



Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Química
Área: Química Física

(Programa del año 2016)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
ESTRUCTURA DE LA MATERIA	LIC. EN QUIMICA	3/11	2016	1° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
DEBATTISTA, NORA BEATRIZ	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
FERRARI, GABRIELA VERONICA	Responsable de Práctico	JTP Semi	20 Hs
NIETO VAZQUEZ, RODOLFO RUBEN	Responsable de Práctico	JTP TC	30 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
4 Hs	Hs	Hs	3 Hs	7 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoría con prácticas de aula y laboratorio	1° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
14/03/2016	24/06/2016	15	110

IV - Fundamentación

La enseñanza de las unidades temáticas teóricas y experimentales que conforman el presente programa contribuye a la formación básica del estudiante en Química Cuántica, ilustrando su aplicación a estructuras electrónicas, geometría y reactividad de moléculas.

La experiencia ha demostrado que la ecuación de Schrödinger es correcta para solucionar los problemas atómicos y nucleares. El desafío mecano-cuántico es calcular la energía de los átomos individuales que componen una molécula y calcular luego la energía de la molécula misma.

Por otro lado, a partir del espectro de una molécula se puede obtener información experimental respecto a su geometría (longitud de enlace) y los estados energéticos de los cuales se obtienen fácilmente la fuerza de los enlaces.

Se dan las bases teóricas de los métodos espectroscópicos y una apreciación de cómo esos métodos suministran información acerca de la estructura molecular y para elucidar mecanismos de reacciones que involucren especies excitadas. Asimismo, las propiedades eléctricas y magnéticas de las moléculas se interpretan en términos de su estructura electrónica. Estas propiedades incluyen al momento dipolar, la polarizabilidad y la magnetizabilidad contribuyendo a la elucidación de estructuras.

Los temas desarrollados servirán de apoyo para el mejor aprovechamiento de otras materias profesionales de la Carrera.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

El curso tiene como objetivos preparar al estudiante para:

- Explicar que problemas aborda la Química Cuántica, como los aborda y cuál es la información que puede obtener del estudio químico-cuántico de diferentes sistemas.

- Aprender la fundamentación mecanocuántica de la Espectroscopía y su aplicación a la determinación de la estructura molecular y elucidación de mecanismos de reacciones que involucren especies excitadas.
- Entender las razones por las que ocurren los distintos fenómenos espectroscópicos útiles en Química y aprender a extraer información estructural cuantitativa de los mismos.
- Analizar los resultados obtenidos y deducir conclusiones lógicas en base a los conceptos ya adquiridos.

VI - Contenidos

TEMA 1: TEORIA CUANTICA.

Naturaleza ondulatoria y cuántica de la radiación. Relación de Planck. Espectros atómicos. El tomo de Bohr. Naturaleza ondulatoria de la materia. Transición clásica-cuántica. Mecánica cuántica. Ecuación de Schrödinger. Principio de correspondencia.

TEMA 2: INTRODUCCION A LA MECANICA CUANTICA.

Postulados de la mecánica cuántica. Función de onda. Propiedades observables y operadores. Teorema del valor medio. Partícula en el foso de potencial. Principio de incertidumbre. Átomos mono y polielectrónicos. Átomos hidrogenoides. Orbitales atómicos. Átomos polielectrónicos. Principio de exclusión de Pauli.

TEMA 3: SIMETRÍA MOLECULAR.

Elementos de simetría. Grupos puntuales de simetría. Representación y caracteres. Reglas de selección.

TEMA 4: ORBITALES MOLECULARES. METODO DE HUCKEL.

Orbitales moleculares. La molécula ión-hidrógeno. Aproximación de Born-Oppenheimer. Método variacional. Principio de máximo recubrimiento. Sistemas electrónicos " π " y " σ ". Método de los orbitales moleculares. Método de Hückel. Energía de deslocalización " π ". Las integrales de Coulomb y de resonancia. Orden de enlace. Índice de valencia libre. Distribuciones de carga. Predicciones de reactividad.

TEMA 5: ESPECTROSCOPIA ROTACIONAL. ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL.

