



## **310 – FISICOQUIMICA MOLECULAR BASICA**

Carácter del curso	Obligatoria para la carrera del QUÍMICO
Semestre en que se dicta	4to. semestre
Número de créditos	6
Carga horaria semanal (hs)	Clases teóricas: 2 Horas Clases prácticas: 2 Horas Clases laboratorio: 0 Horas
Previaturas	Qca. Gral. II y Física 101
Cupo	-

### **Estructura Responsable:**

Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones (DETEMA),  
Grupo de Química y Biología Computacional (CCBG)

### **Docente Responsable:**

Oscar N. Ventura

### **Docentes Referentes:**

Oscar N. Ventura  
Patricia Saenz Méndez  
Mauricio Vega Teijido  
Aline Katz

### **Objetivos:**

- Presentar al estudiante una visión molecular, a primeros principios, de las propiedades termoquímicas macroscópicas que se desarrollarán desde el punto de vista fenomenológico en los cursos básicos posteriores o simultáneos de Físicoquímica Clásica.
- Presentar al estudiante una visión cuantitativa de los fundamentos de estructura y reactividad molecular, cuyas aplicaciones químicas verá en los cursos posteriores de Química Orgánica e Inorgánica.
- Entrenar al estudiante en el empleo de procedimientos computacionales para modelar procesos químicos, como herramienta complementaria o alternativa a las determinaciones experimentales.
- Introducir los principios fundamentales y las herramientas básicas de la Mecánica y Química Cuántica, Termodinámica Estadística, Espectroscopía Molecular y Teoría de Reacciones Químicas.
- Sistematizar los conceptos fisicoquímicos introducidos en Química General y habilitar al estudiante para realizar cursos de segundo y tercer nivel en Química Teórica y Computacional.

### **Contenido:**

#### **Temas**

#### **Módulo 1: Mecánica cuántica, modelos y átomos.**

##### **1. Conceptos básicos de la Físicoquímica Molecular**

<b>Fecha</b>	<b>MA-SGC-2-3.59</b>	<b>V.01</b>
2013/12/30	Página 1 de 4	

Introducción a la fisicoquímica. Fisicoquímica molecular y fisicoquímica fenomenológica. Teoría y experimento, el papel de los modelos. La energía, concepto mecánico central. La entropía, concepto no mecánico.

### **2. Repaso de lo aprendido en Química General**

Planck y la radiación del cuerpo negro. Einstein y el efecto fotoeléctrico. de Broglie y la naturaleza ondulatoria de la materia. Heisenberg y la incertidumbre.

### **3. Las ondas en Física Clásica**

La ecuación de ondas monodimensional. Soluciones oscilatorias y modos normales de vibración: un ejercicio en solución de ecuaciones diferenciales. Las ecuaciones de ondas bidimensionales.

### **4. La ecuación de Schrödinger (ES) y la partícula en la caja**

Partículas y Ondas. La ES es la ecuación de movimiento de una partícula cuántica. Operadores lineales y magnitudes medibles. La ES como un problema de valores propios. La interpretación probabilística de la función de onda. La partícula en una caja de potencial. La cuantización de la energía. Ejemplos de la relevancia química de este modelo. Normalización de la función de onda. Principio de correspondencia. La partícula en una caja tridimensional. Ejemplos de la relevancia química de este modelo.

### **5. Postulados y principios generales de la Mecánica Cuántica**

Significado de la función de onda. Magnitudes físicas y operadores lineales. Observables y valores propios. Dependencia temporal. Ortogonalidad y ortonormalidad. Conmutabilidad y mensurabilidad simultánea.

### **6. Oscilador armónico y rotor rígido**

El oscilador armónico es un modelo de la vibración de moléculas diatómicas. Ley de Hooke, masa reducida y desarrollo en serie. Niveles de energía y el espectro infrarrojo de una molécula diatómica. El rotor rígido como modelo de la rotación de una molécula diatómica. Niveles de energía. Comparación de resultados calculados con los obtenidos experimentalmente.

### **7. Sólo el átomo de hidrógeno es resoluble exactamente (1 núcleo + 1 electrón)**

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno: una ecuación diferencial que puede resolverse exactamente. Los armónicos esféricos, funciones de onda del rotor rígido. Ecuación angular: ecuación azimutal y ecuación polar. Momento angular. Función de onda radial. Los orbitales atómicos hidrogenoides. Análisis de la función angular. El átomo de Helio no es resoluble exactamente.

