

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas

2^{do} CUATRIMESTRE: AÑO 1995

CÓDIGO DE CARRERA: 01

MATERIA: Química Cuántica

CÓDIGO: 5072

PUNTAJE: 5 (cinco) puntos.

PLAN DE ESTUDIO: AÑO 1987

CARACTER DE LA MATERIA: optativa.

DURACION: cuatrimestral.

HORAS DE CLASE SEMANALES: Seminarios teórico-prácticos 10 hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 160 horas.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Química Física II.

FORMA DE EVALUACIÓN: 2 (dos) parciales y examen final.

PROGRAMA ANALÍTICO:

• **Unidad 1: Fundamentos de la Mecánica Cuántica.**

Nociones de espacios vectoriales. Espacio de estados. Operadores lineales. Operadores hermíticos y observables. Autoestados y autovalores. Conmutadores. Principio de incerteza. Operador paridad. Operadores unitarios. Notación de Dirac. Postulados de la Mecánica Cuántica. Reglas de cuantización. Relación entre probabilidad y amplitud. Interferencia cuántica. Propiedades de la ecuación de Schrödinger. Estados estacionarios y sistemas conservativos. Operador evolución y dinámica de funciones de onda. Matriz densidad y estadística cuántica.

• **Unidad 2: Aplicaciones a sistemas sencillos.**

Sistemas de dos niveles. Matrices de Pauli. Oscilador armónico. Operadores de creación y destrucción. Aplicaciones a fonones y fotones. Álgebra del momento angular. Propiedades. Partícula en un potencial central. Sistemas hidrogenoides. Espín electrónico. Adición de momentos angulares. Coeficientes de Clebsch-Gordan. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo. Método variacional. Aplicaciones a autoestados degenerados y no degenerados. Ejemplos simples: efec-

[Handwritten signature]

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES	
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES	
ENTRO	SALIO
1 DIC 1995	
5022 - QI A SF -	

[Handwritten signature]

los Zeeman y Stark. Perturbaciones dependientes del tiempo. Interacción de una partícula con la radiación electromagnética. Fórmula de Rabi.

- **Unidad 3: La Aproximación de Hartree-Fock**

La aproximación de Hartree-Fock. Operadores de Coulomb y de intercambio. El operador de Fock. Derivación de las ecuaciones de Hartree-Fock. Sistemas de partículas idénticas. Principio de Pauli y simetrización. Determinantes de Slater. Las ecuaciones canónicas de Hartree-Fock. Energías orbitales y el teorema de Koopmans. Utilización de funciones de base. Ecuaciones de Roothaan para el caso de moléculas de capa cerrada. El procedimiento de campo autoconsistente. Implementaciones computacionales. Ejemplos. Valores medios, análisis de orbitales moleculares y poblacionales. Funciones de base: funciones contraídas. Bases minimales. Funciones de polarización.

Métodos semiempíricos de orbitales moleculares. Reseña: métodos PPP, Hückel, CNDO, INDO. Hamiltonianos MNDO, MINDO, AM1 y PM3. Implementaciones computacionales. Ejemplos de cálculo en moléculas y sólidos. Sistemas de capa abierta. Ecuaciones de Pople-Nesbet. Cálculos no restringidos de Hartree-Fock. Casos ilustrativos: energías totales, geometrías de equilibrio, modos normales de vibración, potenciales de ionización, estados excitados.

- **Unidad 4: La correlación electrónica.**

Funciones de onda multiconfiguracionales. Método de interacción de configuraciones (CI). Métodos de campo autoconsistente multiconfiguracionales (MCSCF) y de funciones de onda de valencia generalizadas. Métodos perturbativos. Teoría perturbacional de Moller-Plesset. Implementaciones computacionales. Aplicaciones a geometrías de equilibrio, potenciales de ionización y estados excitados.

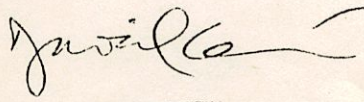
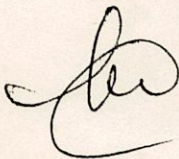
Teoría de los funcionales de la densidad. Implementaciones con funciones localizadas y con funciones de onda planas. Implementaciones computacionales. Aplicaciones a determinación de geometrías de equilibrio, modos normales de vibración y potenciales de ionización. Análisis de orbitales moleculares y poblacionales.

- **Unidad 5: Simetría Molecular.**

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

- **Unidad 6: Transiciones moleculares.**

Rotaciones moleculares. Reglas de selección rotacionales. Estadística nuclear. Vi-



braciones moleculares. Espectro rotovibracional de moléculas diatómicas. Vibraciones de moléculas poliatómicas. Aplicaciones de la teoría de grupos. Anarmonicidades. Fuerzas de Coriolis.

Espectro electrónico de moléculas poliatómicas. Cromóforos. Transiciones vibrónicamente permitidas. Transiciones singulete-triplete. Decaimiento de la excitación. Conservación de la simetría orbital.

• **Unidad 7: Propiedades eléctricas y magnéticas de moléculas.**

Polarizabilidad eléctrica. Índice de refracción. Actividad óptica. Susceptibilidad magnética. Densidad de corriente diamagnética y paramagnética. Constantes de apantallamiento. Apantallamiento por grupos vecinos. Transferencia de carga.

Bibliografía

- I. Levine, *Quantum Chemistry*, Allyn and Bacon, 2a. Ed., 1974.
A. Szabo y N.S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry*, McGraw Hill, 1989.
P.W. Atkins, *Molecular Quantum Mechanics*, 2a. Ed., Oxford University Press, 1988.
J.A. Pople y D.L. Beveridge, *Approximate Molecular Orbital Theory*, McGraw Hill, 1970.
W.J. Hehre, L. Radom, P.Schleyer y J. Pople, *Ab-initio Molecular Orbital Theory*, Wiley, 1986.
R.G. Parr y W. Yang, *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, 1989.
A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North Holland, 1961.
P.A. Dirac, *The principles of Quantum Mechanics*, 1962.
L. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, 1968.
E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Wiley, 1970.
C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloe, *Quantum Mechanics*, J.Wiley, 1977.
L.D. Landau y E. Lifschitz *Quantum Mechanics. Non relativistic theory*, Pergamon , 1965.

Dra. LELIA E. DICELIO
Directora Adjunta
Depto. QCA. INORG. ANAL. QCA. FIS.

Dr. Lariz Daniel