

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
 FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
 DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA
 CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas ORIENTACION: ---
 1er. CUATRIMESTRE: AÑO 2001
 CODIGO DE CARRERA: 01
 MATERIA: Química Física I CODIGO: 5016
 PUNTAJE: ---
 PLAN DE ESTUDIO: AÑO 1987
 CARACTER DE LA MATERIA: obligatoria
 DURACION: cuatrimestral
 HORAS DE CLASE SEMANAL:
 * Teóricas: 4 hs
 * Problemas: 6 hs
 * Laboratorio: 5 hs
 TOTAL: 15 hs.
 CARGA HORARIA TOTAL: 240
 ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Trabajos Prácticos de: Física I, Análisis II, Qca. Orgánica I y Qca. Analítica. Qca. Orgánica II.
 FORMA DE EVALUACION: 2 parciales, evaluación en el laboratorio y examen final.
 PROGRAMA ANALITICO:
 1) PRINCIPIOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA
 a) Antecedentes que condujeron a la formulación de la mecánica cuántica. Cuantización: radiación del cuerpo negro, efecto fotoeléctrico. Dualidad onda-partícula: difracción de electrones, principio de incertidumbre y mecánica ondulatoria. Formulación de la mecánica clásica. Postulados de la mecánica cuántica. Operadores, función de onda, ecuación de Schrödinger.
 b) Modelos sencillos con solución analítica. Partícula libre. Partícula en una caja unidimensional. Barrera de potencial y efecto túnel. Caja tridimensional y degeneración. El oscilador armónico. El rotor rígido.
 c) Métodos aproximados para la resolución de la ecuación de Schrödinger. El método variacional. Método variacional lineal.
 2) ESTRUCTURA DE LA MATERIA
 a) Átomos hidrogenoides. Autofunciones y autovalores. Orbitales atómicos. Espín del electrón y sus autofunciones. Principio de exclusión de Pauli. Átomos multielectrónicos. La aproximación orbital. Método de campo autoconsistente (Hartree-Fock) y orbitales atómicos. Principio de construcción (Aufbau). Estados electrónicos y términos espectroscópicos.
 b) El principio de Born-Oppenheimer. Concepto de superficie de energía potencial. Uniones químicas intramoleculares e intermoleculares. Concepto de molécula.
 c) Aproximación de orbitales moleculares y de ligaduras de valencia. Caso de la molécula de hidrógeno y moléculas diatómicas. Caso general: método de orbitales moleculares en moléculas poliatómicas. Ecuaciones de Hartree-Fock. Métodos semiempíricos. Aplicaciones a la determinación de propiedades termodinámicas, cinéticas y espectroscópicas.
 d) Uniones químicas en sólidos; teoría de bandas.

3) ESPECTROSCOPIA

a) Absorción y emisión de radiación electromagnética por átomos y moléculas. Coeficientes de Einstein. Relación entre la probabilidad de transición cuántica y el coeficiente de absorción. Distintos tipos de perturbaciones: dipolar, polarizabilidad. Reglas de selección.

b) Espectros moleculares. Espectroscopía de rotación pura. Espectroscopía de vibración-rotación. Moléculas diatómicas y poliatómicas. Simetría molecular y modos normales. Dispersión de la radiación electromagnética. Espectroscopía Raman. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear y de espín electrónico.

c) Espectros electrónicos de átomos y moléculas. Espectroscopía de absorción y emisión atómica. Espectroscopía de rayos X. Espectroscopía fotoelectrónica. Principio de Franck-Condon. Fluorescencia y fosforescencia. Transiciones $\pi \rightarrow \pi^*$ y $n \rightarrow \pi^*$ de alquenos, compuestos aromáticos y compuestos carbonílicos. Transiciones d-d en complejos metálicos.

Fotodisociación.

4) TERMODINÁMICA AXIOMÁTICA Y ESTADÍSTICA

a) Sistema, medio ambiente y proceso. Calor y trabajo. Equilibrio termodinámico y funciones de estado. Carácter axiomático y principios de la termodinámica. Energía interna y entalpía. Entropía: variaciones interna y externa. Energía de Helmholtz y de Gibbs. Relaciones termodinámicas. Tercer principio: entropía e información.

b) Potencial químico, espontaneidad y estabilidad. Fugacidad de gases puros. Equilibrio de fases en sistemas de un componente.

c) Energía y grados de libertad. Colectivos y reservorios. Distribución de Boltzmann. Termodinámica estadística de sistemas ideales. Teoría cinética de los gases. Capacidad calorífica: contribuciones traslacionales, rotacionales, vibracionales y electrónicas. Modelos de Einstein y Debye. Nociones de sistemas reales: gases y líquidos.

5) PROCESOS DE TRANSPORTE Procesos estacionarios y leyes fundamentales: Ohm, Fourier, Newton y Fick. Viscosidad y difusión en fluidos. Dependencia con la temperatura y la densidad. Descripción microscópica: teoría cinética de los gases. Movimiento browniano.

BIBLIOGRAFIA:

Textos generales:

- P. W. Atkins, Fisicoquímica, Addison-Wesley Iberoamericana, 3a. Ed.(1991).

- I. N. Levine, Fisicoquímica, Vol. 1 y 2, McGraw-Hill, 4a, 1996.

- G. W. Castellan, Addison-Wesley Iberoamericana, 2ª. Ed., (1987)

Textos especializados (* indica textos de consulta):

1) Estructura atómica y molecular y espectroscopía.

- T. P. Softley, Atomic Spectra, Serie Oxford Chemistry Primers, OCP N 19, (1994)

- L. M. Harwood y T. D. W. Claridge, Introduction to Organic Spectroscopy, Serie Oxford Chemistry Primers, OCP N 42, (1997).

- N. J. B. Green, Quantum mechanics 1: Foundations, Serie Oxford Chemistry Primers, OCP N48, (1997).

- C. Wayne y R. Wayne, Photochemistry, Serie Oxford Chemistry Primers, OCP N 39, (1997).

- M. Diem, Introduction to Modern Vibrational Spectroscopy, John Wiley & Sons, 1998.

- M. Barrow, Introduction to Molecular Spectroscopy, Mc Graw-Hill, 2nd. Ed., 1962.

- *I. Levine, Quantum Chemistry, Prentice Hall, 1999.

- *P. W. Atkins, Molecular Quantum mechanics. Oxford University Press, 2nd. Ed., (1994).

2) Termodinámica y termodinámica estadística.

- E. A. Guggenheim, Termodinámica, Technes, 1970.

- R. Fernández Prini y E. Marceca, Materia y Moléculas, EUDEBA, 2000.
- *R. S. Berry, S. A. Rice y J. Ross, Physical Chemistry, John Wiley & Sons, 1980.
Dr. F. Molina Dr. D. Laria Dr. P. Aramendía Dr. E. Marceca

BIBLIOTECA DE LA
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS y NATURALES
HEMEROTECA