

Supl. QIA 14
Segundo cuatrimestre

Sábado: 10-12.30 h.

DEPARTAMENTOS

QUIMICA PREDICTIVA

- 1.- Introducción. Contenido y objetivos. Bibliografía. Predicción en Ciencia: interpolación, extrapolación, reordenamiento y análisis de la información,. Predicción estructural y dinámica.
- 2.- Clasificación Periódica: instrumento sistemático y predictivo. Energías de ionización. Electronegatividades. Potenciales iónicos ;Acidos, oxidantes y electrofílicos; bases, reductores y nucleofílicos.
- 3.- Interpretación energética de reacciones. Predicción de etapas y parámetros energéticos. Diagrama entálpico. Aplicaciones del ciclo de Born y Haber. Energía libre: índice de espontaneidad. Compuestos no existentes.
- 4.- Efecto de Chatelier: enfoque cibernético. Regla del número mínimo de iones en solución. Paralelismo en las reacciones iónicas: predicción de curvas continuas de valoración. Potenciales redox.
- 5.- Predicción cinética. Química Cuántica predictiva. Propiedades a partir de estructuras y viceversa. Interacción de materia y energía radiante como método predictivo. Uniones químicas y geometría química.

Requisito para inscripción: Química Analítica Cuantitativa

Puntos para Doctorado: de acuerdo a Reglamento del Dep. de Quím. Inorgánica. Analítica y Quím. Física.

QUÍMICA PREDICTIVA

QI 14
1978

- 1.- Introducción. Conceptos y objetivos. Bibliografía. Predicción en Química: interpolación, extrapolación, reordenamiento y análisis de la información. Predicción estructural y dinámica.
- 2.- Clasificación Periódica: instrumento sistemático y predictivo. Escalas de ionización. Electronegatividades. Potenciales iónicos. Ácidos, oxidantes y electrofílicos; bases, reductores y nucleofílicos.
- 3.- Interpretación energética de reacciones. Predicción de etapas y parámetros energéticos. Diagrama entálpico. Aplicaciones del ciclo de Born y Hildebrand. Energía libre: índice de espontaneidad. Compuestos no existentes.
- 4.- Efecto Le Chatelier: enfoque cibernético. Regla del número mínimo de iones en solución. Paralelismo en las reacciones iónicas: predicción de curvas continuas de valoración. Potenciales redox.
- 5.- Predicción cinética. Química Cuántica predictiva. Propiedades a partir de estructuras y viceversa. Interacción de materia y energía radiante como método predictivo. Uniones químicas y geometría química.

-0-

Requisito para inscripción: Química Analítica Cuantitativa

Puntos para Doctorado: de acuerdo a Reglamento del Dep. de Quím. Inorg. Analítica y Química Física.

mg

mg