



17

Q

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

QUIMICA FISICA III (Mecánica Cuántica)

PRIMER CUATRIMESTRE DE 1971

PROFESORA: Dra. Olga Brieux de Mandirola

COLABORACION: Dra. Celia Puglisi de Baumgartner

CAPITULO 1: Introducción. Realidad en la partícula. Atomo de Bohr. Espectroscopia. Experiencia de Franck y Hertz. Experiencia de Stern y Gerlach. Principio de Planck. Principio de Heisenberg. Incertezza.

CAPITULO 2: Revisión de mecánica clásica. Mecánica de Newton. Mecánica de Hamilton. Lagrangiano. Ecuaciones de Lagrange. Ecuaciones de Hamilton. Corchete de Poisson.

CAPITULO 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.

CAPITULO 4: Algebra lineal. Espacios euclidianos. Espacios hermíticos. Ortonormalidad. Método de Schmidt. Independencia lineal. Matrices, definiciones y propiedades. Determinantes. Transformaciones ortogonales. Operadores hermíticos y unitarios, teoremas. Elemento de matriz. Operador proyección. Resolución de la ecuación secular.

CAPITULO 5: Funciones ortogonales. Producto interno. Series de Fourier. Polinomios 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.

CAPITULO 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 y barreras, ejemplos químicos. Operadores, divergencia y gradiente. Empleo de coordenadas generalizadas.

CAPITULO 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.

CAPITULO 8: Momento angular. Definiciones. Reglas de commutación. Autovalores y auto-funciones del momento angular. Armónicos esféricos. Rotor rígido. Moléculas diatómicas y poliatómicas. R.M.N. Suma de momentos angulares

//...

CAPITULO 9: Oscilador armónico. Teoría clásica de vibraciones. Sistemas de coordenadas. Ejemplos de resolución de problemas de vibraciones para moléculas poliatómicas. Autovectores y autofunciones para el oscilador armónico. Polinomios de Hermite. Energía del oscilador armónico.

CAPITULO 10: Atomo de hidrógeno, tratamiento en coordenadas esféricas. Orbitales atómicos hidrogenoides. Autofunción de la energía. Densidad de probabilidad radial. Funciones radiales. Funciones angulares. Estados excitados del átomo de hidrógeno.

CAPITULO 11: Métodos aproximados. teoría de perturbaciones independientes del tiempo de primer orden, ejemplos. Oscilador anharmónico, átomo de helio. Teoría de perturbaciones de segundo orden y órdenes superiores.

CAPITULO 12: Método variacional. Principio variacional. Aplicaciones. Atomo de helio Método de Hartree-Fock. Método LCAO. Técnicas mixtas. Método WKB. Aproximaciones de Pople-Oppenheimer. Cálculo de parámetros físicos de una molécula diatómica, distancias internucleares, ángulos, momentos dipolares.

CAPITULO 13: Atomas, estados atómicos. Problema de muchos electrones. Regla de Hund. Métodos de cálculo. Método de Hartree-Fock & SCF. Acoplamiento spin órbita. Efecto Zeeman.

CAPITULO 14: Molécula. 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.

CAPITULO 15: Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. Revisión de electricidad y magnetismo. Emisión inducida y absorción de radiación. Aplicación de la probabilidad de transición a la espectroscopía atómica y molecular.