



QIA
1978

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

PROGRAMA DE QUIMICA FISICA II - 1978

INTRODUCCION A LA QUIMICA CUANTICA SU APLICACION A LA ESPECTROSCOPIA MOLECULAR
ESTRUCTURA ATOMISTICA DE LA MATERIA

Tema I Naturaleza de la materia y de la radiación

Teorías clásicas. Mecánica clásica. Ondas. Electromagnetismo. Fracaso de las teorías clásicas. Radiación del cuerpo negro. Efecto fotoeléctrico. Naturaleza corpuscular de la luz. Teoría cuántica de Planck. Dualidad onda partícula. Relación de De Broglie. Efecto Compton. Noción de probabilidad. Paquetes de onda. Principio de incertidumbre de Heisenberg. Principio de correspondencia.

Tema II Fundamentos de la mecánica cuántica

Introducción matemática. Sistemas de coordenadas. Determinantes. Vectores. Operadores. Ecuación de autovalores. Espectros atómicos. Modelo atómico de Bohr. Búsqueda de un modelo matemático para el átomo. Postulados de la mecánica cuántica. Ecuación de Schrödinger.

Tema III Aplicaciones a sistemas simples

Partícula libre. Partícula en la caja. Niveles de energía. Función de onda. Partícula en la caja tridimensional. Degeneración de los niveles de energía. Concepto de valor medio. Rotor rígido. Separación de variables. Números cuánticos. Armónicos esféricos. Oscilador armónico. Polinomios de Hermite. Energía de punto cero. Efecto túnel.

Tema IV Estructura electrónica de los átomos

Átomo de hidrógeno. Autofunciones y autovalores. Unidades atómicas. Representación de las funciones de onda. Orbitales atómicos. Espectros de los átomos hidrogenoides. Reglas de selección. Momento angular. Autofunciones y autovalores. Efecto Zeeman. Spin del electrón. Principio de exclusión de Pauli.

Tema V Métodos espectroscópicos

Niveles de energía. Tipos de espectroscopias; información que aportan. Curvas de energía potencial. Espectroscopias de absorción vibracional; infrarrojo y de difusión Raman. Reglas de selección. Simetría. Unidades y nomenclaturas.

Espectroscopia de rotación pura; Moléculas diatómicas. Moléculas lineales. Espectroscopios simétricos y asimétricos. Espectroscopia de vibración-rotación. Vibración de moléculas poliatómicas. Modos normales. Determinación de simetría molecular.

Espectroscopia electrónica; Principio de Franck-Condon. Espectrógrafos.

Olivero

ME

Dra. J.E. ROSSIGNOL de ALBINATI

23

Resolución DT. 495/78



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Tema VI Métodos de difracción

Difracción de electrones, Difracción de rayos X, Cristales, Sistemas cristalinos, Redes de Bravais, Determinación de las constantes de la celda unitaria, Equación de Bragg, Método de polvo, Determinación de las redes de Bravais, Determinación de la simetría molecular, Operaciones de simetría de los grupos espaciales

Tema VII Métodos varios

Método de momentos dipolares, Momento dipolar y polarización, Determinación de momentos dipolares por el método de la temperatura, Método de la refractividad, Aplicaciones de las determinaciones de momentos dipolares.

Métodos de resonancia magnética: Espectroscopia magnética nuclear y electrónica

Niveles de energía de los núcleos en los campos magnéticos, Espectroscopia de R.F.E., Interacciones hiperfinas, Constantes de acoplamiento y estructura molecular electrónica.

ATOMOS Y MOLECULAS Y UNIONES QUIMICAS

Tema VIII Estructura electrónica de átomos multieletrónicos

Átomos multieletrónicos, Funciones de onda aproximadas, Orbitales, Método variacional, Teoría de perturbaciones, Átomo de Helio, Determinante de Slater, Método autoconsistente de Hartree-Fock, Tabla periódica, Nomenclatura de los estados atómicos.

Tema IX Moléculas y unión química

Molécula ión hidrógeno H_2^+ , Método de orbitales moleculares, Método CI-CLOA, Método de unión de valencia, Moléculas diatómicas homonucleares y heteronucleares, Términos espectroscópicos, Moléculas poliatómicas, Orbitales híbridos, Orbitales moleculares localizadas y delocalizadas, Estructura electrónica de sistemas conjugados, Método de Hückel, Uso de simetría.

TEORIA CINETICA QUIMICA

Tema X Leyes fundamentales de la cinética

Velocidad de reacción, Análisis de los datos cinéticos, Método de integración, Método diferencial, Comparación de métodos, Leyes de velocidad, Concepto de orden, reacciones de segundo orden, reacciones que no tienen orden sencillo, mecanismos, Reacciones complejas, Reacciones reversibles, consecutivas, paralelas, Medida de velocidades de reacción.

Tema XI Cinética molecular, aspectos teóricos

Dependencia de la velocidad con la temperatura, Ley de Arrhenius, Superficie de energía potencial, Teoría cinética de las colisiones, Mecánica estadística del equilibrio químico, Teoría de las velocidades absolutas, Forma termodinámica de las velocidades de reacción.

Tema XII Reacciones elementales en fase gaseosa

Reacciones unimoleculares, Teoría de Lindemann, Influencia del tamaño

084

WPC



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

de la estructura. Reacciones bimoleculares. Átomos y radicales libres. Reacciones en cadena. ^{Polimerización} Fotokuímica. Reacciones trimoleculares. Isomerización del ciclopentano. Descomposición del óxido nítrico. Descomposición del etano. Reacciones unimoleculares de moléculas y radicales calientes. Influencia de gases ajenos al sistema de reacción.

Tema XIII

Reacciones complejas en fase gaseosa

Detección y valoración de átomos y radicales en los sistemas reaccionantes. Métodos espectroscópicos. Espectroscopia de resonancia de espín electrónico. Calorimetría. Espectroscopia de masas. Congelación de radicales libres. Tratamiento del estado estacionario. Algunas reacciones inorgánicas. Descomposiciones orgánicas. Ordenes de reacción para diversos tipos de reacciones de iniciación y de terminación. Autooxidaciones en fase gaseosa. Reacciones explosivas.

Tema XIV

Reacciones en solución

Reacciones entre iones. Influencia del disolvente. Factores de frecuencia. Influencia de la fuerza iónica. Reacciones que incluyen dipolos. Influencia de la presión sobre la velocidad de reacciones en solución. Reacciones lineales de energía libre. Algunos mecanismos de reacciones en solución. Catálisis homogénea en solución. Mecanismo de catálisis. Catálisis ácido-base. Las reacciones de Brønsted. Funciones de ácidos. Catálisis por enzimas.

Tema XV

Adsorción y catálisis heterogénea

Tipos de adsorción de gases sobre sólidos. Calor de adsorción. Isotermas de adsorción: de Langmuir y de Freundlich. Adsorción en solución. Catálisis heterogénea.

Tema XVI

Coloides y macromoléculas

Coloides liófilos y liófilos. Electrolitos coloidales. Geles. Rheología. Cristales líquidos. Polímeros. Tipos de polímeros: sintéticos, proteínas, ácidos nucleicos, polisacáridos. Pesos moleculares de los polímeros. Técnicas diversas para su determinación.

Número de horas teóricas totales :60 hs.
" " " de Problemas " :60 hs.
" " " de trabajos prácticos :90hs.

Bibliografía

G.W. Castellan "FISICOQUIMICA" Ed. Fondo Educativo Interamericano, 1974, 2ª Ed. americana Addison Wesley 1971 -

G.F. Eggers, N.W. Gregory, G.D. Halesley, B.S. Rabinovitch, "FISICOQUIMICA" Ed. Limusa-Wiley, 1967.

G.M. Barrow "QUIMICAFISICA" 2ª Ed., Ed. Reverté, 1968

Aprobado por Resolución ST 495/78