

Universidad de Buenos Aires

Facultad de Ciencias Exactas
y Naturales

PROGRAMA DE QUÍMICA FÍSICA AÑO 1971
(la. parte)

Profesora: O.B. de Mandirola

Bibliografía Físico Química .D.F.Eggers Jr., N.W.Gregory, S.D.Halsey Jr.
B.S.Rabinovitch- John Wiley and Sons.
Química Física . Gordon M. Barrow- Mc Graw Hill Co N.Y.
Physical Principles of Chemistry. K.Harvey y S. Porter-Addison -Wesley Co
Text Book of Physical Chemistry. S. Glasstone. Van Nostrand Co.
Physical Chemistry. G.W.Castellán-Addison Wesley Co.
Principles of Physical Chemistry W. Hamill, R. Williams, C.Mac Key-
Prentice Hall Inc.

CAPITULO I: Coordenadas cartesianas- Otras coordenadas- Elemento de volumen- Determinantes- Vectores-Operadores- Divergencia-Gradiente- Laplaciano- Ecuación de autovalores- Mecánica clásica- Principio de correspondencia-Sistemas conservativos- Mecánica de Newton- Mecánica de Hamilton- Ecuación de Lagrange- Ecuaciones canónicas- Separación de coordenadas internas y coordenadas de centro de masa- Implicancias filosóficas inherentes a la mecánica clásica.

CAPITULO II: Introducción a la Mecánica Cuántica- Espectros de líneas- Radiación del cuerpo negro- Constante de Planck- Efecto fotoeléctrico- Teoría Cuántica de la luz. Ondas de De Broglie- Función de onda- Velocidad de onda - Velocidad de grupo- Teoría atómica- Radio de Bohr- Formulación de la Mecánica Cuántica- Variables físicas- Magnitudes- Postulados de la Mecánica Cuántica

CAPITULO III :Partícula en la caja- Valor medio de una magnitud- Principio de Heisenberg- Funciones ortogonales-Norma- Degeneración- Espectroscopía- Leyes de Absorción- Intensidad de líneas- Tipos de espectroscopía

CAPITULO IV :Rotor rígido- Hamiltoniano en coordenadas polares-Número cuántico magnético-Solución en θ -Niveles de energía- Espectroscopía de rotación pura- Intensidades-Reglas de selección- Oscilador armónico- Ecuación de Hermite-Número cuántico vibracional- Niveles de energía del oscilador armónico- Reglas de selección- Intensidad de líneas.

CAPITULO V : Espectros de vibración- rotación- Factores de corrección: Constantes de distorsión centrífuga- Anarmonicidad- Acoplamiento vibración- rotación- Moléculas complejas- Ecuación de Newton para un sistema de N partículas- Modos normales de vibración- Espectrógrafos.

CAPITULO VI: Información que aportan las espectroscopías de absorción en el I.R. U.V y visible- Espectroscopía Raman - Interpretación clásica-

Continúa hoja 2//////////

O.B. de Mandirola

PROGRAMA DE QUÍMICA FÍSICA AÑO 1971
(1a. parte)

Profesora: O.B. de Mandir

Bibliografía Físico Química .D.F.Eggers Jr., N.W.Gregory, S.D.Halsey ,
B.S.Rabinovitch- John Wiley and Sons.
Química Física . Gordon M. Barrow- Mc Graw Hill Co N.Y.
Physical Principles of Chemistry. K.Harvey y S. Porter-Addison -Wesley
Text Book of Physical Chemistry. S. Glasstone. Van Nostrand Co.
Physical Chemistry. G.W.Castellán-Addison Wesley Co.
Principles of Physical Chemistry W. Hamill, R. Williams, C.Mac Key-
Prentice Hall Inc.

CAPITULO I: Coordenadas cartesianas- Otras coordenadas- Elemento de volumen- Determinantes- Vectores-Operadores- Divergencia-Gradiente- Laplaciano- Ecuación de autovalores- Mecánica clásica- Principio de correspondencia-Sistemas conservativos- Mecánica de Newton- Mecánica de Hamilton Ecuación de Lagrange- Ecuaciones canónicas- Separación de coordenadas ternas y coordenadas de centro de masa- Implicancias filosóficas inherentes a la mecánica clásica.

CAPITULO II: Introducción a la Mecánica Cuántica- Espectros de líneas- Radiación del cuerpo negro- Constante de Planck- Efecto fotoeléctrico- Teoría Cuántica de la luz. Ondas de De Broglie- Función de onda- Velocidad de onda - Velocidad de grupo- Teoría atómica- Radio de Bohr- Formulación de la Mecánica Cuántica- Variables físicas- Magnitudes- Postulados de la Mecánica Cuántica

CAPITULO III :Partícula en la caja- Valor medio de una magnitud- Principio de Heisenberg- Funciones ortogonales-Norma- Degeneración- Espectroscopía-Leyes de Absorción- Intensidad de líneas- Tipos de espectroscopía

CAPITULO IV :Rotor rígido- Hamiltoniano en coordenadas polares-Número cuántico magnético-Solución en θ -Niveles de energía- Espectroscopía de rotación pura- Intensidades-Reglas de selección- Oscilador armónico- Ecuación de Hermite-Número cuántico vibracional- Niveles de energía del oscilador armónico- Reglas de selección- Intensidad de líneas.

CAPITULO V : Espectros de vibración- rotación- Factores de corrección- Constantes de distorsión centrífuga- Anarmonicidad- Acoplamiento vibración- rotación- Moléculas complejas- Ecuación de Newton para un sistema de N partículas- Modos normales de vibración- Espectrógrafos.

CAPITULO VI: Información que aportan las espectroscopías de absorción en el I.R. U.V y visible- Espectroscopía Raman - Interpretación clásica- Continúa hoja 2////////

O.B. Mandir

//////Reglas de selección-Espectrógrafo Raman- Atomo de Hidrógeno-
Números cuánticos- Orbitales atómicos-Reglas de selección- Unidades a-
tómicas de distancia, de energía y de momento angular.

CAPITULO VII :Atomo de Helio- Método de perturbaciones- Valor de la
energía de perturbaciones- Momento angular- Operadores Hermitianos-
Teorema sobre la ortogonalidad de las funciones- Teorema sobre la conmu-
tación- Consecuencias- Conmutación de L^2, L_z , etc. -Operadores corredi-
zos- Spin del electrón- Postulados.

CAPITULO VIII:Partículas idénticas-Principio de Pauli+ Teoría para áto-
mos más complejos-Método de Hartree Fock- Determinante de Slater- Ta-
bla periódica-Estructura electrónica de los estados fundamentales de
los elementos-Distribución de los electrones en los orbitales-Acopla-
miento de momentos- Estados(denominación)- Regla de Hund.

CAPITULO IX:Moléculas y unión química- Molécula ión hidrógeno- Aproxima-
ción de Born Oppenheimer-Solución en ϕ - Significado físico de "m"- No-
menclatura de los estados de las moléculas diatómicas- Principio variaci-
onal-Solución por el método variacional de la molécula ión hidrógeno-
Molécula de hidrógeno- Teoría de los orbitales molecularespara moléculas
diatómicas más complejas- Espectros electrónicos con uniones localizadas
Hibridización de orbitales- Valencia dirigida

CAPITULO X:Estructura electrónica de sistemas conjugados- Método de Hückel
Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear- Espectroscopía de Resona-
cia Magnética electrónica

CAPITULO XI :Mecánica estadística- Espacio fásico- Probabilidad de dis-
tribución- Fórmula de Stirling- Multiplicadores indeterminados de
Lagrange- Estadística de Maxwell Boltzman- Distribución de energías de
cantidad de movimiento, de velocidades- Velocidad cuadrática media-
velocidad media- velocidad más probable- Energía media- Estadística
de Bose Einstein- Fórmula de Radiación de Planck- Estadística de Fermi
Dirac.-Índice de ocupación-Factor de Boltzman.

CAPITULO XII :Gases ideales- Ley de Boyle-Ley de gases ideales-Ecuación
de estado- Propiedades extensivas e intensivas-Gases reales-Desviaciones
del gas ideal-Ecuación modificada del gas ideal-Ecuación de Van der Waal
Implicancias-Isotermas de un gas real- Continuidad de los estados-
Estado crítico.

CAPITULO XIII:Teoría cinética de los gases - Cálculo de la presión de u
un gas-Fuerzas que actúan sobre una partícula- Interpretación estadis-
tica de la temperatura-Ley de Dalton-Valor medio de la componente
de velocidad de una molécula- Función densidad puntual-Función distri-
bución.

CAPITULO XIV :Fenómeno de transporte- Propiedades de transporte-Conduc-
tividad térmica de un gas- Colisiones en un gas- Camino libre medio-
Difusión- Leyes.

MSL