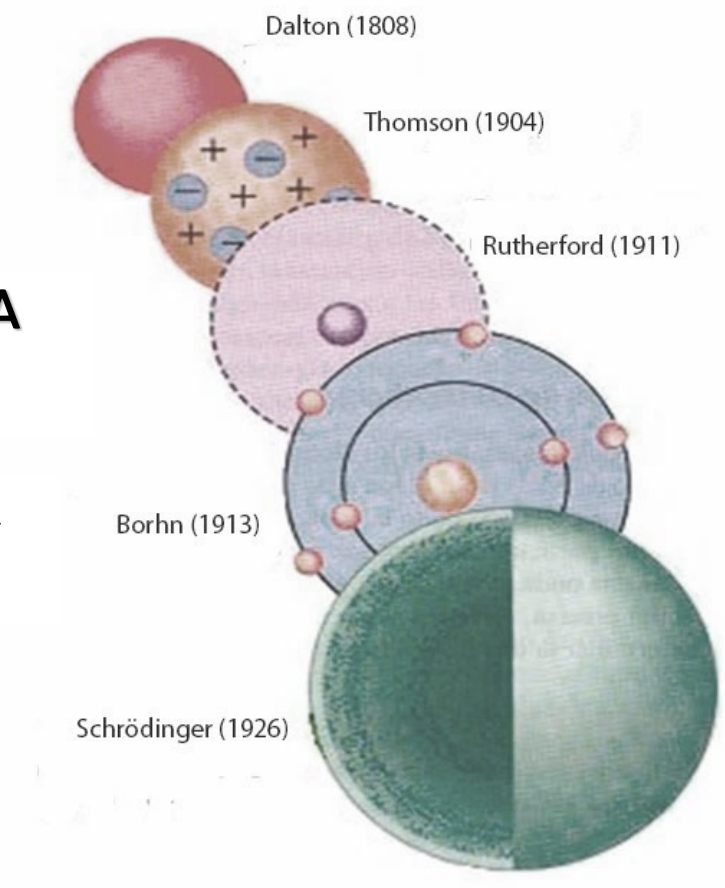




GUIA DE TRABAJOS PRACTICOS DE AULA, LABORATORIO Y COMPUTACIONALES

ESTRUCTURA DE LA MATERIA

Licenciatura en Química
3º año



<https://inf2y3primc.blogspot.com/2013/02/el-atomo.html>

Equipo Docente:

Prof. Responsable: Dra. Gabriela Ferrari

Prof. Colaboradora: Dra. M. Paulina Montaña

Prof. Dra. Yamina Dávila

JTP: Dra. Vanesa Muñoz



CONTENIDO

TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA	2
Teoría cuántica	3
Aplicaciones de la Teoría cuántica	4
Estructura y Espectros Atómicos	5
Estructura Molecular	6
Simetría Molecular	8
Espectroscopia rotacional y vibracional	9
Espectroscopia Electrónica	11
TRABAJOS PRÁCTICOS COMPUTACIONALES	13
Introducción a Matlab y cálculos computacionales	14
Estudio computacional y experimental de frecuencias vibracionales	20
TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO	24
Espectroscopia Ultravioleta-Visible	25
Introducción	25
Objetivo	27
Materiales necesarios	27
Procedimiento experimental	28
Cálculos y gráficos	28
Espectros De Fluorescencia	29
Introducción	29
Objetivo	30
Material y reactivos	30
Procedimiento experimental	30
Cálculos y gráficos	30
RÚBRICAS DE EVALUACIÓN	31
Rúbrica de evaluación de Tablas Comparativas	32
Rúbrica de evaluación de Mapas Conceptuales	33
Rúbrica de evaluación de Infografías	34
Rúbrica para evaluar exposiciones orales	35
BIBLIOGRAFÍA	36



TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA





TEMA 1

TEORÍA CUÁNTICA

- 1 Calcule la energía por fotón y la energía por mol de fotones para la radiación de longitud de onda de: a) 200 nm (ultravioleta), b) 150 pm (rayos X), c) 1,0 cm (microondas).
- 2 Un láser empleado en la lectura de CD emite luz roja de 700 nm de longitud de onda. Calcule el número de fotones emitidos por segundo si su potencia es: a) 0,01 W, b) 1,0 W
- 3 La función de trabajo para el rubidio metálico es 2,09 eV. Calcule la energía cinética y la velocidad de los electrones para una radiación incidente de a) 650 nm; b) 195 nm.
- 4 ¿A qué velocidad se debe acelerar un protón para que alcance una longitud de onda de 3,0 cm?
- 5 Calcule el momento lineal de fotones de longitud de onda de 350 nm. ¿Qué velocidad necesita una molécula de hidrógeno para tener el mismo momento?
- 6 Calcule la velocidad a la que un átomo de ${}^4\text{He}$ estacionario (masa 4,0026 u) podría ser acelerado si absorbiera uno de los fotones del primer ejercicio.
- 7 Identifique cuál de las siguientes funciones son funciones propias del operador d/dx e indique el autovalor cuando corresponda:
a) e^{ikx} b) $\cos kx$ c) k d) kx e) $e^{-\alpha x^2}$
- 8 ¿Cuáles de las funciones anteriores son también autofunciones de d^2/dx^2 ? Indique los autovalores cuando corresponda.
- 9 Dada la función $\Psi = e^{-kr}$ normalícela. La función normalizada ¿es autofunción del operador $\hat{a} = \hbar \frac{d}{dr}$? Si corresponde indique el autovalor.
Tenga en cuenta que $d\tau = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi$ y que $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$
- 10 Las siguientes funciones corresponden a funciones de onda no normalizadas de estados excitados del átomo de hidrogeno. Normalice ambas funciones.
a) $\Psi = \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/a_0}$ b) $\Psi = r \sin \theta \cos \phi e^{-r/2a_0}$
- 11 Verifique que la función $\Psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ es autofunción del operador $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$. Si corresponde indique el autovalor.
- 12 La velocidad de un electrón es de 995 km s^{-1} , si la indeterminación en su momento debe reducirse a 0,0010 por ciento ¿qué indeterminación debe tolerarse en su posición?



TEMA 2

**APLICACIONES DE LA
TEORÍA CUÁNTICA**

- 1 Escriba la expresión de la energía y de la función de onda para los dos primeros niveles de una partícula en una caja unidimensional.
- 2 Calcule las diferencias de energías en joules, kilo joules por mol, electronvoltios y centímetros recíprocos entre los niveles a) $n=3$ y $n=1$, b) $n=7$ y $n=6$ para un electrón en una caja que tiene 1,0 nm de longitud.
- 3 Calcule la separación entre los dos niveles inferiores de una molécula de O_2 en un recipiente unidimensional de longitud 5,0 cm. ¿a qué valor de n la energía de la molécula alcanzará $\frac{1}{2} kT$ a 300 K y cuál será la separación entre dicho nivel y uno inmediatamente inferior?
- 4 Calcule la probabilidad de que una partícula sea encontrada entre 0,65 L y 0,67 L en una caja de longitud L cuando a) $n=1$, b) $n=2$. Considere la función de onda constante en dicho intervalo
- 5 Escriba las funciones de onda y la expresión de la energía para una partícula en una caja bidimensional de longitudes L en la dirección x y L en la dirección y en los siguientes casos: a) $n_1=2$ y $n_2=3$ y b) $n_1=3$ y $n_2=2$.
- 6 Escriba la forma general de la función de onda que describe el movimiento vibracional de una partícula y la expresión final para los primeros tres niveles vibracionales
- 7 Calcule la energía del punto cero de un oscilador armónico consistente en una partícula de masa $5,16 \times 10^{-26}$ kg y constante de fuerza 285 N m^{-1}
- 8 Para un oscilador armónico de masa efectiva $2,88 \times 10^{-25}$ kg la diferencia de energía entre niveles adyacentes es 3,17 zJ. Calcule la constante de fuerza del oscilador.
- 9 Escriba la forma general de la función de onda que describe el movimiento rotacional de una partícula en tres dimensiones y la expresión final para los primeros tres niveles de energía.
- 10 Calcule el momento de inercia de: a) $H^{35}Cl$, b) $H^{37}Cl$, $D^{35}Cl$. Todas las moléculas poseen distancias de equilibrio de 1,275 Å. Calcule las energías de los primeros tres niveles rotacionales para $H^{35}Cl$ y $D^{35}Cl$. Tenga en cuenta que $I = \mu r^2$, donde $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$
- 11 El monóxido de carbono absorbe energía en la región de microondas del espectro electromagnético a $1,153 \times 10^5$ MHz. Esta absorción corresponde a la diferencia de energía entre los dos primeros niveles rotacionales. Calcule la distancia internuclear y el momento de inercia del monóxido de carbono.



