

6 Q I
1986

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: Química Física (II)

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas ORIENTACION: Ciclo Básico

CARACTER: Obligatorio

PLAN: 1957

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: a) Teóricas 4 hs. b) Problemas 6 hs.
(semanales) c) Laboratorio 6 hs. d) Seminario -hs. e) Total: 16 hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Trabajos Prácticos de Química Física (I)

PROGRAMA

PARTE A: ESTRUCTURA DE LA MATERIA (continuación)

Capítulo I. Fundamentos de la Mecánica Cuántica

Postulados. Operadores. Autovalores y autofunciones. Ecuación de autovalores. Ecuación de Schrödinger. Estados estacionarios. Probabilidad. Valores medios. Principio de incertidumbre. Principio de correspondencia. Ec. de Schrödinger dependiente del tiempo.

Capítulo II. Estructura Eléctrica de los Átomos

El átomo de hidrógeno. Autofunciones y autovalores. Momento angular. Representación de las funciones de onda. Orbitales. Espectro del átomo de hidrógeno. Spin del electrón. Principio de exclusión de Pauli. Tabla Periódica. Átomos multielectrónicos.

Capítulo III. Moléculas y Unión Química

Funciones de onda aproximadas. Método Variacional. Molécula la ión H_2^+ . Métodos de orbitales moleculares y enlace de valencia. Molécula de hidrógeno. Orbitales moleculares. Diagramas de correlación simples. Hibridización y valencia dirigida. Método de Mückel.

PARTE B: PROCESOS DE TRANSPORTE

Capítulo IV. Leyes Fundamentales. Viscosidad y Difusión

Procesos de transporte. Flujos, campos potenciales. Procesos estacionarios y transitorios. Conductividad eléctrica y térmica, viscosidad y difusión. Leyes Fundamentales: Ohm, Fourier, Poiseuille y Fick. Viscosidad de gases y líquidos. Difusión de gases y líquidos. Teorías de la viscosidad y difusión. Segunda Ley de Fick. Solución de un caso simple. Difusión convectiva. Aplicaciones de las medidas de viscosidad y difusión.

Capítulo V. Conducción Eléctrica

Conducción eléctrica. Conducción metálica y electrolítica. Conductancia equivalente. Conductancia iónica. Números de transferencia y velocidades iónicas. Teorías de la conducción. Teoría de Debye-Hückel-Onsager. Relación de la conductancia con otros procesos. Aplicaciones de las medidas de conductancia.

PARTE C: FENOMENOS DE DISPERSION Y RESONANCIA. ESPECTROSCOPIA.

Capítulo VI. Interacción de la radiación electromagnética con la materia

Fenómenos de dispersión y resonancia. Dispersión Ray Deigh y Thomson. Absorción y emisión de la radiación. Espectros. Reglas de selección y probabilidades de transición. Difracción de Rayos X. Método de Debye-Scherrer. Determinación de la estructura de sólidos cristalinos.

Capítulo VII. Espectroscopía de Moléculas Diatómicas y Poliatómicas Simples

Espectros de vibración rotación de moléculas diatómicas. Espectros electrónicos. Espectros de moléculas poliatómicas simples. Espectroscopía Raman.

PARTE D: CINETICA DE LAS REACCIONES QUIMICAS

Capítulo VIII: Leyes Fundamentales de la Cinética

Medida de las velocidades de reacción. Análisis de los datos cinéticos. Orden y Molecularidad. Reacciones uni, bi y trimoleculares. Reacciones reversibles. Reacciones consecutivas. Ley de Arrhenius.

Capítulo IX: Teoría de las Reacciones Químicas

Teoría de colisiones. Reacciones unimoleculares. Teorías de Lindemann y Hinshelwood. Superficies de energía potencial. Teoría de las velocidades absolutas. Forma termodinámica de las velocidades de reacción. Otras aplicaciones de las velocidades de reacción. Otras aplicaciones de la T.V.A.

Capítulo X. Reacciones Complejas en Fase Gaseosa y Fotoquímica

Reacciones complejas. Detección de átomos y radicales. Método del estado estacionario. Ejemplos. Explosiones. Reacciones Fotoquímicas. Excitación de moléculas. Fluorescencia y fosforescencia. Tiempo de vida de un átomo excitado. Cinética de reacciones fotoquímicas.

Capítulo XI. Reacciones en Solución

Reacciones en solución. Tipos de control. Control difusional. Efectos de solvente, fuerza iónica y constante dieléctrica. Teoría de las colisiones. Catálisis homogénea. Catálisis ácido-base.

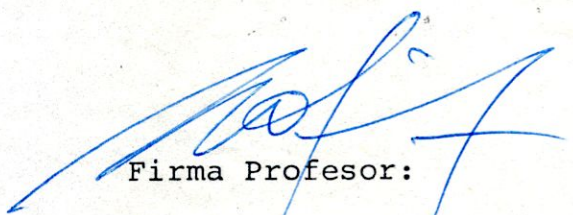
Capítulo XII. Reacciones Heterogéneas y de Electrodo

Adsorción. Isotermas de adsorción. Tipos de isotermas. Reacciones heterogéneas. Catálisis heterogénea. Estructura de la interfaz metal-solución. Velocidad de una reacción electroquímica. Sobrepotencial. Ecuación de Butler-Volmer. Pendientes de Tafel y corriente de intercambio.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- M. Barrow - Physical Chemistry - Mc. Graw Hill, 2a. ed. (1966).
- 2.- M. Barrow - Introduction to Molecular Spectroscopy - Mc. Graw Hill, 2a. ed. (1962).

- 3.- G.F. Eggers, N.W. Gregpry, G.D. Halsley, B.S. Ravinovitch - Fisicoquímica - ed. Limusa-Wiley. (1967)
- 4.- G.F. Castellán - Fisicoquímica - ed. Fondo Educativo Interamericano, (1974).
- 5.- A.W. Adamson, A. Textbook of Physical Chemistry - Academic Press, (1973).
- 6.- M. Karplus y R.N. Porte - Atoms, molecules an introduction for students of Physical Chemistry - W.A. Benjamin (1971).
- 7.- N.W. Hanna - Quantum Mechanics in Chemistry - W.A. Benjamin (1969).
- 8.- F. Daniels y R. Alberty - Fisicoquímica - CECSA, 1a. ed. (1984).
- 9.- Laidler - Cinética Química. Ed. Alhambra. (1971) (2ª ed.)
- 10.- R. Frost, R. Pearson - Kinetics and Mechanics - Wiley Int. (1961).
- 11.- F.A. Cotton - Chemical Applications of Group Theory - Wiley (1971).
- 12.- Y.K. Syrkin - M.E. Dyatkina - Structure of Molecules and the Chemical Band. Dover Publications (1964).



Firma Profesor:

Aclaración firma:

Dr. E.O. Timmermann

FECHA:

Firma Director:



Aclaración firma:

DR. ROBERTO J. FERNANDEZ PRIÓN
 Director Interino
 Dto. Qc'a. Inorg. Anal. y Qc a. Fís.