



Universidad
Nacional
de Córdoba



Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP-UNC 0029492/2019

Anexo de la RCD FAMAF 193/2019, página 53 de 66

TÍTULO: Química para físicos			
AÑO: 2019	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: según carrera	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 45 horas de teoría y 45 horas de práctica.			
CARRERA/S: Doctorado en Astronomía, 1 crédito. Doctorado en Física, 2 créditos.			

FUNDAMENTOS

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 Físico-Química.

OBJETIVOS

- Aprender nociones de Química General, Inorgánica y Físico-Química.
- Nociones básicas de laboratorios de Química.
- Aproximación a resolver algunos problemas de Físico-Química con herramientas de simulación computacional.

PROGRAMA

Unidad 1: Principios básicos de Química.

Repaso de conceptos básicos. Breve reseña histórica. Elementos y compuestos. Teoría atómica. Modelo atómico de Bohr. Número atómico, número de masa e isótopos. Formulación de compuestos. La tabla periódica. Nomenclatura.

Unidad 2: Reacciones químicas.

Masa atómica. Concepto de Mol. Número de Avogadro. Masa molecular. Unidades de medición en química. Composición porcentual. Reacciones y ecuaciones químicas. Balanceo de ecuaciones químicas. Estequiometría. Exceso y defecto. Reactivo limitante. Rendimiento de reacción. Soluciones: unidades de concentración.

Unidad 3: 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. Teoría de los orbitales moleculares. Enlace covalente de moléculas diatómicas homo- y hetero-nucleares.

Unidad 4: Tendencias periódicas.

Radio atómico. Energía de ionización. Afinidad electrónica. Electronegatividad. Propiedades periódicas (basicidad de óxidos, etc.).

Unidad 5: Enlaces químicos e interacciones intermoleculares.

Tipos de enlace. La regla del octeto y las estructuras de Lewis. Enlace iónico. Ciclo de Born-Haber. Enlace Covalente. Forma molecular. Propiedades moleculares: momento dipolar

df



Universidad
Nacional
de Córdoba



Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP-UNC 0029492/2019

Anexo de la RCD FAMAF 193/2019, página 54 de 66

y energías de enlace. Concepto de resonancia. Predicción de la Forma Molecular. Fuerzas Intermoleculares. Dipolo- dipolo. Ion- Dipolo. Fuerzas de Dispersión. Enlaces Puente Hidrógeno.

Unidad 6: 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.

Unidad 7: 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.

Unidad 8: 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. Reacciones endotérmicas y exotérmicas.

Unidad 9: 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. Celdas electroquímicas. Pilas Galvánicas. Ecuación de Nernst.

Unidad 10: Método de Monte Carlo Dinámico.

Métodos Monte Carlo. Diferencias entre Monte Carlo Metrópolis y 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.

Unidad 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.

PRÁCTICAS

- 1.- Normas de seguridad en el laboratorio. Preparación de soluciones con diferentes concentraciones.
 - 2.- Titulaciones ácido-base y Redox.
 - 3.- Computación. Monte Carlo.
 - 4.- Computación. Método de Monte Carlo Dinámico.
- Evaluación: presentación de informes.

df



Universidad
Nacional
de Córdoba



Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP-UNC 0029492/2019

Anexo de la RCD FAMAF 193/2019, página 55 de 66

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.

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Regularidad: Asistencia al 70% de las clases y 75% de los laboratorios.
Examen final escrito para aprobar la materia.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos básicos de Física, de Mecánica Cuántica y de Termodinámica. Manejo de Fortran.



df

P