

PROGRAMA DE QUIMICA FISICA. 2^a Parte. Curso 1976-77

Lección 1.- Espectros de rotación pura. Rotor rígido, tratamiento clásico y cuántico. Reglas de selección e intensidad de las bandas. La molécula diatómica como rotor rígido o como rotor no rígido. Moléculas poliatómicas: lineales, trompos simétricos, trompos asimétricos.

Lección 2.- Espectros de vibración. Oscilador armónico, tratamientos clásico y cuántico. La molécula diatómica como oscilador armónico. Reglas de selección. Anarmonicidad. Moléculas poliatómicas. Coordenadas normales de vibración. Espectros de rotación-vibración.

Lección 3.- Espectros electrónicos. Reglas de selección. Principio de Franck-Condon. Espectros electrónicos de moléculas diatómicas. Energía de disociación. Predisociación y predisociación inducida. Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas.

Lección 4.- leyes fundamentales de la cinética. Velocidad de reacción, orden y molecularidad. Análisis de los datos cinéticos. Método de integración. Método diferencial. Reacciones complejas, reversibles, paralelas y consecutivas. Tratamiento del estado estacionario. Reacciones rápidas.

Lección 5.- Teoría de colisiones. Variación de la velocidad de reacción con la temperatura. Teoría de Arrhenius. Teoría cinética de colisiones. Factores determinantes de la eficacia de una colisión. Energía de activación. Factor estérico.

Lección 6.- Teoría del estado de transición. Superficies de energía potencial. Expresión de la constante de equilibrio a partir de magnitudes moleculares. Hipótesis del equilibrio en la teoría de las velocidades absolutas. Deducción de las ecuaciones cinéticas. Coeficiente de transmisión. Efecto tunel. Formulación termodinámica de las velocidades de reacción. Significado de la entropía de activación.

Lección 7.- Reacciones bimoleculares y unimoleculares. Comparación de los resultados de la teoría del estado de transición y de la teoría cinética de colisiones. Resultados de dinámica molecular, límites de la teoría del estado de transición. Reacciones unimoleculares: teoría de Lindemann, tratamiento de Hinshelwood, teorías RRK y RRKM, tratamiento de Slater.

Lección 8.- Catálisis. Catálisis homogénea, catálisis ácido-base. Catálisis heterogénea. Influencia de la isoterma de adsorción sobre la cinética de la catálisis heterogénea. Reacción en la superficie, teoría de centros activados. Catálisis enzimática.

Lección 9.- Electroquímica iónica. Electrolitos débiles y fuertes. Teoría de Debye-Hückel. Coeficiente de actividad. Introducción del radio iónico, de la interacción ión-disolvente y de la asociación iónica. Conductividad iónica. Número de transporte. Influencia de la atmósfera iónica sobre la migración iónica. Ecuación de Debye-Hückel-Onsager.

Lección 10.- Electroquímica electródica. Diferencia de potencial en la interfase electrificada. Fuerza electromotriz de las pilas. Potencial de electrodo. Doble capa. Transferencia de carga en los electrodos. La ecuación de Butler-Volmer. Sobretensión.

Professor: Dr. Oliva

curs : 1983-84

Vist i plau,

Signat:

Cap de Departament
Química Física

Data:

c/ 82-83

c/ 81-82

c/ 80-81

3.301

9 76-77