

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 (14 semanas) Clases prácticas: 2 Horas (10 semanas) Clases laboratorio: 2 Horas (las 3 semanas finales)
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:

Mauricio Vega Teijido

Docentes Referentes:

Martina Kieninger

Aline Katz

Oscar N. Ventura

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

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

Fecha	MA-SGC-2-3.59	V.01
06/12/2022	Página 1 de 4	

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
06/12/2022	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 BeH_2 y la angular del H_2O . 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 y mecanismos de reacción

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. Teoría de orbitales moleculares y mecanismos de reacción (continuación)

14. De una molécula a un sistema macroscópico, la Termodinámica Estadística

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 toda determinación y/o interpretación de un resultado experimental es correcta, los entretelones de una investigación.

Clases Prácticas y de Laboratorio:

Los temas del punto 2 al 9 (Módulo 1) están acompañados por 10 clases de ejercicios prácticos donde se amplía y aplican los conceptos vistos en las clases teóricas. Los temas del Módulo 2 son complementados por 3 Talleres de laboratorio donde se realiza un entrenamiento en software gráfico de modelado molecular y se realizan tareas de exploración, aplicación y análisis de los conceptos vistos en el teórico.

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
06/12/2022	Página 3 de 4	

310 – FISICOQUIMICA MOLECULAR BASICA

Modalidad del Curso:

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

La asistencia no es obligatoria, en ninguna de las 2 modalidades.

(*) 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. a) si se supera el 50% (30 puntos) se exonera, b) si se está entre 30 y 50% (18-30 puntos) se aprueba el curso y se puede rendir el examen, c) con menos del 30% (18 puntos) se tiene un período de 1 año para rendir el examen, antes de un nuevo dictado.

Se solicitan, de forma voluntaria, la entrega de 2 prácticos y de informes de los 3 talleres, por 2 puntos extra por cada tarea, totalizando 10 puntos extra voluntarios.

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