

PROGRAMA DE QUIMICA-FISICA (primer cuatrimestre)

LECCION 1.- Génesis de la mecánica ondulatoria. Espectros atómicos. Radiación del cuerpo negro. Efecto fotoeléctrico. Modelos atómicos de Rutherford y Bohr. Inconsistencia de estos modelos. Hipótesis de De Broglie. Dualidad onda-corpúsculo. Ecuación de Schrödinger.

LECCION 2.- Postulados de la mecánica cuántica. Algebra de operadores. Postulado de cuantificación. Significado de la función de onda. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Postulado de la descomposición espectral. Consecuencias de los postulados. Principio de interminación de Heisenberg.

LECCION 3.- Partículas en una caja. Caja monodimensional. Caja tridimensional. Estados degenerados. Partículas en pozos de potencial. Efecto túnel. Aplicaciones de la partícula en una caja a la Química.

LECCION 4.- Momento angular. Tratamiento clásico y mecánico-cuántico. Propiedades de los conmutadores. Valores propios y funciones propias de los operadores L^2 y L_z . Interpretación física de l y m .

LECCION 5.- Atomo de hidrógeno. Problema de fuerzas centrales. Números cuánticos, energía y función de onda del átomo de hidrógeno. Distribución radial y angular de los diferentes orbitales. Spin electrónico y estructura fina del espectro.

LECCION 6.- Métodos aproximados. Principio variacional. Teorema de Eckart. Aplicación al estudio del átomo de helio. Teoría de perturbación independiente del tiempo para estados no degenerados. Aplicación al estudio del átomo de helio.

LECCION 7.- Atomos polieletrónicos. Principio de exclusión de Pauli. Determinaciones de Slater. Modelo de electrones independientes y noción de orbitales atómicos. Método autoconistente de Hartree-Fock. Hamiltoniano atómico completo. Estados derivados de una misma configuración electrónica. Reglas de Hund.

LECCION 8.- El enlace químico. La molécula ión H_2^+ . Aproximación de Born-Oppenheimer. Solución exacta. Orbitales moleculares. Aproximación de los orbitales moleculares. Aproxima-

ción de los orbitales moleculares como combinación lineal de orbitales atómicos (MO-LCAO).

LECCION 9.- La molécula de hidrógeno. Método de orbitales moleculares. Método de enlaces de valencia (EV). Inclusión de estructuras iónicas en el método de la mesomeria. Concepto de resonancia. Comparación de los resultados obtenidos por las teorías de EV y OM. Cálculos más exactos.

LECCION 10.- Moléculas diatómicas y poliatómicas. Enlaces localizados. Moléculas diatómicas homonucleares. Moléculas diatómicas heteronucleares. Carácter iónico del enlace. Moléculas poliatómicas. Hibridación.

LECCION 11.- Enlaces deslocalizados. Moléculas conjugadas. Separación σ/π . Estudio por el método de la mesomeria y por el método de los orbitales moleculares. Aproximación de Hückel. Energía de resonancia. Orden de enlace, valencia libre y diagramas moleculares. Índices estáticos de reactividad.