

QUÍMICA FÍSICA III (Mecánica Cuántica)

1er cuatrimestre 1972.-

- 1.- Introducción. Dualidad onda partícula. Átomo de Bohr. Espectroscopia. Experiencia de Franck y Hertz. Experiencia de Stern y Gerlach. Principio de Planck. Principio de Heisenberg. Incerteza.
- 2.- Revisión de mecánica clásica. Mecánica de Newton. Mecánica de Hamilton. Lagrangiano. Ecuaciones de Lagrange. Ecuaciones de Hamilton. Corchete de Poisson.
- 3.- Postulados de la mecánica cuántica. Vector estado. Autovalor. Valor medio. Operador. Relación entre operadores y cantidades físicas. Hamiltoniano dependiente del tiempo. Mecánica matricial y mecánica ondulatoria.
- 4.- Álgebra lineal. Espacios euclidianos. Espacios hermiticos. Ortonormalidad. Método de Schmidt. Independencia lineal. Matrices: definiciones y propiedades. Determinantes. Transformaciones ortogonales. Operadores hermiticos y unitarios, teorema. Elemento de matriz. Operador de proyección. Resolución de la ecuación secular.
- 5.- Funciones ortogonales. Producto interno. Series de Fourier. Polinomios de Legendre. Obtención por ortogonalización de Schmidt. Solución de la ecuación diferencial de Legendre. Relación de recurrencia. Función generadora de los polinomios de Legendre. Polinomios de Hermite. Polinomios de Laguerre.
- 6.- Problemas de potenciales constantes. La partícula libre. La partícula en la caja. Paridad de las funciones. Propiedades. Problemas con más de un potencial constante. Cajas vs. barreras, ejemplos químicos. Operador, divergencia y gradiente. Empleo de coordenadas generalizadas.
- 7.- Sistemas de N partículas. Sistemas con coordenadas múltiples. Teoremas de separación en la mecánica de muchas partículas. Problemas de fuerzas centrales. Simetrías de intercambio de partículas idénticas. Bosones y fermiones. Principio de exclusión de Pauli.
- 8.- Momento angular. Definiciones. Reglas de conmutación. Autovalores y autofunciones del momento angular. Armónicos esféricos. Rotor rígido. Moléculas diatómicas y poliatómicas. R.M.N. Suma de momentos angulares.
- 9.- Oscilador armónico. Teoría clásica de vibraciones. Sistemas de coordenadas. Ejemplos de resolución de problemas vibracionales para moléculas poliatómicas. Autovalores y autofunciones para el oscilador armónico. Polinomios de Hermite. Energía del oscilador armónico.

Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas
y Naturales

//..

10.- Átomo de hidrógeno, tratamiento en coordenadas esféricas. Orbitales atómicas hidrogenoides. Autofunción de la energía. Densidad de probabilidad radial. Funciones radiales. Funciones angulares. Estados excitados del átomo de hidrógeno.

11.- Métodos aproximados. Teoría de perturbaciones independientes del tiempo de primer orden, ejemplos. Oscilador anarmónico, átomo de helio. Teoría de perturbaciones de segundo orden y órdenes superiores.

12.- Método variacional. Principio variacional. Aplicaciones. Átomo de helio. Método de Hartree-Fock. Método LCAO. Técnicas mixtas. Método NKB. Aproximación de Born-Oppenheimer. Cálculo de parámetros físicos de una molécula: distancias internucleares, ángulos, momentos dipolares.

13.- Átomos, estados atómicos. Problema de muchos electrones. Reglas de Hund. Métodos de cálculo. Método de Hartree-Fock ó SCF. Acoplamiento spin órbita. Efecto Zeeman.

14.- Moléculas. Ión molécula de hidrógeno. Molécula de hidrógeno. Unión de valencia. Sistemática de la mecánica cuántica molecular para moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas. Resonancia. Orbitales moleculares. Método de Hückel.-