

PRINCIPIOS DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA

TEMARIO

1. Antecedentes: Descubrimiento del electrón. Radiación electromagnética y espectro de la luz. Radiación de cuerpo negro. Planck: cuantización de la energía. Einstein: efecto fotoeléctrico y cuantización de la radiación. de Broglie: Naturaleza ondulatoria de las partículas. Difracción de electrones. La ecuación de Schrödinger.

2. Solución de la ecuación de Schrödinger. Partícula en una caja de potencial, en una y tres dimensiones. Oscilador armónico. Relaciones de incertidumbre. Átomos hidrogenoides.

3. Fundamentos de la mecánica cuántica. Operadores. Notación de Dirac. Axiomas de la mecánica cuántica. La interpretación de la función de onda. La densidad de probabilidad.

4. Solución de la ecuación de Schrödinger para moléculas. Hamiltoniano molecular. Aproximación de Born Oppenheimer.

5. Estructura Molecular.

Moléculas diatómicas con un solo electrón. Moléculas diatómicas homonucleares. Teoría de orbitales moleculares. Correlación. Integral de recubrimiento e integral de intercambio.

6. Moléculas diatómicas heteronucleares. Ejemplos con soluciones a detalle: Li-H, F-H. Moléculas poliatómicas.

7. Métodos de Huckle y de Hartree-Fock. Ejemplos.

8. Exposiciones. Se harán exposiciones en la última semana de clase. Se debe entregar un resumen de la exposición.

BIBLIOGRAFÍA

J. P. Lowe. Quantum Chemistry, Third edition. Elsevier Inc, 2006.

I. Levin, Quantum Chemistry, Fifth Edition, Prentice Hall, 2000.

P. Atkins and R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 3th. Edition, Oxford University Press, 2005.

Evaluación:

Tareas y exposiciones:

- Solución de la ecuación de Schrodinger para el oscilador armónico.
- anarmonicidad y resonancias en vibraciones de moléculas.
- Trompos esféricos, simétricos y asimétricos.
- Simetría de funciones de onda y Principio de Pauli.
- Aproximación de Hartree-Fock.

La calificación será el 70 % de los problemas y 30% de la exposición (oral y escrita).