### **8. Métodos para encontrar soluciones aproximadas**

El método variacional provee un límite superior a la energía. Funciones de prueba y determinantes seculares. Combinaciones lineales como funciones de prueba. Teoría de perturbaciones. Tanto el método variacional como el método de perturbaciones resuelven el problema del átomo de Helio.

### **9. Átomos multielectrónicos (1 núcleo y varios electrones)**

Ecuaciones de Hartree-Fock y método de campo autoconsistente. El espín del electrón. Antisimetría y determinantes de Slater. Concordancias y discordancias de los cálculos Hartree-Fock con los resultados experimentales. Reglas de Hund y espectros atómicos.

Fecha	MA-SGC-2-3.59	V.01
2013/12/30	Página 2 de 4	

**Módulo 2: Moléculas diatómicas, poliatómicas y sistemas de moléculas**

10. Las moléculas diatómicas y el enlace químico (dos núcleos y varios electrones)

La aproximación de Born-Oppenheimer simplifica la ES para las moléculas. El caso más simple posible, la molécula ión de hidrógeno. La estabilidad de un enlace químico es un efecto cuántico. Orbitales de enlace y antienlace. La molécula de hidrógeno es estable. Pero la molécula diatómica de He no existe. El principio de exclusión de Pauli. La molécula de oxígeno es paramagnética. Estados electrónicos.

11. El enlace en las moléculas poliatómicas

Orbitales híbridos y la estructura molecular. Las diferencias entre la estructura lineal del  $\text{BeH}_2$  y la angular del  $\text{H}_2\text{O}$ . Superficies de energía potencial y optimización de geometría. La existencia de la estructura molecular, un problema filosófico. Estudio de orbitales moleculares usando espectroscopía fotoelectrónica, ¿existen o no existen los orbitales?

12. Teoría de orbitales moleculares

Características topológicas, energéticas y de simetría de los orbitales moleculares. Los orbitales pueden conectarse uno a uno de acuerdo a su simetría sobre un camino de reacción. Reacciones permitidas y prohibidas por simetría. Reglas de Woodward-Hoffmann. Diagramas de correlación de orbitales. Orbitales de frontera: HOMO y LUMO. Ejemplos tomados de la Química Orgánica.

13. De una molécula a un sistema macroscópico, la Termodinámica Estadística (4 horas)

Repaso de conceptos básicos de probabilidad. Ensembles y configuraciones. Distribuciones de probabilidad y potencial químico. Funciones de partición moleculares y funciones termodinámicas. Aplicaciones de la Termoquímica Computacional en las ciencias del medio ambiente y la Ingeniería Química. No todo resultado experimental es correcto, los entretelones de una investigación.

**Bibliografía:**

1. Material multimedia preparado por docentes del Departamento
2. C. E. Dykstra, Physical Chemistry, A Modern Introduction, Prentice-Hall, New Jersey, 1997.
3. D. A. McQuarrie, J. D. Simon, Physical Chemistry, A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, California, 1998.
4. G. C. Schatz, M. A. Ratner, Quantum Mechanics in Chemistry, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1993.
5. C. E. Hecht, Statistical Thermodynamics and Kinetic Theory, Freeman, New York, 1990.

Fecha	MA-SGC-2-3.59	V.01
2013/12/30	Página 3 de 4	

## 310 – FISICOQUIMICA MOLECULAR BASICA

### Modalidad del Curso:

	Teórico	Practico	Laboratorio	Otros (*)
Asistencia Obligatoria	2	2	N/A	N/A
Modalidad Flexible (carga horaria mínima)	2	2	N/A	N/A

(\*) Especificar (talleres, seminarios, visitas, tareas de campo, pasantías supervisadas, etc.)

### **Régimen de ganancia:**

2 evaluaciones parciales (en las semanas correspondientes). Primer examen parcial: 25 puntos. Segundo examen parcial: 35 puntos. Total: 60 puntos.

**Por mayor información visitar la página del curso o consultar directamente en la estructura responsable de la asignatura.**