

INSTITUTO DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
U.B.A

- 1 - DEPARTAMENTO : FISICA
- 2 - CARRERA de: a) Licenciatura en...Ce. Físicas..... ORIENTACION.....  
 b) Doctorado y/o Post-Grado en.....  
 c) Profesorado en.....  
 d) Cursos Técnicos en Meteorología.....  
 e) Cursos de Idiomas.....
- 3 - 1er. CUATRIMESTRE/2do. CUATRIMESTRE Año: 1er. cuatrimestre 1995
- 4 - N° DE CODIGO DE CARRERA: 02
- 5 - MATERIA, ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3..... N° DE CODIGO
- 6 - PUNTAJE PROPUESTO:
- 7 - PLAN DE ESTUDIO : 1987
- 8 - CARACTER DE LA MATERIA: Obligatorio
- 9 - DURACION: Cuatrimestral
- 10 - HORAS DE CLASES SEMANAL: 6(sis)
  - a) Teóricas.....3..... hs.    d) Seminarios..... hs.
  - b) Problemas.....3..... hs.    e) Teórico-problemas..... hs.
  - c) Laboratorio..... hs.    f) Teórico-prácticas..... hs.
  - g) Totales Horas:.....6..... hs.
- 11 - CARGA HORARIA TOTAL:.....6.....hs.
- 12 - ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Trab. Prácticos Física Teórica 2 y 3 .
- 13 - FORMA DE EVALUACION: Examen Final
- 14 - PROGRAMA ANALITICO: (Se adjunta)
- 15 - BIBLIOGRAFIA: (Se adjunta)

FECHA: 28 FEB 1996

FIRMA PROFESOR: Mercado

FIRMA DIRECTOR: J. Dusset

ACLARACION FIRMA: Dr. Martín C. Ruiz de Azúa

DR. GUILLERMO DUSSET  
DIRECTOR  
DEPARTAMENTO DE FISICA

APROBADO POR RESOLUCION CD. N° 268/96

Materia: Estructura de la materia 3

Prof.: Martín C. Ruiz de Azúa

Carga horaria: Teóricas: 3hs Prácticas: 3hs semanales

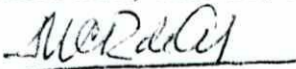
Sistema de aprobación: Corrección de problemas y examen.

Contenidos:

1. Hamiltoniano molecular. Aproximación de Born-Oppenheimer. El Hamiltoniano electrónico. Representación de estados multielectrónicos. La interacción de intercambio. El principio variacional de Ritz. Matriz del Hamiltoniano: interacción de configuraciones.
2. El átomo: Niveles de energía y estados de un electrón. Átomos multielectrónicos: simetrías del Hamiltoniano y clasificación de estados. Configuraciones electrónicas. Reglas de Hund. Valencia atómica. Electronegatividad. La tabla periódica de los elementos. Hibridización de orbitales atómicos.
3. Las ecuaciones de Hartree-Fock. Teorema de Koopmans: afinidad electrónica y potencial de ionización. Teorema de Brillouin. Análisis de la condición de mínimo del estado de Hartree-Fock. Capa cerrada: ecuaciones de Roothaan. Capa abierta: ecuaciones de Pople Nesbet. Partición de Moeller-Plesset del Hamiltoniano electrónico.
4. Moléculas diatómicas. Simetrías del Hamiltoniano y clasificación de estados. Enlace iónico y covalente. Representación por orbitales híbridos. Análisis de la serie homonuclear  $X_2$ . Carácter triplete del oxígeno molecular. Curva de energía potencial para la coordenada internuclear. Disociación.
5. Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo: campo electromagnético de frecuencia  $\omega$  sobre un sistema localizado: aproximación dipolar eléctrica. Reglas de selección.
6. Espectroscopía rotacional. Moléculas diatómicas: espectro, reglas de selección. Moléculas tipo trompo simétrico. Información estructural. Modelo clásico de la espectroscopía Raman. Espectroscopía vibracional. Moléculas diatómicas: espectro, reglas de selección. Acoplamiento rotacional-vibracional. Energía de vibración de "punto cero". Moléculas poliatómicas: modos normales.
7. Espectroscopía electrónica. El principio de Franck-Condon. Reglas de selección. Descripción cualitativa de fenómenos de relajación: fluorescencia y fosforescencia. Polarizabilidad electrónica. Aproximación MECL.
8. Elementos de segunda cuantificación. Función de Green de una partícula en sistemas mono y multielectrónicos. Representación espectral. Análisis de polos y residuos. Relación con observables físicos. Interpretación física.

#### Bibliografía

1. L. D. Landau y E. M. Lifshitz, "Quantum Mechanics", Course of Theoretical Physics, Vol. 3, Pergamon Press, 1977.
2. A. Szabó y N. S. Ostlund, "Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structural Theory", Mc.Millan, New York, 1982.
3. C. Cohen-Tanoudji, B. Diu, F. Laloe, "Quantum Mechanics", J. Wiley & Sons, 1977.
4. P. W. Atkins, "Molecular Quantum Mechanics", Clarendon Press, Oxford, 1970.

  
MARTÍN C. RUIZ DE AZÚA