Espectroscopía rotacional: rotación de uno y dos cuerpos. Moléculas diatómicas. Restricciones cuánticas. Espectros rotacionales. Cálculo de longitudes de enlace. Moléculas poliatómicas. Espectroscopía vibracional: vibración de uno y dos cuerpos. Moléculas diatómicas. Restricciones cuánticas. Espectros vibracionales. Cálculo de constantes de fuerza y amplitud de las vibraciones. Moléculas poliatómicas. Aplicaciones a chalconas simples.

TEMA 6: ESPECTROSCOPIA ELECTRONICA.

Espectros electrónicos. Tránsitos electrónicos en moléculas diatómicas. Espectros electrónicos en moléculas poliatómicas con electrones " π " y no enlazantes. Espectros de transferencia de carga. Aplicaciones a chalconas y sistemas que involucren chalconas.

TEMA 7: PROPIEDADES ELECTRICAS Y MAGNETICAS DE LA MATERIA.

Propiedades eléctricas: momentos dipolares. Dipolos inducidos y permanentes. Polarización y polarizabilidad. Ecuación de Clausius-Mosotti y ecuación de Debye. Determinación del momento dipolar y polarizabilidad. Carácter iónico de moléculas diatómicas. Momentos de enlace. Aplicaciones: estudio de la relación estructura - reactividad de chalconas sustituidas. Propiedades magnéticas: susceptibilidad magnética. Interpretación molecular del diamagnetismo. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear y de resonancia paramagnética electrónica.

TEMA 8: FUNDAMENTOS DE FOTOQUÍMICA.

Introducción: naturaleza de la fotoquímica. Estados electrónicos excitados. Procesos fotofísicos de activación y desactivación: tránsitos radiantes y no radiantes. Diagramas de Jablonski. Emisión luminiscente: espectros de emisión, excitación y absorción. Ecuación de Stern-Volmer. Rendimiento cuántico de emisión. Tiempos de vida. Técnicas experimentales. Reactividad de especies excitadas.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

NORMAS DE SEGURIDAD EN EL LABORATORIO.

Normas básicas de seguridad. Elementos de seguridad. Equipos de protección personal. Higiene y condiciones generales de trabajo. Manipulación de material de vidrio y productos químicos. Prevención de incendios. Realización de experimentos. Disposición y eliminación de residuos. Mantenimiento del laboratorio. Acciones a seguir en caso de emergencia: fuego en laboratorio; quemaduras; cortes; derrames de productos químicos sobre la piel; contacto de productos químicos en los ojos; inhalación de productos químicos; actuación en caso de ingestión de productos químicos.

I. TRABAJOS PRACTICOS EXPERIMENTALES.

1- Espectroscopía Ultravioleta. Resolución de mezclas benceno-tolueno.

Objeto: Análisis de mezclas binarias utilizando espectroscopía ultravioleta. Determinación de los coeficientes de extinción molar y de la composición de la mezcla.

2- Espectroscopía infrarroja.

Objeto: En la experiencia, se trata de mostrar, en espectroscopía IR, el desplazamiento que sufre la banda del grupo carbonilo al variar sus vecindades. También se estudia la influencia de la unión puente hidrógeno sobre la banda de estiramiento del grupo oxhidrilo.

3- Espectroscopía Ultravioleta-visible.

Objeto: Estudio de los corrimientos de las bandas de absorción en función de los sustituyentes.

4- Estudio estructural de la 2',3-dihidroxichalcona

Objeto: Aplicación del método de Guggenheim para el cálculo del momento dipolar de 2',3-dihidroxichalcona.

5- Quenching de fluorescencia.

Objeto: Determinación de la constante de quenching de fluorescencia de Riboflavina por 2',4'-dihidroxichalcona.

II. TRABAJOS PRACTICOS DE AULA

A. Resolución de Problemas

Espectro atómico del hidrógeno. Atomo de Bohr. Teoría del orbital molecular. La aproximación CLOA. Método de Hückel. Cálculo de longitudes de enlace. Cálculo de elasticidad de enlace. Cálculos espectroscópicos. Propiedades eléctricas de la materia. Momento dipolar. Actinometría. Determinación de constantes de quenching de estados singuletes y tripletes.

B. Cálculo computacional. Se ensayarán programas para el cálculo de energías, estudio de orbitales HOMO y LUMO, análisis de enlaces y diversas propiedades de interés químico utilizando métodos semi-empíricos.

