

QUIMICA FISICA II - Año 1975

Dra: O. Brieux de
Mandirola.
Ing. Julio Kun.

- Tema 1: Preliminares matemáticas. Sistema de coordenadas. Operadores. Ecuación de autovalores. Repaso de Mecánica cuántica. Lagrangiano. Hamiltoniano. Centro de masa.
- Tema 2: Espectros atómicos. Radiación del cuerpo negro. Efecto fotoeléctrico. Postulados de la Mecánica Cuántica. Partícula en la caja. Principio de indeterminación. Oscilador armónico. Rotor. Momento Angular.
- Tema 3: Espectroscopía. Unidades. Absorción de radiación. Clases de espectroscopía.
- Tema 4: Rotación y vibración de moléculas. Espectroscopía de rotación pura. Intensidades. Reglas de Selección. Espectroscopía vibracional. Vibración. Rotación. Oscilador anarmónico. Función de Morse. Espectroscopía Raman.
- Tema 5: Estructura electrónica de los átomos. Atomo de hidrógeno. Orbitales hidrogenoides. Espectro atómico del hidrógeno. Reglas de Selección.
- Tema 6: Métodos aproximados. Teoría de perturbaciones. Átomos de helio.
- Tema 7: Spin del electrón. Principio de Pauli. Átomos complejos. Tabla periódica.
- Tema 8: Moléculas. Unión química. Principio ~~xxxx~~ variacional. Molécula de H. Orbitales moleculares. Hibridización de orbitales. Estructura electrónica de sistemas conjugados. Etileno.
- Tema 8': Espectroscopía de vibración de moléculas poliatómicas. Espectroscopía de resonancia Magnética Nuclear y electrónica.

CINETICA QUIMICA

- Tema 10: Las leyes fundamentales de la Cinética. Velocidad de reacción. Ordenes de las reacciones. Reacciones reversibles. Medidas de las velocidades de reacción.

Tema 11: Cinética molecular. Ley de Arrhenius. Teoría cinética de colisiones. Mecánica estadística del equilibrio químico. Teoría de las velocidades absolutas. Forma termodinámica de las velocidades de reacción.

Tema 12: Reacciones complejas en fase gaseosa. Detección y valoración de átomos y radicales en los sistemas reaccionantes. Teoría de Lindeman. Tratamiento del estado estacionario. Algunas reacciones inorgánicas. Descomposiciones orgánicas. Autooxidación en fase gaseosa. Reacciones de polimerización.

ELECTROQUIMICA

Tema 13: Fenómenos de transporte de solución. Transporte de corriente eléctrica en soluciones iónicas. Conductividad. La migración de iones, movilidad, conductividad equivalente. Ley de Kohlrausch. Ley de dilución de Ostwald. Ecuación de Onsager. Regla de Walden. Efecto electroforético y de relajación. Efectos de Wien y de Debye-Falkenhagen. Números de transporte. Hittorf, límite móvil, Washburn. Conductividades iónicas equivalentes. Dependencia de la conductividad con la temperatura. Conductividad en solventes no-acuosos. Difusión. Leyes de Fick. Relaciones entre conductividad y difusión. Difusión de un electrolito simple. Ecuación de Nernst-Hartley. Autodifusión y difusión de trazas.

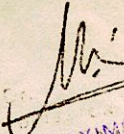
Tema 14: Soluciones de electrolitos: aspectos termodinámicos de las soluciones de electrolitos; potencial químico, actividad, coeficiente de actividad, diferentes escalas de concentración. Coeficiente osmótico. Relación entre coeficientes de actividad en las diferentes escalas. Ecuación de Gibbs-Duhem y relaciones a temperatura y presión constante. Relación entre propiedades parciales molares y coeficientes de actividad. Efecto de la disociación en los coeficientes de actividad. Grado de disociación y constante de disociación. Distintos tipos de fuerzas de interacción entre iones. Teoría de Debye-Huckel: ley límite y modificaciones. radio medio de la atmósfera iónica. Equilibrio en soluciones iónicas, efecto de la interacción iónica.

Tema 15: Celdas electroquímicas. Convención de signos. Potencial electroquímico. Potencial interno (Calvani). Externo (Volta) y de superficie. Termodinámica de pilas: Reversibilidad, corto-circuito e irreversibilidad. Polarización. Afinidad electroquímica, fuerza electromotriz. Tensión eléctrica. Sobretensión.

////

Electrodos Simples. Distintos tipos de electrodos. Celdas químicas y de concentración con y sin transporte. Unión líquida. Aplicaciones para la determinación de coeficientes de actividad.

Tema 16: Cinética electroquímica. Sobrepotencial: distintos tipos. Control por transferencia de carga: relación general corriente-potencial, ecuación de Tafel. Control por transferencia de masa (difusión y/o convección: relación general corriente-potencial. Modelo de capa de Difusión de Nernst. Ecuación para dilución semi-infinita. Nociones elementales de las posibilidades de algunas técnicas electroquímicas (polarografía, voltimetría con variación lineal del potencial, electrodo rotatorio de disco) en cinética electroquímica.


Dr. MAXIMO A. MARIN MINONES
DIRECTOR DEL DEPARTAMENTO DE
QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y
QUIMICA FISICA

Aprobado por Resolución DNE. 693/75