

| | |
|---|------------------------------------|
| Nombre del curso o unidad curricular (*): | |
| Fisicoquímica I | |
| Forma parte de la Oferta Estable (*): | |
| Si | |
| Centro/Instituto responsable (*): | |
| Instituto de Química Biológica | |
| Licenciatura (*): | |
| Bioquímica, Biotecnología | |
| Frecuencia y semestre de la formación al que pertenece la unidad curricular (*): | |
| Anual, semestre impar | |
| Créditos asignados (*): | |
| Bioquímica, 12 créditos, Área Química Biotecnología 12 créditos, Área Química | |
| Nombre del docente responsable de la unidad curricular (*): | |
| María Fernanda Cerdá | |
| Mail de contacto: | Instituto al que pertenece: |
| fcerda@fcien.edu.uy | Instituto de Química Biológica |
| Nombre del/la docente co-responsable: | |
| | |

| | |
|---|------------------------------------|
| Mail de contacto: | Instituto al que pertenece: |
| | |
| Nombre del/la docente responsable de prácticos: | |
| | |
| Mail de contacto: | Instituto al que pertenece: |
| | |
| Nombre del/la docente(s) invitado(s): | |
| Mauricio Avila | |
| Mail de contacto: | Instituto al que pertenece: |
| mavila@fcien.edu.uy | Instituto de Química Biológica |
| Conocimientos Previos Necesarios (*): | |
| Conocimientos sólidos en las siguientes áreas: i) Matemáticas ii) Química Analítica iii) Laboratorio de medidas experimentales | |
| Unidades curriculares y/o créditos previos que habilitan a realizar el curso (*): | |
| Matemática 1 y Matemática 2 (Módulo 1 y 2), Laboratorio de Física I, Química Analítica | |
| Conocimientos adicionales sugeridos: | |
| | |

| |
|---|
| Objetivo de la unidad curricular: |
| Herramientas, conceptos y habilidades que se pretenden desarrollar en la unidad curricular (*): |
| <p>Aportar las herramientas fundamentales de Termodinámica y Cinética Formal, para comprender los procesos fisicoquímicos que se dan a todo nivel, incluyendo los sistemas biológicos y bioquímicos, la transformación de la materia, y las condiciones para que los procesos tengan lugar. Por otra parte, se busca capacitar al estudiante en el manejo de modelos matemáticos y modelos moleculares, en el marco de Leyes y Teorías, respectivamente, así como la validación experimental de los mismos. Los conocimientos en estas áreas resultan fundamentales para la mejor comprensión de temas contenidos en cursos posteriores, como Fisicoquímica Moderna, Fisicoquímica Biológica, Inmunología y Microbiología.</p> <p>Los módulos componentes del curso incluyen las leyes de la Termodinámica y la Cinética Formal. En ambos casos, se aplican estos conocimientos a la mejor comprensión de los fenómenos biológicos y bioquímicos, incluyendo la estabilidad de las macromoléculas, las transferencias de energía en los sistemas biológicos y bioquímicos, los procesos de autoensamblado bioquímico y biológico, bioenergética y termodinámica de las rutas metabólicas, y la cinética formal aplicada diversos sistemas químicos, bioquímicos y biológicos. Para ello se aplican modelos matemáticos y moleculares, que el estudiante validará a través de las actividades experimentales.</p> |
| Temario sintético de la unidad curricular (*): |
| <p>MÓDULO I. TERMODINÁMICA MÓDULO II. CINÉTICA FORMAL</p> |
| Temario desarrollado(*): |
| <p>MÓDULO I. TERMODINÁMICA (30 clases) Las clases teóricas incluyen la resolución de ejercicios. Para cada unidad se seleccionará una o más aplicaciones para discutir con los estudiantes.</p> <p>I.1 PROPIEDADES DE LOS GASES, LOS SÓLIDOS Y LOS LÍQUIDOS (8 clases)</p> <p>I.1.1 La naturaleza de los gases. Descripción del comportamiento de los gases, dependencia con la presión, la temperatura y el volumen. Modelo matemático del gas perfecto. Mezcla de gases, Ley de Dalton. Modelo molecular del gas perfecto. Teoría cinética de los gases. Distribución de Maxwell-Boltzmann. Difusión y efusión. Densidad de los gases. Gases reales. Modelo molecular y matemático de van der Waals. Otros modelos para gases: factor de compresibilidad, modelo virial. Presión barométrica. Medidas y unidades de presión. Aplicaciones en Bioquímica: flotabilidad de los peces.</p> <p>I.1.2 El enlace químico. Enlace iónico. Enlace covalente. Enlace metálico. Fuerzas intermoleculares. Enlace de Hidrógeno. Fuerzas entre dipolos permanentes e inducidos. Aplicaciones en Bioquímica: interacciones por puente de Hidrógeno entre bases nucleotídicas. Interacciones débiles entre cadenas carbonadas en membranas lipídicas y liposomas.</p> <p>I.1.3 La naturaleza de los sólidos. Sólidos iónicos, sólidos metálicos, sólidos moleculares y sólidos amorfos. Semiconductores. Carbono y sus formas alotrópicas: grafito, diamante, grafeno, nanotubos de carbono y fullerenos. Nanopartículas metálicas. Aplicaciones en Bioquímica: Nanotecnología en bioquímica. Uso de materiales y biomateriales en el diseño de dispositivos para obtención de energía.</p> <p>I.1.4. La naturaleza de los líquidos. Propiedades. Densidad y viscosidad. Medidas de densidad y viscosidad. Flujo laminar y flujo turbulento. Viscosidad de disoluciones de macromoléculas.</p> |

Viscosidad relativa, viscosidad específica y viscosidad intrínseca.

Aplicaciones en Bioquímica: Estimación de la forma hidrodinámica y del punto isoeléctrico de las proteínas por medidas de viscosidad. Proteínas plasmáticas y viscosidad de la sangre.

I.2 DESCRIPCIÓN DE LOS SISTEMAS TERMODINÁMICOS (2 clases)

Descripción termodinámica del Universo: sistema, ambiente y frontera. Clasificación de los sistemas en función de la permeabilidad de la frontera. Propiedades del sistema. Propiedades extensivas e intensivas.

Estado del sistema. Equilibrios mecánico, térmico, químico y termodinámico. Equilibrio estacionario.

Definición de trabajo y calor. Relación matemática entre las propiedades de un sistema.

Ecuaciones de estado, ecuaciones paramétricas y ecuaciones viriales. Grados de libertad de un sistema: Regla de las Fases. Descripción matemática de un sistema. Diferenciales exactas e inexactas. Criterio de Euler.

Integrales definidas e integrales de línea. Cambio en las propiedades de un sistema. Procesos reversibles e irreversibles. Estado inicial y final de un proceso.

Aplicaciones en Bioquímica: Descripción termodinámica de diversos sistemas bioquímicos.

I.3 PRIMERA LEY DE LA TERMODINÁMICA (2 clases)

Relación entre calor y trabajo. Definición de la función de estado energía interna (U).

Formulación matemática de la Primera Ley. Carácter axiomático de la Primera Ley.

Interpretación molecular de los cambios energéticos. Cantidades medibles en Termodinámica: transferencia de trabajo a presión constante. Transferencia reversible de trabajo a temperatura constante. Transferencia de calor a volumen constante. Transferencia de calor a presión constante. Definición de la función de estado entalpía (H).

Dependencia de la capacidad calorífica con la trayectoria: capacidad calorífica a presión constante y capacidad calorífica a volumen constante. Procesos adiabáticos. Propiedades térmicas del agua.

Aplicaciones en Bioquímica: temperatura en animales poiquilotermos y mamíferos. Mecanismos de perspiración.

I.4 APLICACIONES DE LA PRIMERA LEY DE LA TERMODINÁMICA (2 clases)

El estado estándar para la entalpía. Nomenclatura (normas IUPAC). Reacciones y transiciones químicas y físicas de la materia como procesos. Entalpías asociadas a los procesos químicos y fisicoquímicos.

Transiciones de fase: sublimación, vaporización, fusión. Desnaturalización proteica, fusión de membranas lipídicas. Energías de enlace. Dependencia de la entalpía con la temperatura. Ecuación de Kirchhoff.

Fuente de datos termodinámicos para el estado de referencia químico (Handbooks, libros, revistas, web).

Técnicas experimentales. Calorimetría convencional y entalpía calorimétrica. Calorimetría diferencial de barrido (DSC). Simulación de perfiles térmicos de DSC para la hipótesis Termodinámica del proceso de desnaturalización.

Aplicaciones en Bioquímica: Trabajo de respiración. Acción de los anestésicos medida por DSC. Caracterización de materiales y biomateriales por DSC y TGA.

