



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449

Republica Argentina

SALTA, 08 de Julio de 2.011

EXP-EXA- N° 8134/2009

RESCD-EXA N° 441/2011

VISTO:

La presentación efectuada por la Comisión de Carrera de la Licenciatura en Química, solicitando la aprobación del Programa de la asignatura "Fisicoquímica II", como así también del Régimen de Regularidad para la carrera de Licenciatura en Química (Plan 1997 y Plan 2011); y

CONSIDERANDO:

Que el citado Programa y el Régimen de Regularidad, todos ellos obrantes en las presentes actuaciones, fueron sometidos a la opinión de la Comisión de Carrera citada;

Que la Comisión de Docencia e Investigación en su despacho de fs. 21, aconseja aprobar el programa analítico y el régimen de regularidad de la asignatura Fisicoquímica II para el período lectivo 2011;

POR ELLO, y en uso de las atribuciones que le son propias;

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

(En su sesión ordinaria del día 06/07/2011)

RESUELVE:

ARTÍCULO 1°: Aprobar, a partir del presente período lectivo, el Programa Analítico de la asignatura "FISICOQUÍMICA II" como así también al respectivo Régimen de Regularidad, para la carrera de Licenciatura en Química (Plan 1997 y Plan 2011), que como Anexo I forma parte de la presente Resolución.

ARTÍCULO 2°: Hágase saber a las Comisiones de Carrera de Licenciatura en Química, a la Responsable de Cátedra (Dra. Emilce Ottavianelli), División Archivo y Digesto y siga al Departamento de Alumnos para su toma de razón, registro y demás efectos. Cumplido, ARCHÍVESE.

RGG

Mag. MARIA TERESA MONTERO LAROCCA
SECRETARIA ACADEMICA
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa



Ing. CARLOS EUGENIO PUGA
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449

Republica Argentina

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 441/2011 – EXP-EXA- N° 8134/2009

Asignatura: Físicoquímica II

Carrera/s y Plan/es: Licenciatura en Química (planes 1997 y 2011)

Departamento o Dependencia: Química

Profesor responsable: Emilce Ottavianelli

Docentes: Dra. Mariela Finetti

Modalidad de dictado: cuatrimestral

Objetivos de la asignatura:

Brindar a los alumnos las bases de la teoría cuántica y como ésta se aplica para entender la estructura electrónica de los átomos y moléculas. Familiarizar a los alumnos con conceptos tales como estados estacionarios de energía, orbitales atómicos y moleculares. Explicar el origen de la energía de enlace entre los átomos de una molécula. Introducir las nociones de transición entre estados, Conocer los fundamentos de las diferentes espectroscopias. Adquirir nociones de termodinámica estadística, obtención de propiedades termodinámicas a partir de las propiedades microscópicas.

Desarrollo del programa analítico:

TEMA I

Teoría cuántica. Hipótesis de De Broglie. Principio de Incertidumbre. Ondas de Materia. Postulados de la Mecánica Cuántica. Probabilidad y Densidad de probabilidad. Operadores y Observables. Ecuación de Schroedinger Temporal y Estacionaria. Valores Medios.

TEMA II

Movimiento de Traslación: Partícula en una caja. Solución en una, dos y tres dimensiones. Degeneración.

Movimiento de Vibración: Oscilador armónico lineal. Vibración de una molécula diatómica.

Movimiento de Rotación: Momento angular. Operador momento angular y sus componentes. Incertidumbre en la determinación simultánea. Armónicos esféricos. Rotor rígido de una y dos partículas. Rotor de varias partículas.

TEMA III

Estructura atómica. Átomo de Hidrógeno. Niveles de energía. Función de onda radial y angular. Funciones de onda reales. Orbitales atómicos, representaciones. Átomos hidrogenoides. Átomo de Helio.

Soluciones aproximadas. Método variacional. Método de perturbaciones.

Espín electrónico. Indistinguibilidad. Principio de Pauli. Átomos Polieletrónicos. Método del Campo Autoconsistente de Hartree – Fock. Momentos angulares de espín y totales de átomos polieletrónicos. Reglas de Hund. Momentos magnéticos orbital y de espín. Interacción con un campo magnético – efecto Zeeman. Interacción espín - órbita. Reglas de selección de espín.

Espectros atómicos.



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449

Republica Argentina

//.. -2-

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 441/2011 – EXP-EXA- N° 8134/2009

TEMA IV

Estructura Molecular. Aproximación de Born – Oppenheimer. Molécula ión – hidrógeno. Moléculas diatómicas. Método de Combinación Lineal de Orbitales Atómicos. Moléculas diatómicas heteronucleares.

TEMA V

Simetría. Elementos y operaciones de simetría. Teoría de grupos. Representaciones. Bases. Tabla de caracteres. Aplicaciones. Orbitales adaptados por simetría. Hibridación de orbitales. Obtención de funciones de onda.

Método de Huckel. Moléculas conjugadas. Hidrocarburos cíclicos. Índices de reactividad.

TEMA VI

Espectroscopía Molecular. Interacción de la radiación con la materia. Absorción y emisión. Ley de Lambert y Beer. Energía electrónica, vibracional y rotacional. Reglas de selección. Uso de la teoría de grupos.

Espectro de rotación pura. Moléculas rígidas, lineales, trompo esféricas y trompo simétricas. Espectros rotacionales Raman.

TEMA VII

Espectros de vibración – rotación. Moléculas diatómicas. Anarmonicidad. Estructura rotacional de las bandas vibracionales. Espectros vibracionales Raman de moléculas diatómicas.

Espectros de moléculas poliatómicas. Modos normales. Modos activos en IR y Raman. Determinación de las especies de simetría de los modos normales por teoría de grupos y su actividad en IR o Raman. Estructura rotacional de las bandas en moléculas poliatómicas lineales, bandas paralelas y perpendiculares.

TEMA VIII

Espectros electrónicos. Transiciones. Estructura vibracional. Disociación y predisociación. Fluorescencia y fosforescencia. Transiciones entre estados singletes y tripletes. Fotoquímica.

TEMA IX

Resonancia magnética. Resonancia magnética nuclear. Corrimientos químicos. Relajación de espín. Resonancia de espín – electrón.

TEMA X

Termodinámica estadística. Estadísticas de Fermi – Dirac, Bose – Einstein y Maxwell – Boltzmann. Macroestados y microestados. Distribución más probable. Entropía y probabilidad. Función de partición y funciones termodinámicas.

TEMA XI

Fuerzas intermoleculares. Interacciones electrostáticas entre iones, dipolos y cuadrupolos. Polarizabilidad, dipolos inducidos. Fuerzas de dispersión de London. Ecuación de Mie y Lennard – Jones.

Estado líquido. Estado sólido.

..//



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449

Republica Argentina

//.. -3-

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 441/2011 – EXP-EXA- N° 8134/2009

Desarrollo del programa de Trabajos Prácticos y/o Laboratorios:

TRABAJOS PRÁCTICOS-Consisten en resolución de problemas, laboratorio computacional y/o experimental, dependiendo del tema. El número de clases por tema no es estricto.

Tema I-Integración numérica. Empleo de planilla de cálculo para la resolución de integrales en forma numérica, resolución de ecuaciones y ajuste de curvas por método de cuadrados mínimos. Radiación de cuerpo negro: cálculo de la temperatura del universo a partir de los datos de radiación tomados por el satélite COBE. Efecto fotoeléctrico: determinación de la función trabajo de Ni y determinación de la constante de Planck. Uso de Scilab. Gráfica de funciones de distribución. Densidad de probabilidad. Cálculo de probabilidades y valores medios. Desarrollo de funciones en términos de funciones propias de operadores. Cálculo de incertidumbres. Comprobación del principio de Heisemberg. (3 clases)

