



Universidad
Nacional
de Córdoba



FAMAF
Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP - UNC 40875/2019

RES CD 217/2019

PROGRAMA DE ASIGNATURA	
ASIGNATURA: Química para Físicos	AÑO: 2019
CARACTER: Especialidad	UBICACIÓN EN LA CARRERA: 4° año 2° cuatrimestre
CARRERA: Licenciatura en Física	
REGIMEN: Cuatrimestral	CARGA HORARIA: 120 horas

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 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.

CONTENIDO

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.

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.

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 plurieléctricos. Teoría de los orbitales moleculares. Enlace covalente de moléculas diatómicas homo- y hetero-nucleares.

Tendencias periódicas.

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

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

Cinética Química.



Universidad
Nacional
de Córdoba



FAMAF
Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP - UNC 40875/2019

RES CD 217/2019

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.

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.

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.

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.

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.

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.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

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

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

Shriver and Atkins, "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, Richard L. Keiter, "Química Inorgánica. Principios, estructura y reactividad." Oxford.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

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.

EVALUACIÓN

FORMAS DE EVALUACIÓN



Universidad
Nacional
de Córdoba



FAMAF
Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP - UNC 40875/2019

RES CD 217/2019

Se tomarán dos exámenes parciales y se podrá recuperar un examen parcial.
Habrá dos laboratorios y dos prácticos de computación, con el requerimiento de presentar y aprobar informes.

El examen final es análogo a los exámenes parciales: con ejercicios para resolver similares a los de las guías de prácticos.

REGULARIDAD

1. cumplir un mínimo de 70% de asistencia a clases teóricas, prácticas, o de laboratorio.
2. aprobar al menos el 60% de los Trabajos Prácticos o de Laboratorio.

PROMOCIÓN

1. cumplir un mínimo de 80% de asistencia a clases teóricas, prácticas, o de laboratorio.
2. aprobar todas las evaluaciones parciales con una nota no menor a 6 (seis), y obteniendo un promedio no menor a 7 (siete).
3. aprobar todos los Trabajos Prácticos o de Laboratorio, o el Informe Final de la Práctica de la Enseñanza con una nota no menor a 6 (seis).
4. Aprobar un coloquio.

CORRELATIVIDADES

Para Cursar: (Regularizada)

Métodos Numéricos y Mecánica Cuántica I.

Para Rendir: (Aprobada)

Métodos Numéricos y Mecánica Cuántica I.