



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

14 Q.I.

PROGRAMA DE QUIMICA FISICA II

Año 1979

INTRODUCCION A LA QUIMICA CUANTICA SU APLICACION A LA ESPECTROSCOPIA
MOLECULAR- ESTRUCTURA ATOMISTICA DE LA MATERIA Y DE LA RADIACION.

Bolilla I: NATURALEZA DE LA MATERIA Y DE LA RADIACION:

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.

Bolilla II: FUNDAMENTOS DE LA MECANICA CUANTICA:

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.

Bolilla 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 del punto cero. Efecto túnel.

Bolilla IV: ESTRUCTURA ELECTRONICA DE LOS ATOMOS:

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

...///...

DR. LUIS O. GARCIA VIGOR
SECRETARIO ACADEMICO
DEPTO. QUIMICA INORGANICA ANALITICA
Y QUIMICA FISICA

Aprobado por Resolución DT 398/79



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

...///...

Bolilla V: METODOS ESPECTROSCOPICOS:

Niveles de energía. Tipos de espectroscopías; información que aportan. Curvas de energía potencial. Espectroscopías de absorción vibracional; de infrarrojo y Raman. Reglas de selección. Simetría.

Unidades y nomenclaturas.

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

Espectroscopía electrónica: Principio de Franck-Gordon. Espectrógrafos.

Bolilla VI: METODOS DE DIFRACCION:

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

Bolilla VII: METODOS VARIOS:

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

Métodos de resonancia magnética: Espectroscopía magnética nuclear y electrónica. Niveles de energía de los núcleos en los campos magnéticos. Espectroscopía de r.p.e.. Interacciones hiperfina constantes de acoplamiento y estructura molecular electrónica.

20

DR. LUIS O. GARCIA VION
SECRETARIO ACADEMICO
DEPTO. QUIMICA INORGANICA ANALITICA
Y QUIMICA FISICA



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

...///...

ATOMOS, MOLECULAS Y UNION QUIMICA.

Bolilla VIII: ESTRUCTURA ELECTRONICA DE ATOMOS MULTIELECTRONICOS:

Atomos multielectrónicos. Funciones de onda aproximadas. Orbitales. Método variacional. Teoría de perturbaciones. Atomo de Helio. Determinantes de Slater. Método autoconsistente de Hartree-Fock. Tabla periódica. Nomenclatura de los estados atómicos.

Bolilla IX: MOLECULAS Y UNION QUIMICA:

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

TEORIA CINETICA QUIMICA

Bolilla X: LEYES FUNDAMENTALES DE LA CINETICA:

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

Bolilla XI: CINETICA MOLECULAR ASPECTOS TECNICOS:

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.

Bolilla XII:

REACCIONES ELEMENTALES EN FASE GASEOSA

Reacciones unimoleculares. Teoría de Lindemann. Influencia del tamaño de la estructura. Reacciones bimoleculares. Reacción entre hidrógeno e iodo. Reacciones que incluyen átomos y radicales libres. Reacciones en cadena. Fotoquímica. Reacciones trimoleculares. Isomerización del ciclo propano. Descomposición del óxido nitroso. Descomposición del etano. Reacciones unimoleculares de moléculas y radicales "calientes". Influencia de gases ajenos al sistema de reacción.

DR. LUIS G. GARIBAY
SECRETARIO ACADÉMICO
DEPTO. QUÍMICA INORGÁNICA ANALÍTICA
Y QUÍMICA FÍSICA



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

...///...

Bolilla XIII: REACCIONES COMPLEJAS EN FASE GASEOSA:

Detección y valoración de átomos y radicales en los sistemas reaccionantes. Métodos espectroscópicos. Espectrometría de resonancia del spin electrónico. Calorimetría. Espectrometría 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 terminación. Autooxidaciones en fase gaseosa. Reacciones explosivas.

Bolilla XIV: REACCIONES EN SOLUCION:

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

Bolilla XV: ADSORCION Y CATALISIS HETEROGINEA:

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

Bolilla XVI : COLOIDES Y MACROMOLECULAS :

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

18

Dr. Luis O. García Vico

[Signature]

DR. LUIS O. GARCÍA VICO
SECRETARIO ACADEMICO
DEPTO. QUIMICA INORGANICA ANALITICA
Y QUIMICA FISICA