TEMA 3

**ESTRUCTURA Y
ESPECTROS ATÓMICOS**

- 1 Sabiendo que la constante de Rydberg para el helio es $109722,3 \text{ cm}^{-1}$, calcule: a) la energía de ionización del ión He^{2+} , b) la longitud de onda de la primera línea de Brackett del espectro de helio ionizado.
- 2 Si la frecuencia de una línea espectral del átomo de hidrógeno es de $246773,25 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ¿entre que orbitas se ha producido la transición?

Compare la energía necesaria para excitar un electrón del átomo de hidrógeno desde la órbita $n=1$ a la $n=2$ con la energía media de traslación de una molécula a 25°C . ¿A qué temperatura es la energía media de traslación igual a la energía de activación del átomo de hidrógeno?
- 3 La serie de Humphrey es un grupo de líneas en el espectro del hidrógeno atómico. Comienza en 12368 nm y llega hasta $3281,4 \text{ nm}$. ¿Qué transiciones participan? ¿Cuáles son las longitudes de onda de las primeras cinco transiciones?
- 4 La función de onda del estado fundamental del átomo de hidrogeno es: $N e^{-r/a_0}$. Determine la constante de normalización N .
- 5 Escriba la función de onda completa para los siguientes orbitales de un átomo hidrogenoide: a) $\Psi_{1,0,0}(r, \phi, \varphi)$; b) $\Psi_{2,1,-1}(r, \phi, \varphi)$
- 6 Cuando una muestra de xenón recibe radiación ultravioleta de longitud de onda $58,4 \text{ nm}$ proveniente de una lámpara de helio, los electrones son expulsados a una velocidad de $1,59 \text{ Mm s}^{-1}$. Calcule la energía de ionización.
- 7Cuál es el momento angular orbital de un electrón en los siguientes orbitales a) $4d$, b) $2p$, c) $3d$. En cada caso indique el número de nodos radiales y angulares.
- 8Halle los términos espectrales que pueden surgir de las configuraciones: a) d^2 , b) p^3 , c) $f^1 d^1$.
- 9Indique cuales de las siguientes transiciones están permitidas en el espectro de emisión electrónica normal de un átomo hidrogenoide: a) $5d \rightarrow 2s$, b) $5p \rightarrow 3s$, c) $6p \rightarrow 4f$.



TEMA 4

ESTRUCTURA MOLECULAR

1 Exprese la configuración electrónica fundamental, dibuje los diagramas de energía y calcule el orden de enlace de: a) H_2^- ; b) N_2 ; c) O_2 ; d) ClF ; e) CS ; f) O_2^- .

2 La función $\Psi = x(x-l)$ para $0 \leq x \leq l$ cumple las restricciones establecidas para describir el movimiento de una partícula en una caja unidimensional. Utilícela como función de prueba variacional y obtenga una expresión para la energía. Compárela con la expresión exacta.

3 A partir de $H \Psi_{\text{sist } \pi} = E \Psi_{\text{sist } \pi}$ y haciendo uso de la aproximación CLOA-OM, del principio variacional y de la aproximación de Hückel, obtenga la expresión de la energía para una molécula A-B. Considere $\alpha_A = \alpha_B = \alpha$

4 Considerando la aproximación CLOA-OM, del principio variacional y de Hückel resuelva para la molécula de formaldehído ($H_2C=O$):

- a) las energías de los orbitales moleculares en términos de α y β
- b) la energía de deslocalización π
- c) las funciones de onda moleculares
- d) los órdenes de enlace
- e) los índices de valencia libres,
- f) la distribución de cargas de cada átomo. NOTA: $h_O = 1,063$ y $k_{C-O} = 2,17$.

5 Considerando la aproximación CLOA-OM, del principio variacional y de Hückel resuelva para el radical alilo ($CH_2=CH-CH_2^\bullet$)

- a) las energías de los orbitales moleculares en términos de α y β
- b) la energía de deslocalización π
- c) las funciones de onda moleculares
- d) los órdenes de enlace
- e) los índices de valencia libres,
- f) la distribución de cargas de cada átomo.

6 Plantee el determinante secular para clorobenceno considerando $h_{Cl} = 2$ y $k_{C-Cl} = 0,8$.

7 Considerando el sistema electrónico π del butadieno, calcule:

- a) las energías de los orbitales moleculares en términos de α y β
- b) la energía de deslocalización π
- c) las funciones de onda moleculares
- d) los órdenes de enlace



- e) los índices de valencia libres,
- f) la distribución de cargas de cada átomo.

NOTA: Las raíces que se obtienen de la ecuación $x^4 - 3x^2 + 1 = 0$ son: $x_1 = -1,618$; $x_2 = -0,618$; $x_3 = 1,618$; $x_4 = 0,618$.

- 8** Compare la energía de deslocalización π del butadieno con la energía de dos enlaces dobles no conjugados.



TEMA 5

**SIMETRÍA
MOLECULAR**

1

Cite todos los elementos de simetría de cada una de las siguientes moléculas:

a) H_2S

b) NH_3

c) HOCl

2

Enumere todas las operaciones de simetría de las siguientes moléculas:

a) H_2S

b) NH_3

c) CHF_3

3

¿A qué operaciones de simetría equivale cada uno de los siguientes productos de operaciones de simetría?

a) σ^4

b) σ^7

c) $(C_4)^2$

d) $C_2\sigma_h$

4

Utilizando el enlace: <http://symmetry.otterbein.edu/challenge/index.html> determine el grupo puntual de: Agua (H_2O); Peróxido de Hidrógeno (H_2O_2); Benceno (C_6H_6); Amoníaco (NH_3)

5

¿Cuál de las siguientes moléculas puede ser polar?

a) CH_3Cl (C_{3v})

c) SF_4 (C_{2v})

b) ClPt_4 (D_{4h})

d) Piridina (C_{2v})



6

Consideremos la estructura de PtCl_4^- en el cual los ligandos de Cl forman un arreglo plano cuadrado de grupo puntual D_{4h} . Identifique el tipo de simetría de la combinación $\Psi_A - \Psi_B + \Psi_C - \Psi_D$

7

¿Aparece A_2 entre las especies de simetría de las representaciones irreducibles abarcadas por un producto de caracteres 7, -3, -1, 5 en el grupo C_{2v} ?

8

Utilice las propiedades de simetría para determinar si la siguiente integral es necesariamente nula en una molécula con simetría D_{6h} :

$$\int p_x z p_z d\tau$$



TEMA 6

**ESPECTROSCOPIA ROTACIONAL
Y VIBRACIONAL**

- 1 Calcule la relación de los coeficientes de Einstein de emisión espontánea y estimulada, A y B, para transiciones con las siguientes características: a) radiación de radiofrecuencia a 500 MHz, b) radiación de microondas a 3,0 cm.
- 2 Estime el tiempo de vida de un estado que da origen a una línea de ancho a) 100 MHz, b) 2,14 cm^{-1} .
- 3 Calcule la frecuencia de transición $J = 3 \leftarrow 2$ en el espectro rotacional puro de $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$. La longitud de enlace de equilibrio es 112,81 pm.
- 4 Si el número de onda de la transición rotacional $J = 1 \leftarrow 0$ del $^1\text{H}^{81}\text{Br}$ considerado como rotor rígido es 16,93 cm^{-1} , ¿cuál es a) el momento de inercia de la molécula, b) la longitud de enlace?
- 5 El número de onda de la radiación incidente en un espectrofotómetro Raman es 20623 cm^{-1} . ¿Cuál es el número de onda de la radiación Stokes dispersada para la transición $J = 4 \leftarrow 2$ del $^{16}\text{O}_2$? $B = 1,4457 \text{ cm}^{-1}$.
- 6 El espectro rotacional Raman del $^{19}\text{F}_2$ muestra una serie de líneas Stokes separadas por 3,5312 cm^{-1} y una serie similar de líneas anti-Stokes. Calcule la longitud de enlace de la molécula.
- 7 ¿Cuáles de las siguientes moléculas pueden presentar un espectro de absorción de microondas rotacional puro?
a) H_2O b) H_2O_2 c) NH_3 d) N_2O
- 8 ¿Cuáles de las siguientes moléculas pueden presentar un espectro Raman rotacional puro?
a) CH_2Cl_2 b) CH_3CH_3 c) SF_6 d) N_2O
- 9 Calcule la longitud de onda del fotón necesaria para excitar la transición entre niveles de energía vecinos en un oscilador armónico de masa efectiva igual a la de un átomo de oxígeno (15,9949 u) y constante de fuerza 544 N m^{-1} . Calcule la longitud de onda si se duplica la masa.



- 10 Suponiendo que las vibraciones de una molécula de $^{14}\text{N}_2$ son equivalentes a las de un oscilador armónicos con constante de fuerza $k = 2293,8 \text{ N m}^{-1}$, ¿cuál será la energía del punto cero de la vibración de esa molécula?
- 11 El número de onda de la transición vibracional fundamental de $^{79}\text{Br}^{81}\text{Br}$ es $323,2 \text{ cm}^{-1}$. Calcule la constante de fuerza del enlace.
- 12 Calcule la relación entre las energías del punto cero de la vibración de un enlace C-H y un enlace C-D. Deberá suponer que las constantes de fuerza para las vibraciones C-H y C-D son iguales.



TEMA 7

ESPECTROSCOPIA ELECTRÓNICA

Se obtuvieron los siguientes datos para la absorción de un colorante disuelto en metilbenceno utilizando una celda de 2,5 mm. Calcule el coeficiente de absorción molar del colorante a la longitud de onda utilizada.

$C_{\text{colorante}} / \text{mol dm}^{-3}$	0,0010	0,0050	0,0100	0,0500
$T / \%$	73	21	4,2	$1,33 \times 10^{-3}$

Una celda de 2,5 mm contiene una solución de un colorante de concentración $15,5 \text{ mmol dm}^{-3}$. Calcule el coeficiente de absorción molar del colorante a esa longitud de onda teniendo en cuenta que la transmitancia es de 32 %. ¿Cuál será la transmitancia en una celda de 4,5 mm a la misma longitud de onda?

A continuación se listan los valores de absorbancia de soluciones de yodo en tetracloruro de carbono medidas a 516 nm en celdas de 1 cm de camino óptico. Calcule la absorptividad molar de I_2 en CCl_4 .

$C_{I_2} \times 10^3 / M$	0,116	0,233	0,349	0,465	0,582	0,698	0,815	0,931	1,164	1,397
A	0,122	0,213	0,316	0,442	0,556	0,647	0,733	0,887	1,089	1,299

Explique el origen del término espectral $^3\Sigma_g^-$ para el estado basal de O_2 .

¿Cuáles de las transiciones electrónicas que se enuncian a continuación están permitidas en el O_2 ?
 $^3\Sigma_g^- \leftrightarrow ^1\Delta_g$ $^3\Sigma_g^- \leftrightarrow ^1\Sigma_g^+$ $^3\Sigma_g^- \leftrightarrow ^3\Delta_u$ $^3\Sigma_g^- \leftrightarrow ^3\Sigma_u^+$ $^3\Sigma_g^- \leftrightarrow ^3\Sigma_u^-$

Enuncie y explique el principio de Franck-Condon.

Explique el fenómeno del color a partir de las estructuras de las moléculas.

El compuesto $CH_3CH=CHCHO$ posee fuerte absorción en el ultravioleta a 46950 cm^{-1} y débil absorción a 30000 cm^{-1} . Justifique esta característica en términos de la estructura de la molécula.

Describa los principios de la acción laser y dé ejemplos.



- 10 Un láser de 0,1 J puede generar radiaciones en pulso de 3 ns a una frecuencia de repetición del pulso de 10 Hz. Asumiendo que los pulsos son rectangulares, calcule el máximo de potencia de salida y la potencia media de salida en este láser.
- 11 ¿Qué es el diagrama de Jablonski? Esquematícelo y enuncie los diferentes caminos disipativos.
- 12 Describa el mecanismo de la fluorescencia. ¿En qué medida el espectro de fluorescencia no es exactamente la imagen especular del espectro de absorción?
- 13 El espectro de fluorescencia de antraceno en fase vapor muestra una serie de picos de intensidad creciente con máximos individuales a 440, 410, 390 y 370 nm, seguido de un corte abrupto a longitudes menores. El espectro de absorción se eleva en forma abrupta desde 0 hasta un máximo en 360 nm con una cola de picos de intensidad decreciente a 345, 330 y 305 nm. Represente cualitativamente estos espectros y explique esta observación.
- 14 Compruebe los valores de energía para un mol de fotones correspondientes a la radiación de diferentes longitudes de onda listadas en la Tabla 14. 1 del libro Química Física de Atkins-de Paula.
- 15 En cierta reacción fotoquímica usando radiación de 464 nm, la potencia de la luz incidente fue de 0,00155 W y el sistema absorbió el 74,4 % de la luz incidente; se produjeron $6,80 \times 10^{-6}$ moles de producto durante una exposición de 110 s. Calcule el rendimiento cuántico.



TRABAJOS PRÁCTICOS COMPUTACIONALES





INTRODUCCIÓN A MATLAB Y CÁLCULOS COMPUTACIONALES

INTRODUCCIÓN

La química computacional es un área de la química que hace uso de modelos matemáticos para simular las interacciones entre los átomos de las sustancias y así resolver problemas de índole química. En principio, todas las soluciones a tales problemas podrían encontrarse resolviendo ecuaciones. Para ello se plantean modelos aproximados del sistema y se intenta verificar la validez de estos modelos. Esta disciplina utiliza los principios de la mecánica molecular y mecánica cuántica, basada esta última en la ecuación de Schrödinger. Comprende las áreas de Química, Biología y Física unidas a la Computación, lo cual permite la investigación de átomos, moléculas y macromoléculas a través de softwares específicos.

La aplicación de la química computacional permite obtener mucha información sobre el sistema en estudio, prediciendo o complementando los resultados experimentales. De esta manera, es posible determinar:

- Parámetros geométricos: formas y tamaños de moléculas, ángulos de enlaces, distancias, etc.
- Energía de especies químicas: de reactivos, productos e incluso intermedios de reacción, magnitudes termodinámicas, entre otras.
- Propiedades espectroscópicas: simulaciones de espectros UV-Vis, FTIR, Raman, incluso propiedades magnéticas y eléctricas.
- Reactividad química y relaciones estructura-actividad.
- Propiedades físicas de fase condensada: interacciones intermoleculares.

Por lo anteriormente dicho, la química computacional se utiliza en diferentes campos de investigación como medicina, biología molecular, tecnología química, diseño de fármacos, bioquímica, nanotecnología, entre otras.

Métodos computacionales

Los métodos computacionales están basados en el cálculo de las Superficies de Energías Potenciales, las cuales se describen como las fuerzas de interacción entre los átomos de una molécula. Estos métodos computacionales difieren en la manera de calcular dicha superficie. En la Fig. 1 se muestra una superficie de energía potencial calculada con sus diferentes zonas. En una optimización geométrica se pretende obtener la estructura de mínima energía, encontrada en el mínimo global de dicha superficie. Estos diagramas también pueden representarse para reacciones químicas (Fig. 2), en donde puede observarse las estructuras de transición ubicadas en zonas de alta energía.

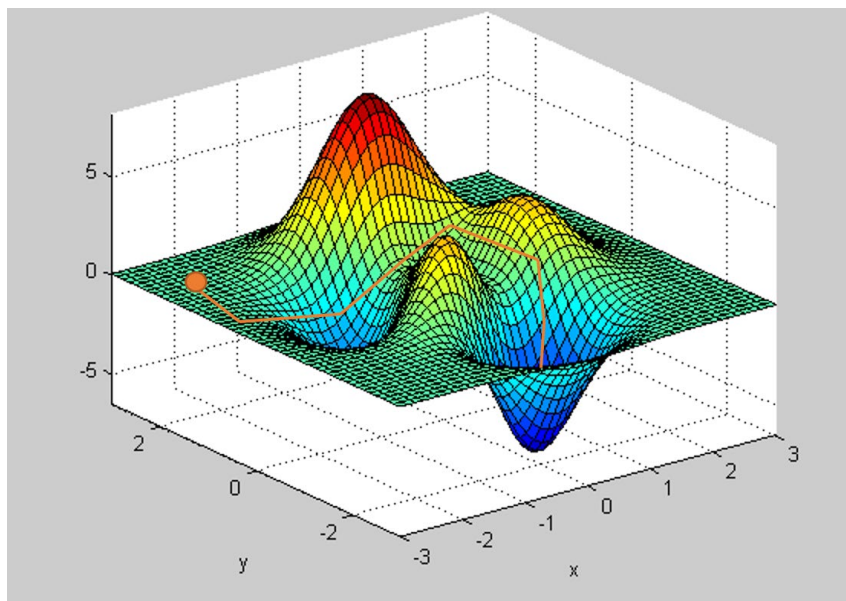


Fig. 1. Superficie de energía potencial en función de parámetros geométricos arbitrarios.

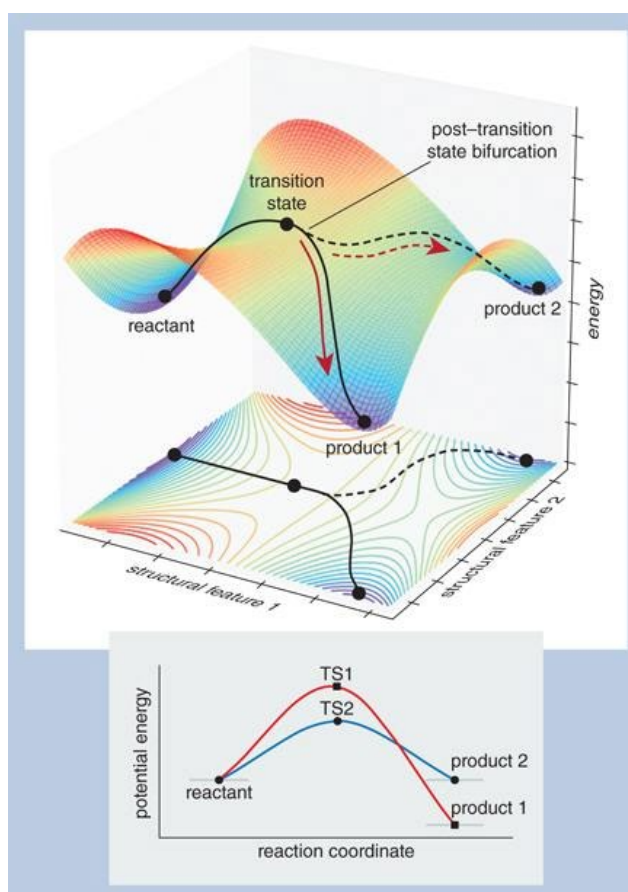


Fig.2. Superficie de energía potencial para una reacción química.

De acuerdo a la rigurosidad del cálculo y a los fundamentos teóricos que aplican los métodos se pueden clasificar como:



Ningún método de cálculo es mejor que otro, sino que debe seleccionarse el más adecuado para el sistema que se quiere estudiar. Entre los métodos que utilizan mecánica cuántica se destacan los siguientes:

- **Semiempíricos:** utilizan un Hamiltoniano más simple que el Hamiltoniano molecular correcto y emplean parámetros cuyos valores se ajustan para concordar con datos experimentales. Un ejemplo es el tratamiento de Orbitales moleculares (OM) Hückel de hidrocarburos conjugados que utiliza un Hamiltoniano monoeléctrico y toma las integrales de enlace como parámetros ajustables, en lugar de cantidades calculadas teóricamente. Dentro de estos métodos se encuentran PM3, AM1, entre otros.
- **ab initio:** del latín “desde el principio”, usa el Hamiltoniano correcto y no emplea otros datos experimentales que no sean los valores de las constantes físicas fundamentales. A partir de un proceso iterativo se calcula la solución de la ecuación de Schrödinger. Entre estos métodos encontramos los métodos Hartree-Fock en donde se supone que la función de onda de muchos cuerpos es un determinante de Slater de orbitales de una partícula (ej: HF/3-21G).
- **DFT:** métodos del funcional de la densidad. No intenta calcular la función de onda molecular, sino que calcula la densidad de probabilidad electrónica molecular, ρ , y la energía electrónica molecular a partir de ρ (ej: B3LYP/6-31+G(d,p)).

Estos métodos también pueden aplicarse a sistemas grandes luego de haber estudiado el mismo por mecánica molecular y haber acotado el problema a una zona puntual.

Para realizar los diferentes tipos de cálculos comentados anteriormente se pueden utilizar diversos paquetes de programas como Gaussian, GAMESS, Q-Chem, Jaguar, ACES II, Turbomole, Molpro, CADPAC, SPARTAN e HyperChem, dependiendo de las necesidades del cálculo.

PRÁCTICA COMPUTACIONAL

OBJETIVOS

Familiarizarse con técnicas de cálculo de química cuántica utilizando computadoras.

Resolver la ecuación de Schrödinger por diferentes métodos.

Calcular parámetros moleculares optimizados: geometría, energía y potencial electrostático

SOFTWARES NECESARIOS

1. MatLab.



2. HyperChem
3. Paquete de Gaussian

PROCEDIMIENTOS: DE LO SIMPLE A LO COMPLEJO

A. MATLAB: Método de Hückel simple

Este método no utiliza la geometría molecular sino que tiene en cuenta la conectividad. Para realizar el método de Hückel se utilizará el programa MatLab. Este software trabaja con matrices y vectores, por lo que a diferencia del trabajo en papel se deberá plantear el problema en forma matricial. Es necesario recordar las pautas marcadas a continuación:

1. Intervienen sólo orbitales pz centrados en distintos átomos formando la base de orbitales χ atómicos.
2. Los OM son únicamente del tipo π .
3. La base de orbitales χ atómicos está ortonormalizada, $\langle \chi_i | \chi_j \rangle = S_{ij} = \delta_{ij}$.
4. $H_{ii} = \alpha$ (integrales de coulomb);
5. H_{ij} (integrales de resonancia). $H_{ij} = \beta$ para átomos vecinos y $H_{ij} = 0$ para átomos no vecinos.
6. Dado que la base es ortogonal, se cumple el sistema del punto 3: $H \mathbf{c} = E \mathbf{c}$

Para comenzar la búsqueda de los coeficientes óptimos y sus energías se seguirán los siguientes pasos:

1. Construir una matriz de nombre H cuyos elementos que la conformen sean 0 y 1.
2. Las dimensiones de la matriz se corresponderán con la cantidad de átomos que posea la molécula (ej. propeno matriz de 3x3). Cada columna y cada fila se corresponden con cada átomo.
3. El llenado de 0 y 1 para cada elemento de matriz dependerá de si el átomo de esa fila y columna están unidos (se coloca 1) o no están unidos (se coloca 0).
4. Es necesario resolver ahora el problema de autovalores y autovectores $H \mathbf{c} = E \mathbf{c}$, que se resuelve diagonalizando H, en donde $\mathbf{C}$ es la matriz de los coeficientes de los autovectores (orbitales moleculares Φ_i) y cada columna es un autovector. Y $\mathbf{E}$ es la matriz diagonal de los autovalores, en donde cada elemento diagonal E_{ii} es un autovalor, o sea, la energía del correspondiente orbital molecular Φ_i .
5. Para diagonalizar H devolviendo la matriz C y la matriz E en MatLab se codifica escribiendo: **[C,E]=eig(H)**
6. Finalmente, con las columnas de la matriz C se construyen los OM:



$$\Phi_1 = c_{11}\chi_1 + c_{21}\chi_2 + c_{31}\chi_3 \quad \text{con energía } E_{11}$$

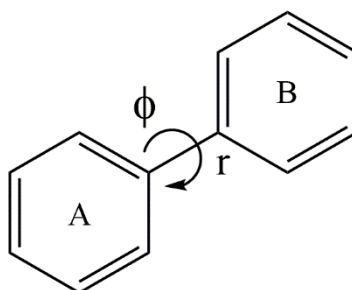
$$\Phi_2 = c_{12}\chi_1 + c_{22}\chi_2 + c_{32}\chi_3 \quad \text{con energía } E_{22}$$

$$\Phi_3 = c_{13}\chi_1 + c_{23}\chi_2 + c_{33}\chi_3 \quad \text{con energía } E_{33}$$

7. Realizar los pasos descritos anteriormente para a) butadieno. Determinar e ilustrar los niveles de energía, calcular la energía total pi (E_π), calcular los coeficientes y presentar la ecuación de los orbitales moleculares correspondientes.

