNATURA:**

Los objetivos generales de la asignatura son los siguientes:



- Capacitar a los alumnos en: la descripción del comportamiento de fluidos reales mediante el empleo de ecuaciones de estado, en la descripción del comportamiento no ideal de soluciones y del equilibrio de fases y en los aspectos básicos de la Ingeniería de las Reacciones.
- Posibilitar que los alumnos adquieran conocimientos y herramientas útiles para su aplicación en Asignaturas posteriores (Ingeniería de las Reacciones Químicas I, Operaciones Unitarias III, etc.)
- Estimular la creatividad y la capacidad de resolución de problemas prácticos por medio de experiencias de laboratorio.

## **CONTENIDOS:**

### **PROGRAMA ANALÍTICO:**

#### ***TEMA 1: El comportamiento de los fluidos***

Gases ideales: Relación V-P (Boyle-Mariotte). Relación V-T (Gay-Lussac). Ecuación de estado de gases ideales (Hipótesis de Avogadro). Mezclas de gases ideales. El comportamiento P-V-T de los gases reales: El factor de compresibilidad.

Ecuaciones de estado para fluidos reales:

La ecuación del virial: Aplicación a sustancias puras. Herramientas para el cálculo de coeficientes del virial para gases puros no polares y gases puros polares. Aplicación a mezclas de gases reales. Herramientas para el cálculo de los coeficientes de la mezcla (gas no polar-gas no polar, gas polar-gas no polar, gas polar-gas polar).

Ecuaciones de estado cúbicas: La ecuación de Redlich-Kwong genérica. Cálculo de funciones residuales y coeficientes de fugacidad. Evaluación de los parámetros de la ecuación. Cálculo de presiones de saturación de componentes puros. Relación con la ecuación del virial.

Ecuaciones de estado cúbicas para mezclas: La ecuación de Redlich-Kwong genérica. Reglas de mezclado y combinación. La ecuación de Soave-Redlich-Kwong: Aplicaciones a sustancias puras y mezclas. La ecuación de Peng-Robinson: Aplicaciones a sustancias puras y mezclas.

#### ***TEMA 2: Equilibrio de fases***

Introducción. La termodinámica clásica del equilibrio de fases. Sistemas homogéneos cerrados. Sistemas homogéneos abiertos. Equilibrio en un sistema heterogéneo cerrado. La ecuación de Gibbs-Duhem. La regla de las fases. El potencial químico. Fugacidad y actividad. Dependencia de la fugacidad de la mezcla y del coeficiente de fugacidad respecto de T, P y de la composición. Dependencia de la fugacidad respecto de la composición: Ley de Henry y regla de Lewis-Randall.

Propiedades de cambio de mezclado: Definición. Propiedades molares parciales de cambio de mezclado. La solución ideal (Lewis-Randall). Funciones termodinámicas de exceso: su relación con los coeficientes de actividad. Ecuaciones generales para la función de Gibbs. Modelos alternativos para soluciones ideales líquidas: convención simétrica y asimétrica del coeficiente de actividad.

Solubilidad de sólidos y líquidos en gases comprimidos. Equilibrio vapor-líquido de sistemas multicomponentes: El problema general. El método  $\phi$ - $\phi$ . El método  $\phi$ - $\gamma$ : Aplicación a sistemas ideales y no ideales. Dependencia de la función de Gibbs respecto de la composición: Ecuaciones de Margules, van Laar, Wilson, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC. Cálculo de puntos de burbuja y de puntos de rocío. Gráficos P-x-y, T-x-y, y-x. Cálculos "flash". Azeótropos homogéneos y heterogéneos. Miscibilidad de fases líquidas. Equilibrio líquido-líquido. Equilibrio vapor-líquido-líquido. Diagramas de equilibrio de fases.



### **TEMA 3: Cinética de las reacciones químicas**

Introducción: Los alcances de la cinética química. La estructura de las reacciones químicas. Redes de reacciones: reacciones globales, reacciones elementales. Intermedios reactivos. Orden y molecularidad de una reacción. La extensión de la reacción. La velocidad de la reacción química. Propiedades generales de la velocidad de la reacción para reacciones "simples". Ejemplos.

### **TEMA 4: Reactores experimentales para estudios cinéticos**

El balance de masa general. Reactores ideales: reactor tanque agitado discontinuo, reactor tanque agitado continuo, reactor tubular en flujo pistón. Estequiometría en reactores discontinuos y continuos. Tratamiento de formas elementales de expresiones de velocidad. Reacciones en fase gas. Reacciones en fase líquida. Definición de conversión. Relación entre conversión y velocidad de reacción. Ejemplos.

### **TEMA 5: Análisis de datos de velocidad de reacción en sistemas homogéneos**

Introducción. Tratamiento de datos experimentales obtenidos en reactores de laboratorio operados isotérmicamente: el método diferencial, el método integral, el método de las velocidades iniciales, el método de la vida media. Aplicaciones en la determinación de cinéticas a partir de datos experimentales obtenidos en reactores discontinuos, continuos y tubulares en flujo pistón. Aplicaciones.

### **TEMA 6: Análisis de secuencias de etapas elementales**

Introducción: Reacciones simples, secuencias abiertas y cerradas. El concepto de catálisis. La aproximación del estado pseudo-estacionario. Catálisis homogénea: el tratamiento cinético de las reacciones en cadena. Ejemplos. Síntesis de la expresión cinética a partir de datos experimentales. Determinación del mecanismo de reacción.

### **TEMA 7: Reacciones heterogéneas: Introducción a la catálisis heterogénea.**

El tratamiento cinético de las reacciones catalíticas heterogéneas: adsorción y desorción en superficies ideales. La isoterma de Langmuir. Etapas conceptuales involucradas en reacciones heterogéneas. Expresiones de velocidad para procesos de adsorción, desorción y reacciones superficiales. Desarrollo de expresiones de velocidad de reacción: aplicación de la aproximación del estado estacionario, aplicación de la aproximación de la etapa controlante. Cinéticas de Langmuir-Hinshelwood. Mecanismo de Eley-Rideal. Ejemplos de análisis de mecanismos de reacción. Determinación de expresiones de velocidad a partir de datos experimentales.

## **TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO**

- 1)-Determinación de la presión de vapor de componente puros, mezclas ideales y mezclas no ideales.
- 2)-Destilación de una mezcla azeotrópica. Determinación de composiciones por refractometría
- 3)-Equilibrio líquido-líquido. Determinación de temperatura máxima de cosoluto
- 4)-Cinética química. Reacción de un colorante con hidróxido de sodio. Determinación de órdenes de reacción seguida por espectrofotometría

## **BIBLIOGRAFÍA**

La mayor parte de los temas se desarrolla en base a los apuntes impresos realizados por la cátedra. Estos apuntes fueron elaborados en base a la bibliografía que se detalla a continuación. Dichas referencias pueden ser utilizadas para consulta sobre temas específicos.

TEMA 1:

"Physical Chemistry", P. Atkins & J. de Paula, OXFORD University Press, 8<sup>th</sup> Edition, 2006



Universidad Nacional de Río Cuarto  
Facultad de Ingeniería

"Classical Thermodynamics of Non-Electrolyte Solutions", H. Van Ness & N. Abbot, McGraw Hill, 1982

Publicaciones en revistas científicas

TEMA 2:

"Molecular Thermodynamics of Fluid Phase Equilibria". Prausnitz, J.M., R.L. Lichtenthaler, E. Gomes de Azevedo, 3<sup>rd</sup> Edition, Prentice-Hall PTR, (2000)

"Classical Thermodynamics of Non-Electrolyte Solutions", H. Van Ness & N. Abbot, McGraw Hill, 1982

Publicaciones en revistas científicas

TEMAS 3 a 7:

"Physical Chemistry", P. Atkins & J. de Paula, OXFORD University Press, 8<sup>th</sup> Edition, 2006

"Reaction Kinetics and Reactor Design", 2<sup>nd</sup> Edition; John B. Butt, Marcel Dekker, Inc., 2000.

