

## Programa Analítico del curso de Físicoquímica Ambiental

❖ Elementos de química cuántica. Ecuación de Schrödinger. Aplicaciones a problemas de interés en físicoquímica. Sistemas cuánticos simples: partícula libre, partícula en una caja unidimensional, partícula en una caja tridimensional, oscilador armónico, rotor rígido en el plano, rotor rígido esférico. Átomo de Hidrógeno. Átomos plurielectrónicos. Estructura molecular. Espectroscopias moleculares. Espectroscopia de microondas. Espectroscopia IR. Espectroscopia electrónica. Espectros de contaminantes simples. Interpretación de los espectros. Reglas de selección. Fluorescencia y fosforescencia. Diagramas de Jablonsky. Fotoquímica. Leyes de la fotoquímica. Procesos fotoquímicos. Rendimientos cuánticos. Decaimiento radiativo y no radiativo. Reacciones de interés en química de la atmósfera. Tecnologías de degradación fotoquímica de contaminantes.

❖ Elementos de termodinámica estadística. Configuraciones y pesos estadísticos. Configuración dominante. Función de partición molecular. Funciones termodinámicas y función de partición. Entropía estadística. Función de partición canónica y la constante de equilibrio químico. Aplicaciones de la termodinámica estadística. Energía media traslacional, rotacional, vibracional y electrónica. Contribuciones individuales a la capacidad calorífica. Ejemplos con contaminantes antropogénicos (CO, NO<sub>x</sub>, CO<sub>2</sub>). Cálculo de constantes de equilibrio utilizando funciones de partición. Ejemplos de interés ambiental. Cálculo del índice GWP.

❖ Fenómenos de transporte en soluciones de electrolitos. Conductancia y conductividad. Comportamientos experimentales. Conductividad molar y su dependencia con la concentración para electrolitos fuertes y débiles. Conductividad molar a dilución infinita. Su evaluación para electrolitos fuertes y débiles. Ley de Kohlrausch de migración independiente de los iones. Movilidad iónica, conductividad iónica y número de transporte. Grado de disociación y conductividad molar. Aspectos teóricos de la conductividad de electrolitos. Efectos de relajación y electroforético. Ciclos redox en aguas y sedimentos.

❖ Físicoquímica de sistemas acuosos. Equilibrios homogéneos y heterogéneos. Reacciones típicas de contaminantes en los diversos compartimentos ambientales. Cinética química. Iones metálicos y sus complejos

❖ Transferencia entre compartimentos ambientales. Equilibrios entre fases. Condiciones generales de equilibrio. Ley de Henry, constantes de Henry de contaminantes. Coeficiente de reparto. Reparto aire-aerosoles. Reparto en sistemas bifásicos. Coeficiente de reparto octanol-agua. Efecto de la temperatura. Correlaciones. Ecuación de Junge-Pankow. Asociación de compuestos naturales con sustancias no polares, efecto en la movilidad.

### Bibliografía básica

1. Físicoquímica, Levine, 5ta Ed.
2. Physical Chemistry, Atkins, De Paula, 2nd Ed
3. Química física del ambiente y de los procesos medioambientales, Juan E. Figueruelo, Martín Marino Dávila, Reverté, 2004
4. Michael Mueller, Fundamentals of Quantum Chemistry, Kluwer Academic Publishers, 2002
5. Statistical Thermodynamics, Norman Laurendeau, Cambridge University Press, 2005