NORMAS BÁSICAS DE SEGURIDAD

1. Antes de empezar el trabajo en el laboratorio familiarizarse con los elementos de seguridad disponibles y seguir, rigurosamente, las indicaciones del profesor a cargo de la realización del trabajo práctico.
2. Utilizar antiparras de seguridad para evitar salpicaduras.
3. Se debe usar guardapolvo en el laboratorio. No llevar ropa corta.
4. Es recomendable utilizar guantes, sobretodo cuando se utilizan sustancias corrosivas o tóxicas.
5. Evitar que las mangas, puños o pulseras estén cerca de las llamas o de la máquina eléctrica en funcionamiento.
6. No comer ni beber en el laboratorio
7. Lavarse las manos después de cada experimento y antes de salir del laboratorio.
8. No fumar en el laboratorio por razones higiénicas y de seguridad.
9. Cerrar herméticamente los frascos de productos químicos después de utilizarlos.
10. El área de trabajo tiene que mantenerse siempre limpia y ordenada, sin libros, abrigos, bolsas, productos químicos vertidos, exceso de frascos de productos químicos, equipos innecesarios y objetos inútiles.

VIII - Regimen de Aprobación

SOBRE LOS TRABAJOS PRACTICOS

- 1- Los Trabajos Prácticos de Estructura de la Materia deberán cumplirse en los días y hora que establezca la Cátedra.
- 2- Toda comunicación o citación se hará por medio del avisador de la Cátedra.
- 3- Cada Alumno deber cumplir semanalmente, tres horas de Trabajo Práctico de Laboratorio y cinco horas de Teórico-práctico.

- 4- Antes de la realización de un Práctico de Laboratorio, el Alumno deberá responder un cuestionario escrito sobre el tema de trabajo. Solo podrá realizar el Trabajo Práctico, aquel alumno que conteste satisfactoriamente el mencionado cuestionario. El Alumno podrá ser interrogado durante el desarrollo de cualquier Trabajo Práctico.
- 5- Se establecerán horarios de consulta en los días que convenga a la mayoría de los Alumnos.
- 6- El Alumno deber concurrir a los Trabajos Prácticos munidos de los elementos necesarios: cuadernos, calculadora, elementos de geometría, guardapolvo, repasador, etc.
- 7- Al concurrir al Trabajo Práctico de Laboratorio, se deber presentar un pre-informe que contenga el objeto de la experiencia y un esquema de las operaciones a realizar, que ser visado a la iniciación del Trabajo Práctico.
- 8- En ningún caso una Comisión de Alumnos iniciar un Trabajo Experimental eléctrico, óptico, etc., sin que previamente el Personal Docente haya dado la autorización correspondiente. Caso contrario cualquier daño al instrumental utilizado ser responsabilidad de la Comisión, que estará obligada a costear su reparación.
- 9- Un Trabajo Práctico de Laboratorio se dará por aprobado si el Alumno cumple con los siguientes requisitos:
 - a. Rinde satisfactoriamente el cuestionario previo.
 - b. Realiza la parte experimental correctamente.
 - c. Presenta un informe ordenado con las operaciones fundamentales, cuadro de valores, cálculos, gráficas, errores, etc.
- 10- Para tener derecho a la recuperación de los Trabajos Prácticos, el Alumno deber tener una asistencia no menor al 75% del total.
- 11- Para aprobar los Trabajos Prácticos del Curso, los Alumnos deberán cumplimentar el 100% del Plan de Trabajos Prácticos.

SOBRE LOS PARCIALES

- 1- Durante el período lectivo se tomarán tres exámenes parciales escritos, sobre los Trabajos Prácticos realizados, cuyas fechas se darán a conocer con al menos 10 (diez) días de anticipación. Podrán rendir cada examen parcial aquellos Alumnos que hayan realizado el 100% de los Prácticos de Aula y Laboratorio, correspondientes a dicho parcial.
- 2- La Cátedra ofrecerá al Alumno 6 (seis) recuperaciones de exámenes parciales.
- 3- La Cátedra ofrecerá la posibilidad de Promoción sin Examen, a todos los Alumnos que hayan cumplimentado las correlatividades correspondientes.
- 4- Tanto los Parciales de Trabajos Prácticos como los de Promoción se aprobarán con el 70% (siete puntos).

