

QUIMICA

QUIMICA FISICA II

ESTRUCTURA ATOMICA

1.- Fundamentos de la Mecánica Cuántica.

Teoría atómica y modelos atómicos.
Postulados básicos: función de onda, operadores y valores propios.
Aplicación a casos sencillos.

2.- El átomo de hidrógeno en Mecánica Cuántica.

Funciones propias hidrogénicas radiales y esféricas.
Significado físico de estas funciones.

3.- Tratamiento teórico de los átomos polielectrónicos.

Métodos aproximados.
Principio de exclusión de Pauli.
Espectros atómicos: su interpretación.

ENLACE QUIMICO

1.- Moléculas y agregados atómicos.

Estudio del enlace químico.
Método de enlaces de valencia y de orbitales moleculares.
Aplicación a la molécula de hidrógeno.

2.- Moléculas diatómicas.

Energía de enlace.
Potenciales de ionización, afinidades electrónicas y electronegatividades.
Carácter iónico: contribución de las formas iónicas a la estabilidad de los enlaces.

Enlace iónico.

3.- Valencias dirigidas.

Hibridación
Propiedades de los orbitales híbridos.
Interpretación teórica de la estructura geométrica de las moléculas.

4.- Moléculas conjugadas y aromáticas.

Métodos de mesomería y orbitales moleculares.
Diagramas moleculares.
Energía de deslocalización.

ESTRUCTURA MOLECULAR

1.- Mecánica estadística.

Naturaleza del problema estadístico.
Función de partición.
Aplicación a los gases ideales.

2.- Propiedades eléctricas y magnéticas de las moléculas.

Ecuación de Clausius-Mossotti-Debye.
Refracción molar.
Diamagnetismo y paramagnetismo.
Efecto inductivo y mesómero.

QUIMICA

- 3.- Espectrografía molecular.
Técnicas experimentales.
Espectros de rotación.
Espectros de rotación-vibración.
Espectros electrónicos.
Espectros de resonancia.

- 4.- Fenómenos de difracción.
Difracción de electrones.
Cristales: Difracción de rayos X.
Difracción de neutrones.

CINETICA QUIMICA

- 1.- Velocidad de las reacciones químicas.
Velocidad y orden de reacción.
Variación de la velocidad de reacción con la temperatura.
Teoría de colisiones y teoría de velocidades absolutas.
- 2.- Cinética de las reacciones homogéneas en fase gaseosa y de las reacciones en disolución.
Reacciones bimoleculares y monomoleculares.
Reacciones en cadena.
Reacciones entre iones: Influencia del disolvente.
Reacciones heterogéneas y en estado sólido.
- 3.- Catálisis.
Catálisis homogénea.
Catálisis ácido-base.
Adsorción y catálisis heterogénea.
Biocatálisis.
- 4.- Absorción de la luz por la materia.
Procesos fotoquímicos primarios y secundarios.
Efecto de las radiaciones de alta energía.

BIBLIOGRAFIA

Texto:

- BARNARD, A.K. y MANSEL, A.L., "Fundamentos de Química física", Urmo, Bilbao, 1967.
BARROW, G.M., "Química física", 2 vols., traducción de S. Senent, 2a. edic., Reverté, Barcelona, 1968.
DIAZ, N. y ROIG, A., "Química-Física", Alhambra, Madrid, 1972 (Vol. II aparecerá próximamente).
GLASSTONE, S., "Tratado de Química física", trad. de J. Sancho, 6a. Ed., Aguilar, Madrid, 1968.
HAMILL, W.H. y WILLIAMS, R.R., "Química física", trad. de M.T. Toral, Grijalbo, Barcelona, 1963.
HUTCHINSON, E., "Química física", trad. de J.M. Orza, Aguilar, Madrid, 1965.
MARON, S., y PRUTON, C., "Principios de Química física", trad. M. Aragonés, Limusa-Wiley, México, 1970.

Problemas:

- HERNANDO, J.M., "Problemas de Química física", Andrés Martín, Valladolid, 1973.

QUIMICA

BARES, J., CERNY, C., FRIED, V. y PICK, J., "Colección de Problemas de Química física", trad. de J.M. Costa, Herder, Barcelona, 1968.
HAWES, B.W. y DAVIES, N.H., "Los cálculos en Química física", trad. de C. Gutierrez Losa, Acribia, Zaragoza, 1965.