



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

(Programa del año 2024)  
(Programa en trámite de aprobación)  
(Presentado el 08/09/2024 19:17:35)

### I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
ESTRUCTURA DE LA MATERIA	LIC. EN QUIMICA	12/21	2024	2° 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
5 Hs	Hs	Hs	1 Hs	6 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoría con prácticas de aula y laboratorio	2° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
05/08/2024	15/11/2024	15	90

### 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 Química Orgánica II, Física II y regularizado el curso Matemática III. 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 "Introducción al Modelado Molecular de Sistemas Orgánicos y Biorgánicos" y "Estado sólido".

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 cómo se aplica a sistemas sencillos. Luego se analizará qué pasos son necesarios para calcular la energía de los átomos individuales que componen una molécula y la energía de la molécula misma. Se estudiará 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 seis 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 como 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 prevé 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:

- Conocer los principios de la Mecánica Cuántica y cómo pueden aplicarse a sistemas sencillos.
- Describir la estructura electrónica de sistemas atómicos y moleculares a través de los principales métodos aproximados
- Identificar las principales técnicas espectroscópicas
- Predecir e interpretar espectros a partir de la estructura de las moléculas y de reglas de selección.
- Predecir el comportamiento y reactividad de átomos y moléculas a partir del análisis de su estructura y de datos teóricos y/o espectroscópicos.

## 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, polieletrónicos. 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: Simetría molecular.

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

Propiedades eléctricas de las moléculas. Momentos dipolares eléctricos. Polarizabilidad. Tablas de caracteres.

Tema 6: 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 7: Espectroscopia electrónica.

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

## VII - Plan de Trabajos Prácticos

### A- TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA.

Se resolverán más de 60 ejercicios relativos a los temas desarrollados y al menos un parcial de asignaturas similares utilizados por universidades extranjeras.

### B- TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO

Se realizarán cuatro Trabajos Prácticos de Laboratorio y un TPL inicial destinado a los aspectos de higiene y seguridad:

TPL 0: 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.

TPL 1 Espectroscopía infrarroja: análisis de desplazamiento de la banda del grupo carbonilo al variar sus vecindades.

TPL 2 Espectroscopía Ultravioleta-visible: Estudio de los corrimientos de las bandas de absorción en función de los sustituyentes.

TPL 3 Espectroscopía de Fluorescencia. Estudio del espectro electrónico de fluorescencia de 9,10-dimetilantraceno

TPL 4 Espectroscopía Ultravioleta. Resolución de mezclas.

### C- TRABAJOS PRÁCTICOS COMPUTACIONALES

Se realizarán dos trabajos prácticos computacionales (TPC) 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.

TPC 1: Cálculo de energías, estudio de orbitales HOMO y LUMO, y análisis de enlaces utilizando métodos ab initio y semi-empíricos.

TPC 2: 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 "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 Trabajo Final de Unidad (TFU) que consiste en una producción personal (mapa conceptual, tabla comparativa o infografía) realizado de forma individual y acorde a los parámetros de la rúbrica de evaluación especificada por el equipo docente. La primera versión del TFU se realizará dentro del horario de clase al final de cada unidad. Se destinará un tiempo de 1 hora para elaborar esta que deberá entregarse en formato papel. Se considerará que el TFU está desaprobado cuando:

- No alcancen el puntaje mínimo de calificación, en cuyo caso deberán recuperar el TFU durante una de las instancias de exposición de TFU.

- Los estudiantes que no se encuentran presentes en esas clases. En este caso deberán recuperar el TFU en forma oral fuera del horario de clase en un horario a convenir.

Las fechas de los TFU se anunciarán en el calendario del Aula Virtual.

c) Defender en forma oral uno de los TFU. Se propondrá una fecha previa al primer parcial en la cual se defenderán los TFU correspondientes a las unidades 2, 3 y 4 y una segunda fecha previa al segundo parcial en la cual se defenderán los TFU

correspondientes a las unidades 5, 6 y 7. Las fechas de estas defensas orales se anunciarán en el calendario del Aula Virtual.

2) Aprobar los Trabajos Prácticos de Laboratorio y los Trabajos Prácticos Computacionales, lo que implica:

a) Rendir satisfactoriamente el cuestionario previo.

b) Desarrollar 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 cuyas fechas se darán a conocer con anticipación. 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).

4) Las conductas antiéticas como el plagio serán motivo de quedar libre en el curso.

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 aprobar todos los requisitos previamente indicados para acceder a la regularidad y, además:

a) Los exámenes parciales se aprobarán con el 80% (ocho puntos)

b) Sólo podrán recuperar uno de los exámenes parciales

b) Defender en forma oral los mapas conceptuales, tablas comparativas o infografías elaborados.

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] MONTAÑA, M. P. "Espectroscopía Uv-Vis" [Infografía Interactiva]. 2020.

[11] SANTAOLALLA, J. "¿La luz es una partícula o una onda?" [Video]. Universidad Politécnica. 2015.

<https://www.youtube.com/watch?v=U4-DmT12D9E>

[12] 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>

[13] ARTÍCULOS DE DISCUSIÓN

[14] 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-cuamico-que-origina-la-materia-y-la-vida.html>.

[15] ROSAS ORTIZ, O. "Entrelazamiento cuántico y universos paralelos" Conversus, 70 18–23, 2008.

[16] APARICI, A. "Benceno: un anillo para dominarlos a todos" Diario "La razón" - Sociedad, 11/03/2020.

## X - Bibliografía 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 Espectroscopia y ejercitarse en obtener información del estudio químico-cuántico de un sistema.

## XII - Resumen del Programa

- 1) Teoría cuántica.
- 2) Aplicaciones de la teoría cuántica.
- 3) Estructura y espectro atómicos.
- 4) Estructura Molecular.
- 5) Simetría molecular.
- 6) Espectroscopia molecular.
- 7) Espectroscopia electrónica.

## XIII - Imprevistos

## XIV - Otros

### ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA

ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA	
	<b>Profesor Responsable</b>
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	