

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: Química Física III (Química Cuántica)

CARRERA: Doctorado en Químicas

ORIENTACION: Qca. Física

PLAN: 1961

CARACTER: Obligatoria

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: a) Teóricas 4hs. b) Problemas 8hs.
(semanales) c) Laboratorio -hs. d) Seminarios-hs. e) Totales: 12 horas

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura en Cs. Químicas -- Qca. Física (II)

PROGRAMA

- 1.- El principio de incertezas. Ecuaciones de Schrödinger 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 de una dimensión, partícula en cajas uni- y tridimensionales. De generación. Valores medios. Oscilador armónico unidimensional.
- 2.- 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. Átomo de hidrógeno. Orbitales atómicos. Orbitales tipo hidrógeno. Efecto Zeeman.--
- 3.- Operadores hermiticos. Expansión en término de autofunciones. Autofunciones de operadores que conmutan. Paridad. Superposición de estados. Autofunciones de operador posición. Postulados de mecánica cuántica.
- 4.- 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.
- 5.- Spin electrónico. Principio de Pauli. Determinante de Slater. Aplicaciones de los métodos variacional y de perturbaciones. Momento magnético de spin.
- 6.- Átomos multielectrónicos. Método autoconsistente de Hartree-Fock. Orbitales y tabla periódica. Correlación electrónica. Momento angular de átomos multielectrónicos. Interacción spin-órbita.
- 7.- Simetría molecular. Elementos, operaciones y productos de operaciones de simetría. Grupos puntuales. Representaciones de grupos. Producto directo. Operadores proyección. Aplicaciones.

./.

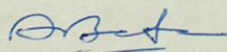
- 8.- Aproximación de Born-Oppenheimer. Molécula ion hidrógeno. Teoría de orbitales moleculares. Términos electrónicos moleculares. Molécula de hidrógeno. Teoría de uniones de valencia. Moléculas diatómicas homo-y heteronucleares. Aproximación del electrón de valencia. Funciones de onda autoconsistentes. Teorema de virial y unión química. Teorema de Hellmann-Feynman. Teorema electrostático.
- 9.- 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.-

BIBLIOGRAFIA

- 1.- I.N. Levine, Quantum Chemistry, Allyn and Bacon, 2nd. Ed. (1974).
- 2.- J.P. Lowe, Quantum Chemistry, Academic Press (1978)
- 3.- F.A. Cotton, Chemical Applications of Group Theory, Wiley, 2nd. Ed. (1971).
- 4.- D.S. Urch, Orbitales and Symmetry, The Mac Millan Press Ltd. (1970).
- 5.- C.A. Coulson, Valence, Oxford Univ. Press, 2nd. Ed. (1961).
- 6.- J.N. Murrell, S.F.A. Kettle and J.M. Tedder; Valence Theory, Wiley (1970).
- 7.- H. Eyring, J. Walter and G.E. Kimball; Quantum Chemistry, Wiley (1967).
- 8.- L. Pauling and E.B. Wilson, Introduction to Quantum Mechanics, McGraw-Hill (1935)
- 9.- J.A. Pople and D.L. Beveridge, Approximate Molecular Orbital Theory, McGraw Hill (1970).
- 10.- H.F. Schaeffer, The Electronic Structure of Atoms and Molecules, Addison-Wesley (1972).
- 11.- J.A. Salthouse and M.J. Ware, Point Group Character Tables and Related Data, Cambridge Univ. Press (1972).
- 12.- A. Messiah, Quantum Mechanics, Vol. 1 and 2, North Holland (1961).
- 13.- P.A.M. Dirac, The principles of Quantum Mechanics, Oxfordarendon Press (1962).
- 14.- L.D. Landau and E. Lifshitz, Quantum Mechanics, Pergamon Press (1959).

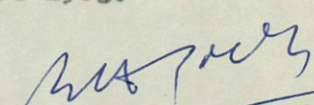
Fecha; Noviembre 1983.

firma profesor:



aclaración firma: Dra. A. BAPANA

firma director:


 DR. R. H. RODRIGUEZ PASQUES
 DIRECTOR DEPTO.

aclaración firma: INGER. ANAL. Y QCA. FIS.