

PROGRAMA DE QUIMICA-FISICA III

(QUIMICA CUANTICA)

12 9 I
1980
AÑO 1980

A cargo de: Dra. A. Batana, Prof. Asoc. Int.

Bolilla I.-

El principio de incerteza. Ecuaciones de Schödinger dependiente e independiente del tiempo. Interpretación física derivada de las funciones de onda. Probabilidad. Operadores y mecánica cuántica. Autofunciones y autovalores. Sistemas simples: Partícula libre en una dimensión, partícula en cajas uni- y tridimensionales. Degeneración. Valores medios. Oscilador armónico unidimensional.

Bolilla II.

El momento angular de un sistema de una partícula. Problema de fuerzas centrales. Reducción del problema de dos partículas al de una partícula. Rotor rígido de dos partículas. Atomo de hidrógeno. Orbitales atómicos. Orbitales tipo hidrógeno. Efecto Zeeman.

Bolilla III.

Operadores hermiticos. Expansión en términos de autofunciones. Autofunciones de operadores que conmutan. Paridad. Superposición de estados. Autofunciones del operador posición. Postulados de mecánica cuántica.

Bolilla IV.

Métodos aproximados. Principio variacional. Extensión del método variacional. Funciones variacionales lineales. Teoría de perturbaciones para niveles de energía no-degenerados y degenerados. Aplicaciones. Comparación de los métodos variacional y de perturbaciones. Técnicas de teoría de perturbaciones.

ps
Dra. J. F. POSSIDONI de ALBINATI
DIRECTORA DEL DPTO. DE
QUIMICA INORGANICA ANALITICA
Y QUIMICA - FISICA

Aprobado por Resolución DT 19/80

Bolilla V.

Spin electrónico. Principio de Pauli. Determinante de Slater. Aplicaciones de los métodos variacional y de perturbaciones. Momento magnético de spin.

Bolilla VI.

Átomos multielectrónicos. Método autoconsistente de Hartree-Fock. Orbitales y tabla periódica. Correlación electrónica. Momento angular de átomos multielectrónicos. Interacción spin-órbita.

Bolilla VII.

Simetría molecular. Elementos, operaciones y productos de operaciones de simetría. Grupos puntuales. Representaciones de grupos. Producto directo. Operadores proyección. Aplicaciones.

Bolilla VIII.

Aproximación de Born-Oppenheimer. Molécula ion hidrógeno. Teoría de orbitales moleculares. Términos electrónicos moleculares. Molécula de hidrógeno. Teoría de uniones de valencia. Moléculas diatómicas homo- y heteronucleares. Aproximación del electrón de valencia. Funciones de onda autoconsistentes. Teorema de virial y unión química. Teorema de Hellmann-Feynman. Teorema electrostático.

Bolilla IX.

Estructura electrónica de moléculas poliatómicas. Términos electrónicos. Teoría autoconsistente de orbitales moleculares. Orbitales moleculares localizados. Uso de simetría en problemas de valencia: simetría y orbitales moleculares, orbitales híbridos, reglas de selección e interacción de configuraciones. Teorías aproximadas de orbitales moleculares. Geometría molecular. Reacciones químicas.



Dra. J. F. POSSIDONI de ALBINATI
DIRECTORA DEL DPTO. DE
QUIMICA INORGANICA ANALITICA
Y QUIMICA - FISICA