



*Universidad Nacional de Salta*

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

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

Republica Argentina

SALTA, 22 de Abril de 2.009

**Exp-Exa: N° 8.134/2009**

**RESD-EXA: N° 129/09**

**VISTO:**

La presentación realizada por la Dra. Emilce Ottavianelli, solicitando la ratificación del Programa vigente de la asignatura "**Fisicoquímica II**" para la carrera de Licenciatura en Química Plan 1997, que fuera aprobado por Res. CD 193/01;

**CONSIDERANDO:**

Que el citado Programa, obrante en las presentes actuaciones, fue sometido oportunamente a la opinión de la Comisión de Carrera correspondiente y de la Comisión de Docencia e Investigación;

POR ELLO y en uso de las atribuciones que le son propias;

**EL DECANO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS  
(Ad-referéndum del Consejo Directivo)**

**R E S U E L V E:**

**ARTÍCULO 1°:** Ratificar a partir del período lectivo 2009, el Programa Analítico de la asignatura "**FISICOQUÍMICA II**", para la carrera de Licenciatura en Química Plan 1997, que como Anexo I forma parte de la presente Resolución.

**ARTÍCULO 2°:** Hágase saber al Departamento de Química, a la Comisión de Carrera de Licenciatura en Química, a la Dra. Emilce Ottavianelli, al Departamento Archivo y Digesto, elévese copia al Consejo Directivo para su homologación y siga a la Dirección de Alumnos para su toma de razón, registro y demás efectos. Cumplido, ARCHÍVESE.

RGG

**Prof. MARIA ELENA HIGA  
SECRETARIA ACADEMICA  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS**



**Ing. NORBERTO ALEJANDRO BONINI  
DECANO  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS**



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

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

República Argentina

**ANEXO I de la RESD-EXA: N° 129/09 - Exp-Exa: N° 8.134/2009**

Asignatura: **FISICOQUÍMICA II.**

Carrera: *Licenciatura en Química*

Profesor Responsable: *Dra. Emilce Ottavianelli*

Docente de Prácticas: *Lic. Mariela Finetti*

Plan: 1997

**1. PROGRAMA ANALITICO**

TEMA I

Teoría cuántica. Hipótesis de De Broglie. Principio de Incertidumbre. Ondas de Materia. Postulados de la Mecánica Cuántica. Probabilidad y Densidad de probabilidad. Operadores y Observables. Ecuación de Schroedinger Temporal y Estacionaria. Valores Medios.

TEMA II

Movimiento de Traslación: Partícula en una caja. Solución en una, dos y tres dimensiones. Degeneración. Movimiento de Vibración: Oscilador armónico lineal. Vibración de una molécula diatómica.

Movimiento de Rotación: Momento angular. Operador momento angular y sus componentes. Incertidumbre en la determinación simultánea. Armónicos esféricos. Rotor rígido de una y dos partículas. Rotor de varias partículas.

TEMA III

Estructura atómica. Átomo de Hidrógeno. Niveles de energía. Función de onda radial y angular. Funciones de onda reales. Orbitales atómicos, representaciones. Átomos hidrogenoides. Átomo de Helio.

Soluciones aproximadas. Método variacional. Método de perturbaciones.

Espín electrónico. Indistinguibilidad. Principio de Pauli. Átomos Polieletrónicos. Método del Campo Autoconsistente de Hartree – Fock. Momentos angulares de espín y totales de átomos polieletrónicos. Reglas de Hund. Momentos magnéticos orbital y de espín. Interacción con un campo magnético – efecto Zeeman. Interacción espín - órbita. Reglas de selección de espín. Espectros atómicos.

TEMA IV

Estructura Molecular. Aproximación de Born – Oppenheimer. Molécula ión – hidrógeno. Moléculas diatómicas. Método de Combinación Lineal de Orbitales Atómicos. Moléculas diatómicas heteronucleares. Moléculas Poliatómicas.

TEMA V

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

Método de Huckel. Moléculas conjugadas. Hidrocarburos cíclicos. Índices de reactividad.

//..



*Universidad Nacional de Salta*

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

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

Republica Argentina

-2- ../

**ANEXO I de la RESD-EXA: N° 129/09 - Exp-Exa: N° 8.134/2009**

TEMA VI

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. Uso de la teoría de grupos.

Espectro de rotación pura. Moléculas rígidas, lineales, trompo esféricas y trompo simétricas. Espectros rotacionales Raman.

TEMA VII

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. Determinación de las especies de simetría de los modos normales por teoría de grupos y su actividad en IR o Raman. Estructura rotacional de las bandas en moléculas poliatómicas lineales, bandas paralelas y perpendiculares.

TEMA VIII

Espectros electrónicos. Transiciones. Estructura vibracional. Disociación y predisiociación. Fluorescencia y fosforescencia. Transiciones entre estados singletes y tripletes.

TEMA IX

Resonancia magnética. Resonancia magnética nuclear. Corrimientos químicos. Relajación de espín. Resonancia de espín – electrón.

TEMA X

Termodinámica estadística. Estadísticas de Fermi – Dirac, Bose – Einstein y Maxwell – Boltzmann. Macroestados y microestados. Distribución más probable. Entropía y probabilidad. Función de partición y funciones termodinámicas.

TEMA XI

Fuerzas intermoleculares. Interacciones electrostáticas entre iones, dipolos y cuádrupolos. Polarizabilidad, dipolos inducidos. Fuerzas de dispersión de London. Ecuación de Mie y Lennard – Jones.

TRABAJOS PRÁCTICOS

Los trabajos prácticos consisten en el desarrollo de problemas de los temas del Programa como también en el uso de programas de cálculo y de diseño molecular.

//..



*Universidad Nacional de Salta*

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

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

Republica Argentina

-3- ././

**ANEXO I de la RESD-EXA: N° 129/09 - Exp-Exa: N° 8.134/2009**

**BIBLIOGRAFÍA**

- Química Cuántica, I.Levine, AC, Madrid, 1977.
- Espectroscopía Molecular, I.Levine, AC, Madrid, 1980.
- 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.
- Physical Chemistry, P.Atkins, W.Freeman, New York, 1986.
- Introduction to Molecular Spectroscopy, G.Barrow, McGraw – Hill, New York, 1962.
- Elementary Quantum Chemistri, F. Pilar McGraw – Hill 1968.
- Quantum Chemistry, J.Lowe, Academic Press, New York, 1978.
- Quantum Chemistry, D. McQuarrie, University Science Books, 1983.
- Molecular Quantum Mechanics, P.Atkins, Oxford University Press, London, 1983.
- Physical Methods in Chemistry, R.Drago, Saunders Company, 1977.
- Introduction to Quantum Chemistry, C.Gatz, C.Merrill Publishing Company, Ohio.
- Termodinámica Estadística, M. Diaz Peña, Alhambra, Madrid, 1979.

rgg

**Prof. MARIA ELENA HIGA**  
SECRETARIA ACADEMICA  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS



**Ing. NORBERTO ALEJANDRO BONINI**  
DECANO  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS