

UNIDAD: IZTAPALAPA		DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA	
NIVEL: LICENCIATURA		EN QUÍMICA	
CLAVE: 2141138	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: TEMAS SELECTOS DE TEORÍA DE LA QUÍMICA ANALÍTICA		TRIM: VI-XII
HORAS TEORÍA: 2	SERIACIÓN 2141101 y 2141086		CRÉDITOS: 7
HORAS PRÁCTICA: 3			OPT/OBL: OPT.

OBJETIVO(S)

GENERAL

- Que al final del curso el alumno sea capaz de explicar y utilizar aspectos avanzados de la teoría de la química analítica y computacional para interpretar y predecir el comportamiento de sistemas en solución de interés en diferentes situaciones de investigación relacionados con la fisicoquímica de las soluciones acuosas y no acuosas.

ESPECÍFICOS

Al final del curso el alumno será capaz de practicar al menos cuatro de los siguientes objetivos:

- Enunciar las aplicaciones más importantes de la química de soluciones acuosas y no acuosas desde el punto de vista de la teoría de la Química Analítica, así como que establezca sus analogías y diferencias.
- Calcular las condiciones de equilibrio de diferentes sistemas con diferentes herramientas de la teoría de la Química Analítica que pueden darse en soluciones acuosas y no acuosas.
- Determinar constantes de acidez de sistemas poliácidos potenciométrica y espectrofotométricamente, utilizando métodos gráficos y computacionales.
- Determinar constantes de equilibrio de coordinación espectrofotométricamente, utilizando métodos gráficos y computacionales.
- Aplicar los métodos de la Química Computacional para el análisis conformacional, e identificación de estructuras más probables.
- Aplicar los métodos de la Química Computacional para el análisis y predicción de espectros UV-Vis.
- Aplicar los métodos de la Química Computacional para el análisis y asignación de bandas de espectros IR.
- Aplicar los métodos de la Química Computacional para la estimación de constantes de equilibrio ácido-base de Brønsted y otros equilibrios químicos.
- Comparar críticamente los resultados de constantes de equilibrio calculadas por métodos computacionales con valores experimentales.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		2/4
CLAVE 2141138	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE TEMAS SELECTOS DE TEORÍA DE LA QUÍMICA ANALÍTICA	

CONTENIDO SINTÉTICO:

- I. Temas avanzados de Química de Soluciones
 1. Equilibrio químico en sistemas multicomponentes, multirreaccionantes y multifásicos en métodos comunes de la Química Analítica.
 - 1.1. Consideración de las especies polinucleares.
 - 1.2. Consideración de los equilibrios de micelización.
 - 1.3. Consideración de los equilibrios con moléculas del tipo anfitrión-huésped.
 2. Representaciones gráficas de los sistemas multicomponentes, multirreaccionantes y multifásicos.
 - 2.1. Los diagramas de distribución de especies y componentes como distribuciones de variable discreta.
 - 2.2. El número promedio de protones y ligantes y la capacidad amortiguadora intrínseca de los sistemas polidonadores.
 - 2.3. Diagramas de zonas de predominio.
 3. Solventes no acuosos.
 - 3.1. Propiedades de los solventes no acuosos más comunes en la Química Analítica.
 - 3.2. Clasificación de los solventes.
 - 3.3. Aplicación del método de Charlot para explicar procesos químicos en solventes con autoprotólisis y en solventes poco disociantes.
 4. Análisis de factores en química para estimar el número de especies que participan en equilibrios.
 - 4.1. El programa TRIANG.
 - 4.2. El programa SYBILA.
 - 4.3. Aplicaciones de los métodos para establecer el número de especies que participan en equilibrios químicos.
 5. Métodos gráficos para la determinación de constantes de equilibrio.
 - 5.1. Uso de hojas de cálculo.
 - 5.2. Determinación de constantes de equilibrio utilizando programas computacionales tales como SUPERQUAD y SQUAD.
 - 5.3. Aplicaciones de los métodos a la determinación de las constantes de equilibrio.
- II. Determinación de constantes de equilibrio por métodos experimentales y computacionales
 1. Conceptos básicos de Química Computacional.
 - 1.1. Sistemas de coordenadas, interfases gráficas y optimización de geometrías.
 - 1.2. Correcciones termodinámicas y cálculos de frecuencias.
 - 1.3. Eficiencia de diferentes metodologías, relación costo-confiabilidad.
 - 1.4. Conjuntos de base.
 - 1.5. Modelos de solvente.
 - 1.6. Elaboración e interpretación de archivos de entrada y salida.
 2. Análisis conformacional.
 - 2.1. Superficie de energía potencial mínima, mínimos locales y mínimo absoluto.
 - 2.2. Interconversión entre mínimos mediante rotaciones.
 - 2.3. Estrategias para identificar al confórmero más probable.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		3/4
CLAVE 2141138	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE TEMAS SELECTOS DE TEORÍA DE LA QUÍMICA ANALÍTICA	

