



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA
CANCILLERÍA GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

SAN LUIS, 20 NOV 2015

VISTO:

El Expediente EXP-USL: 13079/2015 mediante el cual se solicita la protocolización del Curso de Posgrado: **QUÍMICA FÍSICA AVANZADA**; y

CONSIDERANDO:

Que el Curso de Posgrado se propone dictar en el ámbito de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia del 21 de marzo al 15 de abril de 2016, con un crédito horario de 60 horas presenciales y bajo la coordinación del Dr. Matías **ANDRADA**.

Que la Comisión Asesora de Posgrado de Ciencias Químicas de la Facultad Química, Bioquímica y Farmacia recomienda aprobar el curso de referencia.

Que el Consejo de Posgrado de la Universidad Nacional de San Luis en su reunión del 17 de noviembre de 2015, analizó la propuesta y observa que el programa del curso, bibliografía, metodología de evaluación y docentes a cargo, constituyen una propuesta de formación de posgrado de calidad en su campo específico de estudio.

Que, por lo expuesto, el Consejo de Posgrado aprueba la propuesta como Curso de Posgrado, según lo establecido en Ordenanza CS N° 23/09.

Que corresponde su protocolización.

Por ello y en uso de sus atribuciones

EL RECTOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS

RESUELVE:

ARTÍCULO 1°.- Protocolizar el dictado del Curso de Posgrado: **QUÍMICA FÍSICA AVANZADA**, en el ámbito de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia del 21 de marzo al 15 de abril de 2016, con un crédito horario de 60 horas presenciales.

ARTÍCULO 2°.- Protocolizar el cuerpo docente constituido por: Responsable: Dr. Juan **GARRO MARTÍNEZ** (DNI N° 25.683.945) de la Universidad Nacional de San Luis, Corresponsable: Dr. Francisco Tomás **VERT** (DNI N° 19.403.387) de la Universidad de Valencia – España, Colaboradores: Dra. Estela **GASULL** (DNI N° 12.370.189),

Cpde RESOLUCIÓN R N°

1964

Dr. Félix del Niño Quiroga
Rector
UNSL

Dra. Alicia Marcela Pirri
Secretaria de Posgrado
UNSL



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

Dr. Mario **ESTRADA** (DNI N° 6.817.964), Dr. Matías **SANCHO** (DNI N° 29.222.364),
Dr. Matías **ANDRADA** (DNI N° 26.321.926) todos de esta Casa de Altos Estudios.

ARTÍCULO 3°.- Aprobar el programa del Curso de referencia, de acuerdo al **ANEXO** de la presente disposición.-

ARTÍCULO 4°.- Comuníquese, insértese en el Libro de Resoluciones, publíquese en el Digesto Electrónico de la UNSL y archívese.-

RESOLUCIÓN R N°
mav

1964

Dra. Alicia Marcela Prunista
Secretaria de Posgrado
UNSL

Dr. Felix D. Nieto Quintas
Rector
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA
COPAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

ANEXO

DENOMINACIÓN DEL CURSO: QUÍMICA FÍSICA AVANZADA

UNIDAD ACADÉMICA RESPONSABLE: Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia

CATEGORIZACIÓN: Perfeccionamiento

RESPONSABLE: Dr. Juan GARRO MARTÍNEZ

CORRESPONSABLE: Dr. Francisco Tomás VERT

COLABORADORES: Dra. Estela GASULL, Dr. Mario ESTRADA, Dr. Matías SANCHO,
Dr. Matías ANDRADA

COORDINADOR: Dra. María Roxana MORALES

CRÉDITO HORARIO: 60 horas

MODALIDAD DE DICTADO: Presencial

FECHA DE DICTADO DEL CURSO: 21 de marzo al 15 de abril de 2016

FECHA PREVISTA PARA ELEVAR LA NÓMINA DE ALUMNOS APROBADOS:
Junio de 2016

DESTINATARIOS: Egresados con título de grado universitario en disciplinas afines a la temática del curso. En particular: Licenciados en Química con conocimientos en: Elementos de cálculo diferencia e integral. Elementos de álgebra lineal. Probabilidad y estadística básica. Química física. Termodinámica.

