

| | | | | | | |
|--|------------------|------------|-------------------------------|------------------------|----------------------|---|
| UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR | | | | | | 1 |
| BAHIA BLANCA | | | ARGENTINA | | | |
| DEPARTAMENTO DE: Química | | | | | | |
| PROGRAMA DE: CUÁNTICA PARA QUÍMICOS Y ESPECTROSCOPIA | | | | | CODIGO: 6093 | |
| | | | | | AREA NRO: IV | |
| HORAS DE CLASE | | | | | PROFESOR RESPONSABLE | |
| TEORICAS | | | PRACTICAS | | | |
| Por semana | Por Cuatrimestre | Por semana | Por Cuatrimestre | Gustavo A. Appignanesi | | |
| 4 | 60 | 4 | 60 | | | |
| ASIGNATURAS CORRELATIVAS PRECEDENTES | | | | | | |
| APROBADAS | | | CURSADAS | | | |
| Fisicoquímica B (para rendir) | | | Fisicoquímica B (para cursar) | | | |
| DESCRIPCION | | | | | | |
| <p>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.</p> <p>Objetivo: 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 ó de aplicación a los problemas físicos de interés para químicos.</p> | | | | | | |
| PROGRAMA SINTETICO | | | | | | |
| <p>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.</p> | | | | | | |
| VIGENCIA AÑOS | 2022 | | | | | |

| | | | | | | |
|---|------|--|-----------|--|--------------|-----|
| UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR | | | | | | 2/3 |
| BAHIA BLANCA | | | ARGENTINA | | | |
| DEPARTAMENTO DE: Química | | | | | | |
| PROGRAMA DE: CUÁNTICA PARA QUÍMICOS Y ESPECTROSCOPIA | | | | | CODIGO: 6093 | |
| | | | | | AREA NRO: IV | |
| <u>PROGRAMA ANALITICO</u> | | | | | | |
| <p><u>TEMA 1. Mecánica clásica:</u> 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.</p> <p><u>TEMA 2. Fundamentos:</u> Espectros atómicos. Constante de Rydberg. Efecto fotoeléctrico. Radiación del cuerpo negro, tratamientos de Rayleigh –Jeans y de Planck.</p> <p><u>TEMA 3. Mecánica Cuántica.</u> 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.</p> <p><u>TEMA 4. Aplicación de los postulados:</u> 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.</p> <p><u>TEMA 5. Espectroscopia rotacional y vibracional y espectroscopia Raman:</u> 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. Espectroscopia 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. Espectroscopia de rotación-vibración en moléculas poliatómicas. Espectroscopia Raman. Líneas Stokes y anti-Stokes en rotadores lineales.</p> | | | | | | |
| VIGENCIA AÑOS | 2022 | | | | | |

BAHIA BLANCA ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE: Química

PROGRAMA DE: CUÁNTICA PARA QUÍMICOS Y ESPECTROSCOPIA

n 70 o más puntos sobre

AREA NRO: IV

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 polielectrónicos.

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.

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 PRACTICOS: Consta de más de un centenar de problemas.

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 de trata de exámenes escritos de teoría y problemas.

BIBLIOGRAFIA BASICA

-Hanna, Melvin: “*Quantum Mechanics in Chemistry*”. Benjamin. 3ra. edición. 1982.

-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

| | PROFESOR RESPONSABLE (firma aclarada) | AÑO | PROFESOR RESPONSABLE (firma aclarada) |
|--------------------|--|--------------------------|--|
| 2022 | Gustavo A. Appignanesi | | |
| | | | |
| | | | |
| V I S A D O | | | |
| COORDINADOR AREA | SECRETARIO ACADEMICO | DIRECTOR DE DEPARTAMENTO | |
| | | | |

| | | |
|--------|--------|--------|
| FECHA: | FECHA: | FECHA: |
|--------|--------|--------|