Tema II- Movimiento de traslación: cálculo de funciones y energías de una partícula en una caja unidimensional. Gráfico de las funciones y densidades de probabilidad. Densidad de probabilidad para estados estacionarios y no estacionarios. Variación de la densidad de probabilidad con el tiempo. Animación empleando Scilab. Movimiento en dos y tres dimensiones. Cálculo y visualización de las funciones de estado para una partícula en una caja bidimensional. Cálculo de probabilidades y valores medios. Movimiento de vibración: resolución de la ec. de onda para un oscilador armónico unidimensional. Gráfico de las funciones y densidades de probabilidad. Comparación de las curva de densidad de probabilidad clásica y cuántica. Efecto túnel. Cuantificación mediante cálculos de probabilidad fuera de los límites de oscilación clásica. Variación con el número cuántico vibracional. Oscilador armónico isotrópico tridimensional. Movimiento de rotación: representación gráfica de los armónicos esféricos empleando Scilab. (3 clases)

Tema III-Átomos hidrogenoides: representación de las funciones radiales y de la función de distribución radial para átomos hidrogenoides. Variación con el número cuántico principal. Variación con la carga nuclear. Cálculo de la probabilidad de encontrar al electrón a una distancia determinada del núcleo. Cálculo de la probabilidad de encontrar al electrón en una región del espacio. Contornos de densidad de probabilidad. Lectura de artículos relacionados con el significado de la densidad de probabilidad. Métodos aproximados: resolución de problemas variacionales y perturbativos empleando Scilab. Visualización de las funciones de prueba. Método de Hartree-Fock: empleo de planilla de cálculo para el cálculo iterativo de las funciones de onda y energías para el átomo de Helio. Resolución de problemas: funciones simétricas y antisimétricas. Funciones de orden cero para He, Li. Cálculo de términos espectroscópicos. Cálculos de potenciales de ionización a partir de espectros atómicos. Predicción de espectros atómicos. Cálculo de energías y constantes de acoplamiento espín-órbita. (3 clases)

Tema IV: Cálculo de energías y funciones de onda para los dos estados de menor energía para el ion molécula de hidrógeno empleando el método OM-CLOA. Representación gráfica de las curvas de densidad de probabilidad constante en 2D y 3D. Comparación de los valores D_e , U_e , R_e , D_0 y v_e de la molécula de hidrógenos obtenidos a partir de las aproximaciones OM y EV. Configuraciones electrónicas y términos espectroscópicos de moléculas diatómicas. Orden de enlace. Visualización de orbitales moleculares de moléculas diatómicas empleando programas específicos (HyperChem, Gabedit, etc.). (2 clases)

..//



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449

Republica Argentina

//.. -4-

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 441/2011 – EXP-EXA- N° 8134/2009

Tema V: Teoría de grupos aplicada a la simetría molecular. Problemas de aplicación. Moléculas poliatómicas: método de Hückel, cálculo de funciones y energías de alquenos conjugados. Obtención de funciones adaptadas a la simetría molecular para emplear como funciones aproximadas de moléculas poliatómicas. Visualización de orbitales moleculares empleando programas específicos. Comparación con los resultados cualitativos obtenidos por el alumno. (2 clases)

Tema VI: Ley de Lambert-Beer. Problemas de aplicación. Simulación del espectro de rotación pura de moléculas diatómicas. Análisis de los factores que influyen en anchura de líneas, separación, intensidades. (1 clase)

Tema VII: Rotación y vibración de moléculas diatómicas. Problemas de aplicación. Obtención del espectro IR de alta resolución de HF y CO gaseosos, cálculo de R_e a partir del espectro. Rotación y vibración de moléculas poliatómicas. Obtención del espectro IR de alta resolución de CO₂, acetileno y SO₂. Análisis de espectro y asignación de bandas. Comparación con los espectros teóricos predichos a partir de la simetría molecular. (3 clases)

Tema VIII: Espectros electrónicos de moléculas diatómicas. Fotoquímica. Problemas de aplicación. (2 clases)

Tema IX: Espectroscopía de resonancia magnética. Problemas de aplicación. (1 clase)

Tema X: Cálculo de funciones de partición para moléculas diatómicas y poliatómicas. Cálculo de funciones termodinámicas. Cálculo de las funciones termodinámicas de HF a partir de los datos obtenidos del espectro IR y bibliografía. Cálculo de la constante de equilibrio para la reacción de formación de HF. (2 clases)

Tema XI: Fuerzas intermoleculares: simulación de la interacción en el dímero (HF)₂. (1 clase)

Bibliografía:

- Química Cuántica, I. Levine, AC, Madrid, 1977.
- Molecular Spectroscopy, I. Levine, John Wiley and Sons.
- Introducción a la Teoría de Grupos para Químicos, G. Davidson, Reverté, Barcelona, 1979.
- La Teoría de Grupos Aplicada a la Química, A. Cotton, Limusa, México, 1977.
- Physical Chemistry, P. Atkins, W. Freeman, Addison-Wesley Iberoamericana New York, 1986.
- Physical Chemistry. A molecular approach, D. McQuarrie, University Science Books, 1997.
- Physical Methods in Chemistry, R. Drago, Saunders Company, 1977.
- Termodinámica Estadística, M. Diaz Peña, Alhambra, Madrid, 1979.
- Quantum mechanics, Merzbacher, Eugen, Toppan, 1961.
- Infrared and Raman, Nakamoto, Karzuo
- Fuerza intermoleculares, Díaz Peña, Mateo, OEA
- Statistical thermodynamics, Gupta. M. C., John Wiley and Sons
- Symmetry and spectroscopy, Harris, Daniel C., Dover Publications
- Molecular spectra and molecular structure, Herzberg, Gerhard

..//



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449

Republica Argentina

//.. -5-

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 441/2011 – EXP-EXA- N° 8134/2009

- Introducción a la termodinámica estadística, Hill, Terrell L., Paraninfo
- Modern spectroscopy, Hollas, J. Michael, John Wiley and Sons
- Intermolecular and surface forces, Israelachvili, Jacob N., Academic Press
- Statistical mechanics, McQuarrie, Donald A., University Science Books
- Visual quantum mechanics, Thaller, Bernd, Springer/Telos
- Ultraviolet and visible spectroscopy, Thomas, Michael J. K., John Wiley and Sons
- Photochemistry, Wayne, Carol E., Oxford

Metodología y descripción de las actividades teóricas y prácticas:

Metodología: Se dictarán 4 hs de clases teóricas semanales. Se propondrán a los alumnos problemas cuya resolución puedan concretar en forma personal y consultar en los horarios disponibles a tal fin (4 hs por semana de horarios de consulta). En la resolución de alguno de estos problemas se incorporará el uso de software gráfico en computadoras personales para lo cual se afectarán horas del dictado del curso. Se realizarán 2 trabajos prácticos de Laboratorio afectando también a tal fin horas del dictado del curso.

Sistemas de evaluación y promoción:

La asignatura se regulariza a través de la aprobación de 2 (dos) exámenes parciales o sus respectivos recuperatorios, los cuales son escritos y se aprueban con una nota mínima de 60/100 puntos.

La aprobación de la materia se realiza rindiendo un examen final oral en los turnos que para tal fin dispone la Facultad.

El examen del alumno libre consiste en un examen escrito de problemas que deberá aprobarse con 60/100 puntos y una vez aprobado rinde el examen oral en iguales condiciones que el alumno regular.

rgg


Mag. MARIA TERESA MONTERO LARROCA
SECRETARIA ACADEMICA
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa





Ing. CARLOS EUGENIO PUGA
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa