**FORMULARIO PARA LA PRESENTACIÓN DE PROGRAMAS DE ASIGNATURAS**

**Año Lectivo 2025**

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE RÍO CUARTO**

**FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, FISICOQUÍMICAS Y NATURALES**

**DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

**CARRERA/S:** LICENCIATURA EN QUÍMICA

**PLAN DE ESTUDIOS:** 2022

**ASIGNATURA: FISICOQUÍMICA I CÓDIGO: 3823**

**MODALIDAD DE CURSADO:** Presencial

**DOCENTE RESPONSABLE:** Carlos A. Chesta, Dr. en Cs. Químicas, Profesor Titular, DE

**EQUIPO DOCENTE:** Rodrigo E. Palacios, Dr. En Cs. Químicas, Profesor Adjunto, DE

María A. Molina, Dra. en Cs. Químicas, Ayudante de 1ra, SE

**RÉGIMEN DE LA ASIGNATURA:** cuatrimestral

**UBICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIO:** 3 año, segundo cuatrimestre

**RÉGIMEN DE CORRELATIVIDADES:**

Asignaturas aprobadas: Matemática III (3806)

Asignaturas regulares: Física II (3811) y Estadística (3809)

**CARÁCTER DE LA ASIGNATURA:** Obligatoria

**CARGA HORARIA TOTAL:** 140 horas

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Teóricas:** | **56 hs** | **Prácticas:** | **84 hs** | **Teóricas -Prácticas:** | **0 hs** | **Laboratorio:** | **0 hs** |

**CARGA HORARIA SEMANAL:** 10

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Teóricas:** | **4 hs** | **Prácticas:** | **6 hs** | **Teóricas -Prácticas:** | **0 hs** | **Laboratorio:** | **0 hs** |

1. **CONTEXTUALIZACIÓN DE LA ASIGNATURA**

La asignatura se dicta en el segundo cuatrimestre del 3er año de la carrera. El desarrollo de los contenidos de la Fisicoquímica I permite que los estudiantes se familiaricen con conceptos básicos de química cuántica, los cuales facilitan en gran medida la comprensión de temas que se discuten posteriormente en Fisicoquímica II y III y en la Química Orgánica III.

A fin de cursar esta asignatura los estudiantes deben haber obtenido una fuerte formación matemáticas, estadística y física, pre-requisitos que se manifiestan en las correlatividades establecidas.

1. **OBJETIVOS PROPUESTOS**

El principal objetivo de la asignatura es lograr que los estudiantes se familiaricen con los principios básicos de la química cuántica y puedan aplicarlos en la resolución de problemas prácticos de fisicoquímica. A tal fin, los estudiantes serán muñidos de herramientas simples que les permita comprender fenómenos tales como la discretización de la energía, la unión química, propiedades moleculares y los principios de las espectroscopias modernas.

1. **EJES TEMÁTICOS ESTRUCTURANTES DE LA ASIGNATURA Y ESPECIFICACIÓN DE CONTENIDOS**

**3.1. Contenidos mínimos**. Elementos de Mecánica Cuántica. Mecánica cuántica de algunos sistemas simples: partícula en la caja, oscilador armónico y rotor rígido. Solución del átomo de hidrógeno. Teorema variacional. Teoría de las perturbaciones. Principio de exclusión de Pauli y spin electrónico. Átomos polielectrónicos. El método de Hartree-Fock. Uniones químicas. La aproximación de Born-Oppenheimer. Moléculas diatómicas homo y heteronucleares. Métodos de cálculo ab initio y semiempíricos. Teoría del funcional de densidad. Introducción a la espectroscopia molecular. Reglas de selección. El Principio de Franck-Condon. El espectro electrónico, rotacional y vibracional.

