QI-21A QUIMICA MODERNA

UNIDADES DOCENTES	:	10 U.D.
REQUISITOS	:	Cálculo I MA12A/MA121 DH (4.5-1.5-4.0)
DURACION	:	Semestral
CARACTER	:	Obligatorio Plan Común

I) Objetivos Generales

Entregar una concepción moderna de la Química, a partir de los principios básicos de la fisicoquímica y de la teoría de la estructura atómica y molecular son temas relevantes a los dos primeros módulos del programa. Adicionalmente, el curso contempla un tercer módulo de propiedades y transformaciones químicas, de carácter orgánico e inorgánico. El curso es interactivo y los dos primeros módulos sientan las bases formales para una comprensión analítica y no memorística de los temas contemplados en la asignatura.

II) Objetivos específicos

Desarrollar la capacidad de pensamiento analítico del alumno, haciendo énfasis en la estructura de la materia y sus propiedades físicas y químicas. Al término del curso, el alumno debe ser capaz de manejar una cantidad importante de conceptos que le permitan, en su desarrollo como estudiante de especialidad y posteriormente en su calidad de profesional, innovar en el campo tecnológico.

III) Programa

MODULO 1. TERMODINAMICA (15 Horas)

1.1. Conceptos preliminares de gases y líquidos (1,5 horas)

1.1.1. Presión de vapor. Punto crítico. Diagrama de Andrews. Gases ideales y reales.

1.2. Fundamentos y Primera Ley (3 horas)

1.2.1. Definiciones básicas. Propiedades termodinámicas

1.2.2. Transformaciones termodinámicas. Reversibilidad e irreversibilidad

1.2.3. Primera Ley de la Termodinámica.

1.3. Aplicaciones de la Primera Ley (3,5 horas)

- 1.3.1. Relaciones entre propiedades termodinámicas. Transformaciones interesantes.
- 1.3.2. Coeficiente calorimétrico. Termoquímica. Calores de reacción. Estado standard. Calor de reacción y temperatura.

1.4. Segunda y Tercera Leyes de la Termodinámica (4 horas)

- 1.4.1. Ciclo de Carnot. Teorema de Clausius
- 1.4.2. Entropía. Criterio de espontaneidad
- 1.4.3. Equilibrio termodinámico. Potenciales termodinámicos. Ecuación de Gibbs-Helmholtz.
- 1.4.4. Tercera Ley de la Termodinámica. Valores absolutos de las propiedades termodinámicas

1.5. Equilibrio químico (3 horas)

- 1.5.1. Equilibrio químico en sistemas ideales. Equilibrio de gases ideales. Constante de equilibrio y temperatura.

MODULO 2 ESTRUCTURA ATOMICA Y MOLECULAR (21 horas)

2.1. Introducción. Elementos de Química Cuántica (3 horas)

- 2.1.1. Concepto de observable y Principio de Incertidumbre.
- 2.1.2. Energías electrónicas y nucleares. Separación.

2.2. Estructura Atómica (6 horas)

- 2.2.1. Concepto de probabilidad de presencia.
- 2.2.2. Estado permitidos en sistemas atómicos. Continuo y discontinuo de energías.
- 2.2.3. Probabilidad de presencia y Principio de superposición.
- 2.2.4. Energías electrónicas y términos espectroscópicos permitidos. Propiedades periódicas.
- 2.2.5. Niveles energéticos hidrogenoides. Orbitales s, p, d; formas. Modelo no relativista y corrección relativista.
- 2.2.6. Sistemas polielectrónicos livianos. Repulsión electrón-electrón y términos de multiplete. Acoplamiento spin-órbita

2.3. Interacciones atómicas (4,5 horas)

- 2.3.1. Interacciones entre átomos, de largo y corto alcance.
- 2.3.2. Moléculas diatómicas homonucleares y heteronucleares. Diagramas de correlación. Enlace covalente y iónico.

2.3.3. Electronegatividades de átomos, iones y moléculas.

2.4. **Moléculas Poliatómica (6 horas)**

2.4.1. Enlace químico e hibridación. Enlace σ , π y δ .

2.4.2. Estereoquímica

2.4.3. Teoría de bandas.

2.4.4. Método de Hückel simple y aplicaciones al sistema π con y sin heteroátomos.

2.5. **Interacciones moleculares (1,5 horas)**

2.5.1. Momentos dipolares eléctricos y magnéticos.

MODULO 3. NOCIONES DE QUIMICA DE LOS ELEMENTOS. COMPUESTOS INORGANICOS Y ORGANICOS (28,5 horas)

3.1. **Tipos de compuestos inorgánicos (3 horas)**

3.1.1. Clasificación general de los elementos en función de su posición en la Tabla Periódica: metales; no metales; semimetales. Carácter metálico, no metálico y metaloide. Propiedades físicas distintivas.

3.1.2. Compuestos metálicos; compuestos covalentes; compuestos iónicos. Relación con Tabla Periódica. Modelo de enlace. Nociones elementales de nomenclatura. Compuestos inorgánicos clásicos. Compuestos de coordinación. Compuestos organometálicos.

3.2. **Sólidos inorgánicos. Estado cristalino (4,5 horas)**

3.2.1. Celda unitaria y sistemas cristalinos principales.

3.2.2. Estructuras de empaquetamiento compacto.
Descripción tipos de huecos.

3.2.3. Celda unitaria en metales y en compuestos iónicos. Cristales iónicos: relación de radios, energías reticulares. Estimaciones teóricas y experimentales.

3.2.4. Ciclo de Born-Haber. Aplicaciones a la estimación de afinidades electrónicas y estabilidad de compuestos hipotéticos.