CONTENIDO SINTETICO

3. Espectros UV-Vis.
 - 3.1. Diferentes metodologías para el cálculo de espectros UV-Vis.
 - 3.2. Relación entre estructura y espectros.
 - 3.3. Influencia del solvente en la posición de las bandas.
 - 3.4. Interpretación de resultados.
 - 3.5. Predicción de evolución de espectros en función del avance de la reacción.
 - 3.6. Puntos isobéuticos, dicroísmo circular, análisis de errores.
4. Espectros IR.
 - 4.1. Cálculos de frecuencias, selección del nivel de cálculo.
 - 4.2. Costo computacional e importancia.
 - 4.3. Interpretación de resultados.
 - 4.4. Asignación de bandas, relación con la estructura química.
 - 4.5. Identificación de interacciones de puente de hidrógeno.
 - 4.6. Efecto isotópico.
5. Equilibrios químicos.
 - 5.1. Constantes de equilibrio y su relación con la energía libre de Gibbs.
 - 5.2. Importancia de la entropía.
 - 5.3. Cálculo de magnitudes termodinámicas.
 - 5.4. Estimación de constantes de equilibrio.
 - 5.5. Influencia de la temperatura.
 - 5.6. Influencia de la polaridad del medio.
 - 5.7. Reversibilidad.
6. Equilibrios ácido-base: estrategias para la estimación de constantes de acidez, sistemas polidadores, afinidades protónicas, orden de deprotonación, limitaciones y fortalezas de la Química Computacional en el estudio de equilibrios ácido-base.

MODALIDADES DE CONDUCCIÓN DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE

- De acuerdo a los intereses de los alumnos que deseen inscribirse a la presente UEA se hará una estructuración específica de cada curso.
- Se hará énfasis en aplicaciones concretas y estrategias eficientes.
- En su caso, se recomienda que la teoría y los experimentos se desarrollen para los mismos sistemas químicos, haciendo énfasis en la aplicabilidad de la Química Analítica y de la Química Computacional, más que en las bases teóricas que la sustentan y que ya están cubiertas en otras materias.
- La exposición de la teoría se basará principalmente en conferencia o clase magistral y cuando juzgue conveniente podrá usar demostraciones (experiencias de cátedra). Se hará énfasis en los aspectos conceptuales y en las aplicaciones; se procurará usar ejemplos tomados de varias disciplinas.
- Por práctica se entenderá la realización de sesiones de taller o laboratorio de cómputo. En las sesiones de taller se buscará que el alumno elabore un acervo personal de métodos y estrategias para la solución de problemas.
- Un profesor debe conducir tanto las sesiones de teoría como las de taller.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		4/4
CLAVE 2141138	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE TEMAS SELECTOS DE TEORÍA DE LA QUÍMICA ANALÍTICA	

MODALIDADES DE EVALUACIÓN:

Evaluación Global:

- Se realizarán al menos dos evaluaciones periódicas. Los alumnos que aprueben las evaluaciones periódicas no presentarán una evaluación terminal. El resultado final será el promedio simple de las evaluaciones practicadas.

Evaluación de Recuperación:

- El curso podrá acreditarse mediante una evaluación de recuperación, que podrá ser global o complementaria a juicio del profesor.

BIBLIOGRAFÍA NECESARIA O RECOMENDABLE:

1. Cramer, C. J., *Essentials of Computational Chemistry Theories and Models*, 2da. Edición, John Wiley & Sons Ltd, 2004.
2. Charlot, G., *Química Analítica General*. Tomo I, Toray-Masson, Barcelona, 1975.
3. Hartley, F.R., Alcock, R.M., Burgess, C., *Solution Equilibria*. Wiley. Ellis Horwood. Chichester. 1980.
4. Holtje, H., Folkers, G., *Molecular Modeling Basic Principles and Applications*, Wiley-VCH, VCH Publishers, Inc., 1996.
5. Jensen, F., *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons Ltd, 2007.
6. Legget, D., *Computational methods for the determination of formation constants*. Plenum Press. New York. 1985.
7. Meloun M., Havel J., Högfeltd E., *Computation of Solution Equilibria: A Guide to Methods in Potentiometry, Extraction, and Spectrophotometry*. Ellis Horwood. Chichester. 1988.
8. Martell A. E., Motekaitis R. J., *The Determination and Use of Stability Constants*. VCH Publishers. New York. 1988.
9. Moya-Hernández, R.; Rueda-Jackson, J.C.; Ramírez, M.T.; Vázquez, G.A.; Havel, J.; Rojas-Hernández, A., *Statistical Study of Distribution Diagrams for Two-Component Systems*. Journal of Chemical Education, Vol. 79, p. 389, 2002.
10. Popovych, O.; Tomkins, R.P.T., *Non-aqueous solution chemistry*. Wiley. New York. 1981.
11. Rojas-Hernández, A., El método de especies y equilibrios generalizados para el estudio de sistemas químicos en equilibrio bajo condiciones de amortiguamiento. Tesis doctoral. UAM-Iztapalapa. 1995.
12. Smith, W.R.; Missen, R.W., *Análisis del equilibrio en reacciones químicas: teoría y algoritmos*. Limusa. México. 1987.
13. Trémillon, B., *Électrochimie analytique et réactions en solution*. Paris. Masson. 1993.
14. Vicente-Pérez, S., *Química de las disoluciones: diagramas y cálculos gráficos*. Alhambra. Madrid. 1981.
15. Young, D. C., *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*, Wiley-Interscience, John Wiley & Sons, Inc., 2001.