

## A. Programas de Estudios

### UNIVERSIDAD VERACRUZANA (Nombre del PE de posgrado)

DATOS GENERALES
Nombre del Curso
<b>Química: Átomos y moléculas</b>

PRESENTACIÓN GENERAL
<b>Justificación</b>
<p>La Química como experiencia educativa de la maestría en Ciencias en Micro y Nanosistemas, constituye un pilar en la formación del alumno que involucra el manejo y estudio de materiales químicos micro y nanoestructurados. En donde, esta experiencia educativa le permitiría profundizar en conceptos fundamentales de la química y aplicarlos a la comprensión e interpretación de fenómenos relacionados con su área de estudio.</p> <p>Con esta experiencia educativa el alumno tendrá conocimiento acerca de la naturaleza y de la estructura de la materia, de sus propiedades elementales, su reactividad, formas de obtención y modificación, siendo capaz de racionalizar dicho conocimiento y aplicarlo a la ciencia básica y aplicada.</p> <p>Esta materia es un antecedente de las experiencias educativas optativas como Química Supramolecular y Química de los Materiales y establece las bases necesarias para su entendimiento al relacionar los conocimientos con los procesos que toman lugar sus estas áreas de estudio y que son fundamentales en el progreso de la ciencia.</p> <p>Por tal motivo, resulta pertinente la enseñanza de esta área de la química, con el fin de que el estudiante sea capaz de aplicarla convenientemente en su línea de investigación.</p>

OBJETIVOS GENERALES DEL CURSO
Adquirir conocimientos profundos sobre los conceptos fundamentales de la química; de la estructura atómica y molecular; de las principales teorías que los justifican y las consecuencias que de ellas se extraen; de las propiedades elementales y de la reactividad de los compuestos; para entender y explicar los fenómenos químicos observados en su área de estudio y conducir adecuadamente su proyecto de investigación para generar investigación original e innovadora.

UNIDADES, OBJETIVOS PARTICULARES Y TEMAS
<b>UNIDAD 1</b>
Estructura atómica

<b>Objetivos particulares</b>
<p>Conocer la estructura atómica para interpretar las semejanzas y diferencias entre las propiedades químicas de los elementos y de los compuestos en general.</p> <p>Analizar los modelos atómicos que permiten conocer la distribución de los electrones en los átomos; desde el modelo de Thomson, pasando por el modelo de Bohr hasta llegar al modelo atómico propuesto por la mecánica cuántica, modelos de enlace y estructura molecular.</p>
<b>Temas</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>1.1. Modelos atómicos <ul style="list-style-type: none"> <li>1.1.1. Modelo atómico Kelvin-Thomson</li> <li>1.1.2. Modelo atómico de Rutherford</li> <li>1.1.3. Modelo atómico planetario</li> <li>1.1.4. Modelo atómico de Bohr</li> <li>1.1.5. Orbitas elípticas de Sommerfeld</li> </ul> </li> <li>1.2. Mecánica cuántica <ul style="list-style-type: none"> <li>1.2.1. Naturaleza dual de la materia</li> <li>1.2.2. Ecuación del movimiento ondulatorio</li> <li>1.2.3. Ecuación de Schroedinger</li> <li>1.2.4. Interpretación estadística del cuadrado de la función de onda</li> <li>1.2.5. Las relaciones de incertidumbre y sus implicaciones.</li> </ul> </li> <li>1.3. Modelos de enlace químico <ul style="list-style-type: none"> <li>1.3.1. El enlace covalente vía estructuras de Lewis</li> <li>1.3.2. El modelo de resonancia</li> <li>1.3.3. Estructura de los cristales iónicos</li> <li>1.3.4. El ciclo de Born-Haber</li> <li>1.3.5. Enlaces iónicos con carácter parcialmente covalente. Regla de Fajans</li> </ul> </li> <li>1.4. Estructura Molecular <ul style="list-style-type: none"> <li>1.4.1. Modelo de repulsión de pares electrónicos en la capa de valencia (RPECV)</li> <li>1.4.2. Geometría molecular y momento dipolar</li> <li>1.4.3. Modelo del doble cuarteto de Linnett</li> </ul> </li> </ul>

<b>UNIDAD 2</b>
Comportamiento periódico de los elementos
<b>Objetivos particulares</b>
<p>Conocer las propiedades físicas y químicas de los elementos y relacionarlas con el concepto de periodicidad.</p> <p>Adquirir los conceptos fundamentales formativos sobre la estructura molecular, las propiedades periódicas de los elementos, que a su vez que le permitan predecir las propiedades de los productos de reacciones químicas, con base en las estructuras electrónicas de los elementos reaccionantes y bajo la perspectiva de las propiedades periódicas de estos últimos.</p>
<b>Temas</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>2.1. Propiedades electrónicas de los átomos</li> </ul>