B. HYPERCHEM: Estudio de parámetros geométricos

Para llevar a cabo este estudio se utilizará el bifenilo:



1. Abrir el programa HyperChem.
2. Dibujar la estructura del bifenilo y autoajustar en el programa.
3. Hacer un cálculo Single point, seleccionando previamente en Setup el método semiempírico AM1.
4. Realizar un escaneo del valor de r que minimice la energía de la molécula. Para ello se realiza una curva de energía potencial (Energía vs distancia r). Seleccione el enlace correspondiente (hacer click en residuo) y en Compute/Potencial indique un valor inicial de r de 0,01 y final de 2,9.
5. Obtenga la distancia óptima y el gráfico correspondiente.
6. Ahora aumente el nivel de cálculo a Ab initio Small y vuelva a realizar un cálculo Single Point (PM3 vs Ab initio). Registre el valor de la energía. Rote el ángulo ϕ 90° (elegir ángulo dihedro y luego Edit/Set bond torsion) y vuelva a realizar el cálculo. ¿Qué estructura es más estable? ¿cuál es la diferencia de energía?
7. Dibujá la molécula de butadieno.
8. Seleccione un cálculo Ab initio/Small y realice un cálculo de Optimización geométrica. Esto puede demorar unos minutos.
9. Luego en Compute/Orbitals seleccione los orbitales moleculares de frontera que desea visualizar y grafique.

C. GAUSSIAN: Optimización geométrica, Orbitales moleculares y potencial electrostático

1. Grafica el formaldehído en Gaussview.



2. Realizá una optimización geométrica en DFT 3-21G y freq, añade el comando POP=esp. Observar el archivo .log de salida y determinar la energía de la estructura optimizada.
3. Abrí el archivo .chk con gaussview para realizar una superficie de energía potencial. Ir a Results→Surface→New Cube→ Total density, Surface→ New mapped surf (0.004) (tipo ESP). Puedo modificar el tipo de superficie graficada: Properties→ Display→Surface transparent.
4. Comparación de las distancias obtenidas para XH y el ángulo de las estructuras optimizadas de agua y amoníaco en diferentes set de bases:

	H ₂ O		NH ₃	
Set de base en HF	Distancia XH	Ángulo	Distancia XH	Ángulo
STO-3G				
3-21G				
6-31G++				
Valor experimental	0.957	104.5	1.012	106.7

¿Y si se optimiza en DFT 6-31G (d, p)?

CÁLCULOS Y GRÁFICOS

1. Presentar un informe detallado con todas las gráficas obtenidas durante el desarrollo de la práctica organizado por sección A, B y C.
2. Colocar los cálculos correspondientes cuando sean necesarios.
3. Y adjuntar en cada sección las conclusiones a las que arribó con los resultados logrados.



ESTUDIO COMPUTACIONAL Y EXPERIMENTAL DE FRECUENCIAS VIBRACIONALES

INTRODUCCIÓN

La espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) es una herramienta fundamental en el análisis químico moderno, que permite identificar grupos funcionales y estudiar la estructura molecular a través de la absorción selectiva de radiación infrarroja por las vibraciones de los enlaces químicos. Estudiar esta técnica es esencial ya que posibilita el análisis rápido y preciso de compuestos orgánicos e inorgánicos, contribuyendo a la caracterización, el control de calidad y el seguimiento de procesos químicos tanto en investigación química como en diferentes industrias como por ejemplo la farmacéutica. Además, complementar los estudios experimentales con cálculos computacionales, como los realizados con Gaussian, aporta una comprensión profunda de los modos vibracionales que generan los espectros FTIR, facilitando la interpretación y validación de los datos obtenidos experimentales.

Estudio experimental

Existen diferentes tipos de vibraciones moleculares, las cuales se corresponden con movimientos específicos de los átomos de un enlace en una molécula. A continuación se listan las principales y una imagen representativa:

- **Estiramiento simétrico (Symmetric stretching):** Ambos enlaces se alargan o contraen simultáneamente.
- **Estiramiento antisimétrico (Antisymmetric stretching):** Un enlace se alarga mientras que el otro se contrae.
- **Flexión tijera (Scissoring):** Los átomos se acercan y alejan en movimientos semejantes a tijeras.
- **Flexión balanceo (Rocking):** Ambos átomos se mueven en la misma dirección dentro del plano.
- **Flexión meneo (Wagging):** Los átomos se mueven fuera del plano de referencia, hacia arriba y abajo.
- **Flexión torsión (Twisting):** Un grupo de átomos rota alrededor de un eje.

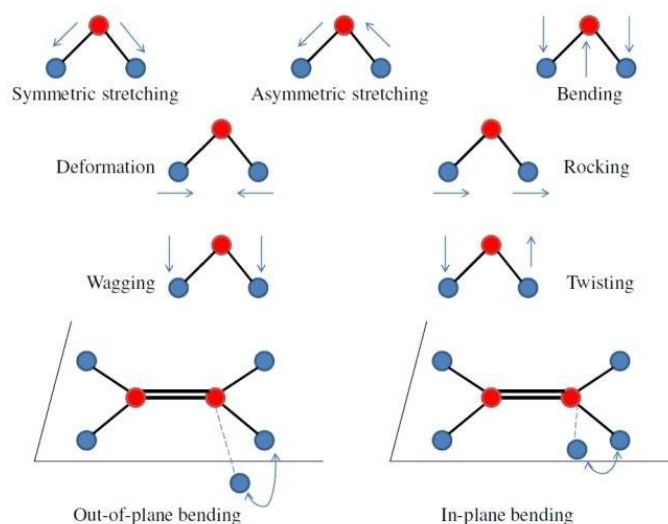


Fig. 1. Modos vibracionales más importantes

Estos modos vibracionales son los responsables de las diferentes bandas observadas en los espectros FTIR que se obtienen experimentalmente. A continuación se muestra un espectro experimental y un esquema en el cual se señalan las zonas en las cuales suelen aparecer las bandas de los grupos funcionales más comunes:

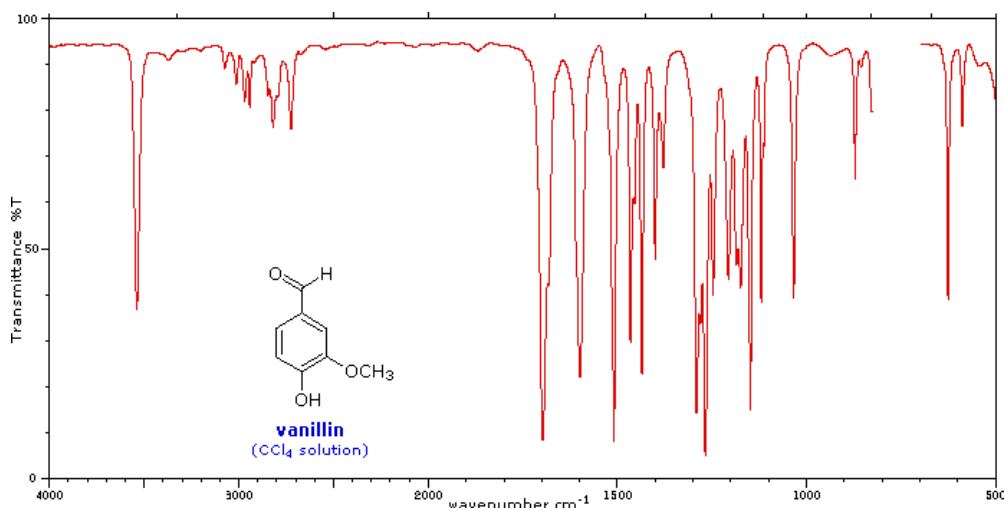


Fig. 2. Espectro FTIR experimental de vainillin.

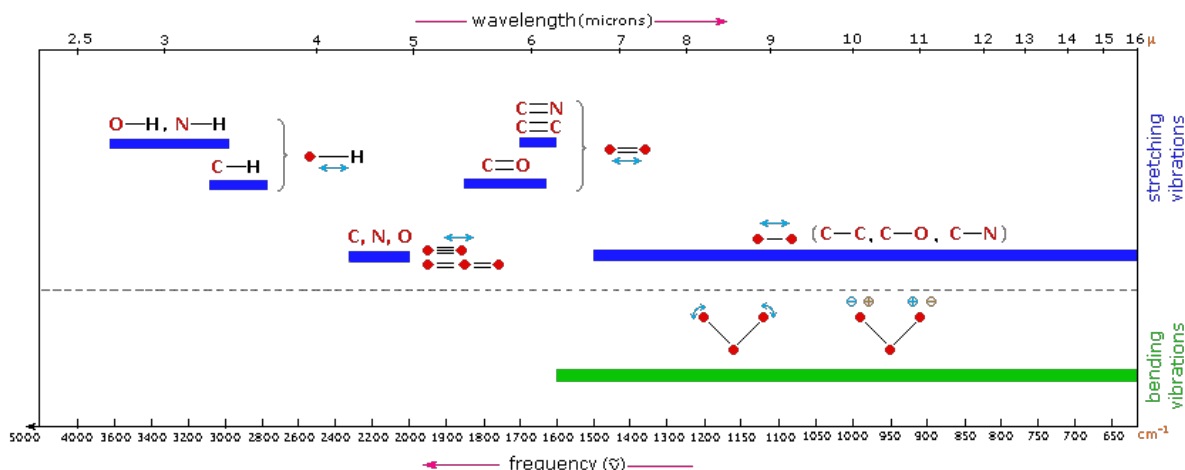


Fig. 3. Zonas características de frecuencias en las que se ubican los modos vibracionales de los grupos funcionales más importantes.

Cálculo de frecuencias vibracionales con Gaussian

Como se estudió en el práctico anterior, Gaussian es un programa de química computacional que permite optimizar la geometría molecular y calcular propiedades físicas, incluida la predicción de frecuencias vibracionales. Para ello se realizan estudios específicos de cálculos de frecuencias que permiten generar espectros teóricos de infrarrojo, incluso ofrece la posibilidad de seleccionar cada frecuencia y animar la molécula para identificar el modo vibracional.

Para desarrollar un cálculo de frecuencia en Gaussian, en primer lugar, se construye y optimiza la molécula a estudiar determinando el nivel de cálculo. Luego se ejecuta un cálculo de frecuencias que genera un espectro teórico de modos normales, con intensidades y frecuencias. Es importante destacar que los valores obtenidos de frecuencias dependerán del método y set de bases utilizados. En ciertos estudios, los valores suelen escalarse con un factor para ajustarlos a los experimentales.

OBJETIVOS

Desarrollar habilidades para obtener e interpretar espectros FTIR, identificando y asignando tipos de vibraciones moleculares a partir de datos experimentales y teóricos.

Fortalecer competencias en el uso de herramientas computacionales para construir, optimizar y calcular frecuencias vibracionales de moléculas orgánicas simples.

Ejercitar la capacidad crítica para comparar y correlacionar datos experimentales y cálculos teóricos, reconociendo las limitaciones y posibilidades de cada método.

SOFTWARES NECESARIOS

1. Paquete de Gaussian

EQUIPOS Y REACTIVOS

1. Nicolet Protège 460
2. Prensa



3. Mortero
4. Pastillero
5. KBr
6. Paracetamol
7. Ibuprofeno

PROCEDIMIENTO

A) Obtención de espectro experimental FTIR

1. Agregar en un mortero una cucharadita de KBr seco (espectroscópico).
2. Moler hasta que quede un polvo bien fino.
3. Colocar el KBr en un pastillero y prensar con prensa hidráulica para formar una pastilla transparente (pastilla utilizada como blanco).
4. Incorporar la pastilla en el porta muestra y realizar la lectura en el equipo.
5. Repetir el mismo procedimiento mezclando el KBr con una pequeña porción de la muestra para preparar la pastilla (ibuprofeno o paracetamol).
6. Limpiar correctamente el pastillero entre preparaciones.
7. Colocar la nueva pastilla en el porta muestras del FTIR y registrar cada espectro.
8. Guardar los espectros en un pendrive para posterior análisis.

B) Obtención de espectro teórico FTIR

1. Construir las estructuras moleculares de ibuprofeno y paracetamol utilizando un editor que conozca.
2. Optimización geométrica: ejecutar cálculo de optimización en Gaussian con nivel teórico B3LYP/6-31G(d).
3. Cálculo de frecuencias vibracionales (job type: Frequency) sobre la geometría optimizada.
4. Obtener el espectro teórico: extraer frecuencias e intensidades con el software de visualización GaussView.
5. Colocar el cursor sobre las diferentes frecuencias del espectro y visualizar los movimientos vibracionales en la molécula.

ANÁLISIS

1. ¿Cuáles son las principales bandas características de cada compuesto observadas en el FTIR experimental y cómo se corresponden con los modos vibracionales calculados?
2. Construya un cuadro que vincule para cada estructura los modos vibracionales, frecuencias experimentales y teóricas obtenidas.
3. ¿Qué diferencias existen entre la frecuencia vibracional del grupo carbonilo obtenida para cada fármaco y cómo se relaciona con sus estructuras?
4. ¿Qué limitaciones tiene el cálculo teórico en la predicción del espectro FTIR y



cómo se puede mejorar la correlación entre ambos estudios?

TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO





ESPECTROSCOPIA ULTRAVIOLETA-VISIBLE

INTRODUCCIÓN

La espectroscopia óptica está basada en la relación:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h \cdot \nu$$

En espectroscopia es apropiado usar el número de onda $\tilde{\nu}$ en lugar de la frecuencia ν . Así, la ecuación (1) toma la forma:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h \cdot c \cdot \tilde{\nu}$$

Dado que:

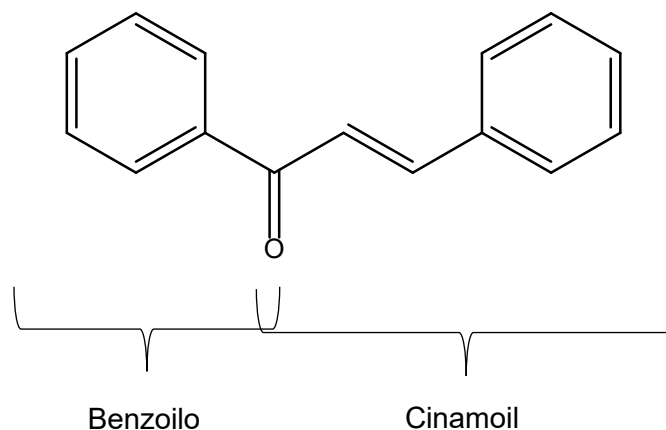
$$\nu = \frac{c}{\lambda} = c \cdot \tilde{\nu}$$

De todo el rango de la radiación electromagnética, la espectroscopia de absorción UV-Vis ocupa un estrecho rango de frecuencias. No obstante, este rango es de extrema importancia puesto que las diferencias de energías corresponden aquellas de los estados electrónicos de átomos y moléculas, de allí el concepto de espectroscopia electrónica. Además, en la región visible del espectro las interacciones entre materia y radiación electromagnética se manifiestan como color.

La aplicación de la espectroscopia Uv-Vis en identificación y determinación de estructuras está basada en el hecho de que los estados excitados de la molécula dependen del número de electrones, de la estructura y geometría y también de la simetría de la misma. Estas correlaciones han sido extensamente estudiadas, particularmente en el caso de ácidos orgánicos. En adición a las influencias estructurales, deben ser considerados los efectos de los sustituyentes y la presencia de heteroátomos.

En este experimento se analizan espectros UV-Vis de un conjunto de chalconas sustituidas, compuestos pertenecientes a las familias de los flavonoides.

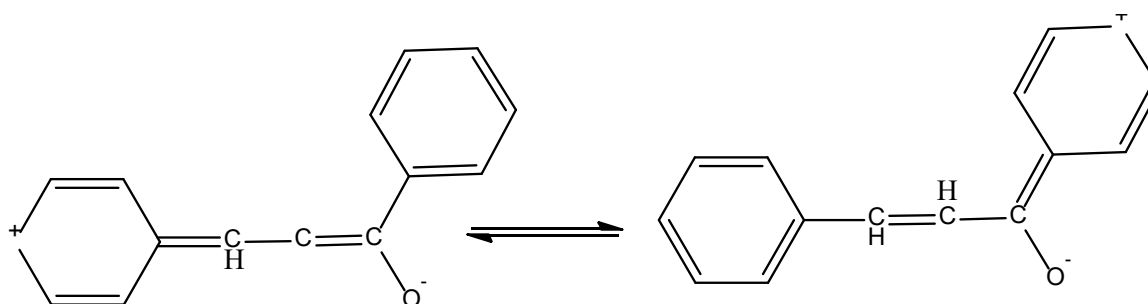
Los espectros UV-Vis de las chalconas presentan dos bandas de absorción características: la banda I que es la más importante, entre 300 y 380nm y la banda II de menor intensidad, entre 220 y 270nm. Respecto de la banda II existe el acuerdo de que la misma es debida al cromóforo benzoilo (transición $\pi \rightarrow \pi^*$ en Ar-C=O). En lo referente a la banda I de chalconas se sostiene que está asociada con la absorción del sistema cinamoilo (transición $\pi \rightarrow \pi^*$ en Ar-C=CH-C=O), tomando como criterio la similitud entre los valores de las absorptividades para compuestos que presentan este cromóforo, a pesar de su muy distinta naturaleza.



Compuesto	Absortividad molar/L mol ⁻¹ cm ⁻¹ (etanol 95%)
Cinamaldehído	25000
t-benzalacetona	23500
Trans-chalcona	24300

Analizando la influencia de distintos grupos en el núcleo de las chalconas, se puede ver que la presencia de sustituyentes donores de electrones en el anillo B causan un corrimiento batocrómico de la banda principal, no teniendo efecto notable cuando se encuentran en el anillo A. Asimismo; los sustituyentes aceptores de electrones en el anillo A provocan un corrimiento batocrómico de la banda , no modificando el espectro si se encuentra en el anillo B.

Se ha advertido, que chalconas con sustituyentes en ambos anillos exhiben corrimientos superiores al promedio de los corrimientos observados en las chalconas análogas con uno de los anillos sin sustituir. A partir de estas evidencias se concluye que el cromóforo debe responder a una estructura compleja. También se propone como origen de la banda principal, una transición cuyo estado excitado estaría descrito por una transferencia electrónica entre dos formas resonantes que involucran todo el sistema conjugado.



La opción de un cromóforo extendido parece una buena respuesta al corrimiento batocrómico de 20 nanómetros para trans chalcona en etanol 306 nanómetro respecto

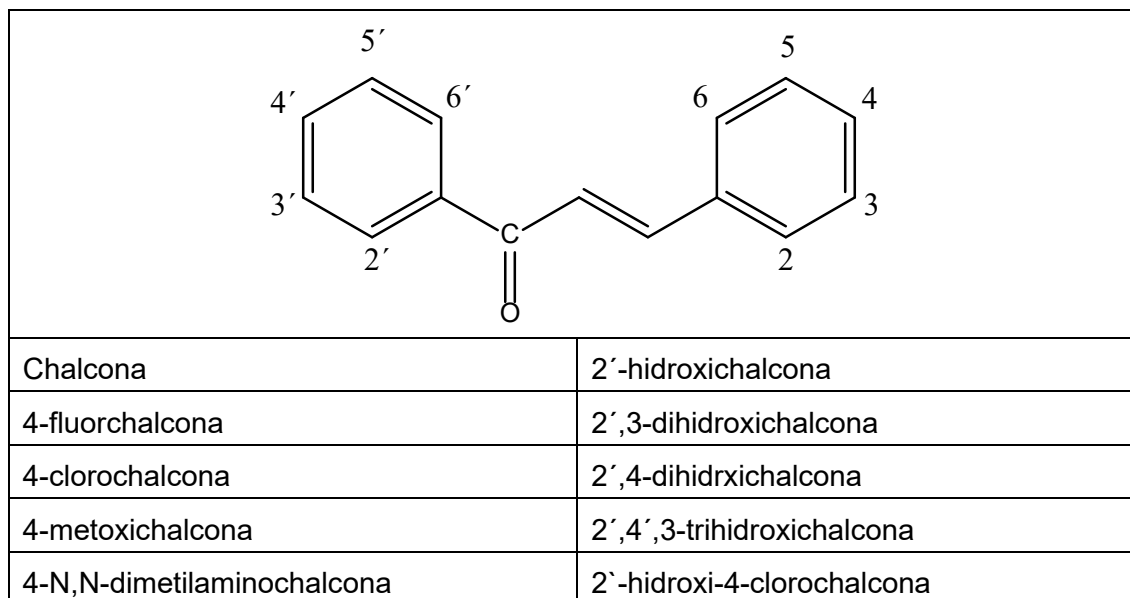


del máximo característico del grupo sin amino y los 286 nanómetro punto seguido Por otra parte el modelo es consistente con la influencia que coma sobre la banda principal, ejercen los sustituyentes.

Esto se resume de la siguiente manera: la forma canónica **a** es menos estable que la **b** por la mayor separación de cargas, luego, sustituyentes donores en la posición 4, que estabilizan la forma **a**, serán causas de un gran efecto batocrómico en la banda 1 mientras que los mismos sustituyentes la posición 4', provocarán el mismo efecto, pero de mediana magnitud; sustituyentes electro aceptores tendrán efectos contrarios.

Por otro lado, la introducción de un grupo OH en la posición 2', tiene un marcado efecto en el espectro de chalconas. Sin lugar a duda, es la unión puente de hidrógeno intramolecular la que, de alguna forma, está implicada en estos defectos. Los datos espectroscópicos son también de utilidad para establecer un orden en lo que se refiere a fuerza de unión puente de hidrógeno, basándose en la clásica acción de los sustituyentes.

En la figura siguiente se muestra la serie de chalconas cuyos espectros UV-Vis se analizarán.



OBJETIVO

- Estudiar los corrimientos de las bandas de absorción UV-Vis en función de los sustituyentes.

MATERIALES NECESARIOS

1. Reactivos: Etanol, Chalconas (soluciones $10^{-5}M$).
2. Vidrio: Tubos de 10 mL con tapa.
3. Instrumental: Espectrofotómetro, porta celdas termostatzado, celdas de cuarzo de 1cm de camino óptico.



PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

1. Encender el espectrofotómetro, dejar estabilizar 15 minutos y ajustar la línea base (200nm-800nm)
2. Seleccionar el rango de longitudes de onda de trabajo (200nm a 550nm)
3. Proceder a la toma de espectros de las soluciones de chalconas.

CÁLCULOS Y GRÁFICOS

1. Ordenar los valores de longitud de onda de máxima absorción (λ_{max}) de los distintos compuestos y discutir el efecto de los sustituyentes.
2. Analizar el cambio de los espectros y la influencia de los sustituyentes sobre el puente de hidrógeno intramolecular de las 2'-hidroxichalconas.



ESPECTROS DE FLUORESCENCIA

INTRODUCCIÓN

La utilización de las espectroscopías de fluorescencia se está incrementando de forma notable en los últimos años, tanto en laboratorios de investigación químicos y bioquímicos como en laboratorios de análisis.

El fenómeno de fluorescencia se caracteriza por un proceso de absorción de radiación que provoca que una molécula adquiera un estado excitado desde el cual puede relajarse emitiendo una radiación de mayor longitud de onda.

Fluoróforo es una molécula o parte de una molécula que emite fluorescencia después de ser excitada con luz. La intensidad y longitud de onda de la luz emitida dependerá tanto del fluoróforo como de su ambiente químico.

Para medir la fluorescencia se utiliza el siguiente esquema experimental: iluminación de una muestra, medida de la intensidad de luz que emite a 90° del haz de luz incidente para asegurar que estamos midiendo solamente la luz emitida, evitando la llegada al detector de luz incidente.

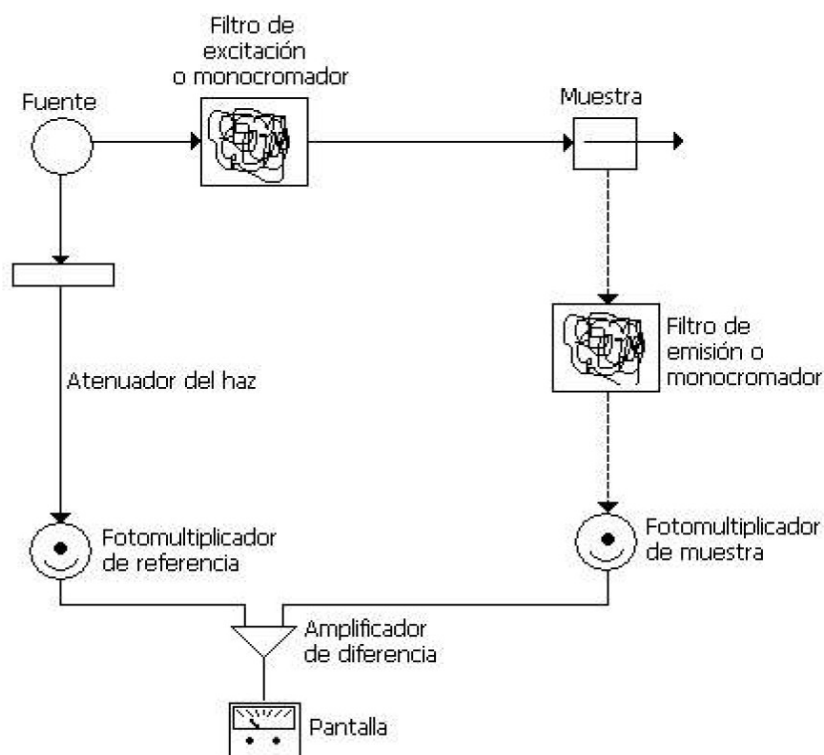


Figura 1. Componentes de un espectrofluorímetro

Al tener dos monocromadores se pueden hacer dos tipos de espectro:

- ESPECTRO DE EXCITACION: se fija el monocromador de emisión y se barre el de excitación.



