

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR						1 3
BAHIA BLANCA			ARGENTINA			
DEPARTAMENTO DE: Química						
PROGRAMA DE: FISICOQUIMICA C					CODIGO: 6099	
					AREA NRO: IV	
H O R A S D E C L A S E					P R O F E S O R R E S P O N S A B L E	
T E O R I C A S			P R A C T I C A S			
Por semana	Por Cuatrimestre		Por semana	Por Cuatrimestre		
4	60		4	60		
A S I G N A T U R A S C O R R E L A T I V A S P R E C E D E N T E S						
A P R O B A D A S				C U R S A D A S		
Fisicoquímica B (para rendir)				Fisicoquímica B (para cursar)		
<u>DESCRIPCION</u>						
<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. Utiliza 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>						
<u>PROGRAMA SINTETICO</u>						
<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 y molécula de Hidrógeno. Método de Hückel Simple.</p>						
VIGENCIA AÑOS						

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR						2 3
BAHIA BLANCA			ARGENTINA			
DEPARTAMENTO DE: Química						
PROGRAMA DE: FISICOQUIMICA C					CODIGO: 6099	
					AREA NRO: IV	
<u>PROGRAMA ANALITICO</u>						
<p><u>TEMA 1. Mecánica clásica:</u> Formulación de Newton, Lagrange y Hamilton. Coordenadas Internas y 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: primera unificación de los resultados de los experimentos. 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 ecuación de Schrödinger. Autofunciones y autovalores. Valores promedios. Estados estacionarios. Ppio. de indeterminación de Heisenberg.</p> <p><u>TEMA 4. Aplicación de los postulados:</u> Aplicación de los postulados precedentes 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 :</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. 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.</p>						
VIGENCIA AÑOS						

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE: Química

PROGRAMA DE: FISICOQUIMICA C

CODIGO: 6099

AREA NRO: IV

TEMA 6. Estructura electrónica de los átomos. Átomos 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 interacción interelectrónica en diferentes grados de aproximación: usando la teoría de perturbación y el método variacional. Spin electrónico. Partículas idénticas y el principio de Pauli. Simetría de las autofunciones. Determinante de Slater. 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. Estados excitados y espectro electrónico de moléculas biatómicas. Enlaces localizados, orbitales híbridos.

TEMA 8. 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 aproximadamente 100 problemas contenidos en el libro de texto de M. Hanna y otros agregados..

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 entre 3 exámenes de promoción (únicamente durante el cursado de la materia) ó los dos 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.

-Levine, Ira: "*Química Cuántica*". Limusa-Wiley, 5ta. Edición. 2001

-Lowe, John P.: "*Quantum Chemistry*". Academic Press. 1978.

	PROFESOR RESPONSABLE (firma aclarada)	AÑO	PROFESOR RESPONSABLE (firma aclarada)
	Dr. Rubén A Montani		
V I S A D O			
COORDINADOR AREA	SECRETARIO ACADEMICO	DIRECTOR DE DEPARTAMENTO	
	Dr. Mariano Garrido	Dra. Adriana G. Lista	
FECHA:	FECHA:	FECHA: Marzo 2017	