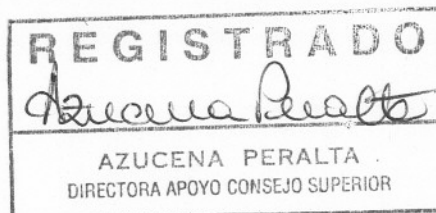




*Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología*  
*Universidad Tecnológica Nacional*  
*Rectorado*



### **APRUEBA CURSO DE POSGRADO DE ACTUALIZACIÓN**

Buenos Aires, 2 de marzo de 2006.

VISTO la Resolución N° 405/05 del Consejo Académico de la Facultad Regional Resistencia, a través de la cual solicita la aprobación y autorización de implementación del Curso de Posgrado de Actualización "Química Física Avanzada", y

#### **CONSIDERANDO:**

Que el Curso propuesto responde a la necesidad de actualización académica de docentes y graduados de la Universidad en el campo de la Química Orgánica y Química Física.

Que la Facultad Regional Resistencia cuenta con un plantel de profesores de elevado nivel académico y profesional, además de una prolongada y amplia experiencia en el dictado de cursos y seminarios vinculados al propuesto.

Que la Comisión de Posgrado de la Universidad ha analizado los antecedentes que acompañan la solicitud y avala la presentación.

Que la Comisión de Enseñanza recomienda su aprobación.

Que el dictado de la medida se efectúa en uso de las atribuciones otorgadas por el Estatuto Universitario.

Por ello,

EL CONSEJO SUPERIOR UNIVERSITARIO DE LA  
UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL



*Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología*  
*Universidad Tecnológica Nacional*  
*Rectorado*

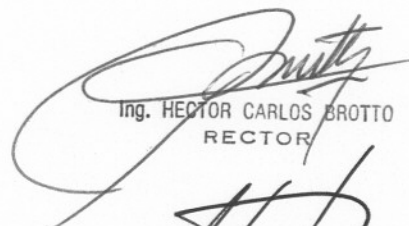
ORDENA:


ARTÍCULO 1°.- Aprobar el currículo del Curso de Posgrado de Actualización "Química Física Avanzada", que figura en el Anexo I y es parte integrante de la presente ordenanza.

ARTÍCULO 2°.- Autorizar el dictado del mencionado Curso en la Facultad Regional Resistencia con el Cuerpo Docente que figura en el Anexo II y es parte integrante de la presente ordenanza.

ARTÍCULO 3°.- Regístrese. Comuníquese y archívese.

ORDENANZA N° 1089

  
Ing. HECTOR CARLOS BROTTTO  
RECTOR

  
Ing. JOSE MARIA VIRGILI  
Secretario Académico y de Plazamiento



*Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología*  
*Universidad Tecnológica Nacional*  
*Rectorado*



**ANEXO I**

**ORDENANZA N° 1089**

## **CURSO DE POSGRADO DE ACTUALIZACIÓN**

### **"QUIMICA FISICA AVANZADA"**

#### **1. Fundamentación**

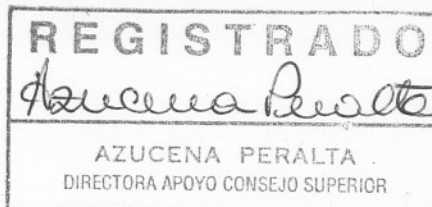
La Química Física es una ciencia teórica y experimental que aplica los métodos y leyes de la física al estudio de los sistemas químicos. Estos pueden estudiarse desde un punto de vista macroscópico o microscópico. En este curso se estudian los procesos microscópicos, teniendo en cuenta el concepto molecular, es estudia la estructura electrónica de átomos y moléculas aplicando las leyes de la mecánica cuántica y los fenómenos fisicoquímicos que derivan de ella, como ser la espectroscopia atómica y molecular.

Actualmente, se reconoce que el extraordinario avance que han tenido en los últimos años disciplinas como Ingeniería Química, Ingeniería Genética, Biología Molecular, Farmacología y Bioquímica, entre otras, se debe en gran parte al hecho de que es posible determinar el comportamiento fisicoquímico de los diversos sistemas a nivel molecular. Resulta así evidente que los profesionales del área de Química deben poseer los conocimientos necesarios que le permitan comprender los problemas fisicoquímicos a este nivel de complejidad.

