

Sypl.

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 cárbonético. Regla del número mínimo de iones en solución. Parallelismo 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.

2
Arich M. Cuartero
1978

versión 10

Duración cuatrimestre
Sábados: 10-18.30 h

QUÍMICA PREDICTIVA

QI 14
1978

1.-

Introducción. Definición 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. Ejercicios 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 Haber. Energía libre: índice de espontaneidad. Compuestos no existentes.

4.-

Efecto Le Chatelier: enfoque cibernetico. 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.

-o-

Requisito para inscripción: Química Analítica Cuantitativa

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

MJ

JK

Dep. de Quím. Inorg. Analítica y Química Física