

Q.I.'96  
②  
5  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Físicas

ORIENTACION: ----

2do. CUATRIMESTRE: AÑO 1996

CODIGO DE CARRERA: 02

MATERIA: Físicoquímica para Físicos

CODIGO: en trámite

PUNTAJE: 5 puntos propuesto.

PLAN DE ESTUDIO: vigente a 1996

CARACTER DE LA MATERIA: optativa

DURACION: cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL:

\*Teóricas: 4hs.

\*Laboratorio y Seminarios: 2hs.

TOTAL: 6hs

CARGA HORARIA TOTAL: 96

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Física IV

FORMA DE EVALUACION: exámenes parciales y final.

PROGRAMA ANALITICO:

Estructura atómica y molecular

- 1) Atomo de hidrógeno. Ecuación de Schrödinger. Cuantización de la energía. Funciones de onda. Cuantización del momento angular. Orbitales atómicos y niveles de energía. Funciones de distribución radial y angular.
- 2) Atomos plurielectrónicos. Aproximación del campo central. Principio de Pauli. Penetración y apantallamiento. Principio de construcción. Configuración electrónica. Electrones de carozo y de valencia. Radios atómico y iónico. Energía de ionización, afinidad electrónica, electronegatividad y dureza de los elementos. Tabla periódica. Características principales de los grupos.
- 3) Moléculas y sólidos. Estructuras de Lewis. Regla del octeto. Carga formal y número de oxidación. Resonancia. Longitud y energía de unión. Aproximación de Born-Oppenheimer. Orbitales moleculares. Moléculas diatómicas homonucleares. Principio de construcción molecular. Moléculas diatómicas heteronucleares. Orden de enlace. Moléculas poliatómicas. Geometría molecular. Hipervalencia. Orbitales localizados. Hibridación. Sólidos. Teoría de bandas. Aislantes. Semiconductores.



4) Forma y simetría molecular. Modelo de repulsión de pares de electrones de valencia. Orbitales moleculares y forma molecular. Simetría molecular. Grupos puntuales. Polaridad. Quiralidad. Tablas de caracteres. Simetría orbital. Simetría de las vibraciones. Modos normales de vibración.

5) Estructura de sólidos. Redes cristalinas. Empaquetamiento. Metales. Polimorfismo. Aleaciones. Sólidos iónicos. Tipos de cristales. Entalpías de red. Ecuaciones de Born-Mayer y de Kapustinskii. Estabilidad térmica. Solubilidad.

#### Energías moleculares y transiciones

6) Vibración y rotación moleculares. Vibración. Niveles de energía y funciones de onda. Rotación. Niveles de energía. Momento angular. Momento de transición. Reglas de selección. Espectros rotacionales. Espectros vibracionales. Estructura rotacional. Modos normales y reglas de selección. Obtención de distancias y fuerzas de unión.

7) Transiciones electrónicas. Espectro de hidrógeno. Reglas de selección. Espectro de átomos complejos. Singletes y tripletes. Términos espectroscópicos. Efecto Zeeman. Espectros moleculares. Principio de Franck-Condon. Estructura vibracional.

8) Función de partición molecular. Distribución de Boltzmann. Función de partición de traslación, rotación y vibración. Función de partición de sistemas de partículas. Relación con funciones termodinámicas.

9) Fotofísica. Fluorescencia. Fosforescencia. Transiciones no radiativas. Diagramas de Jablonskii. Disociación. Isomerización. Láseres. Espectroscopía fotoelectrónica.

#### Fuerzas intermoleculares

10) Propiedades eléctricas moleculares. Polaridad. Polarización. Índice de refracción. Rotación óptica. Interacción entre cargas, dipolos y cuadrupolos. Dipolos inducidos. Puente hidrógeno. Interacciones repulsivas. Potencial de Lennard-Jones. Gases ideales y reales. Condensación. Punto crítico.

11) Soluciones de electrolitos. Interacción entre iones y iones y dipolos en solución. Solvatación. Radio iónico. Pares iónicos. Función de distribución radial. Atmósfera iónica. Actividad de electrolitos. Propiedades termodinámicas.

#### Reacciones químicas

12) Equilibrio químico. Potencial químico y constante de equilibrio. Dinámica molecular. Encuentros moleculares. Teoría de colisiones. Control difusional. Superficies de energía potencial. Teoría del complejo activado. Coordenada de reacción. Trayectorias.

#### BIBLIOGRAFIA:

- D.F. Schriver, P. Atkins, C.H. Langford. Inorganic Chemistry. 2nd. Edition. W.H. Freeman and Company, New York, 1994.
- P.W. Atkins. Physical Chemistry. 5th. Edition. Oxford University Press, Oxford, 1995.
- G.W. Castellan. Fisicoquímica. 2da. Edición. Addison-Wesley Iberoamericana, México, 1987.
- I.N. Levine. Fisicoquímica. Tercera Edición. McGraw-Hill, Madrid, 1991.

Dr. E. San Román

Dr. ENRIQUE A. SAN ROMAN  
Director  
Dpto. QCA, INORG, ANAL, QCA, FIS.