LUGAR DE DICTADO: Aula 4 – Gabinete de Informática de la FQByF.

CUPO: 25 personas.

FUNDAMENTACIÓN: El conocimiento de la Química Física constituye un requisito fundamental en la formación de cualquier especialista en las distintas orientaciones de la Química. Este requisito, indispensable en la formación de grado, resulta también de suma importancia para una clara comprensión de los procesos químicos en los estudios de posgrado, nivel para el cual se hace necesario profundizar los conocimientos tanto en los principios como en las metodologías. Además, para el caso particular de la carrera de Doctorado en Química de la UNSL, teniendo en cuenta su modalidad de "Doctorado No Estructurado", el Comité Académico de dicha carrera ha recomendado como prioritario la inclusión de una serie de cursos avanzados de posgrado a fin de asegurar una formación general y de excelencia en sus egresados. Dichos cursos son: Química Analítica Avanzada, Química Orgánica Avanzada, Química Tecnológica Avanzada, Química Inorgánica Avanzada y Química Física Avanzada.

Dr. Félix D. Neco
Rector
UNSL
Quintas

Dra. Alicia Marcela Printista
Secretaría de Posgrado
UNSL

Cpde RESOLUCIÓN R N°

1964



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA
COPAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

Tomando en consideración lo expuesto anteriormente, en el presente curso se contempla el desarrollo de una amplia temática en Química Física, que comprende Estructura Molecular, Termodinámica Estadística y Cinética Química, a nivel de posgrado de perfeccionamiento.

OBJETIVOS:

El curso tiene como objetivo principal la ampliación y profundización de los conocimientos fundamentales de la Química Física, complementarios de los desarrollados en la currícula de grado, a fin de alcanzar un mejor y más completo entendimiento de los problemas químicos.

CONTENIDOS MÍNIMOS:

Módulo I

- Termodinámica fenomenológica, equilibrio y potencial químico.
- Termodinámica estadística.
- Termodinámica de los procesos irreversibles.

Módulo II

- Química Cuántica: formalismos mecano cuánticos y matemáticos.
- Métodos de la Química Cuántica.
- Química Computacional.

Módulo III

- Conceptos Empíricos de Cinética Química
- Efectos de la temperatura, solvente y fuerza iónica sobre las velocidades de reacción.
- Efecto solventes en espectroscopia UV-visible.

PROGRAMA:

1. Principios. Esquemas axiomáticos. Primer y segundo principio. Tercer principio. Relaciones termodinámicas. Potenciales termodinámicos. Criterios de equilibrio.
2. Propiedades termodinámicas. Probabilidad termodinámica. Modelos físicos y distribución de equilibrio. Interpretación estadística de las propiedades termodinámicas. La función de partición. Termodinámica estadística del equilibrio.
3. Nociones de procesos irreversibles cerca del equilibrio. Micro reversibilidad y régimen lineal. Producción de entropía. Equilibrio local. Sistemas no-isotérmicos.
4. Química Cuántica: formalismos mecano cuánticos y matemáticos. Mecánica Clásica, fenómenos inexplicables. Período precuántico. Teoría cuántica, postulados. El Hamiltoniano atómico y molecular. La aproximación de Born-Oppenheimer. Orbitales moleculares, conjuntos base. Método de Hartree. Vectores, matrices y tensores. Operadores y conmutadores. Tratamiento matricial de las ecuaciones de la Química Cuántica.
5. Métodos de la Química Cuántica. Teoría de Hartree-Fock. Ecuaciones de Roothan-Hall. Correlación electrónica. Interacción de configuración: completa y limitada. Teoría de perturbación Möller-Plesset. Teoría del funcional de la densidad.

Cpde RESOLUCIÓN R N° 1964


Dr. Felix D. Nieto Quintas
Rector
UNSL


Dra. Alicia Marcela Prinitista
Secretaría de Posgrado
UNSL



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

6. Química Computacional. Mecánica y Dinámica Molecular. Métodos Hartree-Fock: *ab initio* y semiempíricos. Correlación electrónica y métodos post-SCF. Métodos MPn. Métodos CC y QCI. Métodos DFT.

