



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina

"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

SALTA, 03 de mayo de 2.022

EXP-EXA: N° 8.134/2009

RESCD-EXA N° 223/2022

VISTO:

La presentación efectuada por la Dra. María Laura URIBURU, solicitando la aprobación del Programa de la asignatura "**Fisicoquímica II**", como así también del Régimen de Regularidad y Promoción para la carrera: Licenciatura en Química (plan 2.011); y

CONSIDERANDO:

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

Que, la Comisión de Docencia e Investigación en su despacho del 05/04/2022, aconseja aprobar el programa analítico y el régimen de regularidad y promoción de la asignatura "**Fisicoquímica II**".

Que, el Consejo Directivo en su sesión ordinaria realizada en modalidad mixta (presencial y virtual) el día 13/04/2022, aprueba por unanimidad el despacho de Comisión de Docencia e Investigación.

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 13/04/2022)

RESUELVE:

ARTÍCULO 1º: Aprobar el Programa Analítico de la asignatura "**Fisicoquímica II**", como así también del Régimen de Regularidad y Promoción, para la carrera: Licenciatura en Química (plan 2.011), que como Anexo I forma parte de la presente resolución.

ARTÍCULO 2º: Notifíquese fehacientemente a la Docente Responsable de Cátedra: Dra. Emilce Ethel OTTAVIANELLI. Hágase conocer con copia: a la Comisión de Carrera de la Licenciatura en Química, al Departamento de Química, a la Secretaría Académica e Investigación de la Facultad, a la División Archivo y Digesto y al Departamento de Alumnos para su toma de razón, registro y demás efectos. Publíquese en la página web; cumplido, archívese.

MRM
sbb

Dra. MARÍA RITA MARCEARENA
SECRETARÍA ACADÉMICA Y DE INVESTIGACIÓN
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa



Ing. DANIEL HOYOS
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

"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 223/2022 – EXP-EXA N° 8.134/2011

PROGRAMA DE FISICOQUÍMICA II

Asignatura: Físicoquímica II

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

Departamento o Dependencia: Química

Profesor responsable: Emilce Ottavianelli

Docentes: Dra. Mariela Finetti y Lic. José F. Miranda

Modalidad de dictado: cuatrimestral

Carga horaria semanal: 4 h de clases teóricas y 5 h de clases prácticas

Contenidos mínimos:

Química Cuántica: postulados, modelos sencillos. Estructura atómica. Espectros. Estructura molecular, teoría de enlace de valencia, teoría de orbitales moleculares. Moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas. Simetría molecular. Orbitales híbridos. Método de OM Huckel. Espectroscopía molecular: Espectros rotacionales, espectros vibracionales y electrónicos. Fotoquímica. Resonancia magnética nuclear. Cálculo estadístico de funciones termodinámicas. Interacciones moleculares. Teoría de líquidos y sólidos.

Objetivos de la asignatura:

Brindar a los alumnos las bases de la química 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. Conocer las diferentes interacciones posibles entre moléculas.

Desarrollo del programa analítico:

TEMA I

Principios de la teoría cuántica. Cuantización de la energía. Carácter de partícula de la radiación electromagnética. El carácter ondulatorio de las partículas. Microscopía electrónica. Postulados. La función de onda. Interpretación de Born. Operadores mecánicos cuánticos. Valores propios y funciones propias. Ecuación de onda dependiente e independiente del tiempo. Superposición de estados y valores de expectación. El principio de incertidumbre de Heisenberg. La forma general del principio de incertidumbre. Medida simultánea de observables.

Emilce Ottavianelli
A



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
República Argentina

“LAS MALVINAS SON ARGENTINAS”

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 216/2022 – EXP-EXA N° 8.134/2011

TEMA II

Movimiento en una dimensión. Movimiento de traslación: Partícula en una caja. Cuantización de la energía. Niveles de energía. Funciones. Valor más probable para la posición. Efecto túnel. Microscopio de efecto túnel. Movimiento de vibración: Oscilador armónico unidimensional. Niveles de energía. Funciones. Propiedades de los osciladores. Vibración de una molécula diatómica. Técnicas de aproximación: Teoría de perturbaciones independiente y dependiente del tiempo. Transición entre estados.

TEMA III

Movimiento en varias dimensiones: Partícula en una caja bi y tridimensional. Separación de variables, degeneración. Movimiento de Rotación: Momento angular. Operador momento angular y sus componentes. Cuantización del momento angular. Autofunciones y autovalores. Armónicos esféricos. Hamiltoniano en coordenadas esféricas. Rotor rígido de una y dos partículas. Momento angular de espín.

TEMA IV

Estructura atómica 1. Átomos hidrogenoides. Niveles de energía. Función de onda radial y angular. Funciones de onda reales. Orbitales atómicos, representaciones. Transiciones espectroscópicas. Átomos polielectrónicos. Método orbital. Átomo de Helio. Espín electrónico. Indistinguibilidad. Principio de Pauli. Penetración y apantallamiento. Potencial de ionización.

