

# PROPUESTA DE MODIFICACION DEL PLAN DE ESTUDIOS DE LA LICENCIATURA EN CIENCIAS QUÍMICAS FCEN – UBA

El nuevo Plan de Estudios para la Licenciatura en Ciencias Químicas de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires se formula atendiendo simultáneamente a las competencias profesionales que un Licenciado en Química de la República Argentina debe presentar, a las fortalezas y características institucionales, a la evaluación de las experiencias previas a través de los mecanismos instrumentados por la Comisión de Carrera de la Licenciatura en Cs. Químicas y otras fuentes de información apropiadas, así como a la situación actual de la disciplina a nivel nacional e internacional, y su evolución posible en un escenario de 2 a 3 décadas.

En lo que respecta a las competencias esperadas, la Res. 344/2009 del Ministerio de Educación de la Nación establece que un Licenciado en Química debe ser capaz, entre otras cosas, de planificar, dirigir, evaluar y efectuar estudios e investigaciones referidos a las sustancias constitutivas de la materia inanimada y viviente, sus combinaciones, sistemas, sus estructuras y propiedades, sus variaciones y las leyes y procesos que rigen sus interacciones, transformaciones y comportamientos; de planificar, dirigir, evaluar y efectuar muestreos, ensayos y análisis cuali y cuantitativos de los sistemas materiales para determinar su composición, estructura y propiedades; de diseñar y preparar sustancias inorgánicas y orgánicas con o sin actividad biológica, a partir de materiales de origen natural o sintético mediante síntesis o transformaciones químicas y biológicas; de participar en la transferencia de los conocimientos desde la escala laboratorio hasta procesos de fabricación, pasando por las sucesivas etapas intermedias, en aquellos procesos en los cuales se trata la materia para realizar un cambio de estado, del contenido de energía o de su composición.

Entre las fortalezas institucionales, destacan la importantísima actividad de investigación desarrollada desde la FCEyN-UBA tanto en la Química en general como en sus diversas subdisciplinas, el liderazgo de la misma a nivel nacional en algunas áreas (con sus respectivas evoluciones temporales), la sostenida tradición de actividades docentes tanto en el grado como en el posgrado, y fundamentalmente en el doctorado, y la excelente recepción de los Graduados en Química de la FCEyN-UBA en el mercado laboral; entre las características más recientes destaca la creciente vinculación con el medio social o productivo a través de programas de extensión, de asesorías calificadas o de órdenes de asistencia técnica.

La evaluación de experiencias previas, a través de sendas encuestas a Graduados de los planes de estudios 1957 (resultados publicados en 1994) y 1987 (informe CCLCQ 2012) rescatan como algunos de los principales aportes a la formación de los graduados el contacto con científicos activos en su disciplina, la exigencia y el contacto con instrumental relativamente avanzado; asimismo, valoran el rol de la carrera en el desarrollo de habilidades tales como la capacidad de análisis crítico de resultados, la predisposición a abordar diversas temáticas, la facilidad para ubicarse en situaciones novedosas y para resolver situaciones problemáticas.

Por otra parte, la implementación de una curricula amplia que incluya muy diversas temáticas –bajo la hipótesis de que ello permitiría al egresado acreditar conocimientos de una amplia variedad de áreas, facilitando la obtención de un primer empleo-, no parece haber incidido particularmente en su inserción laboral. Por el contrario, parecen más valorados para el ejercicio profesional –en vinculación con el punto analizado en el párrafo anterior- el desarrollo de la capacidad analítica y de profundización en temáticas específicas, del pensamiento crítico, de recursos propios para abordar situaciones problemáticas novedosas, así como la formación en determinadas temáticas comunes.

Por todo ello, *la mejor forma que puede ofrecer la FCEyN-UBA para la formación de sus Graduados de la Licenciatura en Ciencias Químicas es una formación sólida en el conjunto de temas básicos inherentes a la labor del Licenciado en Química, complementada en forma indisoluble con una experiencia de profundización temática en algún área específica, que permita al alumno incrementar su experiencia en temas de su interés particular, sea por la inquietud personal o por la posibilidad concreta de trabajar en los mismos, tanto en el ámbito de la investigación como de la industria.* Por lo tanto, *el Plan se estructura con un tronco de ejes conceptuales centrales y transversales a las subdisciplinas que aseguran*

los conocimientos básicos que todo alumno de Química debe poseer, involucrando las distintas áreas temáticas en que la Química se ha agrupado y un número de especializaciones resultantes de las fortalezas institucionales, las principales áreas de demanda de Graduados en la actualidad, y las perspectivas de crecimiento futuro de las subdisciplinas de la Química. Es imaginable que el número y el tipo de estas especializaciones varíe a lo largo del tiempo -para adaptarse a variaciones en los parámetros señalados- mucho más rápidamente que el tronco común. Por otra parte, se considera de alto valor formativo **la realización de un trabajo final, que permita al estudiante tomar un primer contacto con el ejercicio de la química en el ámbito profesional, ya sea académico, regulatorio, o productivo.**

El perfil distintivo de un químico es su comprensión de la materia desde el nivel atómico-molecular. Esta comprensión abarca la capacidad de diseñar y sintetizar compuestos y materiales, su análisis y la explicación de sus propiedades en base a la estructura molecular, la descripción y comprensión de los procesos de cambio de la materia. Por otra parte, la Licenciatura capacita para el desempeño en diversos campos en la frontera con la Física, la Biología, Medicina, Ingeniería Química, Bioquímica, Farmacia y otros campos interdisciplinarios donde el químico aporta su particular visión atómica de la materia y de sus transformaciones. En este panorama, los ejes temáticos transversales a casi toda la carrera, en los que es necesario poner el énfasis y realizar un seguimiento en pos de una visión abarcadora de la Química, que estructuran el ciclo troncal, son: i) síntesis y reactividad, ii) propiedades físicas macroscópicas y su relación con la estructura química, iii) las técnicas de medición y análisis en general y en particular dentro de ellas las mediciones de concentraciones y composiciones y las determinaciones de estructuras moleculares y iv) los estudios dinámicos y mecanísticos del cambio químico.

El presente Plan de Estudios, entonces, parte de la hipótesis de que un Licenciado en Química está en condiciones de ejercer idóneamente su profesión luego de haber adquirido un conjunto de conocimientos y competencias desarrollados en ese tronco, ejercitado la profundización temática en al menos algún área (quedando así en condiciones de ejercer con mayor sapiencia en la misma, o de profundizar en cualquier otra que el ejercicio profesional le requiera), y tenido algún primer contacto con el ambiente en que puede llegar a desarrollar su actividad profesional.

## **CARACTERISTICAS ESTRUCTURALES DEL NUEVO PLAN**

El nuevo plan de estudios incluirá:

- Un **conjunto de materias comunes, que abarque los contenidos troncales** de la Química que todo licenciado en química debe manejar ("**Ciclo Troncal**"). Este ciclo tendrá una carga horaria total de **3200 hs** (de 60 minutos).
- Un conjunto de materias que constituirán parte del "**Ciclo de Especialización**". Este conjunto de materias tendrá aproximadamente una carga horaria total de **600 hs** (de 60 minutos), y estará formado por un número (no menor que 4) de materias electivas y optativas, según la orientación propuesta.
- Un **trabajo final** de carácter obligatorio que formará parte del Ciclo de Especialización y permitirá un primer contacto profesional del estudiante con el medio en el cual puede llegar a desempeñarse, ya sea en el medio socio-productivo o académico. Este trabajo tendrá una duración total de **200hs** (de 60 minutos).

La Comisión de Carrera ha discutido en detalle, y acordado una serie de elementos a tener en cuenta para el **Ciclo Troncal**, que se describen a continuación; el propósito de este escrito es informar a los departamentos de los avances en la propuesta y recibir como respuesta opiniones fundadas de los inconvenientes y ventajas que podría tener este cambio.

### **Observaciones generales**

El **Ciclo Troncal** se ha subdividido en áreas temáticas, a las cuales se les ha asignado una carga horaria total teniendo en cuenta las necesidades de formación tanto teórico-prácticas como de laboratorio y sin perder de

vista el marco de referencia propuesto por el Foro de Decanos de Química a través de la Res. 344/2009 del Ministerio de Educación de la Nación.

Las cargas horarias totales para cada área temática son las siguientes:

Área definida y carga horaria total
Matemática: 320hs
Física: 400hs
Estadística: 64hs
Química General: 224hs
Química Inorgánica: 224hs
Química Orgánica: 416hs
Fisicoquímica: 416hs
Química Analítica: 512hs (Inorgánica: 288 – Orgánica (incluye algunos contenidos complementarios de bromatología): 224)
Química Biológica: 336 hs (incluye contenidos complementarios de microbiología y algunos temas de analítica relacionados con el área)
Complementarias: 288 hs (Materiales: 64hs – Química Industrial: 144hs – Nociones de Toxicología y Química Legal: 80hs)
Carga horaria total del Ciclo Troncal: 3200hs

Con respecto a los temas clasificados como “complementarios” en el ciclo de formación necesaria definido en la Resol.ME344/09, resulta conveniente incluir algunos contenidos en el Ciclo Troncal, fundamentalmente aquellos relacionados con las orientaciones que se propongan para el Ciclo de Especialización, a fin de contribuir a que los estudiantes puedan elegir que orientación seguirán. El dictado de estos contenidos no implicaría necesariamente la existencia de materias específicas, podrían ser abordados dentro de materias generales, como un módulo independiente o incorporado a las otras unidades.

Con respecto a temas de Legislación en Higiene y Seguridad y de Uso Responsable del Conocimiento, se sugiere incorporarlos a través de las actividades prácticas y de laboratorio, y especialmente en las materias que incluyan temas de toxicología y de química industrial.

Con respecto a las guías de trabajos prácticos y de laboratorio, se propone homogeneizar el formato en las distintas materias de la carrera, coordinando especialmente los contenidos de materias complementarias entre sí, y de aquellas que presentan distintos aspectos del mismo concepto, por ejemplo incorporando en las guías referencias explícitas a temas dados en otras materias. Además, se sugiere encabezar cada guía con la explicación de los objetivos pedagógicos de la práctica, sea afianzar conceptos vistos en teóricas, desarrollar destrezas en el uso de alguna técnica u otro.

A continuación se plantean algunas inquietudes generales y posteriormente los temas e inquietudes particulares de cada área temática.

#### **Inquietudes generales a discutir y recabar la opinión de los departamentos:**

##### **1) Clases de Laboratorio:**

¿Cuáles son los objetivos específicos de las clases de laboratorio en las distintas materias? ¿Se pone suficiente énfasis en la confección de informes?

¿Cómo se evalúan los laboratorios?

¿Se toman los contenidos en los parciales?

¿En el caso de turnos múltiples, hay homogeneidad en el dictado y en los criterios de evaluación de los distintos turnos?

2) Clases de problemas o teórico-práctico:

¿Qué alternativas sugerirían para incrementar la interacción docente-alumno?

¿Considera útil el uso de material audiovisual provisto por vía virtual?

¿Sería útil la evaluación de problemas a realizar en domicilio con entrega?

3) Temas de estadística:

¿Qué tema específico de estadística debería estar en el ciclo troncal?

¿Considera conveniente que esta materia continúe siendo dictada por profesores del Departamento de Matemática?

### **Observaciones e inquietudes particulares para cada área temática, a discutir y recabar la opinión de los departamentos**

Los posibles contenidos esenciales, objetivos y organización para cada una de las áreas temáticas incluidas en el Ciclo Troncal del plan de estudios propuesto se exponen a continuación. Se sugieren además los temas a tratar en una única área temática y aquellos que deben coordinarse entre distintas áreas. Por último, se identifican los temas de matemática y física que resultan esenciales y algunas inquietudes que han surgido del debate.

#### **• Química General**

##### **Estructura de materias:**

Se propone una única materia de 224hs (14hs semanales) con al menos un 50% de clases de laboratorio.

##### **Contenidos esenciales propuestos**

- 1) Introducción a la química y a la experimentación:** fenómenos químicos bajo enfoques microscópico y macroscópico; energía cinética (temperatura, movimiento, teoría cinética de gases ideales); energías potenciales e interacciones entre átomos (noción de unión química, interacción intermolecular); relación entre ellas; curvas/superficies de energía potencial.
- 2) Estructura atómica y molecular:** fundamentos de la mecánica cuántica; aplicación computacional; espectroscopía; átomos; propiedades periódicas; uniones químicas; orbitales moleculares y enlace de valencia.
- 3) Interacciones intermoleculares y estados de agregación:** características moleculares que determinan la naturaleza de la interacción; gases reales, líquidos y sólidos; modelos simples (van der Waals, sólidos iónicos, autoensamblado).
- 4) Cinética química:** interpretación microscópica de una reacción química; definición de velocidad y ecuación de velocidad; determinación de la ecuación de velocidad; Arrhenius y energía de activación; mecanismos de reacción; aproximaciones de estado estacionario y pre-equilibrio; catálisis.
- 5) Termodinámica y termoquímica:** principios; estado de equilibrio; procesos; funciones termodinámicas, propiedades de las funciones de estado; termoquímica; entropía desde el punto de vista macroscópico y microscópico; espontaneidad en sistemas aislados y a temperatura y presión constantes; energía libre; sólidos cristalinos perfectos; uso de tablas.

**6) Equilibrio de fases:** fases, cambios de fase y diagramas; ecuaciones de Clapeyron y Clapeyron-Clausius; regla de las fases; termodinámica de sistemas de dos componentes, soluciones ideales; propiedades coligativas.

**7) Equilibrio químico:** ley de acción de masas; aspectos termodinámicos del equilibrio químico, constante de equilibrio, equilibrios en fase homogénea y heterogénea, dependencia de la constante de equilibrio con la temperatura, relación de la constante de equilibrio con el cambio de energía libre; principio de Le Chatelier.