Los métodos teóricos permiten: calcular propiedades termodinámicas, interpretar los espectros moleculares y con ello determinar propiedades moleculares tales como longitudes y ángulos de enlaces, momentos bipolares, barreras de rotación interna,



*Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología*  
*Universidad Tecnológica Nacional*  
*Rectorado*



estimar las estabildades relativas de los sistemas moleculares, calcular las propiedades de los intermediarios de reacción, investigar mecanismos de reacción, calcular energías de interacción: ligando-receptor, de enlaces de hidrógeno, etc. Como decía la Academia de Ciencias Sueca al otorgar el Premio Nobel de Química en 1998 a W. Kohn y J.A. Pople "la química ha dejado de ser una ciencia puramente experimental". Por ello, un químico que no domine la Química Computacional no responde al perfil de un químico del siglo XXI<sup>1</sup>.

## **2. Objetivos**

- Comprender los principios fundamentales que determinan las propiedades y la reactividad de átomos y moléculas a nivel microscópico.
- Comprender los procesos básicos que dan origen a los distintos tipos de espectroscopia molecular.
- Adquirir habilidades relativas al análisis estructural de moléculas y macromoléculas.
- Adquirir la capacidad práctica de modelar propiedades y espectros moleculares e interpretar el significado químico de los resultados obtenidos.
- Integrar los nuevos conocimientos teóricos y prácticos incorporados en el curso a una situación real concreta.

## **3. Contenidos mínimos**

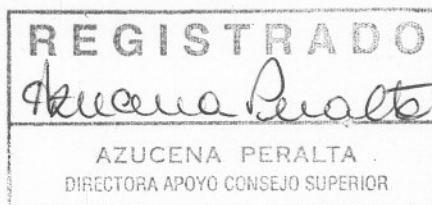
*Unidad Temática I La estructura atómica y molecular a nivel microscópico: Introducción y Principios para el tratamiento del mundo atómico.*

<sup>1</sup> Párrafo extraído del prólogo del Libro: Química Teórica y Computacional: Eds. Juan Andrés y Juan Beltrán.





*Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología*  
*Universidad Tecnológica Nacional*  
*Rectorado*



Rol de la ecuación de Schrödinger en el estudio microscópico de átomos y moléculas.

Operadores de energía cinética y potencial.

Interpretación de Born de la función de onda. Información contenida en la función de onda.

Postulados de la Mecánica Cuántica y principio de incertidumbre de Heisenberg.

Aplicación a un caso concreto.

Cuantificación del movimiento en sistemas simples: a) movimiento trasnacional: modelo de la partícula en una caja, degeneración y efecto túnel. b) Movimiento vibracional: modelo de oscilador armónico c) Movimiento rotacional: modelo de rotor rígido en dos y tres dimensiones. Armónicos esféricos. Cuantización del momento angular. Concepto de Spin.

Forma y soluciones de la ecuación de Schrödinger para átomos hidrogenoides. Concepto de orbital atómico, su representación y relación con los números cuánticos. Orbitales ocupados y virtuales. Degeneración de estados.

*Unidad Temática II. Estructura de átomos polielectrónicos y moléculas poliatómicas.*

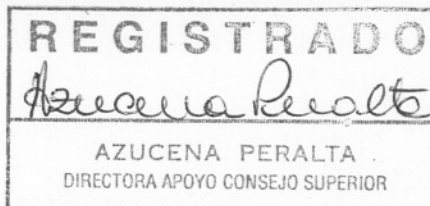
Energías orbitales en átomos polielectrónicos y su relación con los principios de apantallamiento y penetración.

Resolución de la ecuación de Schrödinger para átomos polielectrónicos. Métodos aproximados: Método de perturbaciones. Método variacional. Aproximación de Hartree-Fock. Método del campo autoconsistente SCF. Error de correlación.

Relación entre los orbitales y la función de onda polielectrónica: determinante de Slater. Conexión con el principio de exclusión de Pauli. Multiplicidad de spin. Funciones restringidas y no restringidas.



*Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología*  
*Universidad Tecnológica Nacional*  
*Rectorado*



La aproximación de Born-Oppenheimer y el concepto de superficie de energía potencial. Significado químico de los puntos estacionarios sobre una superficie de energía potencial.

Grandes teorías para explicar la formación del enlace químico y la estructura molecular: teoría del enlace de valencia y teoría de orbitales moleculares (método LCAO). Tipos de orbitales moleculares: clasificación en base a la simetría y al carácter enlazante o antienlazante.

Métodos computacionales disponibles para el estudio de la estructura molecular y propiedades: clásicos (Mecánica Molecular) y cuánticos (ab initio SCF, semiempíricos, post-HF y DFT). Análisis de las ventajas y limitaciones de cada método.

Predicción de propiedades moleculares: estructura geométrica, energías absolutas y relativas, separación entre orbitales HOMO-LUMO, teorema de Koopmans y potenciales de ionización, densidad electrónica total y de spin, cargas atómicas, momento bipolar, potenciales moleculares electroestáticos.

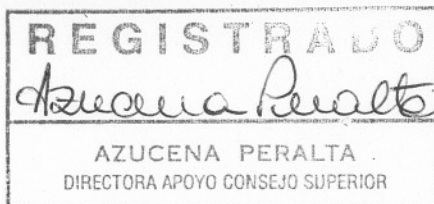
### *Unidad Temática III. Espectroscopia Molecular*

Teoría cuántica de los espectros moleculares. Transiciones entre niveles de energía y tipos de procesos posibles. Tipos de espectroscopia molecular.

Tratamiento de Einstein para la predicción de la intensidad de las señales espectroscópicas. Momento bipolar de transición. Transiciones permitidas y prohibidas. Reglas de selección: origen y consecuencias.

Transiciones entre niveles rotacionales puros: Espectroscopia de microondas. Distorsión centrífuga. Efecto Stark. Espectroscopia Raman rotacional.

Transiciones entre niveles vibracionales: espectroscopia infrarroja. Moléculas diatómicas y anarmonicidad. Moléculas poliatómicas: modos normales de vibración.



*Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología*  
*Universidad Tecnológica Nacional*  
*Rectorado*

Espectros vibrorrotacionales y ramas espectrales.

#### **4. Duración**

SESENTA (60) horas; las cuales incluyen clases expositivas, estudio y análisis de casos.

#### **5. Metodología y Promoción**

La acreditación del curso se realizará mediante una instancia final de evaluación individual y escrita.

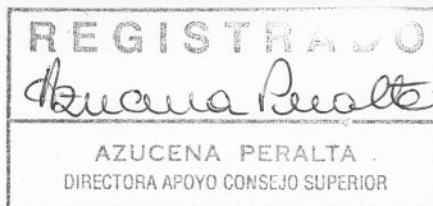
Asistencia, como mínimo, del OCHENTA por ciento (80%) de las clases teórico - prácticas dictadas.

En el desarrollo del curso se brindarán clases teóricas, seminarios de aplicación, seminarios integradores y prácticas en computadoras.

-----



*Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología*  
*Universidad Tecnológica Nacional*  
*Rectorado*



**ANEXO II**

**ORDENANZA N° 1089**

**CURSO DE POSGRADO DE ACTUALIZACIÓN**  
**"QUIMICA FISICA AVANZADA"**  
**EN LA FACULTAD REGIONAL RESISTENCIA**

**CUERPO ACADÉMICO**

- **Nélida María PERUCHENA**

Licenciada en Ciencias Químicas. Universidad Nacional del Nordeste

Doctora en Ciencias Químicas. Universidad de La Plata

Profesora titular dedicación exclusiva. Universidad Nacional del Nordeste

Profesora titular dedicación simple. Universidad Tecnológica Nacional

Docente investigador Categorizado B

Miembro de la carrera del Investigador del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas. Categoría Adjunto.

Director de tesis doctorales y de maestría y Jurado de Tesis de Magíster.

- **Laura Gladis SOSA**

Licenciada en Ciencias Químicas. Universidad Nacional del Nordeste

Doctora en Ciencias Químicas. Universidad de La Plata

Docente con dedicación exclusiva (por concurso) para realizar tareas de investigación.

Profesora Adjunta. Universidad Tecnológica Nacional

Dirección de Becarios de pregrado y posgrado, Directora y Jurado de tesis de Maestría.