

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

PROGRAMA DE: FISICOQUÍMICA C

CÓDIGO: 6093

ÁREA NRO: IV

HORAS DE CLASE

PROFESORA/
RESPONSABLE

TEÓRICAS

PRÁCTICAS

Por semana

Por Cuatrimestre

Por semana

Por Cuatrimestre

Dr. Gustavo A. Appignanesi

4

60

4

60

ASIGNATURAS CORRELATIVAS PRECEDENTES

APROBADAS

CURSADAS

FISICOQUÍMICA B (6098)

DESCRIPCIÓN / OBJETIVOS

Se trata de un curso de Química Cuántica de nivel intermedio, donde se introducen de manera fundamentada las formas atómicas y moleculares de la energía. Utilizan como herramientas matemáticas el cálculo diferencial e integral, análisis vectorial y análisis complejo.

El objetivo es introducir al alumno en el tratamiento mecanocuántico de los objetos específicos que pertenecen a la ciencia química. Como es usual en los textos dirigidos a estudiantes de química, el método de presentación es axiomático deductivo. El curso se divide en dos partes una primera y fundamental que involucra a los temas 1 2 y 3 y una segunda de aplicación a los problemas físicos de interés para químicos.

PROGRAMA SINTÉTICO

Los formalismos de Newton, Lagrange y Hamilton de la mecánica clásica. Espectros atómicos. Efecto fotoeléctrico. La radiación del cuerpo negro. Átomo de Hidrógeno según el modelo de Bohr. Postulados de la mecánica cuántica. Métodos de Perturbación y Variación. Aplicación en problemas de interés químico: rotor rígido, oscilador armónico. Espectroscopía. Reglas de selección. El átomo de Hidrógeno y Helio. Molécula-ión y molécula de Hidrógeno. Método de Hückel Simple.

VIGENCIA AÑOS 2021

PROGRAMA ANALÍTICO

TEMA 1. Mecánica clásica: Formulación de Newton, Lagrange y Hamilton. La variación continua de la energía y la medición simultánea de diferentes variables dinámicas. Coordenadas Internas y el movimiento de centro de masa. Masa reducida.

TEMA 2. Fundamentos: Espectros atómicos. Constante de Rydberg. Efecto fotoeléctrico. Radiación del cuerpo negro, tratamientos de Rayleigh –Jeans y de Planck.

TEMA 3. Mecánica Cuántica: Átomo de Bohr: la primera unificación de los resultados experimentales preexistentes. Hipótesis de De Broglie: Onda asociada al movimiento de una partícula. Postulados de la Mecánica Cuántica. Operadores lineales y hermitianos. Teoremas de funciones útiles en mecánica cuántica. La formulación de Schrödinger. Ecuación de onda: autofunciones y autovalores. Valores promedios. Estados estacionarios. Ppio. de incertidumbre de Heisenberg.

TEMA 4. Aplicación de los postulados: Aplicación de los postulados al problema de la partícula en una caja en una, dos y tres dimensiones. Ortogonalidad y normalización de las autofunciones. Degeneración. Aplicación de los conceptos a moléculas conjugadas lineales y planas. Teoría de perturbación para sistemas no degenerados. La partícula en una caja de potencial con fondos no planos.

TEMA 5. Espectroscopia rotacional y vibracional y espectroscopía Raman: Rotación de moléculas: Modelo del rotor rígido. Hamiltoniano del sistema en coordenadas esféricas. Autofunciones: polinomios asociados de Legendre. Espectros rotacionales puros. Intensidad y Reglas de selección. Momento angular. El oscilador armónico y la vibración de moléculas diatómicas. Hamiltoniano del sistema. Autofunciones: los polinomios de Hermite. Espectroscopía de rotación-vibración. Ramas del espectro: P, Q y R. Correcciones a la anarmonicidad. Función de Morse. Energía de disociación y la constante de anarmonicidad. El uso de la teoría de perturbación para el cálculo de la anarmonicidad. Otras correcciones. Espectroscopía de rotación-vibración en moléculas poliatómicas. Espectroscopía Raman. Líneas Stokes y anti-Stokes en rotores lineales.

TEMA 6. Estructura electrónica de los átomos: Átomo de Hidrógeno e hidrogenoides. Separación de variables. Funciones angulares y radiales. Unidades atómicas. Hamiltoniano y autofunciones en unidades atómicas. Espectro del átomo de Hidrógeno: reglas de selección. El átomo de Helio. Solución del problema de la interacción entre los electrones en diferentes grados de aproximación: usando la teoría de perturbación y el método variacional. Spin electrónico. El principio de Pauli. Simetría de las autofunciones. Determinante de Slater. Tratamiento de átomos polieletrónicos.

TEMA 7. Moléculas y el enlace químico: La molécula ión de Hidrógeno. Coordenadas confocales elípticas. Aproximación de Born-Oppenheimer. El método CLOA: Ecuaciones y determinantes seculares. Integrales de solapamiento, coulombica y de intercambio. Molécula de Hidrógeno. Mejoras a la función de onda para la molécula de hidrógeno. Moléculas diatómicas y poliatómicas. Enlaces localizados, orbitales híbridos.

TEMA 8. Espectroscopia molecular, fotoquímica, fluorescencia, fosforescencia y láseres. Transiciones electrónicas. Espectro electrónico de moléculas diatómicas y poliatómicas. El decaimiento de los estados excitados: Fluorescencia y fosforescencia. Procesos fotoquímicos. Disociación y predisociación. Procesos fotoquímicos secundarios. Láseres: Láseres de 3 y 4 niveles. Tipos de láseres, características de la radiación y aplicaciones químicas.

VIGENCIA AÑOS

2021

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE QUIMICA

PROGRAMA DE: FISICOQUIMICA C

CODIGO: 6093

AREA NRO: IV

TEMA 9. Estructura electrónica de sistemas conjugados: El método CLOA-OM para moléculas de hidrocarburos con enlaces conjugados. El método de Hückel simple. El etileno y butadieno. Uso de propiedades de simetría. Cálculos prácticos sobre moléculas.

PROGRAMA DE TRABAJOS PRÁCTICOS. Problemas teórico / prácticos de cada uno de los temas arriba indicados.

METODOLOGÍA DE LA ENSEÑANZA. Clases explicativas a cargo del profesor. Clases de problemas interactivas con docentes auxiliares. (JTP)

FORMA DE EVALUACIÓN.

Cursado: Dos parciales escritos de teoría y problemas durante el cuatrimestre.

Aprobado: El alumno podrá optar por rendir exámenes de promoción (únicamente durante el cursado de la materia) o sólo los parciales de cursado citados, con un examen final. En todos los casos se trata de exámenes escritos de teoría y problemas.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

- Bailey Chapman, L. E., Troitiño Núñez, M. D. "Química cuántica: la química cuántica en 100 problemas" Universidad Nacional de Educación a Distancia. 2013.
- Hanna, M. "Quantum Mechanics in Chemistry". Benjamin. 3ra. edición. 1982.
- Blinder, S. M. "Introduction to quantum mechanics". Academic Press. 2020.
- Almeida, R. "La mecánica cuántica y la descripción del enlace químico". Universidad de los Andes. 2009.
- Pauling, L. and Wilson, E. B. "Introduction to quantum mechanics with applications to chemistry". Courier Corporation. 2012
- Ratner, M.A and Schatz, G.C. "Introduction to Quantum Mechanics in Chemistry", Prentice Hall. 2001.
- Levine, Ira: "Química Cuántica". Limusa-Willey, 5ta. Edición. 2001

	PROFESORA RESPONSABLE (firma aclarada)	AÑO	PROFESORA/ RESPONSABLE (firma aclarada)
2021	 Gustavo A. Appignanesi		

VISADO		
COORDINADORA/ ÁREA	SECRETARIO/A ACADÉMICO/A	DIRECTORA/ DECANO/A
 BEIGADA J. GARCIA	 DEL ROSSO SECRETARIO/A ACADÉMICO/A DEPT. QUIMICA	 PAULA V. MESSINA DIRECTORA DECANA DEPT. QUIMICA
FECHA:	FECHA:	FECHA: