

QUIMICA FISICA III.

Programa.

PARTE I. GENERALIDADES Y ATOMOS.

1. Introducción matemática. Teoría de las ecuaciones de Sturm - Liouville. Polinomios de Legendre y Laguerre. Relaciones de recurrencia.
2. Nociones de mecánica racional. Ecuaciones de Hamilton.
3. Introducción histórica. Hipótesis de Planck. El efecto fotoeléctrico. El espectro del hidrógeno y el átomo de Bohr. Hipótesis de de Broglie.
4. Ecuación de Schrödinger. Postulados generales. Aplicación a sistemas simples. Partícula libre. Barrera de potencial.
5. Relaciones de conmutación. Principio de incertidumbre. Interpretación física. Momento angular.
6. El átomo de Hidrógeno.
7. Métodos aproximados. Perturbaciones a casos no degenerado y degenerado. Perturbaciones dependientes del tiempo. Reglas de selección.
8. Variaciones. Método de Ritz. Método de Hartree.
9. Spin. Principio de exclusión. Aplicación a átomos complejos. Método de Slater.

PARTE II. MOLECULAS.

10. Matrices. Teoría de Grupos.
11. Moléculas. Método de Ligaduras de Valencia. Método de Orbitales Moleculares. Relación entre ambos métodos.

...//...

12. Moléculas diatómicas : homonucleares y heteronucleares. Poliatómicas.
Hibridización. Método de Hückel. Uniones localizadas.

CLASES TEORICAS : Lunes y Jueves, 18³⁰ - 20³⁰ hrs.