

# Fisicoquímica II para Licenciatura en Química

## Características de la asignatura

- Carrera(s) para las que se ofrece en forma obligatoria (código): Licenciatura en Química, plan 2013 (Q0202)
- Régimen de Cursada (cuatrimestral o anual): cuatrimestral
- Carga horaria semanal y total: 8/128
- Características de la materia: materia del primer cuatrimestre del tercer año de la carrera de Licenciatura en Química, plan 2013. Los requisitos para una cursada exitosa son los conocimientos adquiridos en los cursos de Análisis Matemático I y II y Física I y II de los primeros dos años de la carrera.
- Objetivos generales y específicos: los objetivos de la materia son proveer a las/os alumnas/os de la carrera de los conocimientos básicos de la mecánica cuántica y de su aplicación a problemas de interés en química, al mismo tiempo que se busca ampliar los conocimientos de herramientas matemáticas más avanzadas.
- Propósitos: en general, esta materia presenta complicaciones para las/os alumnas/os dado su contenido matemático y su carácter abstracto. Los docentes de la cátedra estamos comprometidos con facilitar la comprensión de la asignatura mediante una fuerte interacción docente-alumna/o.
- Propuesta metodológica: la materia tiene una estructura en la que las clases teóricas y la resolución de problemas de seminario están íntimamente relacionadas. Las clases teóricas se dan mediante diapositivas, las cuales son facilitadas a las/os alumnas/os con anterioridad, al igual que el seminario de problemas. Para la resolución de este último se propone una dinámica grupal, invitando a las/os alumnas/os a pasar al frente a discutir los problemas. Todo el material está disponible en la página web de la cátedra, así como un foro de consulta por tema en el cual las/os alumnas/os pueden volcar sus dudas, que son respondidas por las/os docentes de la cátedra. La materia no ofrece redictado en el segundo cuatrimestre.
- Evaluación: las evaluaciones se dan en forma de parciales escritos, dos parciales, con sus respectivas segundas fechas, más una fecha flotante que aprovechan quienes aprobaron un parcial solamente.
- Bibliografía: la materia está basada en el libro de P Atkins y J De Paula, Química Física, 8va edición (2008). Algunos temas pueden ser ampliados utilizando los textos de I Levine, Química Cuántica, 5ta edición (2001), o P Atkins y R Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 5ta edición (2011) (en inglés)

## **Programa analítico (desde el año 2021 a la fecha)**

- I. Teoría Cuántica: Introducción y Principios - Los orígenes de la Mecánica Cuántica, falencias de la Mecánica Clásica, introducción del concepto de cuantización de la energía, introducción a los operadores, autofunciones y autovalores, principios de la Mecánica Cuántica
- II. Teoría Cuántica: Técnicas y Aplicaciones - Movimiento traslacional, vibracional y rotacional, resolución de sistemas sencillos y análisis de las soluciones
- III. Estructura y Espectros Atómicos - Estructura y espectros de átomos hidrogenoides, estructura y espectros de átomos plurieléctricos, métodos de Hartree-Fock y Hartree-Fock-Roothaan, soluciones aproximadas, Principio Variacional, Teoría de Perturbaciones Independiente del Tiempo
- IV. Estructura Molecular - Aproximación de Born-Oppenheimer, teoría de orbitales moleculares como combinación lineal de orbitales atómicos en el marco del método de Hartree-Fock-Roothaan, simetría de los orbitales moleculares para moléculas poli-atómicas
- V. Simetría Molecular - Elementos de simetría de los objetos, tablas de caracteres, operadores de proyección, uso de la simetría para construir combinaciones lineales de orbitales atómicos adaptadas por la simetría
- VI. Espectros Rotacionales - Aspectos generales de la Espectroscopia, Teoría de Perturbaciones Dependiente del Tiempo, probabilidad de transición, tipos de rotores, espectros de rotación pura en moléculas diatómicas, espectros de rotación Raman en moléculas diatómicas, reglas de selección para transiciones rotacionales
- VII. Espectros Vibracionales - Aproximación armónica, correcciones por anarmonicidad, potencial de Morse, vibraciones de moléculas diatómicas, acoplamiento de los modos rotacionales y vibracionales en moléculas diatómicas, vibraciones de moléculas poli-atómicas, reglas de selección para transiciones vibracionales, predicción de modos normales usando Teoría de Grupos
- VIII. Espectros Electrónicos - Características de las transiciones electrónicas, características de los estados electrónicos excitados, factor de Franck-Condon, acoplamiento vibracional-electrónico, reglas de selección para transiciones electrónicas, predicción de la observación de transiciones electrónicas usando Teoría de Grupos
- IX. Resonancia Magnética - El efecto de los campos magnéticos sobre los electrones y los núcleos, Resonancia Magnética Nuclear, Resonancia de Espín Electrónico, desplazamiento químico, constante de apantallamiento, constante de acoplamiento de espín y su uso para predecir multipletes en espectros RMN

- X. Termodinámica Estadística - Conceptos, distribución de estados moleculares, funciones de partición en sistemas sencillos, energía interna y entropía, función de partición canónica, relaciones fundamentales entre funciones macroscópicas y microscópicas, aplicaciones al equilibrio químico