Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Quimica
Area: Quimica Fisica

(Programa del año 2023)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
ESTRUCTURA DE LA MATERIA	LIC. EN QUIMÍCA	3/11	2023	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
MUÑOZ, VANESA ALEJANDRA	Responsable de Práctico	JTP Exc	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
6 Hs	Hs	Hs	1 Hs	7 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoria con prácticas de aula y laboratorio	1º Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
13/03/2023	23/06/2023	15	110

IV - Fundamentación

El curso “Estructura de la Materia” está dirigido a estudiantes de tercer año de la carrera Licenciatura en Química. Los requisitos necesarios para cursar esta asignatura implican que las y los estudiantes hayan aprobado los cursos Matemática I y II y regularizado los cursos Matemática III, Física I y Química Física I. Estas asignaturas, junto con Química General I y II y Química Inorgánica brindan las herramientas matemáticas y los conceptos químicos y físicos para poder interpretar los fenómenos que se estudiarán en el curso Estructura de la Materia.

Los conocimientos impartidos en este curso serán útiles en asignaturas como Química Orgánica II y III, Estado sólido y Química Analítica II. Algunos conocimientos de Química Orgánica I son necesarios para el desarrollo del curso, asignatura que se cursa en forma simultánea.

El curso Estructura de la Materia contribuye a la formación básica del estudiante en Química Cuántica y Espectroscopía. 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.

El curso tiene una duración de quince semanas con una carga horaria semanal de siete horas. Se cuenta con un entorno virtual de enseñanza y aprendizaje que incluye al aula virtual de la materia en el sistema de Aulas Virtuales de la UNSL y recorridos interactivos realizados en Genially. En ellos se ofrecen herramientas de comunicación y de trabajo colaborativo asíncronas y diferentes herramientas de evaluación del aprendizaje. De ser necesario proponer encuentros virtuales sincrónicos se utilizarán herramientas como Google Meet, Hangouts y Zoom.

Los modelos de la materia se describirán a nivel submicroscópico en conexión con la evidencia experimental en la que se sustentan y reflexionando sobre el proceso de interpretación y argumentación a través del cual se generan. Esto promoverá el aprendizaje significativo y contribuirá a motivar a las y los estudiantes. El foco no estará puesto en transmitir información sino en reflexionar sobre los conceptos e ideas que nos permitan entender la forma en que se desarrolla el pensamiento.
El curso está pensado desde una concepción constructivista del aprendizaje, buscando no la reproducción sino la reelaboración de contenidos por parte de los y las estudiantes. Los conceptos se presentarán conectados con su utilidad y su posible aplicación práctica. Se fomentará el análisis y la discusión de artículos científicos o de divulgación referidos a la temática cómo una forma de relacionar el contenido con sus aplicaciones y de favorecer la expresión oral de las y los estudiantes. En este sentido se plantean también instancias de exposición oral de mapas conceptuales, tablas comparativas, infografías, etc. Buscando favorecer la expresión escrita de las y los estudiantes, se preveé la elaboración de informes de trabajos prácticos de laboratorio y computacionales.

Se propone el uso de estrategias de Internacionalización del Currículo como el uso de bibliografía en idiomas distintos al español, particularmente en inglés, y el uso de parciales empleados por otras universidades extranjeras como ejercitación del curso.
El equipo docente analizará continuamente la interactividad real y el progreso del aprendizaje, ajustando los tiempos, contenidos y la ayuda según las necesidades. El rol del equipo docente será el de asesor y guía del auto-aprendizaje, motivador y facilitador de recursos, promoviendo la interacción real con cada estudiante y realizando los ajustes necesarios para lograr que cada uno y cada una construya su propio aprendizaje.
Se utilizará la potencialidad que presentan los videos, elaborados por el equipo de cátedra o por otras fuentes, para el desarrollo de temas del currículum recurriendo a ellos para ilustrar conceptos que suelen ser de difícil comprensión. Estos videos serán parte del aula virtual de forma que los estudiantes puedan consultarlos cuando lo deseen.
Se realizará una evaluación formativa que incluye diferentes instancias de evaluación, incluyendo autoevaluaciones y co-evaluaciones.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

El curso tiene como objetivos preparar al estudiante para:
- Entender qué 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 Espectroscopia 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 singulete 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. Resonancia paramagnética electrónica.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

A- TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA.
Se resolverán más de 80 ejercicios relativos a los temas desarrollados y al menos dos parciales de asignaturas similares utilizados por universidades extranjeras.

B- TRABAJOS PRÁCTICOS EXPERIMENTALES.
Se prevé la realización de tres Trabajos Prácticos de Laboratorio.

- 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.

- 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.

- Espectroscopía Ultravioleta-visible: Objeto: Estudio de los corrimientos de las bandas de absorción en función de los sustituyentes.

- Espectros de Fluorescencia: Objeto: Estudiar el espectro electrónico de fluorescencia de 9,10-dimetilantraceno analizando las transiciones implicadas.

C- TRABAJOS PRÁCTICOS COMPUTACIONALES
Se realizarán dos trabajos prácticos donde se ensayarán programas para el cálculo de energías, estudio de orbitales HOMO y LUMO, análisis de enlaces, análisis vibracionales y diversas propiedades de interés químico utilizando métodos semi-empíricos.

VIII - Regimen de Aprobación

- Toda comunicación o citación se hará utilizando el foro de la sección “Novedades” del Aula virtual.
- Los Trabajos Prácticos deberán cumplirse en los días y hora que establezca la Cátedra, previo a los parciales que contengan dichos contenidos.