**3.2. Ejes temáticos o unidades**

**1- Introducción a la Teoría Cuántica.** Teoría de Planck. Hipótesis de De Broglie. Ondas de materia. Principio de incertidumbre de Heisenberg. Definición de los operadores mecano-cuánticos. La ecuación de Schrödingerdependiente e independiente del tiempo.El operador Hamiltoniano, autofunciones, autovalores y conmutabilidad de operadores. Valor medio de un observable. Ortogonalidad de las funciones de onda. Resolución de la ecuación de Schrödingerpara sistemas sencillos. La partícula en una caja. El oscilador armónico unidimensional. Momento Angular (L).

**2- Átomos Hidrogenoides**. Ecuación de Schrödinger para el sistema electrón-núcleo. Energía potencial de origen electrostático. Resolución de la ecuación de Schrödinger para átomos hidrogenoides. Separación de las funciones radiales y angulares. Función radial y número cuántico principal. Concepto de orbital. Niveles de energía y degeneración. Representación gráfica de las funciones radiales. Número de nodos. Funciones de onda completas del átomo de hidrógeno. Distintas representaciones gráficas de orbitales.

**3-** **Métodos aproximados para la resolución de la ecuación de Schrödinger**. El teorema variacional. Funciones de prueba variacionales con parámetros ajustables. Funciones variacionales lineales. El determinante secular. Teoría de las perturbaciones para estados no-degenerados y degenerados. El principio de indistinguibilidad. Efecto de una perturbación sobre estados degenerados. El método del campo autoconsistente de Hartree-Focks. Simplificación de la resolución del Hamiltoniano de multi-partículas al problema de una partícula en un campo de energía potencial fijo. El método iterativo y la búsqueda de autoconsistencia. HF-SCF variante de Roothann.

**4- Átomos polielectrónicos**. El átomo de helio: estado fundamental. Tratamiento variacional. Tratamiento perturbacional. Tratamiento de Hartree-Fock (HF-SCF). Estados excitados del átomo de helio. Tratamiento variacional. Obtención de las funciones de onda de orden cero correctas. Correcciones de primer orden a la energía de los estados excitados. Diagrama de correlación para el átomo de helio. Principio de exclusión de Pauli. Multiplicidad de los estados del átomo de He. El determinante de Slater. El átomo de litio. Especies de capa cerrada, capa abierta y multiplicidad de estados. Regla de Hund. El acoplamiento spin-orbita. Bases atómicas. El Hamiltoniano atómico completo. Cálculos Ab-Initio. Bases atómicas. Funciones tipo Gaussianas (GTF). Correlación electrónica e interacción de configuraciones (CI). Energía de los OA en átomos polielectrónicos.

**5- Orbitales moleculares. Enlace químico.** La aproximación de Born-Oppenheimer. La molécula de H2+. Métodos aproximados para calcular orbitales moleculares. CLOA: Combinación Lineal de Orbitales Atómicos. Estado fundamental de H2+. Tratamiento variacional. Estados excitados de H2+. Solución de la función de onda nuclear. Tratamiento restringido (RHF) SCF-HF para moléculas. Configuraciones electrónicas y multiplicidad de los OM. Interacción de configuraciones (CI). Moléculas biatómicas homonucleares y heteronucleares. Tratamiento General para moléculas poliatómicas. Propiedades moleculares. Orbitales localizados. Densidad de probabilidad electrónica. Momento bipolar. Métodos de cálculos semiempíricos. El método de Hückel. Otros métodos semiempíricos. Teoría del funcional de densidad (DFT). Funciones y Funcionales. Energía molecular y su funcional de la densidad. Los teoremas de Hohenberg y Kohn. Funcionales híbridos.

**6- Fundamentos de espectroscopía.** La ecuación de Schroedinger dependiente del tiempo**.** Teoría de las perturbaciones dependiente del tiempo. Tratamiento General.Interacción de la radiación electromagnética con partículas cargadas.Transición entre estados. Momento de transición yreglas de selección**.** Aproximación de Franck-Condon**.** Diagrama de Jablonskii.

1. **ACTIVIDADES A DESARROLLAR**

Durante el cuatrimestre los estudiantes contarán con clases teóricas donde se discuten los conceptos básicos de la asignatura y clase prácticas donde se aplican dichos conceptos a la resolución de problemas de la temática.