**8) Aplicación a equilibrios en solución:**

**i.- equilibrio ácido-base:** ácidos y bases, teorías de Arrhenius, Bronsted-Lowry y Lewis; autoprotólisis del agua, ácidos y bases fuertes y débiles, disociación; descripción microscópica del entorno de solvatación; pH; hidrólisis de sales; diagrama de especies; titulación; ácidos polipróticos; soluciones reguladoras.

**ii.- equilibrio óxido-reducción:** estado de oxidación; potenciales de electrodo; tendencias periódicas; celdas galvánicas; descripción termodinámica del equilibrio red-ox, ecuación de Nernst, espontaneidad y equilibrio químico; celdas de concentración; electrólisis y leyes de Faraday.

**iii.- equilibrio de precipitación y de formación de complejos:** solubilidad, producto de solubilidad, factores que lo afectan (temperatura, iones comunes, hidrólisis, pH); solubilidad en agua y en presencia de otras especies; constante de formación de complejos, equilibrios acoplados.

### **Contenidos esenciales propuestos para las clases de laboratorio**

- Manejo del instrumental básico de un laboratorio de química.
- Construcción y uso de curvas de calibración.
- Conceptos básicos referentes a error de una medida. Precisión y exactitud.
- Estructura atómica y molecular: uso de programas para realizar cálculos por métodos ab-initio y semiempíricos. Visualización de geometrías y orbitales moleculares. Cálculos de propiedades atómicas y moleculares. Cómputo de curvas de energía potencial.
- Espectroscopía de absorción visible. Ley de Beer. Determinación de espectros moleculares. Emisión atómica a la llama.
- Interacciones intermoleculares. Encapsulamiento de iones y moléculas en sistemas más complejos.
- Cinética química. Estudio de la velocidad de una reacción química mediante métodos espectroscópicos. Uso de condiciones de pseudo-orden. Determinación de los órdenes de reacción y de la ecuación de velocidad. Uso de los métodos diferencial e integral. Comprobación de la ecuación de Arrhenius y determinación de la energía de activación.
- Estudio experimental de la energética de distintos procesos. Determinación calorimétrica de calores de cambio de fase y de reacción. Aplicación de la ley de Hess para calcular entalpías de reacción.
- Medidas crioscópicas a partir de curvas de enfriamiento. Determinación de propiedades coligativas.
- Estudio de los distintos factores que afectan el estado de equilibrio de una reacción química. Determinación experimental de la constante de equilibrio de una reacción. Ilustración del principio de Le Chatelier.
- Estudio del equilibrio de una reacción ácido-base. Uso de indicadores y de pH-metro. Confección de una curva de titulación potenciométrica y determinación del punto final utilizando indicadores ácido-base. Preparación y comprobación de la capacidad reguladora de soluciones buffer.
- Estudio del equilibrio de una reacción de óxido-reducción. Determinación de la fuerza relativa de agentes oxidantes y reductores. Verificación experimental de la ecuación de Nernst. Medida del potencial estándar de una cupla redox. Electrólisis. Verificación de las leyes de Faraday. Confección de una batería para generar energía eléctrica.

### **Temas que se imparten únicamente en esta área:**

- Propiedades periódicas
- Interacciones intermoleculares: características moleculares que determinan la naturaleza de la interacción
- Termoquímica
- Descripción microscópica del entorno de solvatación

### **Temas que se deben coordinar porque se profundizan o se retoman en otras áreas/materias:**

- con Química inorgánica:

- i. temas de reactividad y estructura del punto 2.
- ii. temas de estructura de gases reales, líquidos y sólidos del punto 3.
- iii. temas de cinética en general, aplicación de los conceptos del punto 4.
- iv. terminología y conceptos del punto 5.
- v. temas del punto 8ii y 8iii se ven con mayor profundidad.

-con Química Orgánica:

- i. temas de reactividad y estructura del punto 2.
- ii. temas de cinética en general, aplicación de los conceptos del punto 4.
- iii. terminología y conceptos del punto 5.
- iv. conceptos aplicados a métodos separativos; en particular a destilación y cristalización.

-con Fisicoquímica:

- i. los contenidos de los puntos 1-7 son vistos en mayor profundidad.

-con Química Analítica:

- i. los contenidos del punto 8 son vistos en mayor profundidad.

-con Química Biológica:

- i. temas de unión a metales del punto 2.
- ii. temas de cinética en general, y en particular, cinética enzimática y la aproximación de Michaelis-Menten.
- iii. terminología y conceptos del punto 5.

-con las complementarias:

- i. para química industrial se requieren temas de cinética en general, aplicación de conceptos del punto 4 en el diseño de reactores.
- ii. para química industrial se requieren la terminología y conceptos del punto 5.
- iii. para química industrial se requiere conceptos del punto 6 para los temas de transferencia de materia entre fases y operaciones de separación.

**Conceptos de matemática necesarios:**

- Derivadas e Integrales.
- Probabilidad. Densidad de probabilidad. Distribución normal.
- Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas.

**Conceptos de física necesarios:**

- Conceptos de dinámica y cinemática.
- Ley de Ohm, circuitos en serie.

**Inquietudes particulares del área a discutir y recabar la opinión de los departamentos:**

- 1) ¿Qué ventajas o desventajas tiene dictar la materia de manera conjunta para químicos y biólogos? ¿Existiría algún beneficio para los químicos si se dictaran separadas?
- 2) ¿Cómo organizar la materia con el gran número de alumnos que tiene? ¿Cómo verificar que exista homogeneidad entre los distintos turnos de teóricas/problemas?
- 3) ¿Los conceptos de probabilidad y distribución normal necesarios, que no se ven en las materias del CBC, se introducen en la misma materia o sería conveniente pedir otra materia de matemática como correlativa?

- **Química Inorgánica**

**Estructura de materias:**

Se propone una única materia de 224hs (14hs semanales) con al menos un 50% de clases de laboratorio.

**Contenidos esenciales propuestos**

### **1- Estructura y enlace**

Estructuras de Lewis, Hibridación. TREPEV. Simetría y Teoría de Grupos. Orbitales Moleculares (diatómicas, triatómicas). Estructuras de sólidos: empaquetamientos compactos, técnicas de difracción, Ley de Bragg, estructuras cristalinas de monocristal.

### **2-Tabla Periódica, Grupos de bloque principal**

Tendencias periódicas en propiedades. Grupos de bloque principal: Alcalinos, grupos del B, C, N, O y halógenos: obtención, propiedades y reactividad de los elementos más relevantes.

### **3-Metales de transición, lantánidos, actínidos**

Metales de transición, lantánidos y actínidos: propiedades generales. Metalurgias, obtención de lantánidos y actínidos. Estados de oxidación. Formación de compuestos de coordinación. Radioactividad.

### **4-Compuestos de coordinación. Generalidades.**

Geometrías, ligandos, isomería. Síntesis, distintos procedimientos generales: a partir de sales inorgánicas y ligandos, por intercambio de ligandos, modificación de ligandos.

### **5-Estructura de compuestos de coordinación**

Campo cristalino. Estructura electrónica de compuestos de coordinación: serie espectroquímica, campo de ligandos, orbitales moleculares. Regla de los 18 electrones. Espectroscopía. Magnetismo.

### **6-Reactividad de compuestos de coordinación**

Intercambio de ligandos, efecto trans. Transferencia electrónica. Reactividad organometálica: reacciones sobre el metal: adición oxidativa, eliminación reductiva. Reacciones sobre los ligandos. Catálisis homogénea.

### **7-Bioinorgánica, química de estado sólido**

Sitios activos. Propiedades de almacenamiento y transporte: Fe, Cu, Zn y V. Grupos hemo y citocromos. Procesos redox biológicos. Sólidos iónicos. Defectos. Estructura de bandas. Conductividad eléctrica.

### **Contenidos esenciales propuestos para las clases de laboratorio**

- \* Técnicas de preparación de compuestos: calentamiento, reflujo, adiciones controladas, etc.
- \* Técnicas de purificación de compuestos: destilación, precipitación, cristalización, extracción, cromatografía en columna, sublimación, etc.
- \* Técnicas de caracterización de compuestos: espectroscopías UV-vis, IR, cristalografía RX, electroquímica, momento magnético efectivo.
- \* Familiarización con el aspecto y colores de compuestos sólidos, líquidos y gaseosos, algunos de ellos incluyendo metales de transición.

### **Temas que se imparten únicamente en esta área:**

- Propiedades periódicas sistematizadas por grupos
- Descripción del enlace a lo largo de la tabla periódica
- Estructura de sólidos. Empaquetamientos. Monocristal.
- Obtención y reactividad de compuestos simples a lo largo de la tabla periódica.
- Metales de transición. Lantánidos y Actínidos. Estructura y reactividad. Radioquímica.
- Química de coordinación. Estructura y reactividad. Prop. Electrónicas y magnéticas.

### **Temas que se deben coordinar porque se profundizan o se retoman en otras áreas/materias:**

-con Química General:

- i. temas de reactividad y estructura (interacc. intermolec., cinética)

- ii. terminología y conceptos de termodinámica y termoquímica (energía libre de gibbs).
- iii. equilibrio químico (ácido-base, redox, solubilidad).

-con Química Orgánica:

- i. temas de enlace del punto 1.
- ii. temas de reactividad y estructura (interacc. intermolec., sustituciones nucleofílicas y electrofílicas, isomería).
- iii. laboratorio: metodologías vinculadas a la preparación, purificación y caracterización de sustancias químicas (destilación al vacío, cristalización, cromatografía).

-con Físicoquímica:

- i. estructura, enlace y espectroscopía.

-con Química Analítica:

- i. equilibrio químico (ácido-base, redox, solubilidad)
- ii. compuestos de coordinación (complejometría, analítica cualitativa).

-con Química Biológica:

- i. Metales de transición (sitios activos, catálisis, procesos redox)
- ii. Compuestos de Coordinación (sitios activos, catálisis, procesos redox)

-con las complementarias:

- i. área Qca. Industrial: obtención de sustancias: procesos industriales ( $\text{Cl}_2$ ,  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , metalurgias)
- ii. Área materiales: estructura de sólidos, compuestos de coordinación (MOF's), óxidos (perovskitas, ferritas, espinelas, etc).

**Conceptos de matemática necesarios:**

- Derivadas e Integrales.
- Probabilidad. Densidad de probabilidad. Distribución normal.
- Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas.

**Conceptos de física necesarios:**

- Conceptos de dinámica y cinemática.
- Electromagnetismo.
- Difracción.

**Inquietudes a discutir y recabar la opinión de los departamentos:**

- 1) Cómo establecer la integración y complementariedad con los laboratorios del área de Qca. Orgánica: técnicas experimentales de síntesis, purificación y caracterización de sustancias químicas?
- 2) Cómo establecer la integración con temas del Área de Físicoquímica: estructura electrónica, espectroscopía, propiedades magnéticas, cinética de reacciones?
- 3) ¿Los conceptos de difracción y electromagnetismo se introducen en la misma materia o sería conveniente pedir alguna materia de física como correlativa?

• **Química Orgánica**

**Estructura de materias:**

Se proponen dos materias de 208 h (13 h semanales) cada una, con al menos un 50% de clases de laboratorio.

**Contenidos esenciales propuestos para las clases teóricas y de problemas**

**1. Introducción general.** Química del carbono. Hibridación. Grupos funcionales más importantes. Dobles enlaces. Sistemas aromáticos. Conjugación. Resonancia. Forma de las moléculas y propiedades. Interacciones intermoleculares.

**2. Isomería y estereoisomería.** Configuración y conformación. Rotación alrededor de enlaces simples. Etano, butano. Formas de dibujar distintas conformaciones. Cicloalcanos. Tensión angular y tensión por eclipsamiento. El ciclohexano: formas silla, bote, bote torcido. Isomería geométrica E-Z. Isomería en compuestos cíclicos. Isomería óptica. Rotación de la luz polarizada. Estereocentros. Configuración absoluta y relativa. Convención de Fischer. Nomenclatura R-S. Más de un estereocentro: diastereómeros, formas *meso*. Resolución de mezclas racémicas.

**3. Mecanismos e intermediarios de reacción.** Cinética y termodinámica. Perfiles de reacción. Intermediarios: carbocationes, carbaniones, carbenos, radicales. Estabilidad de los intermediarios. Factores estéricos, electrónicos e hiperconjugación.

**4. Sustitución nucleofílica y eliminación sobre átomos de C saturado.** Mecanismos  $S_N1$  y  $S_N2$ . Diferencias de reactividad de distintos compuestos. Estereoquímica. Ejemplos con halogenuros de alquilo. Nucleofilicidad vs basicidad. Capacidad como grupo saliente. Mecanismos E1 y E2. Diferencias de reactividad con distintas bases. Estereoquímica. Competencia entre los cuatro mecanismos. Alcoholes. Características físicas y químicas. Reacciones de sustitución y eliminación. Eteres y epóxidos. Fenoles.

**5. Adición al doble enlace C-C.** Alquenos y alquinos. Adición electrofílica. Orientación y estereoquímica. Regla de Markovnikov. Reacciones de formación de compuestos saturados. Adición conjugada: control cinético y termodinámico. Reacciones de oxidación del enlace  $\pi$  sin ruptura del enlace  $\sigma$  y con ruptura del enlace  $\sigma$ . Ozonólisis. Adiciones a alquinos.

**6. Introducción a los métodos espectroscópicos.** Espectroscopía de absorción y determinación de la estructura de las sustancias por el empleo de dicha espectroscopía. Espectroscopía UV-visible. Espectroscopía infrarroja. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear. Desplazamiento químico y acoplamiento. Espectrometría de masa.

**7. Reacciones de compuestos aromáticos.** Aromaticidad. Regla de Hückel. Sustitución electrofílica aromática. Mecanismo. Compuestos aromáticos activados y desactivados. Orientación en la segunda sustitución. Sistemas aromáticos policíclicos. Orientación en la tercera sustitución. Oxidación de cadenas laterales. Sustitución nucleofílica aromática por distintos mecanismos.

**8. Reacciones radicalarias y pericíclicas.** Etapas de una reacción radicalaria. Iniciadores e inhibidores. Halogenación de alcanos. Reacciones en cadena. Simetría orbital. Reacciones electrocíclicas. Reacciones de cicloadición. Reacciones de Diels-Alder.

**9. Funcionalización e interconversión de grupos funcionales.** Oxidación y reducción de alcoholes y compuestos carbonílicos; reacciones específicas. Ácidos carboxílicos y derivados. Sustitución en el grupo acilo. Reactividad de los distintos derivados. Degradación de amidas. Halogenación en  $\alpha$  de compuestos carbonílicos.

**10. Formación de enlace C-C y síntesis.** Enolización de compuestos carbonílicos. Condensación de compuestos carbonílicos. Reacción aldólica y relacionadas. Síntesis malónica y acetoacética. Enaminas. Reacciones con iluros y con organometálicos. Reacción de Michael. Anelación de Robinson. Aplicaciones prácticas de la reacción de Diels-Alder.

**11. Filosofía de la síntesis orgánica.** Planificación de una síntesis. Síntesis convergentes y lineales. Retrosíntesis. Sintones. Grupos protectores. Inducción asimétrica. Quimio-, regio- enantio- y diastereo-selectividad. Quirones.

**12. Compuestos nitrogenados.** Aminas. Basicidad y estructura. Sales de amonio cuaternario. Reacciones de las aminas. Eliminación de Hoffman. Generación de sales de diazonio y reacciones de las mismas. Otros compuestos nitrogenados.

**13. Compuestos heterocíclicos.** Sistemas aromáticos heterocíclicos. Pirrol, furano, tiofeno. Piridina. Reacciones de sustitución aromática electrofílica y nucleofílica. Basicidad. Heterociclos saturados. Heterociclos condensados. Heterociclos con más de un heteroátomo.

**14. Hidratos de carbono.** Monosacáridos. Configuración y conformación. Furanosas, piranosas y forma aldehídica. Mutarrotación. Reacciones. Glicósidos. Oligosacáridos y polisacáridos. Determinación de estructura. Acidos nucleicos. ADN y ARN. Estructura y reacciones.

**15. Aminoácidos y péptidos.** Aminoácidos. Propiedades físicas y químicas. Zwitteriones. Punto isoeléctrico. Síntesis de aminoácidos. Unión peptídica. Determinación estructural de péptidos. Síntesis de péptidos. Grupos protectores. Estructura de proteínas.

**16. Lípidos.** Triglicéridos. Jabones y detergentes. Lípidos complejos. Fosfolípidos, glicolípidos y esfingolípidos. Colesterol.

**17. Polímeros sintéticos.** Mecanismos de polimerización. Polímeros por crecimiento en cadena y polímeros por crecimiento en etapas. Características. Copolímeros. Polímeros estereoespecíficos.

### **Contenidos esenciales propuestos para las clases de laboratorio**

#### **a. Técnicas separativas y de purificación**

Destilación fraccionada. Destilación a presión reducida. Arrastre con vapor

Extracción líquido-líquido. Extracción ácido-base.

Recristalización.

Resolución de mezclas racémicas.

Cromatografía en columna.

#### **b. Técnicas de caracterización e identificación**

Determinación de puntos de fusión y ebullición.

Reacciones de reconocimiento de distintos grupos funcionales.

Cromatografía en capa delgada.

Introducción a la cromatografía gaseosa y a la cromatografía de alta resolución.

Determinación de pureza óptica por polarimetría.

Introducción a la resonancia magnética nuclear.

#### **c. Síntesis de compuestos orgánicos.**

Se realizan una serie de trabajos prácticos que implican la síntesis de compuestos orgánicos donde se enfatizan distintos aspectos:

- Mecanismos de las reacciones involucradas.
- Cuestiones prácticas relacionadas con la implementación del proceso sintético elegido (condiciones de reacción, estrategias de separación y purificación de los productos)
- Identificación de los productos.

En cada caso se aplican los conceptos mencionados en los puntos **a** y **b**. Como ejemplo de estos trabajos prácticos se pueden mencionar:

- ✓ Síntesis de halogenuros de alquilo y vinilo.
- ✓ Síntesis de compuestos aromáticos
- ✓ Síntesis de compuestos carbonílicos y estudio de sus reacciones características.
- ✓ Construcción de enlaces carbono-carbono:

Reactivos organometálicos

Reacciones aldólicas y relacionadas

Reactivos basados en iluros de fósforo.

- ✓ Síntesis de heterociclos.
- ✓ Síntesis y caracterización de polímeros.

#### d. Química bioorgánica

Hidratos de carbono, lípidos y aminoácidos: análisis, purificación y caracterización.

#### Temas que se correlacionan con los dictados en otras áreas/materias:

-con Química General:

- i. temas de enlace
- ii. temas de cinética y termodinámica del mecanismo de reacciones

-con Química Inorgánica

- i. temas de enlace
- ii. temas de reactividad y estructura (interacciones intermoleculares, sustituciones nucleofílicas y electrofílicas, isomería)
- iii. laboratorio: metodologías vinculadas a la preparación, purificación y caracterización de sustancias químicas (destilación al vacío, cristalización, cromatografía), reactivos organometálicos

-con Química Analítica

- i. espectroscopía

-con Química Biológica:

- i. Hidratos de carbono
- ii. Proteínas
- iii. Acidos nucleicos

-con Físicoquímica:

- i. temas de cinética y termodinámica del mecanismo de reacciones
- ii. temas de espectroscopía

-con las complementarias:

- i. con química industrial, coordinar temas de técnicas separativas y de purificación con los métodos de diseño de equipos para operaciones unitarias en escala industrial
- ii. Área materiales: polímeros sintéticos.

#### Conceptos de matemática necesarios:

- Derivadas e Integrales.
- Probabilidad. Densidad de probabilidad. Distribución normal.
- Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas.

#### Conceptos de física necesarios:

- Conceptos de dinámica y cinemática.
- Electromagnetismo.
- Difracción.

#### Inquietudes a discutir y recabar la opinión de los departamentos:

- 1) Cuáles son las ventajas de discutir temas de proteínas y ácidos nucleicos a nivel introductorio en el área de química orgánica?
- 2) Cómo establecer la integración QO-QB en estos temas?

## • Química Analítica

### Química Analítica (DQIAQF)

Contexto de la química analítica.

Escalas analíticas. Analitos y matrices. Errores sistemáticos y aleatorios del análisis químico. Tratamiento estadístico de los datos y evaluación de resultados. Intervalos de confianza. Toma de muestra. Control de la incertidumbre de muestreo. Tratamiento de muestras sólidas. Estandarización, calibración y calidad del análisis químico. Trazabilidad, variabilidad intra-laboratorio e interlaboratorio.

### Quimiometría

Calibración univariada. Estimación de los parámetros de la regresión. Regresión ponderada y no ponderada. Predicción de una muestra incógnita. Cifras de mérito de método: sensibilidad, sensibilidad analítica, Límites de detección y cuantificación, rango dinámico. Comparación de métodos analíticos: exactitud y precisión.

Calibración multivarida: Notación matricial, análisis de colinealidad de sensores, Coeficientes de regresión método clásico de cuadrados mínimos (CLS). Cifras de mérito. Regresión por cuadrados mínimos inversos. Regresión por componentes principales (PCR). Regresión por cuadrados mínimos parciales (PLS). Residuos de ajuste y cifras de mérito. Comparación.

### Incertidumbre en metodologías de análisis químicos

Parámetros de la validación de metodologías de análisis. Estimación de la incertidumbre: modelo estadístico aplicado y sus ecuaciones. Incertidumbre combinada y cálculo de la incertidumbre expandida.

Intervalos de confianza y cumplimiento de límites de especificación o regulatorios. Control estadístico en Laboratorios. Discusión de casos.

### Volumetrías ácido base.

Definición de pH. Actividad y concentración. Anfolitos y poder regulador. Descripción exacta de la curva de titulación. Evaluación de puntos importantes. Detección del punto final mediante indicadores visuales.

Estimación de los errores de titulación. Resolución de mezclas compatibles de anfolitos y bases.

### Determinaciones basadas en reacciones de precipitación.

Estimación de los puntos importantes de una curva de titulación por precipitación. Valoraciones argentimétricas. Detección del punto final con indicadores visuales. Métodos de Mohr, Volhard y Fajans. Evaluación de la curva de titulación y monitoreo potenciométrico. Métodos gravimétricos. Formación de precipitados, nucleación y crecimiento de partículas. Incertidumbres del método gravimétrico. Interferencias en métodos basados en reacciones de precipitación.

### Volumetrías por formación de iones complejos.

Complejantes útiles en química analítica. Estimación de los puntos importantes de una curva de titulación por formación de complejos. Efecto del pH y de complejantes auxiliares. Eliminación de interferencias. Indicadores metalocrómicos.

### Volumetrías por reacciones de óxido-reducción.

Oxidantes y reductores útiles en química analítica. Estimación de los puntos importantes de la curva de titulación. Detección del punto final por indicadores redox. Diferencias y similitudes entre las distintas curvas de titulación.

### Potenciometría

Electrodos indicadores metálicos. Primera, segunda y tercera clase. Electrodos indicadores de membrana. Clasificación de membranas. Membranas selectivas a iones. Electrodo de vidrio para medidas de pH y otros cationes. Interferencias y error alcalino. Titulaciones potenciométricas. Transistores de efecto de campo selectivos a iones.

### Conductimetría

Conductividad eléctrica en soluciones de electrolitos. Conductancia y conductividad en electrolitos fuertes y débiles. Movilidad de iones. Número de transporte. Conductividad y las interacciones entre iones. Instrumentación. Titulaciones conductimétricas. Detectores basados en medidas de conductividad.

#### Amperometría

Señales de excitación. Cronoamperometría. Voltamperometría de barrido lineal y de impulsos. Respuesta de especies en solución y adsorbidas. Métodos de redisolución. Electrodo enzimáticos. Instrumentación.

#### Espectrofotometría de absorción molecular

Absorción de la luz. Ley de Beer. Desviaciones a la ley de Beer y desviaciones experimentales. Análisis de error en absorciometría. Tipos de espectrofotómetros. Ventajas y desventajas. Fuentes de luz y rangos de utilización. Resolución espectrofotométrica de mezclas.

#### Espectrofotometría de emisión molecular

Diagrama de estados. Emisión fluorescente y fosforescente. Relación entre la concentración y la emisión. Medición de luminiscencia molecular. Fluorímetros. Fuentes de luz. Tipos de detectores. Límites de detección. Amortiguación (Quenching) de fluorescencia. Sondas fluorescentes. Sensores basados en amortiguación. Métodos por quimioluminiscencia.

#### Espectroscopías atómicas.

Métodos de atomización: descripción de llamas, atomización electrotérmica, arcos y chispas, plasma. Preparación de muestras e introducción a la celda analítica. Instrumental asociado. Corrección de interferencias y fondo espectral. El espectrómetro de masas cuadrupolar. Aplicaciones. Límites de cuantificación

#### Cromatografía

Clasificación y descripción de distintas técnicas de cromatografía. Teoría cromatográfica. Principios y definiciones generales: tiempo de retención, tiempo muerto, tiempo de retención corregido, resolución, eficiencia cromatográfica. Parámetros termodinámicos. Ensanchamiento de picos. Número de platos teóricos, cálculo de la altura equivalente de plato teórico. Ecuación de Van Deemter. Fases estacionarias y móviles en cromatografía de gases, líquida y de fluidos supercríticos. Mecanismos de separación. Aplicaciones y consideraciones prácticas. Descripción general de los elementos que componen los equipos de cromatografía de gases y líquida: inyectores, columnas y detectores según cada técnica cromatográfica. Aplicaciones analíticas.

#### Métodos cinéticos de análisis

Métodos absorciométricos basados en cinética de reacciones. Ambito de uso de métodos cinéticos. Métodos catalíticos. Métodos enzimáticos.

#### Automatización en química analítica

Métodos manuales vs. métodos automáticos. Error y velocidad de análisis. Métodos discretos. Métodos en flujo. FIA. Miniaturización. Lab on a chip.

### **Contenidos esenciales propuestos para las clases de laboratorio**

COMPLETAR POR EL DEPARTAMENTO

#### **Química Analítica (DQO)**

##### ESPECTROMETRÍA DE MASA

FUNDAMENTOS. Introducción. Camino libre medio. Teoría del cuasi-equilibrio. Tipos de iones. Tipos de fragmentaciones. El espectrómetro de masa: Sistemas de introducción de muestras; fuente de ionización, analizador, óptica iónica, bombas de vacío y detectores.

##### MÉTODOS DE IONIZACIÓN.

Métodos con volatilización previa. Ionización por electrones. Ionización química.

Métodos de desorción. Fundamentos de la desorción de partículas cargadas por impacto con proyectiles. Sistemas de matriz sólida y matriz líquida. Espectrometría de masa de iones secundarios. Desorción por ionización química. Desorción por Láser. Desorción por Láser asistida por matriz (MALDI). Métodos de ionización a presión atmosférica: Electrospray (ESI), Ionización Química a presión atmosférica (APCI), Fotoionización a presión atmosférica (APPI). Ionización por láser a presión atmosférica. Desorción por electrospray (DESI) y técnicas relacionadas. Análisis directo en tiempo real (DART).

## ANALIZADORES y DETECTORES.

Características de un analizador: Resolución, Sensibilidad, Precisión, Rango de masas. Barridos. Alta resolución. Descripciones y fundamentos teóricos de los analizadores: Cuadrupolo y Trampas iónicas; Multipolos; Sectores magnético y eléctrico; Doble enfoque magnético-eléctrico; Tiempo de vuelo; Resonancia iónica ciclotrónica con transformada de Fourier. Orbitrap. Ventajas, desventajas y usos de cada tipo de analizador.

Características de un detector: electro-multiplicador (dinodo), celda de Faraday.

## ESPECTROMETRÍA DE MASA TÁNDEM

Instrumentación: Triple cuadrupolo, barridos de precursores, productos y pérdidas neutras, monitoreo selectivo de reacciones. Tándem en el espacio y tándem en el tiempo, MSn. Instrumentos de doble enfoque magnético - eléctrico. Instrumentos híbridos, Cuadrupolo- Tiempo de vuelo. Alcances y limitaciones de cada uno de ellos.

Disociaciones inducidas por colisión de baja y alta energía.

Disociaciones inducidas por colisión dentro de la fuente a presión atmosférica.

## APLICACIONES

Acoplamiento de la cromatografía gaseosa y líquida a la espectrometría de masa. Cuantificación por espectrometría de masa. Monitoreo selectivo de iones y reacciones. Supresión e incremento iónico, uso de patrones internos y externos.

Análisis elemental. Uso de abundancias isotópicas en compuestos orgánicos y organometálicos.

Estudios del mecanismo de reacciones orgánicas. Determinación de impurezas. Determinación de contaminantes. Estudio del metabolismo de drogas. Aplicaciones a la elucidación estructural de productos naturales. Imágenes por espectrometría de masa.

## RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

### 1. Descripción del fenómeno de RMN

Descripción del spin nuclear, momento magnético y momento angular. Número cuántico de spin y sus implicancias en espectros de RMN, dipolos y cuadrupolos magnéticos. Constante magnetogirica del núcleo. Niveles de población de diferentes estados de spin, ecuación de Boltzmann. Influencia del campo magnético  $B_0$  en espectros de RMN: sensibilidad, resolución y efectos sobre sistemas acoplados. Magnetización macroscópica. Modelo de vectores, y sistema de coordenadas rotante. Efecto de efecto de pulsos de radiofrecuencia. Análisis de la evolución de spins en el sistema de coordenadas rotante. Detección de señales en RMN, concepto de FID y transformaciones de Fourier. Descripción del equipo de RMN con imán superconductor.

### 2. Desplazamiento Químico

Definición y origen del concepto de desplazamiento químico en RMN. Desplazamientos químicos típicos en RMN  $^1\text{H}$  y RMN  $^{13}\text{C}$ : escala de  $\delta$ . Contribuciones al desplazamiento químico: efectos inductivos, mesoméricos y anisotrópicos y su importancia relativa en espectros de RMN  $^1\text{H}$  y RMN  $^{13}\text{C}$ .

Reconocimiento de señales características en espectros de RMN  $^1\text{H}$  y RMN  $^{13}\text{C}$  y resolución de problemas.

### 3. Acoplamiento Escalar

Definición y origen de acoplamiento dipolar y escalar. Acoplamiento escalar: definición de multiplete, sistema de spins y constante de acoplamiento ( $J$ ). Influencia del valor de  $J$  en el espectro: acoplamientos fuertes y débiles, sistemas acoplados de primer y segundo orden. Signo de  $J$ . Factores más influyentes en la magnitud de  $J$ . Valores típicos para constantes de acoplamiento  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ : acoplamientos geminales, vecinales, alílicos y homoalílicos. Acoplamientos en alquenos y sistemas aromáticos. Acoplamiento escalar heteronuclear  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ : acoplamientos a corta y larga distancia. Valores típicos de  $J$  heteronuclear para carbonos con hibridización  $sp^3$ ,  $sp^2$  y  $sp$ . Desacople en sistemas homonucleares y heteronucleares.

#### 4. Equivalencia y sistemas de spins

Concepto de equivalencia química, equivalencia de desplazamiento químico y equivalencia magnética. Influencia en el espectro de RMN. Equivalencia por rotación, y casos de rotación restringida. Caso de moléculas proquirales. Análisis y ejemplos de sistemas de spins: AX, AB, AMX, ABX, ABC, AA'XX' y AA'BB'. Influencia del campo magnético  $B_0$ . Análisis de multipletes de primer orden.

#### 5. Relajación, interacción dipolo-dipolo y efecto nuclear Overhauser (NOE)

Relajación nuclear: ecuaciones de Bloch y concepto de tiempos de relajación  $T_1$  y  $T_2$  y su influencia en espectros de RMN. Efecto de variables experimentales en la relajación transversal:  $T_2^*$ . Principales mecanismos de relajación. Interacción dipolo-dipolo: definición, relación con el movimiento molecular en solución e influencia de la distancia internuclear. Tiempo de correlación, y su influencia en los tiempos de relajación. Influencia de las características moleculares y experimentales en la relajación. Influencia de la constante magnetogirica y de sustancias paramagnéticas en la relajación dipolo-dipolo. Factores adicionales que contribuyen a la relajación transversal: intercambio químico y presencia de núcleos cuadrupolares. Relajación cuadrupolar: definición y ejemplos. Efecto nuclear Overhauser: influencia en la intensidad de las señales, relación con la distancia interatómica y utilización para estudios de esteoquímica y elucidación estructural. Estudios de equilibrio químico por RMN: casos de intercambio rápido y lento. Análisis cuantitativo mediante espectros de RMN.

#### 6. RMN Bidimensional

Concepto de RMN 2D. Origen de la segunda dimensión. Descripción y manejo básico de espectros típicos de correlación por acoplamiento escalar homonuclear (COSY) y heteronuclear (HSQC y HMBC) y por correlación dipolar (NOESY). Ejemplos de aplicación. Espectros 3D y su aplicación en el análisis de biomoléculas.

### ANALISIS DE ALIMENTOS

1. Generalidades del análisis de alimentos. Preparación de la muestra para el análisis físico-químico.

Métodos analíticos de uso general en química de alimentos: criterios de selección.

1.1. Parámetros físicos. Índice de refracción, densidad, punto de solidificación, absorbancia en el NIR, constante dieléctrica y conductividad. pH y acidez.

1.2. Determinación de macrocomponentes. Contenido de agua y de sólidos totales. Métodos directos e indirectos: Karl Fischer, gravimetría: secado convectivo y al vacío, por infrarrojo y microondas.

Refractometría. Métodos conductimétricos y dieléctricos. Técnicas basadas en destilación. Métodos para determinar actividad de agua. Compuestos nitrogenados. Proteínas. Método oficial de Kjeldahl. Métodos de Dumas y técnicas de unión a colorantes. Determinación de sustancias lipídicas. Métodos de extracción y caracterización de los lípidos. Hidratos de carbono. Análisis de almidón, fibra bruta y alimentaria y de azúcares.

1.3. Determinación de microcomponentes: enzimas, vitaminas, minerales; componentes que imparten color, aroma, sabor, textura. Amilógrafos, reofermentógrafos, alveógrafos, farinógrafos, extensógrafos.

2. Factores que determinan la tendencia en el desarrollo de nuevos métodos de análisis en alimentos.

Mejoras y desarrollos recientes en la preparación de las muestras: microextracción en fase sólida, métodos de extracción por microondas, fluidos supercríticos, ultrasonido. Tendencias actuales en investigación y desarrollo en análisis de alimentos.

3. Métodos enzimáticos en el análisis de alimentos. Determinación de sustratos. Determinación de actividad enzimática. Inmunoensayos. Método de ELISA aplicado en el análisis de alimentos. Métodos basados en biotecnología y biología molecular: PCR. Aplicaciones. Determinación de organismos genéticamente modificados y de alimentos irradiados.

4. Análisis de organizaciones supramoleculares y estructurales de los componentes alimenticios.

Interacciones intermoleculares y fenómenos cooperativos. Métodos microscópicos. Microscopía óptica, electrónica y de fuerza atómica. Propiedades termofísicas y termomecánicas. Calorimetría diferencial de barrido. Espectrometrías dieléctrica térmica y mecánica térmica dinámica. Análisis de imágenes.

Aplicaciones.

5. Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Aplicaciones de RMN de alta y baja resolución en el análisis de alimentos. RMN bidimensional. RMN de imágenes (RMI): Tomografía de alimentos intactos.

6. Análisis de intermediarios y marcadores de avance de reacciones químicas en alimentos. Aplicaciones de métodos cromatográficos. Espectrofotometría molecular: UV, visible, fluorescencia. Espectrometría Infrarroja: NIR, MIR, FTIR. Deconvolución y derivada segunda de espectros FT-IR. Espectrometría de

masa. Aplicaciones de la EM al análisis de alimentos. Sistemas acoplados: cromatógrafo gaseoso-espectrómetro de masa, cromatógrafo líquido de alta resolución-espectrómetro de masa.

7. Métodos electroanalíticos para la cuantificación de componentes y para la evaluación de propiedades físicas. Electroodos selectivos, electroodos enzimáticos, sensores y biosensores. Conductividad y propiedades dieléctricas. Aplicaciones para la determinación de propiedades de transporte y relación con la movilidad molecular.

### **Contenidos esenciales propuestos para las clases de laboratorio**

Se utilizarán los conocimientos adquiridos en los cursos previos, reforzando aspectos de aplicación práctica de los temas involucrados. Se desarrollarán los criterios necesarios para analizar los componentes orgánicos de mezclas de origen diverso, incluyendo aquellas que se encuentren en matrices complejas. Asimismo, se procurará simular la situación del profesional que ha de elegir los métodos adecuados para el análisis de una muestra, formándose en la búsqueda de la bibliografía específica, adaptando los métodos de separación y purificación a cada caso concreto y usando técnicas espectroscópicas de infrarrojo, RMN y espectrometría de masa, cromatografía gaseosa, cromatografía líquida y cromatografía gaseosa acoplada a espectrometría de masa y en el caso de compuestos quirales, de polarimetría.

### **Análisis de una muestra incógnita preparada en el laboratorio.**

- aplicar criterios de evaluación de la complejidad de la muestra.
- seleccionar los métodos separativos adecuados.
- separar los componentes de la mezcla.
- purificar los componentes y determinar sus constantes físicas.
- elucidar las estructuras por métodos químicos y espectroscópicos (FTIR, RMN, EM).

### **Análisis de muestras de origen comercial**

- Estas comprenden productos farmacéuticos, veterinarios, cosméticos, de limpieza (hogareña e industrial), alimentos, envases (materiales poliméricos), insecticidas, etc.
- efectuar la búsqueda bibliográfica correspondiente, siguiendo los lineamientos y referencias indicadas.
- aplicar la metodología específica al tipo de muestra (el alcance y factibilidad de los análisis y experiencias planeadas será discutido con los docentes). Análisis cualitativo y cuantitativo de los componentes de interés (componentes activos, excipientes, etc.).

### **Temas requeridos para la resolución de las muestras**

- Métodos de purificación (sustancias sólidas y líquidas)
- Determinación de constantes físicas.
- Métodos de separación de mezclas (extracción, destilación, cromatografía preparativa, etc.)
- Técnicas cromatográficas: cromatografía en columna, ccd, CG, HPLC.
- Métodos espectroscópicos: UV, IR, FT-IR, RMN 1D y 2D, EM (impacto electrónico, ionización a presión atmosférica), EM de alta resolución. Técnicas combinadas: CGL-EM, HPLC-EM (electrospray), HPLC preparativo.
- Identificación de grupos funcionales (reacciones, UV, IR, RMN, EM): Hidrocarburos (sat., no sat., arom.); halogenuros (alif., arom.); alcoholes; fenoles; éteres; aldehídos y cetonas; ácidos y derivados; funciones nitrogenadas; tiocompuestos.
- Métodos cuantitativos: CG y HPLC, RMN cuantitativo, titulaciones, equivalente ácido, etc.

### **Temas que se correlacionan con los dictados en otras áreas/materias:**

Los temas requeridos son abordados con anterioridad en Química Orgánica y Química Analítica.

#### **• Química Biológica**

**Estructura de materias:** Se proponen dos materias (de 192hs y de 144hs) que incluyen contenidos de Biología celular, Química Biológica, Microbiología, Biotecnología y Analítica Biológica, cuyos contenidos teóricos, prácticos y cargas horarias respectivas se indican a continuación

# **QB I: CONCEPTOS DE BIOLOGÍA CELULAR, QUÍMICA BIOLÓGICA Y MICROBIOLOGÍA**

## **CONTENIDOS TEÓRICOS: BIOLOGIA CELULAR/QB MICROBIOLOGÍA GENERAL Y BIOTECNOLOGÍA**

### **CONTENIDOS TEORICOS**

#### **I. ESTRUCTURA CELULAR**

Teoría celular. La evolución de las células. TAXONOMÍA Y EVOLUCIÓN. ARN ribosómico y filogenia. Diferencias Procariotas y Eucariotas; Hongos, Animal y Vegetal. Estructuras sub-celulares y función. Membrana plasmática. Sistemas de transporte. Transporte iónico. Envoltura celular. Nutrición, Cultivo y Crecimiento. Composición química de la célula. Cinética del crecimiento celular. Ciclo de división: Mitosis y meiosis.

#### **II. DIVERSIDAD METABÓLICA**

Metabolismo energético. Reacciones químicas involucradas en los caminos metabólicos. Reacciones redox: potenciales redox, participación de protones. Compuestos de alta energía, flujos de energía. Oxidaciones biológicas. Respiración aeróbica y anaeróbica. Transporte de electrones. Síntesis de ATP. Interconversiones bioenergéticas. Degradación de hidratos de carbono. Anabolismo y catabolismo. Fotosíntesis anoxigénica y oxigénica. Autotrofia. Quimiolitotrofia. Procesos fermentativos y biotecnología. Microorganismos de interés industrial.

#### **III. ÁCIDOS NUCLEICOS**

ADN y ARN, consideraciones estructurales. Duplicación del ADN. Tipos de ARN, sus funciones y biosíntesis. Transcripción en procariotas y eucariotas; procesamiento del ARN. Detección. Regulación de la expresión génica. Transferencia de material genético. Determinación de la secuencia y secuenciación masiva.

#### **IV. PROTEÍNAS**

Aminoácidos: propiedades fisicoquímicas y clasificación. Enlace peptídico. Niveles estructurales en la molécula proteica: estructuras primaria, secundaria, terciaria y cuaternaria. Plegamiento proteico. Relación entre estructura y función. Métodos para el estudio de la estructura de proteínas. Biosíntesis de proteínas y código genético. Rol de las proteínas en la célula: proteínas estructurales y enzimas. Modificaciones post-traduccionales de las proteínas. Proteínas de membrana y de exportación. Degradación de proteínas. Traducción.

#### **V. AGENTES PATOGENICOS**

Formas acelulares: Virus y Priones. Bacteriófagos, Virus animales y Virus vegetales. Ciclo de multiplicación. Control de infecciones. Acción de agentes físicos y químicos. Resistencia. Agentes antivirales y antifúngicos. Sistema Inmunológico: Estructura de los anticuerpos. Clases de inmunoglobulinas. Antígenos. Células involucradas en la inmunidad. Conceptos básicos de inmunidad innata y adaptativa.

#### **VI. GENÉTICA Y BIOTECNOLOGÍA**

Mutaciones y agentes mutágenos. Principios generales del clonado de genes. Vectores de clonado. Enzimas de restricción. Metodologías de obtención de clones recombinantes. Sistemas huéspedes de clonado y expresión procarióticos y eucarióticos. Aplicaciones en la producción de vacunas y agentes terapéuticos.

### **CONTENIDOS PRÁCTICOS**

Relacionados con contenidos teóricos I. Estructura Celular:

-Célula y cultivo celular

-Visualización de Células: Microscopías (óptica, fluorescencia, electrónica); citometría de flujo

-Manipulación de cultivos celulares: -Biosseguridad; -Trabajo en esterilidad; -Tinciones;

- Crecimiento en medios de cultivo y aislamiento de microorganismos; -Antibióticos.
- Relacionados con contenidos teóricos II. Diversidad Metabólica: -Bioenergética
- Relacionados con contenidos teóricos III. -Métodos de amplificación y manipulación de ADN (PCR). - Ácidos nucleicos bacterianos: extracción de plásmidos y corte con enzimas de restricción
- Relacionados con contenidos teóricos IV-VI. Introducción a la identificación y cuantificación de biomoléculas.
- Técnicas separativas (Electroforesis: PAGE, agarosa, isoelectroenfoque, bidimensional y capilar); - tinciones de macromoléculas
- Herramientas Bioinformáticas
- Expresión de proteínas recombinantes

### **CARGA HORARIA TOTAL**

Clases teóricas: 4h/semana, total 64 h

Clases laboratorio y problemas: 8h/semana, total 128 h

Total: 192 h

## **QUÍMICA BIOLÓGICA II (incluye contenidos de Química Analítica aplicados a sistemas biológicos)**

### **CONTENIDOS TEORICOS**

#### **I. PROTEINAS CON FUNCION CATALITICA.**

Enzimas. Grupo prostético. Definición de sitio activo: residuos de unión y residuos catalíticos. Característica del sitio activo: especificidad, regulación. Cinética enzimática. Derivación de la expresión de velocidad, a partir de estado estacionario. Ecuación de Michaelis y Menten. Cálculo de parámetros cinéticos y métodos para su determinación. Efecto de la concentración de sustrato y de enzima sobre la velocidad inicial. Regulación de la actividad enzimática: inhibidores reversibles e irreversibles. Mecanismo de acción enzimática: naturaleza del centro activo, tipos de catálisis. Enzimas regulables: alosterismo, teorías (Monod, Koshland).

#### **II. VITAMINAS Y COENZIMAS.**

Concepto de vitamina. Efectos de carencia y exceso de vitaminas. Clasificación en liposolubles e hidrosolubles. Componentes de cada tipo. El papel de las vitaminas hidrosolubles como coenzimas.

#### **III. ESTRUCTURA Y METABOLISMO DE LOS HIDRATOS DE CARBONO**

Estructura general de los hidratos de carbono. Metabolismo degradativo de la glucosa: cadena glucolítica y ciclo de las pentosas. Secuencia de las reacciones. Enzimas y coenzimas que intervienen. Formación de compuestos de alta energía y de compuestos metabólicos. Balance energético. Formación de ácido láctico en músculo y alcohol en levadura. Ciclo de las pentosas-fosfato: secuencia de las reacciones. Formación de NADPH.

#### **IV. CAMINO OXIDATIVO DE LA GLUCOSA.**

Concepto general de las oxidaciones biológicas y ciclos de oxidación. Localización de los sistemas de oxidación. Mitocondrias. Ciclo tricarboxílico (Krebs): secuencia de las reacciones. Coenzima A. Acido lipoico, pirofosfato de tiamina, NAL. El ciclo como unidad catabólica y "generadora" de energía. Función del ciclo en procesos biosintéticos. Ciclos anapleróticos.

#### **V. CADENA RESPIRATORIA.**

Respiración a nivel celular. Importancia a nivel de organización. Membrana interna mitocondrial. Componentes. Cadena respiratoria. Inhibidores del transporte de electrones. Fosforilación oxidativa. Control respiratorio. Inhibidores de la síntesis de ATP y desacoplantes. Posibles utilidades del ATP.

#### **VI. FOTOSINTESIS.**

Utilización de la energía solar. Cadena fotosintética de transporte de electrones. Fosforilación cíclica y no cíclica. Asimilación fotosintética del CO<sub>2</sub>. Ciclo de Benson-Calvin. Modulación de las enzimas por la luz.

Fotorrespiración. Ciclo de cuatro carbonos y metabolismo ácido de las crasuláceas. Asimilación del nitrógeno y del azufre. Nitrato y nitrito reductasas. Activación y asimilación del sulfato.

## **VII. METABOLISMO DE AMINOACIDOS Y SU RELACION CON OTRAS VIAS METABOLICAS.**

Mecanismos generales de degradación de aminoácidos. Desaminación oxidativa y no oxidativa. Transaminación. Decarboxilación. Formación de aminas biógenas. Mecanismo de acción del fosfato de piridoxal. Metabolismo del fragmento C. Mutilación. Metionina activa. Transferencia de metilos. Papel del ácido tetrahidrofólico. Mecanismo de biosíntesis de aminoácidos. Aminoácidos esenciales y no esenciales. Destino de los aminoácidos. Destino del amoníaco. Arginina y ciclo de la urea. Destino del residuo no nitrogenado del aminoácido. Aminoácidos cetogénicos y glucogénicos. Aminoácidos como precursores de otras sustancias. Estructura y biosíntesis de hemoproteínas, porfirinas y clorofilas. Biosíntesis y degradación de los nucleótidos púricos y pirimidínicos. Biosíntesis y papel de poliaminas.

## **VIII. LIPIDOS: METABOLISMO Y FUNCION.**

Distintos tipos de lípidos. Propiedades. Función. Lípidos neutros y lípidos polares. Formación de micelas y bicapas. Membranas biológicas: composición. Modelos de su estructura. Degradación de grasas y fosfolípidos: acción de lipasas y fosfolipasas. Mecanismo general de la degradación de los ácidos grasos. Beta oxidación mitocondrial y peroxisomal. Localización y secuencia de las enzimas que intervienen. Activación y penetración de los ácidos grasos en el interior de las mitocondrias. Destino del acetil CoA. Aspecto energético de la oxidación de los ácidos grasos. Ácidos grasos de cadena impar. Formación de cuerpos cetónicos. Factores que determinan la magnitud de la cetogénesis. Biosíntesis de lípidos: sistema mitocondrial y extramitocondrial para la síntesis de ácidos grasos. Proteína transportadora de grupos acilo. Complejo multienzimático. Acetil CoA carboxilasa. Papel de la biotina. Localización de enzimas que intervienen. Papel del NADPH y sistemas generadores. Transhidrogenación. Regulación de la síntesis de ácidos grasos. Sistemas de elongación de la cadena de ácidos grasos. Síntesis de ácidos grasos no saturados. Eicosanoides, prostaglandinas, tromboxanos y leucotrienos. Mecanismo de síntesis de triglicéridos y de fosfolípidos. Inositol trisfosfato y diacilglicerol como segundos mensajeros. Inositol trisfosfato y liberación de  $Ca^{2+}$ . Activación de la proteína quinasa C por el diacilglicerol y por ésteres de forbol. Síntesis de isoprenoides. Prenoles, poliprenoles. Dolicol fosfato. Esteroides. Transporte del colesterol y otros lípidos. Hipercolesterolemia y aterosclerosis. Regulación de la lipogénesis y la lipólisis.

## **IX. REGULACION METABOLICA. HORMONAS Y REGULACION HORMONAL.**

Regulación de los niveles de enzimas. Inducción de enzimas. Sistemas de regulación de la expresión génica. Regulación hormonal: concepto de hormona y receptor. Mecanismos de acción de hormonas proteicas. Sistemas de segundos mensajeros. Mecanismos de acción de hormonas esteroides. Receptores citoplasmáticos y nucleares. Ejemplos de hormonas hipotalámicas e hipofisarias. Ejemplos de hormonas de insectos y vegetales. Interacción Ligando-Receptor (Conceptos de Radioactividad como herramienta para su cuantificación).

## **CONTENIDOS PRÁCTICOS:**

- Purificación de Proteínas (con foco en técnicas separativas no incluidas en la materia Química Biológica I (cromatografías de alta resolución: intercambio iónico, exclusión por tamaño, afinidad, centrifugación analítica)
- Cinética enzimática
- Técnicas de fluorescencia para visualizar reacciones enzimáticas (cinética por FRET)
- Introducción a las tecnologías “-ómicas”: Genómica, Transcriptómica, Proteómica, Metabolómica
- Herramientas de bioinformática aplicadas a tecnologías -ómicas.
- Ejercitación en la lectura de artículos científicos (Seminarios)

## **CARGA HORARIA**

Clases teóricas: 4h/semana – Total: 64 h

Clases de laboratorio y problemas: 5h/semana Total: 80 h – Total: 144 h

### **Temas que se imparten únicamente en esta área:**

- Célula. Estructura y cultivo de células eucariotas.
- Todos los temas de microbiología, ingeniería genética, comunicación celular y biotecnología.

### **Temas que se deben coordinar porque se profundizan o se retoman en otras áreas/materias:**

#### -Con Química Orgánica

- i. Estructura de Biomacromoléculas: El Departamento de QB requiere que esta temática sea coordinada entre las dos áreas y se implemente en los contenidos de las Orgánicas de manera que QBI sea correlativa de Química Orgánica I y no de Química Orgánica II

#### -Con Química General y Fisicoquímica:

- i. Interacciones entre macromoléculas
- ii. Sitio Activo. Cinética
- iii. Termodinámica y termoquímica
- iv. Bioenergética

#### -Con Química Analítica

- i. Fundamentos de cromatografía
- ii. Técnicas espectroscópicas y microscópicas

**Nota:** Con respecto a las cromatografías, consideramos que los fundamentos teóricos de cromatografía se dan en Química Analítica (porque hasta ahora se daban en instrumental).

### **Inquietudes particulares del área a discutir y recabar la opinión de los departamentos:**

- 1) Cómo organizar las materias dándole un enfoque integral? ¿Es necesario un examen integratorio final?
- ¿Cuál es el número ideal de parciales a tomar teniendo en cuenta el gran número de contenidos variados?
- ¿Cómo verificar que exista homogeneidad entre los distintos turnos de teóricas/problemas?

#### • **Química Física**

##### **Estructura de materias:**

Se propone desarrollar los contenidos en 2 materias cubriendo 416hs (13hs semanales, cada una de ellas) con al menos un 40% de clases de laboratorio.

La química física puede dividirse en unas pocas grandes-áreas temáticas, tales como: i) la estructura atómica-molecular, ii) la termodinámica estadística, iii) la cinética de las reacciones químicas y iv) la química física macroscópica (o clásica), que incluye la termodinámica (en particular, de sistemas en equilibrio). De manera natural, la química física puede dividirse en base al tamaño del sistema que se estudia, poniendo especial atención en la conexión entre los modelos microscópicos y los fenómenos macroscópicos. Los contenidos se listan a continuación comenzando por la descripción microscópica de la materia, y finalizando con el tratamiento de fenómenos a escala macroscópica.

##### **Contenidos esenciales propuestos:**

**1) Principios de la Mecánica Cuántica.** Introducción y principios. Antecedentes que condujeron a la formulación de la mecánica cuántica. Cuantización: radiación del cuerpo negro, efecto fotoeléctrico. Dualidad onda-partícula: difracción de electrones, principio de incertidumbre y mecánica ondulatoria. Formulación de los Hamiltonianos de la mecánica clásica. Postulados de la mecánica cuántica. Operadores, función de onda, ecuación de Schrödinger. Propiedades de las funciones de onda y los operadores en mecánica cuántica. Modelos sencillos con solución analítica. Partícula libre. Partícula en una caja unidimensional. Caja tridimensional y degeneración. El oscilador armónico. El rotor rígido.

Métodos aproximados para la resolución de la ecuación de Schroedinger. El método variacional. Método variacional lineal. Teoría de perturbaciones.

**2) Estructura de la Materia.** Átomos hidrogenoides. Autofunciones y autovalores. Orbitales atómicos. Espín del electrón y sus autofunciones. Principio de exclusión de Pauli. Átomos multielectrónicos. La aproximación orbital. Método de campo autoconsistente (Hartree-Fock) y orbitales atómicos. Principio de construcción (aufbau). Estados electrónicos y términos espectroscópicos atómicos.

El principio de Born-Oppenheimer. Concepto de superficie de energía potencial. Uniones químicas intra e intermoleculares. Concepto de molécula.

Aproximación de orbitales moleculares y de enlace de valencia. Caso de molécula de hidrógeno y moléculas diatómicas. Orbitales moleculares en moléculas poliatómicas. Métodos semiempíricos. Aplicaciones a determinación de propiedades termodinámicas, cinéticas y espectroscópicas.

**3) Espectroscopía y Fotofísica.** Absorción y emisión de radiación electromagnética por átomos y moléculas. Coeficientes de Einstein. Relación entre la probabilidad de transición cuántica y el coeficiente de absorción. Distintos tipos de perturbaciones: dipolar, polarizabilidad. Reglas de selección.

Espectros moleculares. Espectroscopía de rotación pura. Espectroscopía de vibración-rotación. Moléculas diatómicas y poliatómicas. Simetría molecular y modos normales. Dispersión de la radiación electromagnética. Espectroscopía Raman.

Espectros electrónicos de átomos y moléculas. Espectroscopía de absorción y emisión atómica. Principio de Franck-Condon. Fluorescencia y fosforescencia. Transiciones  $\pi-\pi^*$  de alquenos y de compuestos aromáticos,  $n-\pi^*$  y  $\pi-\pi^*$  en compuestos carbonílicos. Transiciones d-d en complejos metálicos.

Fotodisociación.

**4) Termodinámica Estadística.** Funciones de partición. Energías y grados de libertad. Colectivos y reservorios. Distribución de Boltzmann. Termodinámica estadística de sistemas ideales. Teoría cinética de los gases. Capacidad calorífica: contribuciones traslacionales, rotacionales, vibracionales y electrónicas. Termodinámica estadística de cristales. Modelos de Einstein y de Debye.

**5) Cinética de las Reacciones Químicas.** Fundamentos de la cinética química. Velocidad de reacción. Orden de reacción y constante de velocidad. Integración de ecuaciones de velocidad. Tiempo de vida media. Ecuación de Arrhenius. Reacciones elementales y mecanismos de reacción. Reacciones paralelas, consecutivas y opuestas. Intermediarios de reacción y estado estacionario. Teorías de la Cinética Química. Reacciones bimoleculares en fase gaseosa. Teoría de colisiones. Superficies de energía potencial y coordenada de reacción. Teoría del complejo activado. Formulación termodinámica y estadística. Reacciones unimoleculares. Mecanismo de Lindemann. Otras teorías. Reacciones de asociación. Métodos experimentales para el seguimiento de reacciones en fase gaseosa.

**6) Termodinámica Clásica.** Sistema, ambiente y proceso. Equilibrio termodinámico y funciones de estado. Carácter axiomático y principios de la termodinámica. Primer Principio de la termodinámica. Termoquímica. Segundo Principio de la termodinámica. Entropía: variaciones interna y externa. El potencial químico. Funciones de Gibbs y de Helmholtz. Relaciones termodinámicas de espontaneidad y estabilidad. Tercer principio de la Termodinámica.

**7) Gases, Líquidos y Sólidos - Mezclas.** a) Gases reales, factor de compresibilidad, desarrollo del virial, coeficientes de fugacidad. Mezclas de gases. Proceso de mezcla ideal, características microscópicas. Estado tipo. Funciones de mezcla y de exceso. Ecuaciones de estado. Fuerzas intermoleculares y ley de estados correspondientes. Ecuación del virial. Determinación de fugacidades. b) Mezclas líquidas. Leyes de Raoult y Henry. Desviaciones de la idealidad. Determinación de actividades. Propiedades molares parciales. Integración de Euler. Relación de Gibbs-Duhem. Consistencia termodinámica. Polímeros en solución. Estadística de fracción en volumen. c) Soluciones de electrolitos. Termodinámica de sistemas iónicos. Actividad iónica media. Fuerza iónica. Teoría de Debye-Hückel y sus extensiones. Conductividad de electrolitos. Atmósfera iónica y ecuación de Onsager. d) Sólidos. Propiedades de simetría. Teoría de Grupos. Determinación de estructuras cristalinas, cristalografía. Metales, semiconductores y sólidos iónicos.

**8) Equilibrio de Fases.** Equilibrios de fase sólido-líquido-vapor. Punto triple. Regla de las fases. Campana de Andrews. Ecuación de Clayperon-Clausius. Propiedades coligativas de las soluciones. Variaciones de entalpía y entropía en los cambios de fase. Modelos y ecuaciones de estado. Azeótropos. Miscibilidad parcial. Segundo coeficiente de virial osmótico. Solubilidad de sólidos no iónicos en líquidos y en fluidos supercríticos. Equilibrio osmótico o de membrana. Transporte entre fases y equilibrio. Equilibrio y transporte de materia entre fases cargadas: potencial electroquímico. Doble capa eléctrica y electrocapilaridad; estabilidad de coloides.

**9) Equilibrio Químico.** Avance de reacción. Afinidad química. Energía de Gibbs de reacción y constante de equilibrio. Entalpías, entropías y energías de Gibbs de reacción tipo. Formalización de Le Chatelier, efecto de la presión y de la temperatura sobre el equilibrio químico. Aspectos estadísticos de reacciones en fase gaseosa. Equilibrio electroquímico y ecuación de Nernst. Determinación de la actividad y propiedades termodinámicas de electrolitos.

**10) Sistemas Heterogéneos - Superficies.** Trabajo superficial y tensión superficial. Burbujas, gotas y capilaridad. Ecuación de Gibbs; exceso superficial. Fisisorción y quimisorción. Isotermas de adsorción: monocapas y multicapas. Modelo estadístico de la isoterma de Langmuir. Determinación de áreas superficiales. Interfaz sólido electrolito: doble capa. Sistemas microheterogéneos. Adsorción y catálisis: mecanismo de Langmuir-Hinshelwood. Fotocatálisis. Cinética de electrodo: energía de activación y potencial de electrodo. Relación corriente-potencial. Sobrepotencial. Control activado: ecuación de Butler-Volmer. Control difusional. Reacciones en ambientes restringidos (micelas, liposomas, células, sólidos microporosos).

**11) Procesos de transporte.** Procesos estacionarios y leyes fundamentales: Ohm, Fourier, Newton y Fick. Viscosidad y difusión en fluidos. Dependencia con la temperatura y la densidad. Descripción microscópica en base a la teoría cinética de los gases.

**12) Cinética de Reacciones en Solución - Mecanismos de reacción.** Control activado y control difusional. Efecto caja y otros efectos del solvente. Reacciones entre iones: efectos de la fuerza iónica y de la constante dieléctrica. Reacciones de transferencia de electrones. Métodos experimentales para el seguimiento de reacciones en solución. Métodos de flujo, de destello y de relajación. Análisis espectroscópico de concentraciones. Métodos electroquímicos. Mecanismos de reacciones complejas. Reacciones en cadena: iniciación, propagación, terminación, ramificación. Longitud de cadena. Catálisis homogénea. Relaciones lineales de energía libre. Catálisis enzimática.

Fotoquímica. Transiciones radiativas y no radiativas. Diagramas de Jablonski. Rendimiento cuántico. Gráficos de Stern-Volmer. Fotodisociación. Fotosensibilización. Métodos para el estudio de reacciones rápidas y ultrarápidas.

### **Contenidos esenciales propuestos para las clases de laboratorio:**

- *Aplicación de la mecánica cuántica elemental a sistemas químicos y determinación de parámetros atómico/moleculares a partir de mediciones espectroscópicas:* uso del modelo de la partícula en la caja; líneas espectrales atómicas, asignación de series y términos espectroscópicos; obtención de los parámetros roto-vibracionales de moléculas sencillas; espectros vibrónicos de moléculas diatómicas; espectroscopía de fluorescencia inducida por láser de moléculas simples.
- *Prácticas de termodinámica (1er. principio):* Mediciones calorimétricas. Variación de la energía interna y la entalpía. Determinación de capacidades caloríficas. Calorimetría diferencial. Empleo de trabajo eléctrico en las mediciones calorimétricas. Determinación del cociente de las capacidades caloríficas.
- *Prácticas de termodinámica (2do. principio):* Determinación de diagramas de fases. Uso de la ecuación de Clausius Clapeyron. Cálculo de funciones termodinámicas de sistemas sencillos haciendo uso de la termodinámica estadística y de parámetros moleculares de acceso experimental. Estudio termodinámico de un sistema elástico. Medición de potenciales químicos. Medida de coeficientes de fugacidad de sustancias gaseosas.
- *Termodinámica de mezclas y equilibrio químico. No idealidad:* Determinación de propiedades parciales molares, densitometría, entalpimetría, etc. Estudio del equilibrio químico y afinidad. Medición de constantes de equilibrio. Medición de potenciales químicos en mezclas no-iónicas, coeficientes de actividad. Medición de coeficientes de actividad iónico medio de soluciones acuosas de electrolitos. Verificación de la ecuación de Nerst. Efecto de la fuerza iónica en el equilibrio químico. Verificación de la validez de la teoría de Debye-Hückel para soluciones diluidas de electrolitos. Equilibrio de fases en mezclas binarias y ternarias. Estudio de la termodinámica de micelización en soluciones acuosas de un tensioactivo iónico.
- *Fenómenos de transporte:* Difusión de sales en agua. Determinación del coeficiente de viscosidad de gases. Determinación de la conductividad térmica de gases. Uso de modelos moleculares y de herramientas de la teoría cinética para interpretar las medidas experimentales. Medidas de conductividad iónica.
- *Sistemas heterogéneos:* Adsorción en distinto tipo de sistemas materiales. Determinación de áreas superficiales. Medición del exceso superficial.
- *Cinética Química:* Estudio de la cinética de reacciones en fase gaseosa y en solución. Construcción de gráficos de Arrhenius. Estudio cinético de reacciones con mecanismos complejos. Efecto de la constante

dieléctrica y de la fuerza iónica. Métodos de relajación y de flujo detenido. Determinación de constantes cinéticas de reacciones rápidas a partir de métodos. Fotodisociación y fotosensibilización.

### **Temas que se imparten únicamente en esta área:**

- Se aportan los conceptos fundamentales y los principios sobre los cuales se construye la Química, tales como: i) noción de unión química, estructura atómico/molecular, y la interacción de la luz con la materia, desde la mecánica cuántica; ii) sistemas colectivos fluctuantes (en equilibrio o evolucionando en el tiempo), a través del comportamiento del valor medio de sus propiedades microscópicas intrínsecas, evaluados en términos del formalismo de la termodinámica estadística; iii) aplicación de la termodinámica clásica y del concepto de no idealidad al tratamiento de procesos químicos en equilibrio desde un punto de vista macroscópico; iv) estudio de los aspectos cinéticos asociados a un proceso químico desde la teoría de colisiones, y aplicando el concepto de coordenada de reacción desde la teoría del complejo activado; v) uso de las leyes fenomenológicas que describen el transporte de materia, carga, energía, y momento.
- Se emplean modelos matemáticos que permiten realizar predicciones cuantitativas, enfatizando la conexión entre el mundo atómico/molecular y los fenómenos macroscópicos. En particular, se aplican a reacciones que sufren las especies químicas, ya sea en solución, en fase sólida o gaseosa, y en superficies interfaciales.

### **Temas que se deben coordinar porque se profundizan o se retoman en otras áreas/materias:**

-con las complementarias:

- i. con Química Industrial coordinar algunos temas de los puntos 8-12, tales como temas generales de cinética química, de termodinámica de disoluciones y mezclas gaseosas no ideales y de transporte de materia y energía, que resultan de utilidad para diseñar reactores químicos y operaciones industriales que involucren separación entre fases.
- ii. con Química de Materiales coordinar el aprendizaje de los fundamentos de las técnicas de caracterización con lo presentado en los puntos 3 y 10.

### **Conceptos de matemática necesarios:**

- Derivadas e Integrales.
- Probabilidad. Densidad de probabilidad. Distribución normal.
- Ecuación de autovalores. Operadores Hermíticos.
- Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas.
- Resolución de ecuaciones diferenciales.

### **Conceptos de física necesarios:**

- Conceptos de dinámica y cinemática.
- Física de Ondas.
- Oscilador armónico y rotor rígido.
- Electricidad - Ley de Ohm, circuitos en serie y paralelo.

### **Inquietudes particulares del área a discutir y recabar la opinión de los departamentos:**

1) ¿Es posible implementar en las clases prácticas una modalidad de ejercitación y resolución de problemas que emplee computadoras? ¿En qué grado se emplean computadoras en el laboratorio para asistir en la recolección, análisis y presentación de los datos recogidos? ¿Se emplean herramientas computacionales como Mathematica, Matlab o Mathcad para conectar los fenómenos observados con los resultados que emergen de los modelos?

Comentario: el uso de computadoras permitiría que los alumnos se familiaricen mejor con los modelos y teorías matemáticas para realizar predicciones cuali/cuantitativas, siempre enfatizando la conexión entre el mundo atómico/molecular y los fenómenos macroscópicos. Además, desaparecería la limitación de ejercitar en clase sólo con sistemas ideales o aquellos sometidos a condiciones particulares que posean una resolución analítica simple. Por otra parte permite la sistematización en la recolección de datos y la posibilidad de extraer mayor información

2) Tomando en cuenta que los conceptos cubiertos sustentan la descripción de una gran variedad de fenómenos, pueden incluirse en los cursos ejemplos de interés científico reciente, que guarden relación con otras áreas de la química, o que muestren la contribución de la fisicoquímica en estudios interdisciplinarios, etc? En esa línea, ¿pueden cubrirse los elementos básicos de fisicoquímica asociados a sistemas químicos

complejos, como aquellos supramoleculares, inmovilizados sobre soportes, formando parte de composites, en fase sólida?

3) ¿Qué ventajas o desventajas tiene dictar la materia en módulos teórico-prácticos? Dado que la resolución de problemas es una actividad primaria en el aprendizaje de la fisicoquímica, ¿es posible estructurar las clases como para ponerlo de relevancia?

4) ¿Pueden implementarse en las prácticas de laboratorio actividades para poner de manifiesto las limitaciones de los modelos utilizados, en cuanto a la predicción cuantitativa de los fenómenos químicos que se observan, y entender las aproximaciones bajo las cuales se trabaja?

5) ¿Adquieren los estudiantes las habilidades necesarias para medir correctamente las variables experimentales primarias? ¿Puede entrenarse a los alumnos a reconocer la validez de una medida, y que error debe adjudicársele?

6) ¿Es posible que los alumnos participen en el diseño de sus propios experimentos?

- **Complementarias**

## **Química Industrial**

### **Estructura de materias:**

Se propone una materia de 144hs (9hs semanales) con al menos un 30% de trabajos prácticos de planta piloto, laboratorio y de simulación.

### **Contenidos esenciales propuestos**

**1) Introducción:** Organización de una empresa industrial. Variables que determinan la selección de una tecnología y el diseño de un proceso. Conceptos básicos de evaluación de proyectos. Procesos en distintas escalas, concepto de escalado. Procesos discontinuos y continuos, estacionarios y no estacionarios. Balances de materia y energía. Concepto de modelos de flujo.

### **2) Fundamentos de fenómenos de transporte:**

**2.1. Fluidodinámica o transporte de cantidad de movimiento:** tipos de fluidos (Newtonianos y no-Newtonianos). Concepto de régimen de flujo. Concepto de pérdida de carga y como evaluarla en casos comunes: conductos, lechos rellenos. Nociones de mezclado y de sistemas de impulsión de fluidos.

**2.2. Transferencia de calor:** mecanismos (conducción, convección y radiación). Convección natural y forzada. Coeficientes peliculares y globales. Aplicación al diseño de intercambiadores de calor.

**2.3. Transferencia de masa:** mecanismos (difusión y convección). Transferencia de materia entre fases: coeficientes peliculares y globales, área interfacial. Analogías entre los fenómenos de transporte.

**3) Operaciones de separación de mezclas:** tipos y clasificación. Operaciones mecánicas y con transferencia de masa. Fundamentos para el dimensionamiento de equipos: contactado continuo (concepto de números y alturas de unidades de transferencia, determinación de la sección); contactado en etapas (concepto de etapa ideal y de eficiencia de etapa, altura equivalente de plato teórico). Aplicaciones a operaciones comunes en la industria química.

**4) Reactores químicos:** velocidad de reacción en sistemas abiertos, factor de expansión. Reactores homogéneos y heterogéneos. Implicancia de los modelos de flujo en reactores. Ecuaciones de diseño de reactores discontinuos, continuos y semicontinuos, isotérmicos y no-isotérmicos. Nociones de cinética y catálisis heterogénea.

### **Contenidos esenciales propuestos para las clases de planta piloto y simulación**

-Elementos de Higiene y Seguridad en plantas químicas y legislación asociada, incluyendo la disposición de residuos peligrosos.

-Modelos de flujo, caracterización del mezclado macroscópico en un tanque agitado

-Fluidodinámica: pérdida de carga, instrumentos de medición de caudal

-Transferencia de calor: intercambiadores de calor.

-Transferencia de masa: operaciones de separación de mezclas.

-Conversión en reactores de operación continua.

Se realizarán práctica en escala de planta piloto y/o uso de utilitarios de simulación.

**Temas que se imparten únicamente en esta área:**

-conceptos básicos de ingeniería de procesos

-procesos continuos, sistemas abiertos, estados transientes

-uso de adimensionales

-conceptos básicos de reología

-pérdida de carga y regímenes de flujo, nociones de mezclado

-nociones de escalado, influencia de la fluidodinámica y de las limitaciones por transporte sobre el rendimiento y la selectividad de reacciones

-operaciones y procesos en escala piloto

**Temas que se deben coordinar porque se profundizan o se retoman en otras áreas/materias:**

-con Química General:

i. termodinámica

ii. equilibrio químico y de fases

iii. cinética

-con Química Inorgánica y con Química Orgánica:

i. procesos de síntesis en escala laboratorio

-con Química Inorgánica, con Química Orgánica y con Química Analítica:

i. operaciones de separación en escala laboratorio

-con Físicoquímica:

i. termodinámica

ii. equilibrio químico y de fases

iii. cinética

iv. fenómenos de transporte

v. catálisis heterogénea

**Conceptos de matemática necesarios:**

-Derivadas e Integrales

-Ecuaciones diferenciales

-Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas

**Conceptos de física necesarios:**

-Estática de fluidos. Dinámica de fluidos ideales: ecuación de Bernoulli.

**Inquietudes particulares del área a discutir y recabar la opinión de los departamentos:**

1) ¿Cómo transmitir las posibilidades de desempeño en las distintas industrias que emplean licenciados en química? ¿Resultaría útil la visita a empresas o la invitación a egresados que se desempeñan en la industria para dar alguna charla dentro de la materia?

2) ¿Resultaría importante promover el desarrollo de prácticas de simulación? ¿Asociadas a las clases de planta piloto, o incorporadas en clases de teórico-práctico?

**Química de Materiales (Grupo ad-hoc "Materiales" p/área Complementarias)**

**Estructura de materias:**

Se propone una única materia de 64 hs (4 hs semanales), sin clases de laboratorio. Considerando lo acotado de la carga horaria, se sugiere un enfoque general para esta materia. Esta materia dará un enfoque general, sin separar los contenidos en módulos específicos y se priorizará presentar una visión holística sobre la

ciencia de materiales por sobre la descripción específica de ciertos tipos. Sin embargo, dada la diversidad de los materiales utilizados actualmente, se considera relevante el estudio de algunos ejemplos representativos.

### **Objetivos:**

Se espera que, al terminar la materia, los estudiantes estén en condiciones de:

- Reconocer la relación entre composición química, estructura y propiedades de materiales.
- Reconocer los conceptos y algunas de las principales vías de preparación de distintos tipos de materiales.
- Vincular el tipo de propiedades esperadas con el grado de orden de los materiales que las generarán.
- Seleccionar técnicas de caracterización y de estudio de propiedades de materiales.
- Describir las principales propiedades de materiales metálicos, poliméricos, cerámicos, compuestos, biomateriales, etc. y su vinculación con la composición y estructura.
- Explicar cómo se modifican las propiedades de los materiales al pasar a la nanoescala.

### **Contenidos esenciales propuestos para las clases teóricas y de problemas**

**1. Fases condensadas, estructura y propiedades:** Orden y desorden en fases condensadas: sólidos cristalinos; sólidos amorfos, vidrios y cementos; cristales líquidos. Estructuras cristalinas: descripción geométrica. Estructura electrónica de sólidos (enlace extendido). Sólidos no estequiométricos. Sistemas con distribuciones de pesos moleculares.

**2. Métodos de caracterización de los distintos materiales:** Métodos espectroscópicos UV/Vis IR, Raman, RMN, EM-MALDI. Métodos Termomecánicos: TGA, DSC, DTA, EGA, DMTA, TMA, métodos reológicos para la determinación de las características viscoelásticas Cromatografía de permeación por geles (GPC). Difracción de rayos X (DRX). Caracterización de superficies.

**3. Estudio de propiedades, síntesis y aplicaciones de materiales representativos. Metales.** Estructuras metálicas y propiedades mecánicas, eléctricas y magnéticas. **Cerámicos:** Tipos de cerámicos. Cerámicos semiconductores. Técnicas de síntesis. Aplicaciones. **Materiales poliméricos.** Métodos de síntesis y mecanismos de polimerización. **Materiales compuestos.** Aplicaciones biomédicas, alimenticias, recubrimientos, aeroespaciales, cosméticas, etc.

**4. Nanomateriales.** Influencia del tamaño nanométrico de dominios sobre las propiedades ópticas, eléctricas, magnéticas y mecánicas. Nanotecnología; aproximaciones "top-down" y "bottom-up". Dimensiones de los nanomateriales y nanoestructuras. Nanotoxicidad

### **Temas que se imparten únicamente en esta área:**

- Clasificación de diferentes tipos de materiales en base a sus estructuras y composición
- Técnicas de caracterización de materiales.
- Discusión de relación estructura-propiedad de materiales.
- Aplicaciones de materiales

### **Temas que se deben coordinar porque se profundizan o se retoman de otras áreas/materias:**

-con Química Inorgánica:

- i. temas de enlace
- ii. temas de estructura de sólidos
- iii. interacciones intermoleculares

-con Química Orgánica:

- i. temas de enlace e interacciones intermoleculares
- ii. temas de estructura de polímeros
- iii. espectroscopías

- con Físicoquímica:
  - i. estructura y enlace
  - ii. espectroscopías
  - iii. fotofísica y fotoquímica
  - iv. termodinámica

- con Química Analítica:
  - i. técnicas espectroscópicas

- con Química Biológica:
  - i. estructura y función de biomacromoléculas
  - ii. difracción de rayos X

#### **Conceptos de matemática necesarios:**

- Derivadas e Integrales.
- Probabilidad. Densidad de probabilidad. Distribución normal.
- Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas.

#### **Conceptos de física necesarios:**

- Óptica
- Electromagnetismo.
- Difracción.

#### **Inquietudes a discutir y recabar la opinión de los departamentos:**

- 1) Cómo coordinar los contenidos mínimos de esta materia con el ciclo superior de orientaciones de manera de encontrar correlato de los mismos?
- 2) Cómo organizar la materia para asegurarse que no resulte una sucesión de módulos independientes?

La materia está pensada de modo que haya una vinculación constante entre las características de cada material, las técnicas para su estudio y los requerimientos necesarios para sus aplicaciones posibles. De esta manera se evitaría que los temas fueran módulos independientes y se favorecería a que la materia fuera dictada por docentes de varios departamentos, de manera integradora e cooperativa.

### **Nociones de Toxicología y Química Legal**

#### **Estructura de materias:**

Se propone una única materia con clases teóricas, laboratorio y problemas de 80 h.

#### **CONTENIDOS TEÓRICOS**

I. Definición, objetivos y alcances de la Toxicología. Distintas ramas e incumbencias. Noción y cuantificación de la toxicidad. Distintos factores que modifican la toxicidad. Interacciones toxicológicas. Antagonismo, sinergismo y potenciación. Antidotismo. Toxicidad selectiva. Tolerancia y resistencia a tóxicos. Toxicidad aguda y subaguda. Toxicidad crónica y subcrónica. Efectos locales y sistémicos. Efectos reversibles o irreversibles.

II. Etapas involucradas en los procesos de intoxicación. Fuentes de exposición y Vías de ingreso. Toxicocinética: absorción, distribución, biotransformación, acumulación, excreción y eliminación. Concepto de toxicodinamia: molécula, organela, tejido u órgano blanco. Nociones de toxicidad diferencial. Parámetros biomarcadores de exposición, de efecto y de susceptibilidad.

III. Química Legal: definición. El rol del químico en aspectos relacionados con los fueros penales, laborales, civiles, comerciales y ambientales. Responsabilidad profesional. Características de los análisis químicos para fines legales. Evaluación de Riesgo. Reglamentaciones vigentes. Hojas de seguridad.

## **CONTENIDOS PRÁCTICOS**

- Cuantificación del efecto tóxico de sustancias químicas sobre seres vivos. Cálculos de CL50, DL50, TL50, etc. Consideraciones estadísticas. Dependencia frente a los distintos factores que influyen en la toxicidad.
- Determinación de contaminantes en muestras ambientales y/o biológicas.
- Modo de acción de insecticidas. Evaluación del efecto tóxico en un caso específico: inhibición de la enzima acetilcolinesterasa. Su utilidad como parámetro biomarcador de exposición y efecto.

## **CARGA HORARIA**

**Clases teóricas, laboratorio y problemas: 5h/semana, Total 80 h**

### **Temas que se correlacionan con los dictados en otras áreas/materias:**

- Requiere conocimiento de los conceptos asociados a ciclos metabólicos que se abordan en el área de química biológica.

- **Matemática**

### **Estructura de materias:**

Se proponen dos materias de 160hs c/u (10hs/semana) similares a las que se cursan en la carrera actual: Análisis Matemático I y II (se transcriben los programas actuales)

### **Contenidos**

#### **Análisis Matemático I – Programa**

##### **Topología en $\mathbb{R}$ y en $\mathbb{R}^n$**

Complejidad de  $\mathbb{R}$ . Existencia del supremo y equivalencias. Distancia, discos abiertos y discos cerrados. Puntos interiores. Interior de un conjunto. Conjuntos abiertos. Puntos adherentes. Clausura de un conjunto. Conjuntos cerrados. Conjuntos acotados. Límite de sucesiones de números reales. Límite de sucesiones en  $\mathbb{R}^n$  y límite en cada coordenada.

##### **Funciones de $\mathbb{R}^n$ en $\mathbb{R}^k$ ( $n, k = 1, 2, \dots$ )**

Representación gráfica. Dominio de definición. Curvas y superficies de nivel. Límite de funciones de  $\mathbb{R}^n$  en  $\mathbb{R}^k$ . Límite a lo largo de rectas y de curvas. Funciones continuas. Composición de funciones continuas. Propiedades de las funciones continuas.

##### **Cálculo diferencial en varias variables**

Derivadas parciales. Aproximación lineal. Diferencial de una función. Matriz jacobiana. Plano tangente al gráfico de una función. Regla de la cadena. Teoremas generales de la función inversa y de la función implícita. Producto escalar en  $\mathbb{R}^n$ . Ecuación del plano ortogonal a un vector. Derivadas direccionales. Gradiente. Relación con las superficies de nivel y la dirección de máximo crecimiento. Plano tangente a una superficie de nivel. Teorema del valor medio en varias variables. Derivadas de orden superior. Aproximación polinomial de orden 2. Matriz Hessiana (o Hessiano) de una función.

##### **Extremos de funciones de varias variables**

Puntos críticos y extremos de una función. Formas cuadráticas, matriz asociada. Análisis de los puntos críticos en varias variables a partir del Hessiano: máximos, mínimos, puntos de ensilladura. Extremos ligados: extremos de una función sobre un conjunto dado por una ecuación  $G = 0$ . Condición para que un punto sea punto crítico. Multiplicadores de Lagrange.

##### **Integrales dobles y triples**

Repaso: integral definida, sumas de Riemann, Teorema fundamental del cálculo, regla de Barrow. Integrales impropias: definiciones, propiedades, criterios de convergencia, convergencia absoluta. Aplicación: convergencia de series. La integral doble sobre rectángulos. La integral doble sobre regiones más generales.

Cambio del orden de integración: Teorema de Fubini. La integral triple. El Teorema de Cambio de variables. Aplicaciones de las integrales dobles y triples.

## BIBLIOGRAFÍA

NORIEGA, R. Cálculo Diferencial e Integral. Editorial Docencia  
LAGES LIMA, E. Curso de análisis, volúmenes 1 y 2.  
MARSDEN, J. y TROMBA, A. Cálculo Vectorial. Tercera edición. Addison-Wesley.  
SPIVAK, M. Calculus (Cálculo Infinitesimal), Vol I y II. Ed. Reverte.  
PISKOUNOV, N. Cálculo diferencial e integral, tomos I y II. Ed. Mir.  
SPIEGEL, M. R. Cálculo superior ( Advanced Calculus ). Serie Shaum.  
REY PASTOR, J. PI CALLEJA y TREJO : Análisis Matemático, Vol. I y II. Ed. Kapelusz.  
APOSTOL, T. Calculus, Vol. I y II. Editorial Reverte.  
COURANT, R. Differential and Integral Calculus. Ed. Interscience

## Análisis Matemático II – Programa

### Integrales sobre curvas y superficies

La integral de línea. Superficies parametrizadas. Área de una superficie. Integrales de funciones escalares sobre superficies. Integrales de campos vectoriales sobre superficies. Aplicaciones.

### Los teoremas del cálculo vectorial

El Teorema de Green. El Teorema de Stokes. Campos conservativos. El Teorema de Gauss. Aplicaciones.

### Ecuaciones Diferenciales

Introducción y métodos elementales. El Teorema de existencia y unicidad. Soluciones maximales. Sistemas de ecuaciones diferenciales lineales de primer orden y ecuaciones diferenciales de orden superior.

### Sistemas de Ecuaciones Diferenciales

Resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales lineales con coeficientes constantes. Diagramas de flujo. Estabilidad lineal. Sistemas conservativos. Aplicaciones.

## BIBLIOGRAFIA

Marsden, J., Tromba, A. "Vector Calculus". Freeman and Company, New York 1988.  
Apostol, T. "Análisis Matemático". Ed. Reverté, 1960 y "Calculus", Vol. II, Ed. Reverté, 1960.  
Rey Pastor, J., Pi Calleja, P. y Trejo, C. "Análisis Matemático" Vol. II., Ed. Kapelusz. 1961.  
N. Wolanski. "Introducción a las ecuaciones diferenciales ordinarias", disponible en <http://mate.dm.uba.ar/~wolanski/ode.pdf>  
Coddington, E.A. & Levinson, N. "Theory of ordinary differential equations", Mc-Graw Hill, 1955.  
Birkhoff, G. And Rota, G.C. "Ordinary Differential equations", Ginn & Company, 1962.  
G. Acosta y N. Wolanski Curvas, superficies e integrales  
<http://mate.dm.uba.ar/~wolanski/apunte%20curvas.pdf>

## Inquietudes particulares del área a discutir y recabar la opinión de los departamentos:

- 1) Consideran suficientes y adecuados los temas incluidos?
- 2) Qué estrategias sugieren para lograr incluir problemas asociados a las materias de química en las guías de TP?

### • Física

#### Estructura de materias:

Se proponen dos materias: Física I de 176 (11hs/semana) y Física II de 224hs (14hs/semana) cada una con al menos un 30% de clases de laboratorio. Los contenidos serían similares a los que se dictan en la carrera

actual, minimizando la superposición con temas de Física del CBC y reduciendo el tiempo no utilizado fundamentalmente de las clases de laboratorio de Física I.

## **Contenidos**

### **Física I**

Mediciones y unidades

Vectores. Concepto de dirección. Escalares y vectores. Adición de vectores. Componentes de un vector. Adición de varios vectores. Producto escalar. Producto vectorial.

Cinemática. Movimiento rectilíneo. Velocidad. Aceleración. Representación vectorial de la velocidad y la aceleración en el movimiento rectilíneo. Movimiento curvilíneo. Velocidad. Aceleración. Movimiento bajo aceleración constante. Componentes tangencial y normal de la aceleración. Movimiento circular. Velocidad angular. Aceleración angular. Movimiento curvilíneo general en un plano.

Dinámica de una partícula. Ley de inercia. Momento lineal. Principio de conservación del momento lineal. Segunda y tercera leyes de Newton. Concepto de fuerza. Fuerzas de fricción. Movimiento curvilíneo. Momento angular. Fuerzas. Composición de fuerzas concurrentes. Fuerzas centrales.

Movimiento oscilatorio. Cinemática del movimiento armónico simple. Fuerza y energía en el movimiento armónico simple. Dinámica del movimiento armónico simple. Péndulo simple. Superposición de dos movimientos armónicos simples de igual dirección e igual frecuencia. Superposición de dos movimientos armónicos simples de igual dirección y diferentes frecuencias. Superposición de dos movimientos armónicos simples: direcciones perpendiculares. Oscilaciones anarmónicas. Oscilaciones amortiguadas. Oscilaciones forzadas. Impedancia de un oscilador.

Trabajo y energía. Potencia. Energía cinética. Trabajo de una fuerza de magnitud y dirección constantes. Energía Potencial. Conservación de la energía total de una partícula. Movimiento rectilíneo bajo fuerzas conservativas. Movimiento bajo fuerzas centrales conservativas. Discusión de curvas de energía potencial. Fuerzas no conservativas.

Dinámica de un sistema de partículas. Movimiento del centro de masa de un sistema de partículas. Masa reducida. Momento angular de un sistema de partículas. Energía cinética de un sistema de partículas. Conservación de la energía de un sistema de partículas.

Cantidad de movimiento e impulso angular. Torque de una fuerza. Centro de masa. Choques. Conservación de la cantidad de movimiento y del impulso angular.

Cinemática del cuerpo rígido. Condición de rigidez y de rodadura. Dinámica de un cuerpo rígido. Momento angular de un cuerpo rígido. Cálculo del momento de inercia. Ecuación de movimiento de la rotación de un cuerpo rígido. Energía cinética de rotación.

Hidroestática. Principio de Arquímedes. Fuerzas de fricción en fluidos. Coeficiente de viscosidad. Hidrodinámica. Movimiento de un fluido. Teorema de Bernoulli.

Óptica geométrica. Rayos luminosos. Leyes de la reflexión y refracción. Construcción gráfica del rayo refractado. Camino óptico. Principio de Fermat. Superficies planas. Angulo límite y reflexión total. Reflexión de rayos divergentes. Refracción de rayos divergentes. Imágenes formadas por rayos paraxiales. Superficies esféricas. Focos y distancias focales. Formación de imágenes. Imágenes virtuales. Puntos y planos conjugados. Construcciones gráficas. Método del rayo paralelo. Método del rayo oblicuo. Fórmula de Gauss. Lentes delgadas. Focos y distancias focales. Aumento lateral. Combinación de lentes delgadas. Potencia de una lente delgada. Lentes delgadas en contacto. Fórmula de las lentes. Instrumentos ópticos.

## Bibliografía

- R. M. Eisberg y L. S. Lerner: Física: Fundamentos y Aplicaciones; McGraw-Hill, 1983.  
D. Halliday y R. Resnick: Física; Editorial Continental, México, 1980.  
P. A. Tipler: Física; Editorial Reverté, Barcelona, 1978.  
J. Roederer: Mecánica Elemental, Eudeba.  
M. Alonso y E. Finn: Física, Vol. I: Mecánica; Fondo Educativo Interamericano, 1976.  
F. A. Jenkins y H. E. White: Fundamentos de Optica; Editorial Aguilar, Madrid, 1964.  
E. Hecht y A. Zajac: Optica, Fondo Educativo Interamericano.  
R.S. Longhurst, Longman, Geometrical and Physical Optics, 1973.

TPs de Laboratorio de Física I (Químicos)

PRÁCTICA 1: Mediciones Directas: Estadística

PRÁCTICA 2: Mediciones Indirectas y Diferencias Significativas

PRÁCTICA 3: Guía de Adquisición Digital de Datos y Principio de Cuadrados Mínimos

PRÁCTICA 4: Guía de Estudio de Teoremas de Conservación

PRÁCTICA 5: Guía de Movimiento Oscilatorio Armónico Simple y Amortiguado

PRÁCTICA 6: Sistemas rotantes

PRÁCTICA 7: Optica: Ley de Snell y Lentes

## Física II

- Electrostática
- Conductores, capacidad. Medios dieléctricos
- Ley de Ohm. Circuitos de corriente continua
- Magnetostática
- Inducción electromagnética
- Circuitos de corriente alterna
- Ondas mecánicas
- Interferencia
- Difracción
- Polarización

## Bibliografía

- Tipler, P. A., Física para la ciencia y la tecnología, Vol. 2, Reverté
- Purcell, E., Electricidad y Magnetismo, Berkeley Physics Course, Vol. 2, Reverté
- Rodríguez Trelles, F., Temas de Electricidad y Magnetismo, Eudeba
- Alonso, M., Finn, E., Física, Vol. 2, Addison-Wesley
- Crawford, F., Ondas, Berkeley Physics Course, Vol. 3, Reverté
- Jenkins, F. A., White, H. E., Fundamentals of Optics, McGraw-Hill
- Hecht, E., Optica, Addison-Wesley

## Inquietudes particulares del área a discutir y recabar la opinión de los departamentos:

1) ¿Cómo coordinar en forma sostenible la interacción de las materias de física con materias de la carrera que utilizan fuertemente conceptos de estas materias?

- Estadística

## Estructura de materias:

Se propone una materia de 64hs (4hs/semana) que provea algunos conceptos fundamentales y herramientas de estadística

## Contenidos

1. Probabilidad. Espacio muestral. Eventos. Definición de probabilidad. Propiedades. Espacios de probabilidad finitos. Probabilidad condicional. Independencia. Variables aleatorias. Variables aleatorias

discretas. Función de probabilidad puntual. Función de distribución. Independencia de variables aleatorias. Esperanza y varianza: definición y propiedades. Distribución binomial. Distribución de Poisson. Variables aleatorias continuas. Función de densidad. Distribución uniforme, normal, exponencial. Variables aleatorias independientes. Esperanza y varianza de la suma de variables aleatorias. Distribución de la suma de variables aleatorias independientes. Ley de los Grandes Números Teorema Central de Límite.

2. Estadística Descriptiva. Tipos de variables. Métodos descriptivos visuales: esquema de tallo-hoja, histograma, boxplot. Medidas de posición y dispersión. Media, mediana, desvío estándar, distancia intercuartil, mediana de las desviaciones absolutas. Errores de medición: error aleatorio, precisión, exactitud. Propagación de errores independientes

3. Inferencia estadística. Estimación de parámetros e intervalos de confianza. Intervalo para la media de una distribución normal con varianza conocida. Distribución t de Student. Intervalo para la media de una distribución normal con varianza desconocida. Intervalo de confianza para varianza bajo normalidad. Intervalo asintótico para la media de una distribución cualquiera. Intervalo asintótico para una proporción. Tamaño de muestra.

4. Test de hipótesis. Presentación del problema. Hipótesis nula y alternativa. Tipos de errores. Nivel y potencia de un test. Valor "p". Test para la media de una población normal con varianza conocida y con varianza desconocida. Relación entre test e intervalos de confianza. Test con nivel asintótico para la media de una población con cualquier distribución. Test para muestras apareadas. Test e intervalo de confianza para dos muestras normales independientes. Test e intervalos de confianza asintóticos para dos muestras independientes. Apartamiento del supuesto de homocedasticidad, test de Welsch. Métodos no paramétricos: Test del signo, test de rangos signados de Wilcoxon, test de Mann-Whitney. Test de normalidad de Shapiro-Wilk.

5. Análisis de la varianza. Modelo para el diseño de un factor. Partición de las sumas de cuadrados. Distribución de las sumas de cuadrados. Tabla de análisis de varianza. Validación y chequeo de supuestos. Comparaciones múltiples: Método de Tukey y de Bonferroni. Intervalos de confianza simultáneos.

6. Regresión lineal simple y correlación. Estimación e intervalos de confianza para los parámetros del modelo. Intervalo de confianza para el valor esperado de "Y" e intervalo de predicción para un nuevo valor. Predicción inversa.

## BIBLIOGRAFIA

-Devore, Jay L. Probabilidad y Estadística para ingeniería y ciencias. International Thomson Editores, 5a edición, 2002.

-Miller, J. C y Miller, J. N. Estadística para Química Analítica. Addison-Wesley Iberoamericana, 2a edición, 1993.

## **Inquietudes particulares del área a discutir y recabar la opinión de los departamentos:**

En esta sección se ha transcripto el programa actual de la materia acordado con los docentes a cargo del dictado, que lleva 6hs/semana. No hay acuerdo dentro de la Comisión respecto de los contenidos y ubicación de la materia en el plan, ni de si es necesaria una materia separada que cubra estos temas. Se solicita a los departamentos sugerencias respecto de si es más conveniente la incorporación de conceptos teóricos relacionados con probabilidad y los teoremas asociados, o una materia que resulte una herramienta para el análisis de datos, o si es suficiente la inclusión de los temas necesarios en las materias que utilizan los conceptos; en este último caso, detallarlos e indicar en qué materia se impartirían dichos conceptos.

1) Cuáles son los contenidos que juzga imprescindibles que sean impartidos en esta materia y con qué alcance?