Dada la evaluación formativa propuesta para el curso, para alcanzar la condición de REGULAR los estudiantes deben:

1) Realizar los Trabajos Prácticos de Aula, lo que implica:
a) Resolver todos los ejercicios indicados en cada tema estudiado
b) Elaborar y presentar por cada tema estudiado y según se indique, un mapa conceptual, tabla comparativa o infografía, que

cumpla con los parámetros de la rúbrica de evaluación especificada por el equipo docente
c) Defender en forma oral uno de estos mapas conceptuales, tablas comparativas o infografías.

2) Aprobar los Trabajos Prácticos de Laboratorio y los los Trabajos Prácticos Computacionales, lo que implica:
a) Rendir satisfactoriamente el cuestionario previo.
b) Desarrollar correctamente la parte experimental o los cálculos computacionales y analizar correctamente los datos obtenidos
c) Presentar a través del Aula Virtual un informe ordenado que incluya: las operaciones fundamentales, cuadro de valores, cálculos, gráficas, errores y conclusiones. Este informe debe ser presentado a través del Aula Virtual y en un lapso no mayor a una semana de haber realizado el trabajo experimental .
El estudiante podrá ser interrogado durante el desarrollo de cualquier Trabajo Práctico de Laboratorio o Computacional. En ningún caso una Comisión de Estudiantes iniciará un Trabajo de Laboratorio 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.

3) Aprobar los exámenes parciales:
Se tomarán dos exámenes parciales escritos, sobre ocho de los nueve Trabajos Prácticos realizados, cuyas fechas se darán a conocer con anticipación. Uno de los Trabajos Prácticos se evaluará a través de actividades en el aula virtual. Podrán rendir los exámenes parciales aquellos estudiantes que, para cada tema incluido en el parcial, hayan:
a) Realizado el 100% de los Prácticos de Aula
b) Aprobado el 100% de los Trabajos Prácticos de Laboratorio o Computacionales,
c) Entregado el 100% de los mapas conceptuales, tablas comparativas o infografías solicitadas.
Se ofrecerán 2 (dos) recuperaciones por cada examen parcial. Los Parciales se aprobarán con el 70% (siete puntos).

Una vez alcanzada la condición de regular, los estudiantes deberán aprobar un examen final teórico en algún turno de examen ofrecido por la institución.
Esta asignatura ofrece la posibilidad de PROMOCIÓN sin examen final. Para ello los estudiantes en condiciones de acceder a la promoción deben cumplir todos los requisitos previamente indicados para acceder a la regularidad y, además:
1) Defender en forma oral todos los mapas conceptuales, tablas comparativas o infografías elaborados.
2) Aprobar los exámenes parciales con una nota igual o superior a 8 (ocho)
3) Aprobar un exámen teórico integrador al finalizar la cursada, involucrando la totalidad de los temas de la asignatura.

Dadas las características del curso no se puede rendir el examen final en condición de alumno LIBRE.

IX - Bibliografía Básica

[1] ATKINS, P.; DE PAULA, J. “Química Física”, 8ª Ed., Ed. Médica Panamericana, 2008.
[2] BARROW, G.M. "Estructura de las moléculas"; Ed. Reverté, 1967
[3] CASTELLAN, G.W. "Fisicoquímica"; Fondo Educativo Interamericano, S.A., México, última edición.
[4] LEVINE, I.N. "Fisicoquímica"; Mc Graw-Hill, 5ª Ed., 2004.
[5] LEVINE, I.N. "Química Cuántica", 5ª Ed., Prentice-Hall, 2010.
[6] HOLLAS, J.M. “Modern Spectroscopy”, 4ª Ed., Wiley, 2004.
[7] RECURSOS MULTIMEDIA DISPONIBLES EN EL AULA VIRTUAL:
[8] DÁVILA, Y. A. “Cuantizando la cuántica”. [Infografía]. 2021.
[9] DÁVILA Y. A. “Química Computacional” [Recorrido Genially interactivo], 2021
[10] FERRARI, G. V., Teorías de los temas 1 a 5 y 7 [Videos]. 2020-2021.
[11] MONTAÑA, M. P. “Espectroscopía Uv-Vis” [Infografía Interactiva]. 2020.
[12] SANTAOLALLA, J. “¿La luz es una partícula o una onda?” [Video]. Universidad Politécnica. 2015. https://www.youtube.com/watch?v=U4-DmT12D9E
[13] SANTAOLALLA, J. “Que no te mareen ¡Todo lo que siempre quisiste saber sobre el SPÍN!” [Video]. Universidad Politécnica. 2018. https://www.youtube.com/watch?v=Hq4Q36YSm8o&feature=youtu.be
[14] ARTÍCULOS DE DISCUSIÓN
[15] MARTINEZ DE LA FE, E. “La IA penetra en el sistema cuántico que origina la materia y la vida” Tendencias, 2020. https://tendencias21.levante-emv.com/la-ia-penetra-en-el-sistema-cuantico-que-origina-la-materia-y-la-vida.html.

[16] ROSAS ORTIZ, O. “Entrelazamiento cuántico y universos paralelos” Conversus, 70 18–23, 2008.
[17] APARICI, A. “Benceno: un anillo para dominarlos a todos” Diario “La razón” - Sociedad, 11/03/2020.

X - Bibliografia Complementaria

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

XI - Resumen de Objetivos

En esta asignatura se pretende que el estudiante 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 y paramagnética electrónica.

XIII - Imprevistos

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

XIV - Otros

Datos de contacto:

Prof. Dra. Gabriela V. Ferrari
Box 62, 2º Piso Bloque III
gvferrari@gmail.com