7. Conceptos Empíricos de Cinética Química. Métodos para la resolución de ecuaciones de velocidad: reacciones de primer y segundo orden. Velocidades iniciales. Reacciones complejas: reversibles, consecutivas y simultáneas. Catálisis ácido-base.

8. Efectos de la temperatura, solvente y fuerza iónica sobre las velocidades de reacción. El estado de transición. Teoría de Eyring. Determinación del mecanismo de reacciones homogéneas. Aproximaciones del pre-equilibrio y del estado estacionario.

9. Efecto solvente en espectroscopia UV-visible. Interacciones moleculares soluto-solvente generales y específicas. Uniones hidrógeno intra e intermoleculares. Parámetros empíricos y teóricos de solvatación. Corrimientos químicos espectroscópicos UV-visible. Aplicaciones.

SISTEMA DE EVALUACIÓN:

80% Asistencia a clases.

Aprobación de un examen final individual.

BIBLIOGRAFÍA:

- .- Callen, H.B. Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics. Wiley, 2nd. Ed. (1985).
- .- Pitzer, K.S.; Thermodynamics. McGraw-Hill, 3rd. Ed. (1995).
- .- Tester, J/W. y Modell, M; Thermodynamics and its Applications. Prentice Hall, 3rd. Ed. (1997).
- .- Levine, Ira. Quantum Chemistry. Fifth Edition. Editorial Prentice Hall (2000).
- .- Levine, I: Química Cuántica, Editorial AC (1999)
- .- Foresman, J.B. y Frisch, A.E.: Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Gaussian Inc.
- .- Ruff, F. y Csizmadia, I.G. ; Organic Reactions: Equilibria, Kinetics and Mechanism, Elsevier (1994).
- .- P. W. Atkins 'Química Física'. 8ª ed., Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, (2008).
- .- Juan C. Garro Martínez, Pablo R. Duchowicz, Mario R. Estrada, Graciela N. Zamarbide and Eduardo A. Castro. QSAR Study and Molecular Design of Open-Chain Enaminones as Anticonvulsant Agents.. *Int. J. Mol. Sci.* 2011, 12 (12), 9354-9368.
- .- Lobna Abdel-Mohsen Ebaid Nassr. Kinetic Investigation of Aquation of Some Fe(II) Schiff Base Amino Acid Complexes. *International Journal of Chemical Kinetics* 42 (2010) 372-379.
- .- M.C. Almandoz, M.I. Sancho, S.E. Blanco. Spectroscopic and DFT study of solvent effects on the electronic absorption spectra of sulfamethoxazole in neat and binary solvent mixtures. *Spectrochim. Acta Part A* 118 (2014) 112-119.
- .- 'Spectrophotometric investigation of the complexation mechanism of Al(III) by 2,4-dihydroxy-acetophenone'. *Spectrochim. Acta A*, 77, 51-58 (2010).
- .- 'Spectroscopic Study of Solvent Effects on the Electronic Absorption Spectra of Flavone and 7-Hydroxyflavone in Neat and Binary Solvent'. *Int. J. Mol. Sci.* 12, 8895-8912 (2011).

Cpde RESOLUCIÓN R N°

1964

Dr. Felix D Nieto Quintas
Rector
UNSL

Dra. Alejandra Piniasta
Secretaria de Posgrado
UNSL



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

ARANCEL: \$50 (pesos cincuenta).

— Doctorandos y Docentes de la UNSL: Gratuito.

COSTOS Y FUENTES DE FINANCIAMIENTO: Costos mínimos de gastos de trabajos prácticos y material bibliográfico a cargo de Proyecto 2-1514 de CyT-UNSL, Director Dr. Juan C. Garro Martínez.

Cpde RESOLUCIÓN R N°
may

1964

Dra. Alicia Marcela Printista
Secretaría de Posgrado
UNSL

Dr. Felix Nieto Quintas
Rector
U.N.S.L.