

Q I 1994
18

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas

ORIENTACION:

1er. CUATRIMESTRE: AÑO 1994

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: Química Cuántica

CODIGO: 5072

PUNTAJE: 5

PLAN DE ESTUDIO: - 1987

CARACTER DE LA MATERIA: -

DURACION: cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL: * Teóricas: 4 hs
* Problemas: 6 hs

TOTAL: 10 hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 160

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: -

FORMA DE EVALUACION: 2 parciales y 1 final.

PROGRAMA ANALITICO:

- 1) El principio de incerteza. Ecuaciones de Schrödinger dependiente e independiente del tiempo. Interpretación física derivada de las funciones de onda. Autofunciones y autovalores. El momento angular de sistemas de una partícula. Problemas de fuerzas centrales. Atomo de hidrógeno. Orbitales atómicos.
- 2) Operadores hermiticos. Expansión en términos de autofunciones. Autofunciones de operadores que conmutan. Paridad. Superposición de estados. Autofunciones del operador posición. Postulados de mecánica cuántica.
- 3) 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.
- 4) Spin electrónico. Principio de Pauli. Determinante de Slater. Aplicaciones de los métodos variacional y de perturbaciones. Momento magnético de spin.

APROBADO POR RESOLUCION 09 1269/94


Enrique A. SAN ROMAN
Director
Dpto. QCA, INORG. ANAL. QCA, FIS.

//

- 5) Átomos multieletrónicos. Método autoconsistente de Hartree-Fock. Orbitales y tabla periódica. Correlación electrónica. Momento angular de átomos multieletrónicos. Interacción spin-órbita.
- 6) Simetría molecular. Elementos, operaciones y productos de operaciones de simetría. Grupos puntuales. Representaciones de grupos. Producto directo. Operadores de proyección. Aplicaciones.
- 7) Aproximación de Born-Oppenheimer. Moléculas diatómicas homo y heteronucleares. Teoría de orbitales moleculares. Teoría de uniones de valencia. Términos electrónicos moleculares. Estructura electrónica de moléculas poliatómicas. Teoría autoconsistente de orbitales moleculares. Sistema de base. Energía de correlación. Interacción de configuraciones.
- 8) Métodos semiempíricos de orbitales moleculares. Método de Hückel, aplicaciones, importancia de simetría. Extensión a moléculas heteroatómicas. Método de Hückel extendido. Tratamiento semiempírico de moléculas no planas. Uso de simetría en problemas de valencia.
- 9) Espectroscopía vibraciones. Objetivo. Niveles de energía. Espectrofotómetros. Transiciones resonantes y no resonantes. Espectroscopía de absorción de infrarrojo. Espectroscopía Raman. Momento dipolar, polarizabilidad, momento dipolar. Reglas de selección particulares, generales y por simetría. Repaso de álgebra lineal. Diagonalización de matrices.
- 10) Transiciones vibracionales y electrónicas en la aproximación de Born-Oppenheimer. Condiciones de Eckart. Mecánica clásica de las pequeñas oscilaciones. Constantes de fuerza, autovalores. Coordenadas normales, modos normales (aproximación armónica). Ecuación de Schrödinger para 3n-6 osciladores. Anarmonicidad: sobre tonos y bandas de combinación.
- 11) Computación y aplicaciones. Método de ortogonalización de Schmidt. Cálculo de autovalores y autovectores. Método de Hückel. Métodos semiempíricos. Vibraciones de la molécula de agua.

BIBLIOGRAFIA

- * Quantum Chemistry; I.N. Levine, Ed. Allyn and Bacon, 2nd. ed. (1974)
- * Quantum Chemistry; J.P. Lowe, Ed. Academic Press (1978)
- * Chemical applications of Group Theory; F.A. Cotton, Ed. Wiley, 2nd. ed. (1971)
- * Orbitales and Symmetry; D.S. Urch, Ed. The Mac Millan Press Ltd. (1970)
- * Valence Theory; J.N. Murrell, S.F.A. Kettle & J.M. Tedder, Ed. Wiley (1970)
- * Quantum Chemistry; H. Eyring, J. Walter & G.E. Kimball; Ed. Wiley (1967)
- * Introduction to Quantum Mechanics; L. Pauling & E.B. Wilson; Ed. McGraw-Hill (1935)
- * Approximate Molecular Orbital Theory; J.A. Pople & D.L. Beveridge, Ed. McGraw-Hill (1970)
- * The Electronic Structure of Atoms and Molecules; H.F. Schaeffer, Ed. Addison Wesley (1978)
- * Point Group Character Tables and Related Data; J.A. Salyhouse & M.J. Ware, Ed. Cambridge Univ. Press (1972)
- * Quantum Mechanics, Vol 1 y 2; A. Messiah, Ed. North-Holland (1961)

///

Dr. ENRIQUE A. SAN ROMÁN
Director

Depto. QCA. INORG. ANAL. QCA. FIS.

///

- * The Principles of Quantum Mechanics; P.A.M.Dirac, Ed.Oxford Clarendon Press (1962)
- * Quantum Mechanics; L.D.Landau & E.M.Lifshitz, Ed.Pergamon Press (1959)
- * Molecular Vibrations; E.B.Wilson, J.C.Decius & P.C.Cross, Ed.McGraw-Hill (1970)
- * Raman Spectroscopy of Gases and Liquids; A.Weber, Ed.Springer-Verlag (1979)



Dr. ENRIQUE A. SAN ROMAN
 Director
 Depto. QCA. INORG. ANAL. QCA. FIS.