

ELEMENTOS DE QUÍMICA CUÁNTICA

CONTENIDOS MÍNIMOS

1. Mecánica Clásica
 - 1.1 Ecuaciones de Newton
 - 1.2 Ecuaciones de Lagrange
 - 1.3 Ecuaciones de Hamilton

2. Elementos de Mecánica Cuántica
 - 2.1 Espacios vectoriales
 - 2.2 Operadores
 - 2.3 Postulados de la Mecánica Cuántica
 - 2.4 Relaciones de incertidumbre

3. Sistemas cuánticos simples
 - 3.1 Oscilador armónico
 - 3.2 Oscilador de Morse
 - 3.3 Efecto túnel

4. Procesos radiativos
 - 4.1 Interacción de la materia con la radiación
 - 4.2 Reglas de selección

5. Momento angular
 - 5.1 Relaciones de conmutación para el momento angular orbital
 - 5.2 Armónicos esféricos

6. Sistemas con potenciales esféricamente simétricos
 - 6.1 El átomo de hidrógeno
 - 6.2 Reglas de selección para el átomo de hidrógeno
 - 6.3 El rotor rígido

6.4 Espín electrónico

7. Métodos aproximados

7.1 Teoría de perturbaciones

7.2 Método variacional

7.3 Oscilaciones anarmónicas

7.4 Efecto Stark para el átomo de hidrógeno

7.5 Efecto Zeeman para el átomo de hidrógeno

8. Átomos plurielectrónicos

8.1 Átomo de Helio

8.2 Tratamiento perturbacional

8.3 Tratamiento variacional

8.4 Partículas indistinguibles

8.5 Determinantes de Slater

8.6 El método autoconsistente de Hartree-Fock

9. Elementos de Teoría de Grupos

9.1 Grupos

9.2 Tablas de caracteres

9.3 Representaciones irreducibles

9.4 Operadores de proyección

10. Estructura molecular

10.1 La aproximación de Born-Oppenheimer

10.2 Método de Hartree-Fock

10.3 Transiciones electrónicas

11. Estructura electrónica de moléculas diatómicas

11.1 El ión molécula de hidrógeno

11.3 La molécula de hidrógeno

- 11.4 Enlace valencia
- 11.5 Orbitales moleculares
- 11.6 Moléculas diatómicas homonucleares
- 11.7 Moléculas diatómicas heteronucleares
- 11.8 Fuerzas entre los átomos
- 11.9 Moléculas poliatómicas lineales

12. Estructura electrónica de moléculas poliatómicas no lineales

- 12.1 Orbitales híbridos, orbitales equivalentes, orbitales de enlace, orbitales de simetría
- 12.2 Molécula de agua
- 12.3 Molécula de amoníaco
- 12.4 Molécula de metano
- 12.5 Superficies de energía potencial

Bibliografía

- I. N. Levine, Química Cuántica, Editorial AC, 1977
- H. Eyring, J. Walter, G. E. Kimball, Quantum Chemistry, John Wiley, 1944
- F. L. Pilar, Elementary Quantum Chemistry, McGraw-Hill, 1968



Prof. Dr. Francisco Marcelo Fernández