IX - Bibliografía Básica

- [1] - BANWELL, C.N.; McCASH, E.M.: "Fundamentals of molecular Spectroscopy"; 4ª Ed., McGraw-Hill, 1994;
- BARROW, G.M.: "Introduction molecular spectroscopic".
- [2] - BARROW, G.M.: "Estructura de la moléculas"; Ed. Reverté, 1967.
- [3] - CASTELLAN, G.W.: "Fisicoquímica"; Fondo Educativo Interamericano, S.A., México, última edición.
- [4] - LEVINE, I.N.: "Química Cuántica", 5ª Ed., Prentice-Hall, 2010.
- [5] - LEVINE, I.N.: "Fisicoquímica"; Mc Graw-Hill, 5ª Ed., 2004.
- [6] - LEVINE, I. N.: "Espectroscopía Molecular", Ed. AC, España, 1980.
- [7] - ATKINS, P.; DE PAULA, J.: "Química Física", 8ª Ed., Ed. Médica Panamericana, 2008.
- [8] - TURRO N.: "Modern Molecular Photochemistry", University Science Books, California, 1991.
- [9] - LAKOWICZ J.: "Principles of Fluorescence Spectroscopy", 3ª Ed., Springer, 2008.

X - Bibliografía Complementaria

- [1] - ATKINS, P.W. & TRAPP C.A.: "Physical Chemistry"; 5th Ed., Oxford Univ. Press, 1995.
- [2] - JEAN, Y., VOLATRON F. & BURDETT J.: "An introduction to molecular orbitals"; Oxford University Press, 1993.
- [3] - MORCILLO RUBIO, J.: "Espectroscopía 1 y 2"; Univ.Nacional a Distancia de Madrid, 1992.
- [4] - RUSCA, J.B., GALLO, V.B. y Col.: "Química Cuántica", Ed. Síntesis. Madrid, 2000.

XI - Resumen de Objetivos

OBJETIVOS DEL CURSO:

El curso tiene como objetivos poner en condiciones al estudiante para:

- Explicar que problemas aborda la Química Cuántica, como los aborda y cuál es la información que puede obtener del estudio químico-cuántico de diferentes sistemas.
- Aprender la fundamentación mecanocuántica de la Espectroscopía y su aplicación a la determinación de la estructura

molecular y mecanismos de reacciones que involucren especies excitadas.

- Entender las razones por las que ocurren los distintos fenómenos espectroscópicos útiles en Química y aprender a extraer información estructural cuantitativa de los mismos.
- Analizar los resultados obtenidos y deducir conclusiones lógicas en base a los conceptos ya adquiridos.

XII - Resumen del Programa

PROGRAMA SINTETICO:

TEMA 1: Teoría cuántica. Naturaleza de la radiación. El átomo de Bohr. Ecuación de Schrödinger.

TEMA 2: Introducción a la mecánica cuántica. Postulados de la mecánica cuántica. Principio de incertidumbre.

TEMA 3: Simetría molecular. Elementos y grupos de simetría. Reglas de selección.

TEMA 4: Orbitales moleculares. Método de Hückel. Predicciones de reactividad.

TEMA 5: Espectroscopía rotacional. Cálculo de longitudes de enlace. Espectroscopía vibracional. Cálculo de constantes de fuerza y amplitud de las vibraciones. Aplicaciones a chalconas simples.

TEMA 6: Espectroscopía electrónica. Aplicaciones a chalconas y sistemas que involucren chalconas.

TEMA 7: Propiedades eléctricas de la materia. Momento dipolar y polarizabilidad. Estudio de la relación estructura - reactividad de chalconas sustituidas. Propiedades magnéticas. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear y de resonancia paramagnética electrónica.

TEMA 8: Fundamentos de fotoquímica. Procesos fotofísicos de activación y desactivación. Emisión luminiscente. Ecuación de Stern-Volmer. Técnicas experimentales. Reactividad de especies excitadas.

XIII - Imprevistos

Las horas restantes del crédito horario de la asignatura se destinarán a trabajos prácticos de aula adicionales.

XIV - Otros