Asig. AMPLIACIO QUIMICA FISICA II

PROGRAMA DE CINETICA.

Lección 1. Reacciones complejas. Reacciones de primer orden: reversibles, paralelas y consecutivas. Hipótesis del estado estacionario. Tratamiento general de las reacciones de primer orden. Reacciones de segundo orden. Simulación.

Lección 2. Reacciones en cadena. Formación del HBr. Determinación de la velocidad global y de las constantes de velocidad. Longitud de la cadena. Reacciones de polimerización. Autooxidación. Reacciones en cadena no estacionaria. Reacciones en cadena ramificadas. Teoría de Hinshelwood. Teoría de Semenov.

Lección 3. Superfícies de potencial. Aproximación de Born-Oppenheimer. Procesos adiabáticos y no adiabáticos. Superficies de potencial. Camino de reacción. Superficie de potencial para la reacción H_2 + H. Ecuación de London. Tratamientos semiempíricos: método de London-Eyring-Polanyi (LEP), método de Sato (LEPS). Tratamientos empíricos. Cálculos mécano-cuánticos.

Lección 4. Teoría del complejo activado. Hipótesis del equilibrio. Expresión a partir de magnitudes moleculares de la constante de equilibrio. Formulación de la ecuación de velocidad. Coeficiente de transmisión. Efecto tunel. Dependencia del factor de frecuencia respecto a la temperatura. Formulación termodinámica de la constante de velocidad.

Lección 5. Reacciones unimoleculares. Teoría de Lindemann. Tratamiento de Hinshelwood. Tratamientos estadísticos, teorías RRK y RRKM. Tratamientos dinámicos, teoría de Slater.

Lección 6. Dinámica molecular. Dinámica clásica, ecuaciones. Sección eficaz. Energía de activación. Comparación con la teoría del complejo activado. Quimiluminiscencia. Carácter atractivo y repulsivo de las superfícies. Haces moleculares. Mecanismos de arranque y rebote.

Lección 7. Catálisis homogénea. Aspectos generales de la catálisis. Catálisis ácido-básica. Catálisis ácido-base específica y general. Relaciones lineales de la energía libre, ley de Brönsted. Catálisis por ácidos de Lewis y por complejos de métales de transición.

Lección 8. Catálisis heterogénea y enzimática. Quimadsorción. Isoterma de Langmuir. Etapas de la catálisis heterogénea. Reacción sobre la superficie. Aplicación de la teoría de velocidades absolutas. Centros activos y especificidad del catalizador. Catálisis enzimática.

Lección 9. Reacciones en disolución. Tratamientos empíricos. Reacciones limitadas por difusión. Reacciones entre iones. Reacciones lentas. Formulación de la teoría del complejo activado. Modelos continuos del disolvente. Funciones termodinámicas de transferencia. Papel activo del disolvente.

Lección 10. Fotoquímica. Reacciones térmicas y fotoquímicas. Leyes básicas de la Fotoquímica. Disociación óptica, predisociación y predisociación inducida. Procesos fotofísicos. Transferencia intermolecular de energía. Interpretación teórica de algunos procesos fotoquímicos primarios.