



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

(Programa del año 2019)

### I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
ESTRUCTURA DE LA MATERIA	LIC. EN QUIMICA	3/11	2019	1° cuatrimestre

### II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
FERRARI, GABRIELA VERONICA	Prof. Responsable	P.Adj Exc	40 Hs
MONTAÑA, MARIA PAULINA	Prof. Colaborador	P.Tit. Exc	40 Hs
DAVILA, YAMINA ANDREA	Responsable de Práctico	JTP Exc	40 Hs
NIETO VAZQUEZ, RODOLFO RUBEN	Responsable de Práctico	JTP Semi	20 Hs

### III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
5 Hs	Hs	Hs	2 Hs	7 Hs

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

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
13/03/2019	19/06/2019	15	110

### IV - Fundamentación

Este curso pretende contribuir a la formación básica del estudiante en Química Cuántica. Se estudiará la ecuación de Schrödinger y qué pasos son necesarios para calcular la energía de los átomos individuales que componen una molécula y la energía de la molécula misma. Se analizará también cómo la mecánica cuántica puede utilizarse para interpretar el espectro de un átomo o molécula y la forma en que puede obtenerse información experimental respecto de los mismos. Los temas desarrollados servirán de apoyo para comprender en mayor profundidad otras materias profesionales de la Carrera.

### V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

El curso tiene como objetivos preparar al estudiante para:

- Entender que problemas aborda la Química Cuántica, cómo los aborda y cuál es la información que se puede obtener del estudio químico-cuántico de un sistema.
- Aprehender la fundamentación mecano-cuántica de la Espectroscopía y su aplicación a la determinación de la estructura molecular.
- Ejercitarse en la extracción de información estructural cuantitativa de los fenómenos espectroscópicos útiles en Química.

### VI - Contenidos

#### Tema 1: Teoría cuántica.

Orígenes de la mecánica cuántica. Dualidad onda-partícula. Ecuación de Schrödinger. Interpretación de Born de la función de onda. Normalización. Información de la función de onda. Cuantización. Principio de incertidumbre. Postulados de la

mecánica cuántica.

Tema 2: Aplicaciones de la teoría cuántica.

Movimiento de traslación. Partícula en una caja. Movimiento de vibración: niveles de energía y funciones de onda.

Movimiento de rotación. Partícula en un anillo. Cuantización. Espín.

Tema 3: Estructura y espectro atómicos.

Átomos hidrogenoides. Estructura. Orbitales atómicos y sus energías. Transiciones espectroscópicas y reglas de selección.

Átomos, polielectrónicos. Aproximación orbital. Orbitales de campos autoconsistentes. Átomos complejos. Estados singlete y triplete. Acoplamiento espín-órbita. Términos espectrales y reglas de selección.

Tema 4: Estructura Molecular

Aproximación de Born-Oppenheimer. Teoría del enlace valencia. Teoría de los orbitales moleculares. Ión molécula hidrógeno. Moléculas diatómicas homonucleares y heteronucleares. Orbitales moleculares para sistemas poliatómicos.

Aproximación de Hückel. Energía de deslocalización "pi". Orden de enlace. Índice de valencia libre. Distribuciones de carga. Predicciones de reactividad.

Tema 5: Interacciones moleculares.

Propiedades eléctricas de las moléculas. Momentos dipolares eléctricos. Polarizabilidad. Permitividades relativas.

Interacciones entre moléculas. Interacciones entre dipolos. Interacciones repulsivas y totales.

Tema 6: Simetría molecular.

Elementos de simetría. Operaciones de simetría. Clasificación de moléculas según su simetría. Consecuencias de la simetría.

Tema 7: Espectroscopia molecular.

Características generales. Intensidad y ancho de línea. Espectros rotacionales puros. Momentos de inercia. Niveles de energía rotacional. Transiciones rotacionales. Cálculos de longitudes de enlace. Espectros vibracionales de moléculas diatómicas.

Reglas de selección. Constantes de fuerza. Vibraciones de moléculas poliatómicas. Modos normales. Espectros de absorción infrarrojo.

Tema 8: Espectroscopia electrónica.

Características de las transiciones electrónicas. Espectros electrónicos de moléculas diatómicas y poliatómicas. Estados excitados. Fluorescencia. Fosforescencia. Fotoquímica

Tema 9: Resonancia magnética.

Efecto del campo magnético sobre los electrones y el núcleo. Energías de electrones y núcleos. Resonancia magnética nuclear.

## VII - Plan de Trabajos Prácticos

### TRABAJOS PRACTICOS DE AULA.

Se resolverán más de 80 ejercicios relativos a los temas desarrollados.

### TRABAJOS PRACTICOS EXPERIMENTALES.

1- Normas de Seguridad en el Laboratorio.

Normas básicas de seguridad. Equipos de protección personal. Higiene y condiciones generales de trabajo. Manipulación de material de laboratorio Disposición y eliminación de residuos. Acciones a seguir en caso de emergencia.

2- Estudio estructural de la 2',3-dihidroxicalcona

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

3- 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.

4- 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.

5- Espectroscopía Ultravioleta-visible.

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

6- Espectros de Fluorescencia y Raman.

Objeto: Determinación del espectro electrónico de fluorescencia de una sustancia en solución y del espectro Raman vibracional de un disolvente. Análisis de las transiciones implicadas y de las frecuencias vibracionales.

## II. TRABAJOS PRACTICOS COMPUTACIONALES

Se realizarán dos trabajos prácticos donde 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.

## VIII - Regimen de Aprobación

### SOBRE LOS TRABAJOS PRÁCTICOS

1- Para aprobar los Trabajos Prácticos del Curso, los Alumnos deberán cumplimentar el 100% del Plan de Trabajos Prácticos y el 80 % de las clases teórico-prácticas.

2- Los Trabajos Prácticos deberán cumplirse en los días y hora que establezca la Cátedra.

3- Toda comunicación o citación se hará por medio de la sección “Novedades” del Aula virtual y por el avisador de la Cátedra.

4- Cada Alumno deberá cumplir semanalmente dos horas de Trabajo Práctico de Laboratorio y cinco horas de clases Teórico-prácticas.

5- Durante el desarrollo de las clases los equipos móviles deben permanecer en silencio. En casos de urgencia, deben ser usados fuera del aula o laboratorio.

6- El Alumno deberá concurrir a los Trabajos Prácticos munidos de los elementos necesarios: cuadernos, calculadora, guardapolvo, repasador, etc.

7- Antes de la realización de un Práctico de Laboratorio, el Alumno deberá responder un cuestionario escrito sobre el tema del 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 de Laboratorio. Al finalizar el trabajo experimental el alumno deberá presentar a través del Aula Virtual el correspondiente informe en un lapso no mayor a una semana.

8- En ningún caso una Comisión de Alumnos iniciará un Trabajo de Laboratorio o Computacional sin que previamente el Personal Docente haya dado la autorización correspondiente. Caso contrario cualquier daño al instrumental utilizado será 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. en un lapso no mayor a una semana a través del Aula Virtual.

10- Se podrán recuperar hasta dos trabajos prácticos de laboratorio en cualquiera de sus instancias.

11- Los alumnos que no están en condiciones de cursar, no podrán realizar los trabajos prácticos de laboratorio dado que no se encuentran cubiertos por los seguros correspondientes.

### SOBRE LAS EVALUACIONES PARCIALES

1- Durante el período lectivo se tomarán dos exámenes parciales escritos, sobre siete de los nueve 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- En ningún caso se permitirá el uso de equipos móviles como calculadoras durante los exámenes parciales o sus recuperaciones.

3- La Cátedra ofrecerá al Alumno 2 (dos) recuperaciones por cada examen parcial, de acuerdo a la normativa vigente.

4- Dos de los Trabajos Prácticos realizados se evaluarán mediante actividades en el aula virtual.

5- Los Parciales de Trabajos Prácticos se aprobarán con el 70% (siete puntos).

6- Dadas las características del curso, en esta asignatura no puede rendirse el examen final como alumno libre.

## IX - Bibliografía Básica

- [1] ATKINS, P.; DE PAULA, J. "Química Física", 8ª Ed., Ed. Médica Panamericana, 2008.
- [2] CASTELLAN, G.W. "Fisicoquímica"; Fondo Educativo Interamericano, S.A., México, última edición.
- [3] LEVINE, I.N. "Fisicoquímica"; Mc Graw-Hill, 5ª Ed., 2004.
- [4] LEVINE, I.N. "Química Cuántica", 5ª Ed., Prentice-Hall, 2010.
- [5] BARROW, G.M. "Estructura de la moléculas"; Ed. Reverté, 1967

## X - Bibliografía Complementaria

- [1] LAKOWICZ J.: "Principles of Fluorescence Spectroscopy", 3ª Ed., Springer, 2008
- [2] TURRO N.: "Modern Molecular Photochemistry", University Science Books, California, 1991.
- [3] LEVINE, I. N.: "Espectroscopía Molecular", Ed. AC, España, 1980.
- [4] ATKINS, P.W. & TRAPP C.A.: "Physical Chemistry"; 5th Ed., Oxford Univ. Press, 1995.
- [5] JEAN, Y., VOLATRON F. & BURDETT J.: "An introduction to molecular orbitals"; Oxford University Press, 1993.
- [6] MORCILLO RUBIO, J.: "Espectroscopía 1 y 2"; Univ.Nacional a Distancia de Madrid, 1992.
- [7] RUSCA, J.B., GALLO, V.B. y Col.: "Química Cuántica", Ed. Síntesis. Madrid, 2000
- [8] BANWELL, C.N.; McCASH, E.M.: "Fundamentals of molecular Spectroscopy"; 4ª Ed., McGraw-Hill, 1994.

## XI - Resumen de Objetivos

En esta asignatura se pretende que el alumno sea capaz de entender los problemas que aborda la Química Cuántica, la fundamentación mecano-cuántica de la Espectroscopía y ejercitarse en obtener información del estudio químico-cuántico de un sistema.

## XII - Resumen del Programa

1. Teoría cuántica.  
Orígenes y principios de la mecánica cuántica. Ecuación de Schrödinger.
2. Aplicaciones de la teoría cuántica.  
Movimientos de traslación, vibración y rotación. Técnicas de aproximación.
3. Estructura y espectro atómicos.  
Átomos hidrogenoides, multielectrónicos y complejos.
4. Estructura Molecular  
Aproximación de Born-Oppenheimer. Teorías del enlace valencia y de los orbitales moleculares. Aplicación a sistemas poliatómicos.
5. Interacciones moleculares.  
Propiedades eléctricas de las moléculas. Interacciones entre moléculas.
6. Simetría molecular.  
Elementos de simetría. Aplicaciones a la espectroscopía.
7. Espectroscopia molecular.  
Características generales. Espectros de rotación. Espectros de vibración.
8. Espectroscopia electrónica.  
Transiciones electrónicas. Estados excitados. Fotoquímica.
9. Resonancia magnética.  
Efecto del campo magnético. Resonancia magnética nuclear.

## XIII - Imprevistos

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

## XIV - Otros