

**PROGRAMA DE QUÍMICA CUÁNTICA**  
**Febrero – Junio 2005**

17 semanas  
11 créditos  
4 h /semana

**1. Introducción** (1 semana)

- 1.1 El Espectro Electromagnético y naturaleza dual de la luz
- 1.2 El descubrimiento del electrón
- 1.3 Radiación del cuerpo negro
- 1.4 Efecto de Compton
- 1.5 Estados Atómicos
- 1.6 Postulado de DeBroglie
- 1.7 Principio de Incertidumbre
- 1.8 La ecuación de Onda
- 1.9 Probabilidad
- 1.10 Número complejos y Unidades

**2. Principios de Mecánica Cuántica** (3 semanas)

- 2.1. Álgebra de operadores
- 2.2. Ecuaciones de valores propios y propiedades generales
- 2.3. Postulados de la mecánica cuántica
- 2.4. Interpretación de la función de onda
- 2.5. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo
- 2.6. Valor promedio de un operador

**3. Aplicaciones de la mecánica cuántica a algunos sistemas simples**  
(2 semanas)

- 3.1 Partícula en una caja unidimensional
- 3.2 Condiciones de frontera y cuantización
- 3.3 Partícula en una caja tridimensional
- 3.4 Separación de variables y estados degenerados
- 3.5 Oscilador armónico
- 3.6 Soluciones: niveles de energía del oscilador armónico
- 3.7 Vibración de una molécula diatómica
- 3.8 Relaciones de conmutación, coordenadas polares
- 3.9 Rotor rígido, rotación de una molécula diatómica

**4. Estructura de átomos hidrogenoides** (2 semanas)

- 4.1 Ecuaciones de Schrödinger para el átomo.
- 4.2 Separación de variables, solución de la parte radial
- 4.3 Descripción de la función de onda
- 4.4 Funciones radiales y de distribución radial
- 4.5 Parte angular.

## **5. Métodos aproximados.**

(3 semanas)

- 5.1 Método variacional
- 5.2 Teoría de perturbaciones para estados degenerados y no degenerados
- 5.3 Comparación entre ambos métodos
- 5.4 Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo
- 5.5 Espin Electrónico y el principio de exclusión de Pauli
- 5.6 Principio de antisimetría
- 5.7 Determinantes de Slater.
- 5.8 Momento de espín magnético

## **6. Átomos multielectrónicos**

(2 semanas)

- 6.1 El hamiltoniano atómico
- 6.2 El método de Hartree-Fock
- 6.3 Orbitales y tabla periódica
- 6.4 Ecuaciones de Rotan
- 6.5 Energía de correlación electrónica
- 6.6 Interacción de configuraciones
- 6.7 Momento angular total
- 6.8 Interacción espín-órbita

## **7. Moléculas**

(3 semanas)

- 7.1 El hamiltoniano molecular.
- 7.2 Aproximación de Born-Oppenheimer.
- 7.3 Orbitales moleculares en moléculas diatómicas.
- 7.4 El método de Hartree-Fock aplicado en moléculas.
- 7.5 Densidad electrónica
- 7.6 Orbitales de frontera
- 7.7 Relevancia de la correlación electrónica
- 7.8 El enlace químico
- 7.9 Configuraciones aplicadas a moléculas

Criterios de calificación:

16 Tareas	40%
2 Exámenes parciales	40%
1 Proyecto final	20%