- **ESPECTRO DE EMISION:** se fija el monocromador de excitación y se barre el de emisión.

En general, la forma del espectro de emisión es independiente de la longitud de onda de excitación, aunque puede variar su intensidad. Además, el espectro de emisión es la imagen especular del espectro de absorción. De la diferencia entre las bandas que presentan estos espectros puede obtenerse una medida de las diferencias de energías entre los niveles vibracionales de la molécula tanto en estado excitado como en el estado basal.

OBJETIVO

- Analizar el espectro de fluorescencia de una sustancia en disolución.

MATERIAL Y REACTIVOS

Material: espectrofluorímetro, cubetas de fluorescencia de 1 cm de paso de luz, pipetas, frascos con tapón.

Reactivos: Etanol y disolución etanólica de 9,10 –dimetilantraceno (DMA).

PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

1. Registrar el espectro de absorbancia del DMA en disolución de etanol. Observar el espectro de absorción y seleccionar la longitud de onda de excitación. Para el compuesto en estudio se selecciona 250nm para realizar la excitación.
2. Medir el espectro de fluorescencia de la misma solución entre 260 y 550nm.

CÁLCULOS Y GRÁFICOS

1. Graficar los espectros de absorbancia y de fluorescencia. Señalar los máximos de cada espectro.
2. Calcular el corrimiento de Stokes.
3. Transformar las longitudes de onda a números de onda y representar de nuevo el espectro.
4. Indicar a qué transiciones corresponden cada uno de los picos de absorción y fluorescencia del DMA y calcular la diferencia de energía de los niveles vibracionales tanto para el estado fundamental como para el estado excitado del DMA.



RÚBRICAS DE EVALUACIÓN





RÚBRICA DE EVALUACIÓN DE TABLAS COMPARATIVAS

Nivel de desempeño	Muy bueno	Suficiente	En proceso
Criterio			
Puntualidad	Presentado dentro de la fecha límite	Presentado fuera de la fecha límite	No presentado
Elementos de la comparación	Incluye todos los elementos de la comparación	Incluye la mayoría de los elementos que deben ser comparados	Faltan elementos importantes en la comparación
Diferencias y semejanzas	Identifica de forma clara y precisa diferencias y semejanzas entre los elementos comparados	Identifica la mayor parte de las semejanzas y diferencias entre los elementos comparados	Identifica pocas o ninguna de las semejanzas y diferencias entre los elementos comparados
Ortografía, gramática y presentación	No hay errores ortográficos ni gramaticales. La presentación es clara y atractiva.	Presenta algunos errores ortográficos y/o gramaticales. La presentación es clara.	Presenta gran cantidad de errores ortográficos y/o gramaticales



RÚBRICA DE EVALUACIÓN DE MAPAS CONCEPTUALES

	Muy bueno	Suficiente	En proceso
Presentación	Cumple con lo estipulado en cuanto a formato, claridad y creatividad. No presenta errores ortográficos ni gramaticales	El mapa es claro pero no posee el formato adecuado o presenta algunos errores ortográficos y/o gramaticales	El mapa no es claro y/o presenta gran cantidad de errores ortográficos y/o gramaticales
Puntualidad	Presentado dentro de la fecha límite	Presentado fuera de la fecha límite	No presentado
Conceptos	Incluye todos los conceptos importantes vistos en el tema y demuestra entendimiento adecuado de los mismos	Incluye la mayoría de los conceptos pero con errores en la terminología o muestra desconocimiento de conceptos.	Incluye pocos conceptos y/o abundantes errores en terminología o conocimiento de los conceptos
Relaciones entre conceptos	Muestra una relación clara y novedosa entre los conceptos	Muestra una relación clara entre los conceptos	No muestra relación entre los conceptos



RÚBRICA DE EVALUACIÓN DE INFOGRAFÍAS

	En proceso	Suficiente	Muy Bueno
Elementos y equilibrio	Solo presenta uno o dos de los elementos propios de una infografía (título, cuerpo, fuentes o créditos, autores) y/o la información visual y textual no está equilibrada.	Están presentes todos los elementos propios de una infografía (título, cuerpo, fuentes o créditos y autores), la información visual y textual están bastante bien equilibradas.	Están presentes todos los elementos propios de una infografía (título, cuerpo, fuentes o créditos y autores), existe un equilibrio perfecto entre el texto y la imagen.
Diseño	La distribución de la información no es atractiva visualmente, los colores no combinan de manera armónica y/o la tipografía empleada es inapropiada y poco legible.	La información está distribuida de una manera visualmente poco atractiva, la combinación de colores es poco armónica y/o la tipografía no es apropiada.	La información está distribuida de una manera visualmente atractiva, la combinación de colores es muy armónica y la tipografía empleada es clara y legible.
Contenido	En la infografía no se reflejan las ideas fundamentales del tema.	En la infografía aparecen recogidas con bastante claridad la mayor parte de las ideas claves del tema.	Todos y cada uno de los conceptos e ideas claves del tema aparecen con mucha claridad en la infografía.
Elementos visuales	La mayor parte de las imágenes no poseen dimensiones adecuadas y no se adecúan al mensaje que se quiere transmitir.	No todas las imágenes empleadas tienen las dimensiones adecuadas pero apoyan con claridad el mensaje que se quiere transmitir.	Todas las imágenes empleadas poseen dimensiones adecuadas y apoyan con claridad el mensaje que se quiere transmitir.
Corrección lingüística	Aparecen cinco o más errores ortográficos, gramaticales, de puntuación o en el uso de subíndices, supraíndices u otros símbolos propios del tema.	Aparecen hasta cuatro errores ortográficos, gramaticales, de puntuación o en el uso de subíndices, supraíndices u otros símbolos propios del tema.	No se aprecian errores ortográficos, gramaticales, de puntuación o en el uso de subíndices, supraíndices u otros símbolos propios del tema.

Bibliografía: ["Rúbrica de evaluación de una infografía"](#) CEDEC, 2023



RÚBRICA PARA EVALUAR EXPOSICIONES ORALES

Nivel de desempeño	Muy bueno	Aprobado	Insuficiente
Criterio			
Dominio del tema	Buen dominio del tema, no comete errores, no duda.	Tiene que hacer algunas rectificaciones, y en ocasiones duda.	Rectifica continuamente. El contenido es escaso, no muestra conocimiento del tema.
Organización de la información	La información está bien organizada, de forma clara y lógica.	No existe un plan claro para organizar la información, cierta dispersión.	La información aparece dispersa y poco organizada.
Exposición	Atrae la atención del público y mantiene el interés durante toda la exposición.	Le cuesta conseguir o mantener el interés del público.	Apenas usa recursos para mantener la atención del público.
Expresión oral	Habla claramente durante toda la presentación. Su pronunciación es correcta. Su tono de voz es suficientemente alto para ser oído por todos.	Durante la mayor parte de la presentación habla claramente. Su pronunciación es correcta, pero recurre frecuentemente al uso de pausas innecesarias. Su tono de voz no es suficientemente alto.	Algunas veces habla claramente. Su pronunciación no siempre es correcta, hace muchas pausas y usa muletillas. Su tono de voz no es adecuado para mantener el interés de la audiencia.
Lenguaje no verbal	Tiene buena postura, y demuestra seguridad en sí misma/o durante la presentación. Establece contacto visual con todos los presentes.	En general tiene buena postura, establece contacto visual con los presentes sólo en ocasiones. Muestra inseguridad.	No tiene buena postura, no establece contacto visual con los presentes. Muestra gran inseguridad.
Tiempo	Tiempo ajustado al previsto, con un final que retoma las ideas principales y redondea la exposición.	Tiempo poco ajustado. Exposición ligeramente más corta o larga. No redondea la exposición.	Tiempo no ajustado. Exposición excesivamente corta o demasiado larga. Final precipitado o alargado por falta de control del tiempo.

Bibliografía: [“Rúbrica exposición oral de una presentación”](#) CEDEAC, 2019.



BIBLIOGRAFÍA



Atkins, P., & de Paula, J. (2010). *Physical Chemistry* (9o Ed.). Oxford University Press.

Atkins, P., & De Paula, J. (2008). *Química Física* (8o). Ed. Médica Panamericana.

Barrow, G. M. (1967). *Estructura de las moléculas*. Reverté.

Castellan, G. (1987). *Fisicoquímica* (Second). Addison Wesley Iberoamericana.

Levine, I. (2001). *Química Cuántica* (5o). Pearson Educación.