- 2.1.1. Energía de ionización
  - 2.1.2. Afinidad electrónica
  - 2.2. El tamaño de los átomos
    - 2.2.1. Determinación de tamaño
    - 2.2.2. Radio iónico
    - 2.2.3. Radio covalente
    - 2.2.4. Radio metálico
    - 2.2.5. Radio de van der Waals
    - 2.2.6. Radio atómico
  - 2.3. Electronegatividad
    - 2.3.1. Escalas de electronegatividad
    - 2.3.2. Métodos basados en propiedades electrónicas
    - 2.3.3. Métodos basados en tamaño de átomo
  - 2.4. Periodicidad de los elementos
- Periodicidad y anomalías

### UNIDAD 3

Reactividad química

#### Objetivos particulares

Entender los procesos fisicoquímicos y estructurales implicados en la reactividad química e integre estos conocimientos a las reacciones químicas.

#### Temas

- 3.1. Principios de reactividad
  - 3.1.1. Concepto de mecanismo de reacción
  - 3.1.2. Concepto de mecanismo de reacción
  - 3.1.3. Teoría del estado de transición
  - 3.1.4. Evaluación y significado mecanístico de  $\Delta H^\circ$ ,  $\Delta S^\circ$ ,  $\Delta G^\circ$
  - 3.1.5. Postulado de Hammond
  - 3.1.6. Modelo de superficie de energía potencial
  - 3.1.7. Principio de reactividad-selectividad
  - 3.1.8. Principio de Curtin-Hammet
- 3.2. Efectos de la estructura sobre la reactividad
  - 3.2.1. Relaciones lineales de energía libre
  - 3.2.2. La ecuación de Hammett, usos y limitaciones
  - 3.2.3. Otras relaciones lineales de energía libre
  - 3.2.4. Parámetros de Taft
  - 3.2.5. Gráficas de Grunwald-Winstein
  - 3.2.6. Parámetros de Swain-Scott
  - 3.2.7. Correlaciones de Edwards y Ritchie

### TÉCNICAS DIDÁCTICAS Y ASPECTOS METODOLÓGICOS

Analogías  
 Discusión de temas  
 Informes  
 Problemarios

Modelaje.  
Simulación.  
Lectura e interpretación de textos.  
Estudios de caso.  
Aprendizaje basado en problemas.  
Elaboración de tareas

### EQUIPO NECESARIO

#### **Materiales didácticos:**

Libros  
Revistas científicas  
Antologías  
Artículos de investigación  
Pintarrón  
Plumones  
Borrador

#### **Recursos didácticos:**

Aula de cómputo  
Software especializado  
Proyector  
Computadora  
Internet  
Biblioteca virtual  
Eminus

### BIBLIOGRAFÍA

- Physical Chemistry for the Life Sciences. Atkins, P.W.; de Paula, J., Oxford University Press, 2006
- Organic Chemistry. McMurry John. Thompson Brooks-Cole CA. USA. 2008
- *Estructura Atómica* (Un enfoque químico). Cruz, D.; Chamizo, J. A.; Garritz, A.; Ed. Adisson-Wesley Iberoamericana, 1991
- Carey, F.A.; Sundberg, R.J.; *Advanced Organic Chemistry/Part A: structure and mechanisms*. 5th Edition, Ed. Springer Science, 2007.
- D.M.P. Mingos, *Essential trends in Inorganic Chemistry*, Ed. Oxford University Press, 1998.

### REFERENCIAS ELECTRÓNICAS (Última fecha de acceso:)

- <http://www.journal.chemistrycentral.com/search/pm/advanced>
- <http://www.combichemlab.com/website/files/home.htm>
- <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/>

### Otros Materiales de Consulta:

1. Analytical Methods in Supramolecular Chemistry, C. Schalley, Ed. Wiley-VCH Weinheim (2007).
2. Encyclopedia of Supramolecular Chemistry, Atwood, J. L.; Steed, J. W. (Editores) 2 volúmenes, Taylor & Francis, 2004. ISBN: 978-0-8247-5056-5.
3. Modern Supramolecular Chemistry, Diederich, F.; Stang, P. J.; Tykwinski, R. R. (Editores) , Wiley-VCH, Weinheim, 2008. ISBN: 978-3-527-31826-1
4. Comprehensive Supramolecular Chemistry, Lehn, J. M. (Editor) 11 volúmenes, Wiley-VCH, Weinheim, 1995.
5. Analytical Methods in Supramolecular Chemistry, Schalley, C. A. (Editor), Wiley-VCH, Weinheim, 2007. ISBN: 978-3-527-31505-5

<b>EVALUACIÓN</b>			
<b>SUMATIVA</b>			
<b>Aspecto a Evaluar</b>	<b>Forma de Evaluación</b>	<b>Evidencia</b>	<b>Porcentaje</b>
Aprendizaje de los contenidos	Examen	Examen escrito	35
	Trabajos de investigación y/o tareas.	Reporte escrito	30
	Presentaciones Orales	Archivo de la presentación	35
Total			