



Universidad Nacional de Córdoba
FACULTAD DE MATEMÁTICA ASTRONOMÍA Y FÍSICA



UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA
Facultad de Matemática, Astronomía y Física

PROGRAMA DE CURSO DE POSGRADO

TÍTULO: Química para físicos.	
AÑO: 2018	CUATRIMESTRE: 1ero
CARGA HORARIA: 60 horas	No. DE CRÉDITOS:
CARRERA/S: Doctorado en física.	
DOCENTE ENCARGADO: Dra. María Cecilia Gimenez	

Fundamentación y objetivos.

Debido a que los trabajos de investigación tienden a ser cada vez más interdisciplinarios y que hay muchas áreas de estudio de la física que requieren conocimientos de Química, este curso se propone brindar a los físicos los conocimientos necesarios para abordar problemas de Fisico-Química.

PROGRAMA

- 1.- Principios básicos de Química.** Repaso de conceptos básicos. Breve reseña histórica. Elementos. Teoría atómica. Número atómico, número de masa e isótopos. Formulación de compuestos. Nomenclatura. Unidades de medición en química. Composición porcentual. Soluciones: unidades de concentración.
- 2.- Estructura del átomo.** El átomo de hidrógeno. Función de onda radial. Funciones de onda angulares. Simetría de los orbitales. Energía de los orbitales. El átomo polieletrónico. El espín del electrón y el principio de Pauli. El principio de Aufbau. Configuración electrónica de átomos plurielectrónicos. Enlace covalente de moléculas diatómicas homo- y hetero-nucleares.
- 3.- Reacciones químicas.** Concepto de Mol. Número de Avogadro. Estequiometría. Exceso y defecto. Reactivo limitante. Rendimiento de reacción.



4.- Tendencias periódicas. Radio atómico. Energía de ionización. Afinidad electrónica. Electronegatividad. Propiedades periódicas.

5.- Enlaces químicos e interacciones intermoleculares. Tipos de enlace. La regla del octeto y las estructuras de Lewis. Enlace iónico. Enlace Covalente. Forma molecular. Propiedades moleculares: momento dipolar y energías de enlace. Predicción de la Forma Molecular. Fuerzas Intermoleculares. Dipolo- dipolo. Ion-Dipolo. Fuerzas de Dispersión. Enlaces Puente Hidrógeno.

6.- Termoquímica. Ley de Hess. Entalpía de formación y de combustión. Cálculo de la entalpía de reacción a partir de entalpías de formación de reactivos y productos.

7.- Electroquímica. Reacciones de óxido reducción. Balanceo de ecuaciones por el método del ión-electrón. Tabla de potenciales de electrodo. Criterios de espontaneidad de una reacción.

8.- Cinética Química. Cinética de las reacciones. Medida de las velocidades de reacción. Integración de las ecuaciones cinéticas. Reacciones de primer orden. Reacciones de segundo orden. Reacciones de grado n. Determinación de las ecuaciones cinéticas. Ecuaciones cinéticas y constantes de equilibrio de reacciones elementales. Mecanismos de reacción. Ley de Arrhenius.

9.- Método de Monte Carlo Dinámico. Algoritmo de Gillespie. Aplicación del método para estudiar cinética de reacciones químicas. Aplicación del método para estudiar adsorción y difusión de partículas sobre superficies.

10.- Equilibrio químico. Reacciones reversibles, equilibrio dinámico. Constante de equilibrio de una reacción química. Cálculos de equilibrio. Principio de le Chatelier. Equilibrios iónicos en soluciones acuosas. Equilibrios de disociación. Ácidos y bases. Conceptos de Arrhenius, de Bronsted-Lowry y de Lewis. Equilibrio ácido-base. Producto iónico del agua, escala de pH y pOH. Grado de disociación, ácidos y bases fuertes y débiles. Cálculos de pH.

11.- Nociones básicas de química orgánica. Alcanos. Reacciones de los alcanos. Isomería óptica de alcanos sustituidos. Cicloalcanos. Alquenos. Alquinos. Hidrocarburos aromáticos. Alcoholes. Éteres. Aldehídos y cetonas. Ácidos carboxílicos. Esteres. Aminas.

Laboratorios:

1.- Normas de seguridad en el laboratorio. Preparación de soluciones con diferentes concentraciones.

2.- Titulaciones ácido-base y Redox.



3.- Electroquímica. Reacciones de desprendimiento de hidrógeno y formación de oxígeno. Voltamperogramas.

4.- Computación. Método de Monte Carlo Dinámico.

BIBLIOGRAFÍA

R. Chang, "Química" 6ta Ed., McGraw Hill, México, (1999)

P.W. Atkins , "Química General", Trad. española,, Ediciones Omega, Barcelona, (1992).

Shriver and Aktins, "Inorganic Chemistry", quinta edición.

Mahan/Myers, "Química, curso universitario", Cuarta Edición. Addison-Wesley Iberoamericana.

Ira N. Levine. "Físico-Química", tercera edición.

James E. Huheey, Ellen A. Keiter, Rihard L. Keiter, "Química Inorgánica. Principios, estructura y reactividad." Oxford.

Sheldon M. Ross, Simulation, 2da edición, Prentice Hall, México, 1999.

A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions. D. T. Gillespie, J. Comput. Phys., 22 (1976) 403.

METODOLOGÍA DE TRABAJO.

15 clases de cuatro horas semanales (2 de teórico y 2 de práctico).

4 laboratorios (optativos para postgrado).

MODALIDAD DE LA EVALUACIÓN.

Regularidad: Asistencia al 70% de las clases.

Promoción: Asistencia al 80% de las clases y aprobación de dos evaluaciones parciales (con calificación 7 o más).

Posibilidad de rendir examen final para alumnos regulares.