



PROGRAMA ANALÍTICO

DEPARTAMENTO: TECNOLOGÍA QUÍMICA

CARRERA: INGENIERÍA QUÍMICA

ASIGNATURA: FISICOQUÍMICA

CÓDIGO: 9131

AÑO ACADÉMICO: 2018

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 ϕ - ϕ . El método ϕ - γ : 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, 8th Edition, 2006



"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, 3rd 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, 8th Edition, 2006

"Reaction Kinetics and Reactor Design", 2nd 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 cada uno de los cuatro exámenes parciales teórico-prácticos con nota no inferior a 5, 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. Cuando la calificación en alguno de los exámenes parciales teórico-prácticos sea inferior a 5, el alumno tendrá la posibilidad de rendir un examen recuperatorio de dicho parcial. En caso de que la calificación obtenida en este recuperatorio no sea igual a superior a 5, el alumno quedará libre por parcial. Lo mismo vale para cada informe final de laboratorio. Un informe de laboratorio desaprobado deberá ser presentado nuevamente con las correcciones pertinentes. Si esta nueva versión del informe no fuera aprobada, el alumno quedará libre.

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 2018:

El cronograma de actividades que se implementará durante el primer cuatrimestre del 2018 es el siguiente:

	Lunes (14:30 – 18:30 hs)	Viernes (16 – 19 hs)
<u>Marzo</u>	<u>Día 12:</u> Teoría Tema 1	<u>Día 16:</u> Teoría Tema 1
	<u>Día 19:</u> Teoría Tema 1	<u>Día 23:</u> Teoría Tema 1
	<u>Día 26:</u> Teoría Tema 1	<u>Día 30:</u> Día no laborable
<u>Abril</u>	<u>Día 2:</u> Día no laborable	<u>Día 6:</u> 1 ^{er} Parcial (Tema 1)
	<u>Día 9:</u> Teoría Tema 2	<u>Día 13:</u> Teoría Tema 2
	<u>Día 16:</u> Teoría Tema 2	<u>Día 20:</u> Teoría Tema 2
	<u>Día 23:</u> Teoría Tema 2	<u>Día 27:</u> Teoría Tema 2
	<u>Día 30:</u> 2 ^{do} Parcial (Tema 2, 1 ^{ra} Parte)	
<u>Mayo</u>		<u>Día 4:</u> Teoría Tema 2
	<u>Día 7:</u> Teoría Tema 2	<u>Día 11:</u> Teoría Tema 2
	<u>Día 14:</u> Teoría Tema 3	<u>Día 18:</u> 3 ^{er} Parcial (Tema 2, 2 ^{da} Parte)
	<u>Día 21:</u> Teoría Tema 3 / Tema 4	<u>Día 25:</u> Día no laborable
	<u>Día 28:</u> Teoría Tema 4	
<u>Junio</u>		<u>Día 1:</u> Tema 4
	<u>Día 4:</u> Teoría Tema 5	<u>Día 8:</u> Teoría Tema 5/ Tema 6
	<u>Día 11:</u> Teoría Tema 6 / Tema 7	<u>Día 15:</u> Teoría Tema 7
	<u>Día 18:</u> Día no laborable	<u>Día 22:</u> 4 ^{to} Parcial (Temas 3 a 7)
	<u>Días 25 a 29:</u> Recuperatorios	



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 rd Edition, 2000	No disponible en la Biblioteca
Reaction Kinetics and Reactor Design	John B. Butt	Marcel Dekker, Inc.	2 nd Edition, 2000	Un ejemplar de la edición anterior
Physical Chemistry	Atknis, P., de Paula, J.	OXFORD University Press	8 th Edition, 2006	No disponible en la Biblioteca
Chemical, Biochemical and Engineering Thermodynamics	Stanley I. Sandler	John Wiley & Sons Inc.	4 th Edition, 2006	No disponible en la Biblioteca

Firma Docente Responsable

Firma Secretario Académico