

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

MATERIA: Química Física II

CARRERA: Ciencias Químicas

CARACTER: Obligatorio

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: a) Teóricas 4 hs. b) Problemas 6 hs.
(Semanales) c) Laboratorio 5 hs. Total: 15 Horas

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Trabajos prácticos de Física Química I

PROGRAMA

PARTE A: ESTRUCTURA DE LA MATERIA

1. Fundamentos de la Mecánica Cuántica:

Postulados. Operadores. Autovalores y autofunciones. Ecuación de autovalores. Ecuación de Schrodinger. Estados estacionarios. Probabilidad. Valores medios. Principio de incertidumbre. Principio de correspondencia. Ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo. Oscilador armónico. Rotor rígido.

2. Estructura Electrónica 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.

3. Moléculas y Unión Química:

Funciones de onda aproximadas. Método variacional. Molécula ión H_2^+ . Métodos de orbitales moleculares y enlace de valencia. Molécula de hidrógeno. Orbitales moleculares. Diagramas de correlación simples. Hibridación y valencia dirigida. Método de Huckel. Simetría puntual. Elementos de computación.

PARTE B: ESPECTROSCOPIA

4. Interacción de la Radiación Electromagnética con la Materia:

Fenómenos resonantes y no resonantes. Difusión Rayleigh y Raman. 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. Simetría: Grupos espaciales y puntuales.

5. Espectroscopía de moléculas diatómicas. Espectros electrónicos. Espectros vibracionales de moléculas poliatómicas simples. Espectroscopias Infrarroja y Raman.

PARTE C: PROCESOS DE TRANSPORTE

6. Leyes Fundamentales. Viscosidad y Difusión:

Procesos estacionarios. Conductividad eléctrica y térmica, viscosidad y difusión. Leyes fundamentales: Ohm, Fourier, Newton y Fick. Viscosidad y difusión en gases y líquidos.

Dr. JOSE A. OLABE
Director Adjunto Int.
Química Inorg. Anal. y Quím. Fis.

Revisado por Resolución CD 1617/89

all

3518/1-91
2 de 1989

Teoría cinética de las gases. Procesos de transporte. Flujos y campos potenciales. Predicción de las propiedades de transporte en gases. Procesos no estacionarios. Segunda ley de Fick. Solución de un caso simple. Difusión convectiva. Aplicaciones de las mediciones de viscosidad y difusión.

7. Conductividad Eléctrica:

Conducción eléctrica en metales y electrolitos, Conductancia equivalente. Conductancia iónica. Números de transporte y movilidades iónicas. Teoría de Debye-Hückel-Onsager. Relación de la conductancia con la difusión. Aplicaciones de conductancia a la determinación de constantes de equilibrio entre iones y titulaciones ácido-base.

PARTI D: CINÉTICA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS

8. Leyes Fundamentales de la Cinética:

Medición de las velocidades de reacción. Análisis de los parámetros cinéticos. Orden y molecularidad. Reacciones uni, bi y trimoleculares. Reacciones reversibles. Consecutivas y paralelas. Hipótesis del estado estacionario. Energía de activación: Ley de Arrhenius.

9. Teoría de las Reacciones Químicas:

Teoría de colisiones. Reacciones unimoleculares. Teorías de Lindemann y Hinshelwood. Superficies de energía potencial. Teoría de las velocidades absolutas. Aspectos termodinámicos de las velocidades de reacción. Aplicaciones de la Teoría de velocidades absolutas.

10. Reacciones Complejas en Fase Gaseosa y Fotoquímica:

Reacciones complejas. Radicales y reacciones en cadena. Ejemplos. Explosiones. Reacciones fotoquímicas. Procesos primarios y secundarios. Excitación de moléculas. Fluorescencia y fosforescencia. Tiempo de vida del estado excitado. Rendimiento cuántico. Iniciación fotoquímica de reacciones en cadena.

11. Reacciones en solución:

Diferencias con reacciones en fase gaseosa. Control difusional. Efectos del solvente, fuerza iónica y constante dieléctrica. Teoría de las colisiones. Reacciones de transferencia electrónica. Elementos de la Teoría de Marcus-Hush. Catálisis homogénea. Catálisis ácido-base. Relación de energía libre de Eyring. Catálisis enzimática.

12. Reacciones heterogéneas y cinética de electrodo:

Superficies. Isotermas de adsorción. Reacciones y catalisis heterogénea. Teoría de Langmuir-Hinshelwood. Estructura de la interfaz metal-electrolito. Reacciones químicas en electrodos. Dependencia de la velocidad con el potencial. Ecuación de Butler-Volmer. Parámetros electrocinéticos. Relación de energía libre de Tafel. Efectos difusionales.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- N.W. Hanna, Quantum Mechanics in Chemistry, W.A. Benjamin, (1969)
- 2- I. Levine, Química Cuántica, Ed. AC (1977)
- 3- M. Barrow, Introduction to Molecular Spectroscopy, Mc. Graw Hill 2da. Ed. (1962)
- 4- A.W. Asanson, A Textbook of Physical Chemistry, Academic Press, (1973)
- 5- P.W. Atkins, Fisicoquímica, Fondo Educativo Interamericano, (1985)
- 6- M. Barrow, Physical Chemistry, Mc. Graw Hill, 2da. Ed. (1966)
- 7- G.F. Eggers, K.W. Gregory, G.D. Halsley, B.S. Ravinovitch, Fisicoquímica, ed. Limusa-Wiley (1967).
- 8- G.F. Castellan, Fisicoquímica, ed. Fondo Educativo Interamericano, (1974)
- 9- W.J. Moore, Fisicoquímica Básica, Prentice Hall Hispanoamericana.

A. Batana

Firma del Director

Dr. JOSE A. OLIVERA
Director Adjunto Int.
Qca. Inorg. Anal. y Qca. Fis.