TEMA V

Estructura atómica 2. Átomos Polielectrónicos. Orbitales de Campo Autoconsistente. Momentos angulares de espín y totales de átomos polielectrónicos. Reglas de Hund. Momentos magnéticos orbital y de espín. Interacción con un campo magnético — efecto Zeeman. Interacción espín - órbita. Símbolos de los términos.

TEMA VI

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

TEMA VII

Estructura Molecular. Aproximación de Born — Oppenheimer. Método variacional. Molécula ión — hidrógeno. Moléculas diatómicas. Método de Combinación Lineal de Orbitales Atómicos. Moléculas diatómicas homonucleares y heteronucleares. Espectroscopia fotoelectrónica. Método de Hückel. Moléculas conjugadas. Hidrocarburos cíclicos. Índices de reactividad. Enlace en sólidos.

TEMA VIII

Interacciones moleculares. Interacciones electrostáticas entre iones, dipolos y cuadrupolos. Polarizabilidad, dipolos inducidos. Fuerzas de dispersión de London. Ecuación de Mie y Lennard-Jones. Enlace de hidrógeno. Interacciones moleculares en gases. Sólidos y líquidos.

Reservado
#



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina

"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 223/2022 – EXP-EXA N° 8.134/2011

TEMA IX

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. Momentos de inercia. Moléculas rígidas, lineales, trompo esféricas y trompo simétricas. Niveles de energía. Espectros de rotación pura. Espectros rotacionales Raman.

TEMA X

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. Estructura rotacional.

TEMA XI

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

TEMA XII

Resonancia magnética. Resonancia magnética nuclear. Corrimientos químicos. Acoplamientos. Relajación de espín. Resonancia de espín del electrón.

TEMA XIII

Termodinámica estadística. Distribución de los estados moleculares. Configuraciones y pesos. Distribución de Boltzmann. La función de partición molecular. Interpretación. Energía interna. Entropía estadística. Información termodinámica en la función de partición.

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: Problemas de aplicación.

Práctica demostrativa de microscopía electrónica.

Tema II: Problemas de aplicación.

Lab. Computacional: partícula en una caja, oscilador armónico.

Tema III: Problemas de aplicación. Visualización de funciones y densidades en dos y tres dimensiones.

Tema IV: Problemas de aplicación. Visualización de funciones y densidades en dos y tres dimensiones.



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

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

Republica Argentina

"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 223/2022 – EXP-EXA N° 8.134/2011

Tema V: Problemas de aplicación.

Lab. Computacional: empleo del método de Hartree-Fock para el cálculo de energías de iones helioides. Presentación de informe.

Tema VI: Problemas de aplicación.

Lab. Computacional: Visualización de la forma molecular empleando programas de modelado molecular.

Tema VII:

Lab. Computacional: 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 de la molécula de hidrógeno obtenidos a partir de las aproximaciones OM y EV. Presentación de informe. Visualización de orbitales moleculares de moléculas diatómicas empleando programas específicos (HyperChem, Gabedit u otros).

Tema VIII: Problemas de aplicación.

Tema IX: Problemas de aplicación. Visualización de espectros.

Tema X: Problemas de aplicación.

Laboratorio experimental: obtención del espectro IR de alta resolución de HF y CO gaseosos, cálculo de R_e a partir del espectro. Presentación de informe.

Análisis de espectros IR y Raman de moléculas poliatómicas, asignación de bandas. Comparación con los espectros teóricos predichos a partir de la simetría molecular.

Tema XI: Problema de aplicación.

Laboratorio experimental: obtención de espectros UV-visible de moléculas gaseosas. Presentación de informe.

Tema XII: Espectroscopía de resonancia magnética. Problemas de aplicación.

Tema XIII: Problemas de aplicación.

Bibliografía:

Physical Chemistry, P. Atkins, W. H Freeman, Addison-Wesley Iberoamericana New York, 1986.

Physical Chemistry: Quanta, matter and change. P. Atkins, J. de Paula, R. Friedman, Oxford University Press, segunda edición. 2014.

Quantum Chemistry, Donald McQuarrie, University Science Books, 2008.

Physical Chemistry. A molecular approach, D. McQuarrie, University Science Books, 1997.

Rescud
[Signature]



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina

"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 223/2022 – EXP-EXA N° 8.134/2011

Química Cuántica, I. Levine, AC, Madrid, 1977.

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.

Fuerzas intermoleculares, Díaz Peña, Mateo, OEA

Molecular Spectroscopy, I. Levine, John Wiley and Sons.

Symmetry and spectroscopy, Harris, Daniel C., Dover Publications

Modern spectroscopy, Hollas, J. Michael, John Wiley and Sons

Molecular spectra and molecular structure, Herzberg, Gerhard

Statistical mechanics, McQuarrie, Donald A., University Science Books (archivo)

Termodinámica Estadística, M. Diaz Peña, Alhambra, Madrid, 1979.

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 3 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.

Profesora responsable:

Alf. S. S. S. S. S., E.

DR. MARÍA RITA MARTEARENA
SECRETARÍA ACADÉMICA Y DE INVESTIGACIÓN
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSA



Ing. DANIEL HOYOS
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSA