

FISICOQUÍMICA I

1. **Formalismo del equilibrio termodinámico:** Ecuación fundamental de la termodinámica. Potenciales termodinámicos. Principios extremales. Condiciones de espontaneidad y equilibrio.
2. **Termodinámica de soluciones:** Magnitudes molares parciales. El potencial químico y la ecuación de Gibbs-Duhem. Criterio general para el equilibrio de fases. Disoluciones ideales. Ley de Raoult. Ley de Henry. Disoluciones no-ideales. Actividad. Coeficiente de actividad. Propiedades coligativas.
3. **Equilibrio electroquímico:** Equilibrio químico. Disociación electrolítica (deficiencias de la teoría clásica). Teoría de interacción iónica (fundamentos termodinámicos, teoría de Debye-Hückel, equilibrio en soluciones iónicas). Celdas electroquímicas. Fuerza electromotriz. Potencial de electrodo. Potenciales estándar.
4. **Equilibrio de fases:** Conceptos sobre la estabilidad de las fases. La regla de las fases. Diagramas de fase de componentes puros. Ecuación de Clausius-Clapeyron. Cambios de fase sólido-sólido. Diagramas de fase de sistemas binarios líquido-líquido. Composición y regla de la palanca. Sistemas binarios líquido-vapor. Mezclas azeotrópicas.
5. **Fenómenos superficiales:** Capilaridad. Tensión superficial. Termodinámica de interfases líquidas. Interfases curvas. Ecuación de Young-Laplace. Mojado de superficies. Ángulo de contacto. Tipos de surfactantes. Micelas y concentración micelar crítica. Detergencia. Ejemplos diversos de dispersiones coloidales.
6. **Estructura de fases condensadas:** Propiedades eléctricas de las moléculas (electronegatividad, momento dipolar eléctrico, polarizabilidad, etc.). Fuerzas intermoleculares (fuerzas de London, interacción dipolo-dipolo, interacción ión-dipolo, enlace de hidrógeno). Potencial de Lennard-Jones. Efecto de las fuerzas de interacción en las propiedades de las sustancias (ej. líquidos y gases reales).
7. **Movimiento molecular en gases:** Postulados básicos de la teoría cinética de los gases. Función de distribución de velocidad. Velocidades características. Efusión. Colisiones moleculares. Frecuencia de colisiones. Trayectoria libre media.

Bibliografía:

- I. Levine, *Fisicoquímica* (5a. edición, McGraw-Hill, Interamericana, 2004).
- P. Atkins, J. de Paula, *Physical Chemistry* (8a. edición, Univ. Press, Oxford, 2006).
- P. Atkins, J. de Paula, R. Friedman, *Quanta, Matter and Change: a molecular approach to physical chemistry* (Oxford University Press, Oxford, 2008).
- T. Engel, P. Reid, *Physical Chemistry* (Pearson education Inc., 2006).
- A.W. Adamson, A.P. Gast, *Physical chemistry of surfaces* (6a. edición, Wiley-Interscience, 1997).

QUÍMICA INORGÁNICA

1. **Estructura atómica:** Partículas fundamentales de un átomo. Carácter dual de las partículas sub-atómicas. Números cuánticos. Orbitales atómicos. Energía de los orbitales atómicos, carga nuclear, número atómico, número másico e isotopos de los elementos. Principio de Aufbau. Principio de exclusión de Pauli, primera regla de Hund.
2. **La Tabla Periódica de los elementos:** El origen de los elementos. Propiedades periódicas. Electrones de valencia. Electronegatividad (Pauling y Mulliken). Energía de Ionización. Electroafinidad. Los elementos y sus compuestos. Reacciones químicas y su relación con las propiedades periódicas. Elementos puros, propiedades físico químicas en relación con su posición en la tabla periódica. Elementos de transición y sus propiedades.
3. **Modelos de enlace químico:** Enlace iónico, metálico y covalente. Estructuras de Lewis. Regla del octeto. Teoría de repulsión de pares de electrones de valencia, aplicaciones. Teoría del enlace de valencia, hibridación, aplicaciones. Teoría de orbitales moleculares, sistemas homo y hetero nucleares, aplicaciones. Estado sólido, relación enlace-estructura. Tipos de empaquetamiento estructural. Energía de red. Ciclo Born-Haber. Constante de Madelung. Ecuación de Born-Landé. Análisis de la densidad electrónica.
4. **Introducción a la Química de Coordinación:** Nomenclatura. Números de coordinación y geometrías, isomerismo. Constantes de estabilidad. Teoría del campo cristalino y propiedades. Introducción a la simetría molecular. Operaciones de simetría, grupos puntuales y aplicaciones.
5. **Teorías de Ácidos y Bases :** Ácidos de Brönsted. Acidez de Lewis. pH, pKa y sus aplicaciones. Introducción a las teorías modernas de ácidos y bases. Generalización de los conceptos de ácidos y bases de Lewis. Principio HSAB y reactividad química.
6. **Metodologías de síntesis en solución:** Precipitación y fenómenos que le acompañan (nucleación y crecimiento). Productos de solubilidad y equilibrios en solución. Reacciones de sustitución en solución acuosa, reacciones de sustitución en disolventes no acuosos, reacciones redox, catálisis homogénea vs heterogénea. Nanomateriales, relación tamaño - propiedades. Teoría de bandas y semiconductores. Nivel de Fermi. Sistemas 0D, 1D, 2D y 3D.
7. **Técnicas avanzadas de caracterización de materiales inorgánicos:** Espectroscopia UV-Vis, aplicaciones. Introducción a la difracción de rayos X, elementos básicos del modelado de estructuras cristalinas. Espectroscopias infrarroja y Raman, principios básicos. Introducción a la resonancia magnética nuclear, aplicaciones. Principios básicos de las microscopías electrónicas de transmisión y de barrido.

Bibliografía:

- F.A. Cotton and G. Wilkinson, *Química inorgánica avanzada* (1978).
- B.E. Douglas and D.H. Mc Daniel, *Conceptos y modelos de química inorgánica* (1970).
- J.E. Huheey, *Química inorgánica. Principios de estructura y reactividad* (Editorial

Harla, México, 1981).

- G.C. Demitras, C.R. Russ, J.F. Salmon, and G.S. Weiss, *Química inorgánica* (Editorial Prentice Hall, México, 1973).
- Willian B. Jensen. *The Lewis Acid Based Concepts. An Overview*. John Wiley and Sons, New York. 1979.
- *Nanoparticles: From theory to applications*. Ed. by Gunter Schmid. 2004 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
- J.-P. Jolivet, *Metal Oxide Chemistry and Synthesis - From Solution to Solid State*, Wiley- Interscience, Chichester, 2003

FISICOQUÍMICA II

1. **Procesos de transporte:** Transporte de masa por difusión (leyes de Fick). Conducción térmica. Movimiento browniano. Viscosidad. Conducción iónica. Conductividad molar. Electrolitos débiles y fuertes. Movilidad iónica. Ecuación de Nernst-Einstein. Ecuación de Stokes-Einstein.
2. **Cinética química:** Velocidad de reacción. Mecanismo de reacción. Leyes de velocidad integradas. Reacciones consecutivas. Reacciones paralelas. Reacciones reversibles. Dependencia con la temperatura de las constantes de velocidad. Catálisis. Dinámica de las reacciones moleculares. Superficies de energía potencial. Teoría del complejo activado.
3. **Adsorción y reacciones en superficies sólidas:** Defectos estructurales en las superficies sólidas. Adsorción de gases (fisisorción y quimisorción). Isotermas de adsorción (Langmuir, BET y otras). Catálisis de superficie. Mecanismo de Langmuir-Hinshelwood.
4. **Aspectos eléctricos de la química superficial:** La interfase electrificada en coloides. La doble capa eléctrica. La interfase metal-solución. Teoría de Gouy-Chapman. La capacitancia de Helmholtz. El potencial zeta. Fenómenos electrocinéticos. Potencial de carga cero. Concepto de potencial absoluto de electrodo.
5. **Cinética electroquímica:** Cinética de una reacción de electrodo simple. Barreras de energía de activación. Coeficiente de transferencia. Densidad de corriente de intercambio. Ecuación de Butler-Volmer. Aplicaciones a diversos procesos electroquímicos (celdas de electrólisis, celdas de combustible y celdas de corrosión).
6. **Macromoléculas:** Tipos, tamaño y forma, peso molecular promedio, propiedades coligativas de macromoléculas. Polielectrolitos y diálisis. Propiedades de transporte de macromoléculas cargadas eléctricamente.
7. **Principios de espectroscopia:** Transiciones entre niveles de energía (absorción ó emisión de radiación electromagnética). Vibraciones moleculares. Niveles de energía. Reglas de selección. Espectroscopia de absorción de infrarrojo. Transiciones rotacionales. Espectroscopia Raman. Transiciones electrónicas. Espectroscopia ultravioleta y visible.

Bibliografía:

- P. Atkins, J. de Paula, *Physical Chemistry* (8a. edición, Univ. Press, Oxford, 2006).
- P. Atkins, J. de Paula, R. Friedman, *Quanta, Matter and Change: a molecular approach to physical chemistry* (Oxford University Press, Oxford, 2008).
- T. Engel, P. Reid, *Physical Chemistry* (Pearson education Inc., 2006).
- J. O'M Bockris, S.U.M. Khan, *Surface electrochemistry: a molecular level approach* (Springer, 1993).
- A.W. Adamson, A.P. Gast, *Physical chemistry of surfaces* (6a. edición, Wiley-Interscience, 1997).

QUÍMICA CUÁNTICA

1. **Ecuación de Schrödinger:** Ec. de Schrödinger dependiente del tiempo. Estados estacionarios. Probabilidad.
2. **Partícula libre y potenciales unidimensionales:** Partícula en una caja. Partícula en un pozo. Efecto túnel.
3. **Operadores en mecánica cuántica:** Ec. de Schrödinger tridimensional para un sistema de varias partículas. Partícula en una caja tridimensional. Degeneración. Valores medios.
4. **Oscilador armónico y Momento angular:** Oscilador armónico unidimensional. Vibración de moléculas. Momento angular de un sistema de una partícula. Método de operadores escalera.
5. **El átomo de hidrógeno:** Fuerzas centrales. Separación de variables. Rotor rígido. Estados enlazantes. Orbitales hidrogenoides. Efecto Zeeman.
6. **Teoremas de la mecánica cuántica:** Operadores hermíticos. Desarrollo en términos de funciones propias. Funciones propias de operadores que conmutan. Paridad. Superposición de estados. Postulados de la mecánica cuántica.
7. **Métodos aproximados:** Teorema de variaciones. Ecuaciones lineales simultáneas. Funciones variacionales lineales. Teoría de perturbaciones no degenerada. Estado fundamental de helio. Teoría de perturbaciones para estados degenerados. Estados excitados de helio. Perturbaciones dependiente del tiempo.
8. **El espín del electrón y el principio de Pauli:** Átomo de helio. Determinantes de Slater. Estado fundamental de litio. Momento magnético de espín.
9. **Introducción a sistemas poliatómicos:** Moléculas, cúmulos y sólidos. Introducción a métodos ab initio y del funcional de la densidad. Introducción a tratamientos semi-empíricos.

Bibliografía:

- D.A. McQuarrie, *Quantum Chemistry* (University Science Books, 1983).
- I.N. Levine, *Quantum Chemistry* (Allyn and Bacon, Inc. 1983).
- Luis de la Peña, *Introducción a la Mecánica Cuántica* (Fondo de Cultura Económica, México, 1991).
- E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons, 1970).

TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

1. **Conceptos introductorios:** Entropía y segunda ley. Ecuación fundamental de la termodinámica. Potenciales termodinámicos. Principios extremales. Equilibrio y espontaneidad. Relaciones de Maxwell. Análisis combinatorio para objetos distinguibles e indistinguibles. Distribuciones de probabilidad discretas y continuas (binomial, Poisson y gaussiana). Características numéricas de las distribuciones de probabilidad (media, varianza y desviación estándar).
2. **Estadística de partículas independientes:** El método de Maxwell-Boltzmann. Microestados y macroestados. El macroestado más probable. La distribución más probable de partículas. Identificación de los multiplicadores de Lagrange. La función de partición molecular. Niveles de energía y degeneración para átomos poliatómicos y moléculas diatómicas. El principio de equipartición de la energía. Evaluación de las propiedades termodinámicas del gas ideal.
3. **Mecánica estadística:** El método de Gibbs de los colectivos. Colectivo canónico. Otros colectivos (gran canónico, microcanónico, isotérmico-isobárico). Interpretación estadística del primer principio de la termodinámica. Definición estadística de la entropía. Fluctuaciones. Estadística de Boltzmann. Introducción a las estadísticas de Fermi-Dirac y Bose-Einstein.
4. **Estadística del gas ideal:** La paradoja de Gibbs. Función de partición canónica para el gas ideal monoatómico, diatómico y poliatómico. Cálculos de constantes de equilibrio químico en términos de parámetros moleculares.
5. **Estadística de gases no-ideales:** La función de partición canónica para el gas denso. Gas de van der Waals. La expansión del virial para un gas de un componente.
6. **Estadística cuántica:** El gas ideal de Fermi. Gases de electrones en metales. El gas ideal de Bose-Einstein. Distribución de Planck. Propiedades termodinámicas del gas de fotones en equilibrio térmico. Vibraciones de red y fonones. Modelos de Einstein y Debye.
7. **Fenómenos de no-equilibrio:** Teoría cinética elemental del transporte en gases. Distribuciones de velocidad de Maxwell-Boltzmann. Cinética del transporte molecular. Teoría de colisiones binarias.

Bibliografía:

- N. M. Laurendeau, *Statistical thermodynamics. Fundamentals and applications* (Cambridge University Press, 2005).
- D.A. McQuarrie, *Statistical mechanics* (University Science Books, 2000).
- W. Greiner, L. Neise and H. Stöcker, *Thermodynamics and statistical mechanics* (Springer, 1997).
- F. Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics* (McGraw-Hill, 2008).
- K.A.Dill, S. Bromberg, *Molecular driving forces: statistical thermodynamics in chemistry and biology* (Garland Sciences, 2002),