

TEMARIO TEÓRICO: QUÍMICA FÍSICA (Grupo A)

MECÁNICA CUÁNTICA

I.? Estructura Atómica

Tema 1.- Estructura atómica. Generalidades.

Radiación del cuerpo negro y cuantización de la energía.- Efecto fotoeléctrico.- Espectro del hidrógeno; Interpretación según las primitivas teorías atómicas: Modelo de Bohr, Modelo de Sommerfeld.- Los números cuánticos.- Insuficiencia de estos modelos.

Tema 2.- Introducción a la Mecánica Cuántica

Bases de la Mecánica Cuántica: Dualidad onda-corpúsculo. Principio de incertidumbre de Heisenberg.- Origen de la ecuación de Schrödinger. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo: Estados estacionarios.- Separación de variables.

Tema 3.- Aplicación de la ecuación de Schrödinger a sistemas sencillos

Partícula libre.- Partícula en una caja monodimensional.- Caja tridimensional: Estados degenerados. Partícula en un pozo de potencial: Efecto túnel.- Rotor rígido: Momento angular.- Oscilador armónico.

Tema 4.- El átomo de hidrógeno.

Ecuación de ondas para el átomo de hidrógeno.- Función de onda radial y angular.- Forma y tamaño de los orbitales atómicos.- Impulso angular orbital.- Espín del electrón.- Impulso angular total.- Energía de los orbitales. Espectro de los átomos hidrogenoides.

Tema 5.- Átomos polielectrónicos I.

Métodos aproximados para resolver la ecuación de Schrödinger: variaciones y perturbaciones.- Método del campo autoconsistente.- Orbitales aproximados de Slater.- Funciones de onda simétricas y antisimétricas.- Principio de exclusión de Pauli.

Tema 6.- Átomos polielectrónicos II.

Propiedades periódicas.- Origen de los términos espectrales.- Efecto de los campos eléctricos.- Efecto de los campos magnéticos.

Código Seguro de verificación:TE60tUNbyieeHA9w21jWng==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/6



II.? Estructura Molecular y Teoría del Enlace Químico.

Tema 7.- La naturaleza del enlace químico.

El hamiltoniano molecular: Significado de cada una de las contribuciones.? Aproximación de Born?Oppenheimer: Separación de las contribuciones electrónica y nuclear. Ecuación de ondas electrónica.? Separación de las contribuciones de traslación, de rotación y de vibración. Ecuación de ondas nuclear.? Limitaciones de la aproximación de Born?Oppenheimer.

Tema 8.- Molécula de hidrógeno.

Enlace químico.? Fundamentos de las teorías mecanocuánticas del enlace químico: Hipótesis básicas y aproximaciones.? Método de orbitales moleculares. Aproximación

CLOA.? Estudio de la molécula ión de hidrógeno, H<sub>2</sub><sup>+</sup>.? Estudio de la molécula de hidrógeno.? Características energéticas y estructurales de los enlaces.

Tema 9.- Moléculas diatómicas.

Generalización del método de OM a moléculas diatómicas: Orbitales moleculares s y p enlazante y antienlazante. Niveles de energía. Diagramas de correlación.? Poblaciones electrónicas: carácter iónico o covalente del enlace.- Electronegatividad.? El método de enlaces de valencia (EV): características y limitaciones.

Tema 10.- Moléculas poliatómicas.

Estructura electrónica de las moléculas poliatómicas.? Aplicación del método OM. Aproximación CLOA.? Orbitales atómicos localizados: Teoría de hibridación.? Principales tipos de orbitales híbridos.? Ideas actuales acerca del estudio mecanocuántico de las moléculas poliatómicas: Métodos "ab- initio" y semiempíricos.

Tema 11.- Moléculas conjugadas y aromáticas.

Conjugación y resonancia.? Mesomería.? Aplicación del método OM: Separación.? Aproximación de Hückel: Estudio del benceno, de hidrocarburos polibencénicos y de moléculas heterocíclicas y sustituidas.? Índices de reactividad: Densidad de carga. Orden de enlace móvil. Valencia libre. Orden total de enlace.? Diagramas moleculares.? Reactividad química.

ELECTROQUÍMICA

Tema 12.- Disoluciones de electrolitos.

Código Seguro de verificación:TE60tUNbyieeHA9w21jWng==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/6



Leyes de Faraday.- Conductividad específica y molar.- Electrólitos débiles: teoría de Arrhenius.- Electrólitos fuertes.- Teoría de Debye-Hückel-Onsager.- Ley de Kohlrausch de la migración independiente de los iones.- Índices de transporte.

Tema 13.- La interfase electrodo-electrolito.

La doble capa eléctrica.- Sobretensión y polarización.- Ecuación de Butler-Volmer.

Tema 14.- Celdas electroquímicas.

Definiciones y generalidades.- Descripción y funcionamiento de una pila electroquímica sencilla.- Medida de la fuerza electromotriz de una pila.- Pilas patrón.- Ley de Nernst.- Tipos de electrodo.- Potenciales estándar de electrodo.- Tipos de celdas electroquímicas.- Corrosión y protección de metales.

Tema 15.- Aplicaciones de las medidas de fuerza electromotriz.

Determinación de coeficientes de actividad.- Determinación de índices de transporte.- Determinación de constantes de equilibrio y funciones termodinámicas.- Valoraciones potenciométricas.- Determinación potenciométrica del pH.

### CINÉTICA QUÍMICA

Tema 16.- Velocidad de reacción.

Estudio experimental y ecuaciones empíricas de velocidad.- Análisis de los resultados cinéticos.- Reacciones complejas.- Influencia de la temperatura sobre la velocidad de reacción: ecuación de Arrhenius.

Tema 17.- Estudio teórico de la velocidad de reacción.

Teoría de colisiones.- Teoría del complejo activado.- Superficies de energía potencial.- Comparación entre las diferentes teorías.

Tema 18.- Mecanismos compuestos.

Reacciones en fase gaseosa y en solución.- Reacciones en cadena.- Explosiones. Reacciones en solución: características cinéticas especiales.- Catálisis: características y tipos.

Tema 19.- Fotoquímica.

Procesos primarios y secundarios.- Diagramas de Jablonsky.- Cinética de procesos fotofísicos y fotoquímicos.- Reacciones fotoquímicas.- Rendimiento cuántico.-

Código Seguro de verificación:TE60tUNbyieeHA9w21jWng==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/6



Técnicas experimentales.

Campus Universitario de Puerto Real. Polígono Río San Pedro s/n.11510. Puerto Real (Cádiz). Spain. Tel: 34.956.016300 . Fax: 34.956.016288

44

Código Seguro de verificación:TE60tUNbyieeHA9w21jWng==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	4/6



TE60tUNbyieeHA9w21jWng==

TEMARIO PRÁCTICO: QUÍMICA FÍSICA

Consta de 20 clases de problemas, que se van explicando a medida que se acaban los temas de teoría que pretenden ilustrar.

Campus Universitario de Puerto Real. Polígono Río San Pedro s/n.11510. Puerto Real (Cádiz). Spain. Tel: 34.956.016300 . Fax: 34.956.016288

Código Seguro de verificación:TE60tUNbyieeHA9w21jWng==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	5/6



TE60tUNbyieeHA9w21jWng==

**BIBLIOGRAFÍA: QUÍMICA FÍSICA (Grupo A)**

- ATKINS, P.W.: "Fisicoquímica". Addison-Wesley Iberoamericana. (1991).  
 ADAMSON, A.W.: "Química Física". Ed. Reverté. (1979).  
 BARROW, G.M.: "Química Física". Vol. I y II. Ed. Reverté. (1988).  
 CASTELLAN, G.W.: "Fisicoquímica". Fondo Educativo Interamericano. (1987).  
 DIAZ, M. Y ROIG, A.: "Química Física". Vol. I y II. Ed. Alhambra. (1988-89).  
 LEVINE, Ira N.: "Fisicoquímica". McGraw Hill. (1981).  
 MOORE, W.J.: "Química Física". Ed. Urmo. (1978).

Campus Universitario de Puerto Real. Polígono Río San Pedro s/n.11510. Puerto Real (Cádiz), Spain. Tel: 34.956.016300 . Fax: 34.956.016288

Código Seguro de verificación:TE60tUNbyieeHA9w21jWng==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
 Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	6/6



TE60tUNbyieeHA9w21jWng==