



EX-2022-00597456- -UNC-ME#FAMAF

PROGRAMA DE ASIGNATURA	
ASIGNATURA: Química para Física	AÑO: 2022
CARACTER: Especialidad	UBICACIÓN EN LA CARRERA: 4° año 2° cuatrimestre
CARRERA: Licenciatura en Física	
REGIMEN: Cuatrimestral	CARGA HORARIA: 120 horas

FUNDAMENTACIÓN Y OBJETIVOS

Fundamentación: 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. A su vez se brindan nociones de herramientas computacionales ampliamente utilizadas en la actualidad en estas áreas, como cálculos ab-initio y simulaciones de tipo Monte Carlo. Estas herramientas teóricas permiten estudiar diferentes sistemas Físico-Químicos, como sólidos, superficies, moléculas, etc. y también el abordaje de sistemas complejos, con aplicaciones a reacciones químicas, adsorción y difusión sobre superficies, estudios de percolación, modelos de opinión y epidemias.

Objetivos: Brindar conocimientos generales de Química, especialmente Inorgánica y Físico-Química. Al mismo tiempo proveer de algunas nociones básicas de cálculos ab-initio y simulaciones de tipo Monte Carlo y Monte Carlo cinético, con aplicaciones a problemas de Física y Química.

CONTENIDO

Unidad I: 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.

Unidad II: Reacciones químicas.

Concepto de Mol. Número de Avogadro. Estequiometría. Exceso y defecto. Reactivo limitante. Rendimiento de reacción.

Unidad III: 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 IV: Teoría del Funcional de la Densidad electrónica.

Ecuación de Schrodinger. Aproximación de Born-Oppenheimer. DFT. Teoremas de Hohenberg y Kohn. Ecuaciones de Kohn-Sham. Aproximación de densidad local. Ejemplos de aplicación.

Unidad V: Tendencias periódicas.

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

Unidad VI: 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.



EX-2022-00597456- -UNC-ME#FAMAF

Unidad VII: 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 VIII: 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.

Unidad IX: 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 X: 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 XI: Métodos de Monte Carlo y Monte Carlo Dinámico.

Método de aciertos y fallos. Muestreo simple. Muestreo de importancia. Generación de Números aleatorios. Algoritmo de Metrópolis y colaboradores. Modelo de Ising y gas de red.

Ejemplos de aplicación. Algoritmo de Gillespie. Diferencias entre Monte Carlo Metrópolis y Monte Carlo dinámico. Aplicación del método para estudiar cinética de reacciones químicas.

Aplicación del método para estudiar adsorción y difusión de partículas sobre superficies.

Unidad XII: 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, Iberoamericana. Curso universitario", Cuarta Edición. Addison-Wesley
- 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

Durante el cursado se tomará asistencia, se pedirá que entreguen dos ejercicios por guía y se tomarán dos parciales, con la posibilidad de recuperar uno de ellos. Además se solicitarán informes del laboratorio experimental y de los prácticos de computación.



EX-2022-00597456- -UNC-ME#FAMAF

REGULARIDAD

Para regularizar la materia se solicitará:

1. cumplir un mínimo de 70% de asistencia a clases teóricas, prácticas, o de laboratorio.
2. Entregar resueltos al menos dos problemas por guía de ejercicios.
3. Aprobar al menos el 60% de los Trabajos Prácticos o de Laboratorio (aprobar 2 de los tres prácticos especiales, laboratorio y prácticos de computación, con asistencia y entrega de informes).

PROMOCIÓN

Para promocionar la materia se solicitará:

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). Serán dos parciales con la posibilidad de recuperar uno de ellos.
3. Entregar resueltos al menos dos problemas por guía de ejercicios.
4. aprobar todos los Trabajos Prácticos o de Laboratorio (aprobar los tres prácticos especiales, laboratorio y prácticos de computación, con asistencia y entrega de informes).

CORRELATIVIDADES

Para cursar: Física II, Análisis matemático II y Métodos Numéricos (regularizadas).

Para rendir: Física II, Análisis matemático II y Métodos Numéricos (aprobadas).