

# Química física I

## PROGRAMA

### 1. PRINCIPIOS DE LA MECANICA CUANTICA

Introducción y principios. 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 Schroedinger. Propiedades de las funciones de onda y los operadores en mecánica cuántica. Modelos sencillos con solución analítica. Partícula libre. Partícula en una caja unidimensional. Caja tridimensional y degeneración. El oscilador armónico. El rotor rígido. Métodos aproximados para la resolución de la ecuación de Schroedinger. El método variacional. Método variacional lineal.

### 2. ESTRUCTURA DE LA MATERIA

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 atómicos. El principio de Born-Oppenheimer. Concepto de superficie de energía potencial. Uniones químicas intra e intermoleculares. Concepto de molécula. Aproximación de orbitales moleculares y de ligadura de valencia. Caso de molécula de hidrógeno y moléculas diatómicas. Orbitales moleculares en moléculas poliatómicas. Métodos semiempíricos. Aplicaciones a determinación de propiedades termodinámicas, cinéticas y espectroscópicas.

### 3. ESPECTROSCOPIA Y FOTOFISICA

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. 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. Espectros electrónicos de átomos y moléculas. Espectroscopía de absorción y emisión atómica. Principio de Franck-Condon. Fluorescencia y fosforescencia. Transiciones p-p\* de alquenos y de compuestos aromáticos, n-p\* y p-p\* en compuestos carbonílicos. Transiciones d-d en complejos metálicos. Fotodisociación.

### 4. TERMODINAMICA CLASICA

Sistema, ambiente y proceso. Equilibrio termodinámico y funciones de estado. Carácter axiomático y principios de la termodinámica. Primer Principio de la termodinámica. Termoquímica. Segundo Principio de la termodinámica. Entropía: variaciones interna y externa. El potencial químico. Funciones de Gibbs y de Helmholtz. Relaciones termodinámicas de espontaneidad y estabilidad. Tercer principio de la Termodinámica.

## 5. TERMODINAMICA ESTADISTICA

Funciones de partición. Energías 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 de Debye.

## 6. 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 en base a la teoría cinética de los gases.

## 7. CAMBIOS DE FASE EN SUSTANCIAS PURAS

Gases reales, factor de compresibilidad, desarrollo del virial, coeficientes de fugacidad,. Equilibrios de fase sólido-líquido-vapor. Campana de Andrews. Punto triple. Ecuación de Clayperon-Clausius. Variaciones de entalpía y entropía en los cambios de fase.

## BIBLIOGRAFIA

### Textos generales

- P. W. Atkins. *Fisicoquímica*. Addison-Wesley Iberoamericana 3ra Ed.  
I. N. Levine. *Fisicoquímica* Vol. 1 y 2. Mc Graw - Hill 1996.  
G. W. Castellan. Addison - Wesley Iberoamericana. 2da Ed.  
R. S. Berry, S. A. Rice y J. Ross. *Physical Chemistry*. John Wiley & Sons. 1980.  
T. Engel, P. Reid. *Química Física*. Pearson. Addison Wesley. 2006.  
D. A. McQuarrie; J. D. Simon. *Physical chemistry: a molecular approach*. Sausalito, CA: University Science Books, 1997  
R. A. Alberty; R. J. Silbey. *Physical chemistry*. 2nd. Ed New York, NY: Wiley, 1997.

### Textos especializados (\*indica que son textos de consulta):

#### 1. Estructura atómica y molecular. Espectroscopía

- Atomic Spectra, T. P. Softley. - Serie °Oxford Chemistry Primers OCP:N 19 OCP.  
Introduction to Organic Spectroscopy - °Serie Oxford Chemistry Primers OCP:N 42.  
Quantum mechanics 1: Foundations, N. J. B. Green. - Serie Oxford Chemistry 48  
.°Primers OCP:N  
Photochemistry, Wayne and Wayne. - Serie °Oxford Chemistry Primers OCP:N 39 .  
Max Diem, Introduction to Modern Vibrational Spectroscopy. John Wiley & Sons.1998  
M. Barrow, Introduction to Molecular Spectroscopy, Mc Graw-Hill, 2da Ed. 1962.  
\*I. Levine, Quantum Chemistry, Prentice Hall ,1999.  
\*P. W. Atkins, Molecular Quantum mechanics. Oxford N. Y. University Press. 2da Ed

#### 2. Termodinámica y termodinámica estadística

- E. A. Guggenheim, Termodinámica, Technes, 1970.  
R. Fernández Prini, E. Marceca, Materia y Moléculas. EUDEBA. 2000.  
R. S. Berry, S. A. Rice y J. Ross, Physical Chemistry. John Wiley & Sons. 1980.  
\*Denbigh, Thermodynamics of Equilibrium