Universidad Nacional de Quilmes

QUILMES, 23 NOV 2011

VISTO el Expediente Nº 827-1387/11, y

CONSIDERANDO:

Que mediante el citado Expediente se tramita la aprobación del Curso de Doctorado denominado "Fundamentos mecano-cuánticos sobre estructura y reactividad de átomos y moléculas".

Que por Resolución (CS) N° 283/05, se aprueba el Reglamento de Cursos y Seminarios de Posgrado de la Universidad.

Que el mencionado curso constituye un aporte relevante a la formación de posgrado en las especialidades involucradas.

Que los antecedentes académicos y profesionales de los docentes a cargo del dictado del mismo, garantizan calidad y solvencia en el desarrollo de los contenidos especificados.

Que la evaluación del citado curso ha cumplido con los requisitos estipulados en el Art. 15° del Reglamento de Cursos y Seminarios de Posgrado de esta Casa de Altos Estudios.

Que mediante Resolución (CS) Nº 696/10 se aprueba el Presupuesto correspondiente al Ejercicio 2011.

Que la presente se dicta en virtud de las atribuciones conferidas por el Art. 72º del Estatuto Universitario.

Por ello,

EL RECTOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE QUILMES

R E S U E L V E:

ARTICULO 1º: Aprobar el dictado del Curso de Doctorado denominado "Fundamentos mecano-cuánticos sobre estructura y reactividad de átomos y moléculas", cuyo programa y características generales se detallan en el Anexo de la presente Resolución.

ARTICULO 2º: Designar como docentes a los Dres. Gustavo Pierdominici Sottile y Juliana Palma.

UNQ

- 01115

Universidad Nacional de Quilmes

ARTICULO 3º: El gasto autorizado en la presente deberá imputarse a las Partidas que correspondan, Dependencia 004.000, Fuente 12, Programa 04.03.00.04, Presupuesto 2011, Organización Funcional por Programas.

ARTICULO 4º: Disponer que el curso tendrá una duración total de 50 horas y que se podrá dictar hasta el ciclo lectivo 2013.

ARTICULO 5º: Establecer un cupo máximo de 20 alumnos. En el caso que la cantidad de postulantes excedan esa cifra, los docentes a cargo realizarán la selección correspondiente.

ARTICULO 6º: Regístrese, practíquense las comunicaciones de estilo y archívese.

RESOLUCION (R) N°: 01115

Mg. Alfredo Alfonso
Secretario General
UNIVERSIDAD NACIONAL DE QUILMES

Gustavo Eduardo Lugones
Rector
Universidad Nacional de Quilmes

Universidad Nacional de Quilmes

ANEXO

Título del Curso de Doctorado: "Fundamentos mecano-cuánticos sobre estructura y reactividad de átomos y moléculas".

Lugar de Realización: Universidad Nacional de Quilmes - Roque Sáenz Peña 352, Bernal.

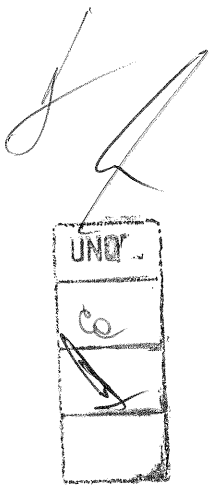
Docentes Coordinadores: Dres. Gustavo Pierdominici Sottile y Juliana Palma.

Carga horaria: 50 horas

Fecha de realización: año 2011 con aprobación hasta el 2013.

Destinatarios: Graduados en Biología, Biotecnología, Bioquímica, Ingeniería en alimentos, Química, Profesorado de Química y carreras afines.

Objetivos: El objetivo central del curso es enseñar los principios de la mecánica cuántica y desarrollar, a partir de los mismos, las herramientas necesarias para comprender la estructura y la reactividad de átomos y moléculas. También se discutirán los fundamentos de las técnicas experimentales que se usan para caracterizar ambas propiedades. En pos de alcanzar el objetivo fundamental se proponen los siguientes objetivos específicos:



- Familiarizar al alumno con los conceptos básicos de la mecánica cuántica: naturaleza dual de la materia, observables físicos, funciones de onda y principio de incertidumbre.
- Discutir las interpretaciones de la mecánica cuántica y las implicancias del principio de incertidumbre, en las determinaciones experimentales realizadas en sistemas de diferentes escalas.
- Analizar la aparición de fenómenos cuánticos (cuantización de la energía, transferencia túnel, etc.) como consecuencia de la aplicación de la ecuación de Schrödinger a sistemas sencillos.

01115

• Resolver la ecuación de Schrödinger correspondiente a sistemas fundamentales de la Química: el átomo de Hidrógeno, átomos polielectrónicos, el ión-molécula de Hidrógeno y la molécula de Hidrógeno. Discutir las características de las soluciones halladas en cada caso.

• Analizar las propiedades periódicas de los elementos a partir del principio de construcción Aufbauf para átomos polielectrónicos y las energías de los orbitales atómicos.

• Comparar críticamente la teoría del enlace de valencia y la teoría de los orbitales moleculares.

• Discutir los fenómenos de hibridización y resonancia en término de las funciones de onda de orden cero de las moléculas consideradas.

• Presentar la ecuación de Schrödinger para el movimiento nuclear y analizar cómo, a partir de su solución, se obtienen los niveles rotacionales y vibracionales de una molécula.

• Discutir, a partir del análisis de las ecuaciones que describen la interacción de la radiación con la materia, las reglas de selección aplicables a diferentes técnicas espectroscópias.

• Adquirir conocimientos básicos sobre los programas computacionales que permiten hacer cálculos de estructura electrónica y propiedades espectroscópicas de sistemas atómicos y moleculares.

UNQ Co

Contenidos y bibliografía

1) Desarrollo histórico de la mecánica cuántica

Ruptura del paradigma clásico y emergencia de la mecánica cuántica. La radiación del cuerpo negro y el efecto fotoeléctrico. La vieja teoría cuántica y el átomo de Bohr. Difracción de electrones y la dualidad onda-partícula. La interpretación de Copenhague y la teoría cuántica moderna. Aplicaciones actuales: espectroscopia UV, visible e infrarroja; microscopia electrónica, microscopía de efecto túnel.

2) Herramientas matemáticas de la mecánica cuántica

01115

Universidad Nacional de Quilmes

Mecánica cuántica ondulatoria y matricial. Espacios vectoriales. Concepto de bases. Series de Fourier y transformada de Fourier. Operadores. Principio de superposición. Conmutadores. Autovalores y autovectores. Principio variacional y teoría de perturbaciones.

3) Postulados y ecuaciones de la mecánica cuántica

Postulados de la Mecánica Cuántica. La función de onda y su interpretación. Relación entre probabilidad y amplitud. Principio de incertidumbre.
Reglas de cuantización. Interferencia cuántica. Propiedades de la ecuación de Schrödinger. Estados estacionarios y sistemas conservativos. Relación entre la mecánica cuántica y la clásica: principio de correspondencia y teorema de Ehrenfest.

4) Sistemas con soluciones analíticas a la ecuación de autovalores

Partícula en caja. Oscilador armónico. Colisión contra una barrera cuadrada unidimensional. Efecto túnel. Momento angular. Rotor rígido en el plano y en 3D.

5) Estructura electrónica de los átomos

El átomo de Hidrógeno. Orbitales. Transiciones entre niveles de energía electrónica. El espín de electrón. Átomos polielectrónicos. Principio de exclusión de Pauli. Principio de Aufbauf y tabla periódica. Momento angular en átomos polielectrónicos: términos y niveles atómicos. Método de Hartree-Fock.

6) Estructura electrónica de las moléculas.

La aproximación de Born-Oppenheimer. La molécula más simple: el H2+. Orbitales moleculares. Teoría del enlace de valencia y teoría de orbitales moleculares. Estructura electrónica de moléculas: tratamientos ab-initio y teoría de los funcionales de la densidad. Métodos semiempíricos.

Universidad Nacional de Quilmes

7) Vibraciones y rotaciones de las moléculas

Resolución de la ecuación de Schrödinger nuclear. Separabilidad de los movimientos rotacionales y vibracionales de las moléculas. Niveles de energía vibracional y rotacional de moléculas diatómicas. Simetría molecular. Modos normales. Niveles de energía vibracional y rotacional de moléculas poliatómicas.

8) Fundamentos teóricos de técnicas experimentales

El espectro electromagnético. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Emisión y absorción de la radiación. Anchura e intensidad de las líneas: Probabilidad de transición, reglas de selección. Espectroscopia UV, visible, infraroja. Microscopia de efecto túnel. Microscopía electrónica.

Bibliografía

- Elementary Quantum Chemistry, F. Pilar, McGraw-Hill, 1968.
- Quantum Mechanics, E. Merzbacher, Wiley, 1970.
- Mecánica cuántica (tomo I), A. Messiah, Tecnos, 1975.
- Quantum Mechanics; C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloe; J.Wiley, 1977.
- Modern Quantum Chemistry; A.Szabo y N.S.Ostlund; Mc.Graw Hill, 1989.
- The world of Physical Chemistry, K.J. Laidler, Oxford University Press, 1995.
- I.N. Levine, Química Cuántica, Ed. Prentice Hall, 2001.
- Physical Chemistry: Quantum Mechanics, H. Metiu, Taylor and Francis, 2006.
- Álgebra lineal, Grossman, Stanley, 6a. ed. México : McGraw-Hill, 2007.
- Introducción al álgebra lineal, Anton, Howard 4a. ed. México, Limusa, 2009.
- Non-relativistic Quantum Theory, K.I. Lam, World Scientific, 2009.

Metodología: Las clases tendrán una modalidad teórico-práctica.

Modalidad: Presencial

Requisitos de asistencia: Asistencia al 80 % del total de las clases.

UNQ

Universidad Nacional de Quilmes

Evaluación: Proyecto final

Certificación: Certificados de Asistencia y Aprobación de la UNQ.

Cupo máximo: 20 alumnos.

Arancel:

Arancel general de $ 1.000,00. Comunidad UNQ (graduados de la Universidad Nacional de Quilmes, docentes y personal administrativo y de servicios) $500,00. Alumnos de Doctorado, Maestrías y/o de la UNQ exentos de pago.

Presupuesto:

La realización del curso quedará sujeta a que la recaudación de fondos garantice la cobertura de su presupuesto.

Requerimientos:

UNQ

Los currículos de los docentes constan de fs. 10 a 24 del Expediente citado en el Visto

ANEXO RESOLUCIÓN (R) Nº: 01115

Mg. Alfredo Alfonso
Secretario General
UNIVERSIDAD NACIONAL DE QUILMES

Gustavo Eduardo Lugones
Rector
Universidad Nacional de Quilmes