**CLASES TEÓRICAS:** 2 clases semanales de 2 horas c/u.

**CLASES PRÁCTICAS:** 2 clases semanales de 3 horas c/u.

**CLASES DE TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO:** no corresponde

**OTRAS:** ninguna

1. **PROGRAMAS Y/O PROYECTOS PEDAGÓGICOS INNOVADORES E INCLUSIVOS**

Ninguno

1. **CRONOGRAMA TENTATIVO DE CLASES E INSTANCIAS EVALUATIVAS**

No corresponde

1. **BIBLIOGRAFÍA**

**7.1. Bibliografía obligatoria y de consulta**

Textos Generales de Fisicoquímica con una buena introducción a la mecánica cuántica

Levin, I. N. – *Química Cuántica*. 7ma ed.-Pearson Education, 2014.

Atkins, A. *Físicoquímica*, 12ava. ed.- OUP Oxford, 2022.

McQuarrie, D. *Quantum Chemistry.*2da ed.-University Science Books, 2007.

Levin, I. N. – *Química Cuántica*. 5ta ed., Editorial Prentice Hall, 2001.

Atkins, A. Físicoquímica, 8ra. ed., Editorial Medica Panamericana, 2008.

Adamson, A.- *Textbook of Physical Chemistry*. 4ta. ed., Editorial Academic Press, 1979.

Daniels, F y Alberty, R. A. – *Fisicoquímica,* Editorial Continental, 1977.

Castellan, G. W. *– Fisicoquímica*, Editorial Wesley Iberoamericana, 1987.

Textos de química cuántica de nivel adecuado al curso

D. McQuarrie - *Quantum Chemistry -* University Science Books, 1983 (También contiene capítulo de espectroscopía molecular adecuado al curso).

Levine, I. N. - *Quantum Chemistry* - Allyn and Bacon. (hay traducción)

Streitwieser, A. -  *Molecular orbital theory for organic chemists* - Wiley, NY, 1961.

Pauling, L. and Wilson, E. B. - *Introduction to quantum mechanics* - Mcgraw Hill, NY, 1935.

Lowe, J.P. - *Quantum Chemistry - 2nd Edition -* Academic Press, NY, 1993.

Simons, J. and Nichols, J. - *Quantum Mechanics in Chemistry -* Oxford University Press, NY, 1997 (Más avanzado que los anteriores)

Textos de Espectroscopía molecular:

Barrow, G. - *Introduction to Molecular Spectroscopy* - McGraw Hill, NY 1962.

LeBarrow, G. - *Introduction to Molecular Spectroscopy* - McGraw Hill, NY 1962.

(algo más avanzado, hay traducción).

**7.2. Otros: materiales audiovisuales, enlaces, otros.**

1. **DÍA Y HORARIOS DE CLASES**

Teóricos: jueves y viernes 14-16 h

Prácticos de aula: jueves y viernes de 9-12 h

1. **DÍA Y HORARIO DE CLASES DE CONSULTAS**

Lunes 10-12 h

1. **REQUISITOS PARA OBTENER LA REGULARIDAD Y LA PROMOCIÓN**

La asignatura no es promocionable.

Se requiere asistencia del 80% a las clases de prácticas de aula. Además, los estudiantes deberán aprobar, en primera o segunda instancia, 3 (tres) exámenes parciales durante el cuatrimestre con un 50% de los puntos. Cada parcial tendrá una oportunidad de recuperación al final del cuatrimestre.

1. **CARACTERÍSTICAS, MODALIDAD Y CRITERIOS DE LAS INSTANCIAS EVALUATIVAS**

En todos los casos las evaluaciones poseen carácter individual.Los exámenes parciales son de carácter escrito. El examen final es de carácter oral. La asignatura puede rendirse en condición de libre. En esta instancia evaluativa el alumno debe mostrar su capacidad para analizar e integrar los temas tratados durante el curso.

****

**Firma Profesor/a Responsable Firma Secretario/a Académico/a**