I.5 LA ENTROPÍA Y LA SEGUNDA LEY DE LA TERMODINÁMICA (2 clases)

Definición de la función de estado entropía (S). Segunda Ley de la Termodinámica. Carácter axiomático de la Segunda Ley. Interpretación macro y microscópica de la entropía. Entropía de los procesos reversibles.

Procesos reversibles de un gas perfecto. Entropía y procesos irreversibles: irreversibilidad mecánica externa, irreversibilidad mecánica interna, irreversibilidad térmica externa. Disipación de energía. Estado estándar para la entropía. Entropía absoluta. Influencia de la temperatura.

Cambio de entropía para los procesos de transición.

Aplicaciones en Bioquímica: Disipación de calor durante la vida.

1.6 ENERGÍA DE GIBBS (2 clases)

Definición de la función de estado energía de Gibbs (G). Definición de la función de estado energía de Helmholtz (A). Relación con el trabajo útil. El estado estándar para la energía de Gibbs. Influencia de la temperatura. Criterio de espontaneidad.

Aplicaciones en Bioquímica: Relaciones entre las propiedades termodinámicas para los procesos de autoensamblado biológico. Hidrólisis del ATP. Análisis por ITC. Celdas solares basadas en pigmentos, concepto de radiación y potencia, y consideraciones termodinámicas.

1.7 EQUILIBRIO FÍSICO (4 clases)

1.7.1 Termodinámica de las sustancias puras. Ecuaciones de Maxwell. Cambio en el volumen de las sustancias: coeficientes de compresibilidad isotérmico y adiabático, coeficiente de dilatación isobárico. El potencial químico de una sustancia pura. Estabilidad de fases.

Equilibrio de fases. Diagramas P-T. Modelos matemáticos para los equilibrios de fases.

Ecuación de Clapeyron. Ecuación de Clausius-Clapeyron. Verificación experimental de los modelos matemáticos. Entalpía de van't Hoff.

1.7.2 Mezcla de sustancias. Cantidades molares parciales. Energía de Gibbs molar parcial.

Ecuación de Gibbs-Duhem. Termodinámica de la mezcla de gases.

1.7.3 Potencial químico de los líquidos. Soluciones ideales. Soluciones ideales diluidas.

Termodinámica de la mezcla de líquidos. Propiedades coligativas: elevación del punto de ebullición, disminución del punto de fusión, presión osmótica. Modelo molecular para las disoluciones: modelo del impedimento de la evaporación, modelo del pseudo-gas de Mysels.

Soluciones reales. Coeficientes de actividad. Estado de referencia molar.

Aplicaciones en Bioquímica: Ejemplos de propiedades coligativas en gastronomía molecular.

1.8 EQUILIBRIO QUÍMICO (3 clases)

Definición de la función de estado energía de Gibbs (G). Definición de la función de estado energía de Helmholtz (A). Relación con el trabajo útil. Criterio de espontaneidad. El estado estándar para la energía de Gibbs. Influencia de la temperatura. Ecuación de van't Hoff.

Constantes aparentes y termodinámicas.

Incidencia de la fuerza iónica: modelo de Davies.

Aplicaciones en Bioquímica: Relaciones entre las propiedades termodinámicas para los procesos de autoensamblado biológico. Hidrólisis del ATP en el estado de referencia químico. Reacciones de complejación en sistemas de captación de energía.

1.9 TERMODINÁMICA BIOQUÍMICA (5 clases)

Desarrollo histórico. Recomendaciones de la IUBMB. Ecuaciones químicas y bioquímicas. Reglas para formular ecuaciones bioquímicas. Efecto del pH, fuerza iónica y concentración de Mg^{2+} en las reacciones bioquímicas. Estado estándar biológico, bioquímico y cuasi-fisiológico. Tablas de propiedades termodinámicas transformadas. Fuente de datos termodinámicos para los estados de referencia biológico y bioquímico (Handbooks, libros, revistas, web). Cálculo del cambio en las propiedades termodinámicas transformadas en las reacciones bioquímicas. Termodinámica de las rutas metabólicas. Termodinámica de la hibridación del ADN. Modelo BPNN (Base Pair Nearest Neighbors). Tablas de Santa Lucía.

Compensación entálpico-entrópica en procesos bioquímicos. Aplicaciones en Bioquímica: Hidrólisis del ATP y análisis termodinámico de las vías glicolítica, pentosas fosfato, ciclo de Krebs, etc., en el estado de referencia bioquímico y cuasi-fisiológico. Fundamentos termodinámicos de la técnica de PCR (Polymerase Chain Reaction).

MÓDULO II. CINÉTICA FORMAL (6 clases)

Las clases teóricas incluyen la resolución de ejercicios

II.1 CINÉTICA QUÍMICA (3 clases)

Definiciones. Velocidad de reacción. Ley de velocidad, constante de velocidad y orden de reacción.

Clasificación de las reacciones de acuerdo con su cinética: reacciones elementales, reacciones compuestas, reacciones en cadena. Métodos de análisis de datos experimentales cinéticos. Método diferencial. Método integral: reacciones de orden 0, 1 y 2. Método del aislamiento. Método de la vida media. Reacciones compuestas: definiciones y leyes de velocidad. Reacciones en paralelo. Reacciones opuestas. Reacciones consecutivas. Reacciones con retroalimentación. Simplificación de las leyes cinéticas de reacciones compuestas. Hipótesis del estado estacionario. Métodos experimentales para realizar estudios cinéticos. Influencia de la temperatura en la velocidad de reacción. Ley de Arrhenius. Ley de Kooij.

Aplicaciones en Bioquímica: estabilidad cinética de biomoléculas bajo la acción de luz y calor.

II.2 MECANISMOS DE REACCIÓN (3 clases)

Cinética microscópica. Indicios de la existencia de un mecanismo de reacción. Etapas de un mecanismo de reacción. Análisis de un mecanismo de reacción. Mecanismos de reacción clásicos. Mecanismo de Lindemann-Hinselwood. Teoría del estado de transición (Eyrig). Relación entre las teorías de Arrhenius y de Eyrig.

Aplicaciones en Bioquímica: reacciones de transferencia de electrones en sistemas de captación de luz.

Fotosíntesis.

Resolución de problemas (12 clases):

Intercaladas durante el dictado del Curso Teórico

Curso Práctico:

El curso Práctico está formulado en base a 2 grandes módulos:

Módulo III: Laboratorio de Termodinámica

Módulo IV: Laboratorio de Cinética

MÓDULO III: LABORATORIO DE TERMODINÁMICA (6 clases)

III.1 Propiedades de la materia

Ilustración práctica de los conceptos de propiedad aditiva, propiedades de los líquidos, interacciones intermoleculares. Se verificarán modelos matemáticos y moleculares empleando principalmente métodos de ajuste lineal. Ejemplos de prácticas:

i) Densidad y viscosidad de soluciones de proteínas ii) Procesos de autoensamblado iii)

Propiedades aditivas: absorbancia, índice de refracción, etc.

III.2 Propiedades termodinámicas de procesos bioquímicos

Métodos de determinación de las propiedades termodinámicas (ΔH , ΔS y ΔG) asociadas a procesos bioquímicos, empleando propiedades aditivas. Se emplearán modelos matemáticos y moleculares adecuados al proceso en estudio.

Ejemplos de prácticas:

i) Desnaturalización proteica inducida químicamente (uso del modelo termodinámico de desnaturalización y del modelo LEM de tratamiento de datos)

ii) Desnaturalización proteica inducida térmicamente (uso del modelo termodinámico de desnaturalización y modelos lineales para el tratamiento de datos)

iii) Simulación del perfil calorimétrico del proceso de desnaturalización proteica (uso del modelo termodinámico de desnaturalización y modelos no lineales para el tratamiento de datos)

iv) Simulación de los cambios en el perfil calorimétrico de proteínas en su interacción con diferentes ligandos (uso del modelo termodinámico de desnaturalización y modelos no lineales para el tratamiento de datos)

v) Determinación del coeficiente de reparto y logP para distintos aminoácidos. Incidencia de la fuerza iónica (uso de propiedades aditivas, y efecto de la fuerza iónica)

vi) Equilibrio de asociación de complejos de interés bioquímico (uso de propiedades aditivas, y

modelo de Davies para la fuerza iónica)

vii) Medidas de los perfiles termométricos para diferentes reacciones (disolución, neutralización, etc).

MÓDULO IV: LABORATORIO DE CINÉTICA (2 clases)

IV.1 Cinética formal

Ilustración práctica de los métodos de análisis de datos experimentales, aplicando los métodos: diferencial, integral, de aislamiento y vida media. Empleo de propiedades aditivas para la medida de la concentración, y de métodos lineales y no lineales de análisis de datos.

Ejemplos de prácticas:

i) Descomposición de la murexida (método integral)

ii) Reacción entre el tiosulfato y el yoduro (método diferencial)

IV.2 Cinética compleja

Ilustración práctica de los métodos de análisis de datos experimentales, aplicando los métodos: diferencial, integral, de aislamiento y vida media, para cinéticas complejas. Empleo de propiedades aditivas para la medida de la concentración, y de métodos lineales y no lineales de análisis de datos.

Ejemplos de prácticas:

i) Desnaturalización proteica (mecanismo de reacciones opuestas, análisis de datos por métodos no lineales)

Bibliografía:-

a) Básica (*)

P. Atkins, J. De Paula. Physical Chemistry for the Life Sciences. W.H. Freeman Co. (2011)

R. Chang. Physical Chemistry for the Biosciences. University Science Book (2005)

G. G. Hammes, S. Hammes-Schiffer. Physical Chemistry for the Biological Sciences. 2da edición. John Wiley Sons (2015)

P. Atkins, J. de Paula. Physical Chemistry. 9º edición. Oxford University Press (2010)

C. W. Garland, J. W. Nibler, D. P. Shoemaker. Experiments in Physical Chemistry. 8ava edición. McGraw-Hill (2003).

P. Atkins, J. de Paula. Elements of Physical Chemistry. 5ta edición. W.H. Freeman Co. (2009).

b) Complementaria

IUPAC. Quantities. Units and Symbols in Physical Chemistry. 3era edición. RSC Publishing (2007).

M. Koppmann. Manual de gastronomía molecular: el encuentro entre la ciencia y la cocina. 2da edición.

Siglo Veintiuno Editores (2011).

M. Koppmann. Nuevo manual de gastronomía molecular. 1era edición. Siglo Veintiuno Editores (2012)

U. von Stockar, T. Maskow, V. Vojinovic. Biothermodynamics: the role of thermodynamics in biochemical engineering. Taylor and Francis Group (2013).

R. A. Alberty. Thermodynamic of biochemical reactions. Wiley Interscience (2003).

R. A. Alberty. Biochemical Thermodynamics: applications of Mathematica (2006). NIST Standard Reference Database 74. http://xpd.b.nist.gov/enzyme_thermodynamics

Modalidad de cursada (*):

Presencial

Metodología de enseñanza:

Clases presenciales de laboratorio de carácter obligatorio, clases teóricas de asistencia no obligatoria.

| |
|---|
| Duración en semanas(*): |
| 15 |
| Carga horaria total (*): |
| 180 horas |
| Horas sugeridas de estudio domiciliario durante el período de clase: |
| 90 |

| |
|---|
| Carga horaria detallada: |
| a) Horas aula de clases teóricas (*) |
| 54 |
| b) Horas aula de clases prácticas (*) |
| 36 |
| c) Horas aula de seminarios: |
| |
| d) Horas aula de talleres: |
| |
| e) Horas de salida de campo: |
| |
| f) Horas de tareas domiciliarias: |
| 0 |
| TIPO DE CURSO (*): OPCIÓN DESPLEGABLE CON LAS 4 OPCIONES DE CURSO: |
| TIPO 2: Aprobación por examen obligatorio |

| |
|---|
| a) Asistencia requerida para aprobar la unidad curricular (*): |
| 100 % (deben realizar la totalidad del curso práctico). Pueden tener una falta no justificada al curso práctico, pero deberán recuperar dicha clase. Los teóricos son de asistencia libre |
| b) Características de las evaluaciones durante el curso (*): |
| Se obtiene la ganancia del curso (derecho a examen) realizando dos parciales obligatorios, debiendo promediar un mínimo de 50 % entre ambos parciales, sin existir un mínimo en cada parcial. Para la ganancia del curso, se requerirá la aprobación de todos los informes de los prácticos realizados (módulos III y IV). Para la aprobación del examen, se requerirá tener aprobado el curso. |
| c) Características del examen (si corresponde): |
| El examen es escrito |
| d) Modo de devolución o corrección de las pruebas (si corresponde): |
| Muestra de los controles escritos. Si el estudiante cursa los módulos I, II, III y IV, las pruebas constan de 3 problemas relacionados con los prácticos dictados en los módulos, junto con las correspondientes unidades dictadas en el curso teórico. |
| Habilitada para rendirse en calidad de libre (*): |
| No |
| Comentarios: |
| |