"Kinetics of Chemical Processes"; Michel Boudart, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1968.

"The Elements of Chemical Kinetics and Reactor Calculations"; H. Scott Fogler, Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs., 1970.

"Chemical Reactor Design"; E.B. Nauman, Jhon Wiley & Sons, 1987.

Publicaciones en revistas científicas

### **METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA:**

Detallar modalidades de enseñanza empleadas (teórica, resolución de problemas, laboratorio, actividades de campo, prácticas en centros asistenciales, tareas de proyecto y diseño, etc.).

Con la finalidad de lograr los objetivos de la asignatura y como puede observarse en el programa analítico que se ha descrito, la asignatura se desarrolla mediante el dictado de siete temas o capítulos cuyos contenidos permiten definir dos secciones:

Sección 1: Temas 1 y 2

Sección 2: Temas 3 a 7

La Sección 1 trata sobre el comportamiento de los fluidos reales, ecuaciones de estado y del equilibrio de fases de sustancias puras y sistemas de múltiples componentes, que involucra del orden de 46 horas de clases teóricas. Por su parte en la Sección 2 se consideran los aspectos básicos de la cinética de las reacciones químicas homogéneas, reactores de laboratorio, tratamiento de datos experimentales y una introducción a la catálisis homogénea y heterogénea, involucrando un total de 32 horas de clases teóricas. La carga horaria en clases teóricas de cada tema es la siguiente: Tema 1: 14 horas, Tema 2: 32 horas, Tema 3: 5 horas, Tema 4: 6 horas, Tema 5: 5 horas, Tema 6: 6 horas, Tema 7: 10 horas. Lo que da un total de 78 horas de clases teóricas, distribuidas en quince semanas. Dos clases teóricas por semana, 7 horas semanales de clases teóricas.

El curso se complementa con cuatro prácticos de laboratorio y explicación de problemas, que involucran 40 horas más de trabajo frente alumnos.

### **MODALIDAD DE EVALUACIÓN:**

*Promoción:* promedio de calificaciones no menor a 7 en los cuatro exámenes parciales, los que son teórico-prácticos y por escrito, más la aprobación de los trabajos de laboratorio informe incluido, además de una asistencia no inferior al 80 % a las clases teóricas y asistencia obligatoria a los prácticos de laboratorio. En caso de que en un único examen de los cuatro previstos, se obtenga una calificación menor que siete pero mayor o igual que seis los alumnos pueden solicitar la recuperación de dicho examen a efectos de mantenerse en el régimen de promoción (ver Res. C.D. "Régimen de Alumnos y Enseñanza de Grado" de fecha mayo 1991, ver Res. C.S. N° 356/10 "Régimen de Estudiantes y de Enseñanza de Grado").



**Regularización:** Aprobación de los exámenes parciales teórico-prácticos con nota no inferior a 5, pudiendo recuperar como máximo 2 exámenes parciales, sobre el mismo tema o distinto, más la aprobación de los trabajos de laboratorio informe incluido. Los alumnos que regularizaron la asignatura, para su aprobación, deberán rendir un examen final escrito, teórico-práctico, sobre el contenido de toda la materia, que además podrá incluir temas de los prácticos de laboratorio.

**Exámenes Libres:** Aquellos alumnos que opten por rendir la asignatura en carácter de alumno libre, deberán cumplimentar para la aprobación de la misma, las mismas exigencias que se le requieren a los alumnos inscriptos formalmente en la asignatura, incluyendo como corresponde, el cumplimiento de las correlatividades correspondientes.

**CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES 2017:**

El cronograma de actividades que se implementará durante el primer cuatrimestre del 2017 es el siguiente:

	<b>Lunes (14:30 – 18:30 hs)</b>	<b>Viernes (16 – 19 hs)</b>
<b><u>Marzo</u></b>	<b><u>Día 13:</u></b> Teoría Tema 1	<b><u>Día 17:</u></b> Teoría Tema 1
	<b><u>Día 20:</u></b> Teoría Tema 1	<b><u>Día 24:</u></b> Día no laborable
	<b><u>Día 27:</u></b> Teoría Tema 1	<b><u>Día 31:</u></b> Teoría Tema 2
<b><u>Abril</u></b>	<b><u>Día 3:</u></b> Teoría Tema 2	<b><u>Día 7:</u></b> 1 <sup>er</sup> Parcial (Tema 1)
	<b><u>Día 10:</u></b> Teoría Tema 2	<b><u>Día 8:</u></b> Teoría Tema 2
	<b><u>Día 11:</u></b> Teoría Tema 2	<b><u>Día 14:</u></b> Día no laborable
	<b><u>Día 17:</u></b> 2 <sup>do</sup> Parcial (Tema 2, 1 <sup>ra</sup> Parte)	<b><u>Día 21:</u></b> Teoría Tema 2
	<b><u>Día 24:</u></b> Teoría Tema 2	<b><u>Día 28:</u></b> Teoría Tema 2
<b><u>Mayo</u></b>	<b><u>Día 1:</u></b> Día no laborable	<b><u>Día 5:</u></b> 3 <sup>er</sup> Parcial (Tema 2, 2 <sup>da</sup> Parte)
	<b><u>Día 8:</u></b> Teoría Tema 3	<b><u>Día 12:</u></b> Teoría Tema 3
	<b><u>Día 15:</u></b> Teoría Tema 3 / Tema 4	<b><u>Día 19:</u></b> Teoría Tema 4/ Tema 5
	<b><u>Día 22:</u></b> Teoría Tema 5	<b><u>Día 26:</u></b> Teoría Tema 6
	<b><u>Día 29:</u></b> Teoría Tema 6	
<b><u>Junio</u></b>		<b><u>Día 2:</u></b> Teoría Tema 7
	<b><u>Día 5:</u></b> Teoría Tema 7	<b><u>Día 9:</u></b> Teoría Tema 7
	<b><u>Día 12:</u></b> Teoría Tema 7	<b><u>Día 16:</u></b> Teoría Tema 7
	<b><u>Día 19:</u></b> Día no laborable	<b><u>Día 23:</u></b> 4 <sup>to</sup> Parcial (Temas 3 a 7)
	<b><u>Días 26 a 30:</u></b> Recuperatorios	



Universidad Nacional de Río Cuarto  
Facultad de Ingeniería

**BIBLIOGRAFÍA:**

Título	Autor/s	Editorial	Año de Edición	Ejemplares Disponibles
Molecular Thermodynamics of Fluid Phase Equilibria	Prausnitz, J.M., R.L. Lichtenthaler, E. Gomes de Azevedo	Prentice-Hall, PTR	3 <sup>rd</sup> Edition, 2000	No disponible en la Biblioteca
Reaction Kinetics and Reactor Design	John B. Butt	Marcel Dekker, Inc.	2 <sup>nd</sup> Edition, 2000	Un ejemplar de la edición anterior
Physical Chemistry	Atknis, P., de Paula, J.	OXFORD University Press	8 <sup>th</sup> Edition, 2006	No disponible en la Biblioteca
Chemical, Biochemical and Engineering Thermodynamics	Stanley I. Sandler	John Wiley & Sons Inc.	4 <sup>th</sup> Edition, 2006	No disponible en la Biblioteca

\_\_\_\_\_  
Firma Docente Responsable

\_\_\_\_\_  
Firma Secretario Académico