3.2.5. Propiedades de sólidos iónicos: puntos de fusión, conductividad, solubilidad, etc.

3.3. **Propiedades del solvente y equilibrio químico en solución. Oxido-reducción (6 horas)**

3.3.1. Solvatación de especies en solución. Sistemas de solventes. Diferencias entre iones provenientes de compuestos iónicos típicos y iones de metales de transición. Propiedades: calores de solución, n° de hidratación, constantes de estabilidad, etc.

3.3.2. Conceptos ácido-base. Teoría de Brønsted-Lowry; de Arrhenius; de Lewis. Ácidos y bases fuertes y blandos.

- 3.3.3. Equilibrio químico en solución. Constante de equilibrio. Reacciones de hidrólisis (ejemplos: hidrólisis de sales, etc.)
- 3.3.4. Reacciones de óxido-reducción. Agentes oxidantes y reductores. Número de oxidación. Potenciales. Balanceo de ecuaciones redox (ejemplo: corrosión de $\text{Fe} + \text{H}_2\text{O}$). Celdas galvánicas.
- 3.4. **Enlace covalente en moléculas poliatómicas. (1,5 horas)**
- 3.4.1. Enlace híbridos: sp ; sp^2 ; sp^3 ; analogía con moléculas inorgánicas (BeCl_2 , BF_3 , etc.). Moléculas con electrones no compartidos (H_2O , NH_3 , etc.). Extensión a otras moléculas sencillas.
- 3.4.2. Hidrocarburos: clasificación (alcanos, alquenos, alquinos). Propiedades físicas.
- 3.5. **Familias y funcionalidad en Química Orgánica (5 horas)**
- 3.5.1. Sistemas saturados. Alifáticos y cíclicos.
- 3.5.2. Sistemas insaturados y aromático (calores de hidrogenación), calores de combustión, longitud de enlace, etc.). Estructura resonantes. Descripción de orbitales.
- 3.5.3. Funciones oxigenadas y nitrogenadas. Alcoholes, éteres, cetonas, ácidos carboxílicos, aldehídos (breve nomenclatura, propiedades y comparación entre compuestos de familias homólogas e hidrocarburos). Aminas alifáticas y aromáticas; propiedades. Heterocíclicos (piridina, tiofeno, furano, pirrol).
- 3.6. **Estructura molecular en compuestos orgánicos 3 horas)**
- 3.6.1. Relaciones entre estructura y propiedad física. Agua, amoníaco, alcoholes y aminas. Ácidos carboxílicos y aminas. Acidez-basicidad.
- 3.6.2. Isomería: posición y funcionalidad. Actividad óptica. Luz polarizada, rotación específica. Polarímetro.
- 3.7. **Escisiones homolíticas y heterolíticas. (3 horas)**
- 3.7.1. Concepto de nucleófilo, electrófilo y radical libre.
- 3.7.2. Estabilidad de carbocationes, carboaniones y radicales libres. Algunas reacciones sencillas con formación de estas especies. Adición y sustitución electrofílica aromática (benceno).
- 3.8. **Estructura y reactividad (2,5)**
- 3.8.1. Energía de activación. Estado de transición. Avance de reacción. Cambio de energía. Reactividad y desarrollo de estado de transición. Complejo activado.

Total semestral: 64,5 horas

BIBLIOGRAFIA

1. R. Petrucci. "Química General". Fondo Educativo Interamericano. 1976.
2. D.D. Ebbing. "General Chemistry". Houghton Mifflin Co. Boston. 1984.
3. H. Gray. "Principios Básicos de Química". Ed. Reverté. 1969.
4. H. Gray. "Electrones y Enlace Químico". Ed. Reverté. 1978.
5. D. Cruz-Garriz, J.A. Chamizo, A. Garriz. "Estructura Atómica, un enfoque Químico". Fondo Educativo Interamericano. México. 1986.
6. G.C. Pimentel, R.D. Spratley. "Chemical Bonding clarified through Quantum Mechanics". Holden-Day Inc. San Francisco. 1969.
7. G.W. Castellan. "Fisicoquímica". Fondo Educativo Interamericano. 1975.
8. I.N. Levine "Fisicoquímica". Mac-Graw Hill. 1990.
9. J.D. Roberts. M. C. Caserio. "Basic Principles of Organic Chemistry". Ed. W.A. Benjamín. 1965.
10. R.T. Morrison, R.N. Boyd. "Química Orgánica". Fondo Educativo Interamericano. 1985.
11. B.H. Mahan, "Química Curso Universitario". Fondo Educativo Interamericano. S.A.
12. G.M. Barrow, "Química Física". Editorial Reverté, S.A. 1964.
13. S.H. Maron y C.F. Prutton, "Fundamentos de Fisicoquímica". Editorial Limusa Wiley. S.A. 1968.
14. C.R. Dillard y D.E. Goldberg, "Química: reacciones, estructuras, propiedades". Ed. Fondo Educativo Interamericano. S.A. 1977.
15. F.A. Cotton y G. Wilkinson, "Fundamentos de Química Inorgánica" Editorial Limusa, México. 1978.
16. E. Hutchinson, "Química". Ed. Reverté, S.A. 1960.

IV. EVALUACION

Se realizarán 3 controles, cada uno de ellos luego de finalizado el módulo temático respectivo, más un Examen Final. La Nota de Control (NC) será el promedio simple de ellas y existirá, adicionalmente, una Nota de Ejercicios (NE). La Nota Final (NF) será el promedio ponderado entre NC y NE (una cifra de referencia es $NF = 0,80 NC + 0,20 NE$).