

FICHA UNIFICADA

Organización de Asignaturas 2° Cuatrimestre. Facultad de Ciencias Químicas (UNC).

QUÍMICA FÍSICA III

INFORMACION SOLICITADA PARA LA ASIGNATURA*

Datos del o de los Profesores responsables de la asignatura:

Apellido y Nombre, Departamento, e-mail:

Departamento de Físicoquímica

Martín Patrito, mpatrito@gmail.com

Eduardo Coronado, coronado@fcq.unc.edu.ar

Datos de los integrantes del tribunal responsable de la asignatura:

Apellido y Nombre, Departamento, e-mail.

Departamento de Físicoquímica

Martín Patrito, mpatrito@gmail.com

Eduardo Coronado, coronado@fcq.unc.edu.ar

ACTIVIDADES TEÓRICAS

Cronograma de Actividades teóricas:

-Aclaraciones respecto de recuperatorios de actividades teóricas debido a feriados, congresos, etc.

Las actividades teórico-prácticas de la asignatura tienen carácter OBLIGATORIO y se dictan los días **lunes y miércoles de 10:0 a 12:30 hs.**

CLASE INAUGURAL: lunes 7 de Agosto

CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES 2019 QUÍMICA FÍSICA III

SEMANA	CLASES TEORICAS*	CLASES DE EJERCICIOS Y PROBLEMAS**
1 7 /08	Repaso de Álgebra lineal. Matrices y determinantes. Espacios vectoriales complejos en N dimensiones. Cambio de bases. El problema de autovalores. Funciones ortogonales, autofunciones y operadores. El método variacional. El problema variacional lineal	N°1 Ejercicios correspondientes

*

FICHA UNIFICADA

Organización de Asignaturas 2º Cuatrimestre. Facultad de Ciencias Químicas (UNC).

2 14 /08	Notación de Dirac. Representación matricial de un operador. Transformación unitaria y el problema de autovalores de matrices. El teorema variacional. Funciones de onda antisimétricas y resolución exacta de la ecuación de Schroedinger. Interacción de configuraciones.	Nº2 Ejercicios correspondientes
3 21 /08	El hamiltoniano molecular. Funciones de onda moleculares. Autovalores y autovectores de las ecuaciones de Hartree-Fock.	Nº3 Ejercicios correspondientes
4 28/08	El hamiltoniano molecular. Expresión de la energía para una función de onda monodeterminantal. Ecuaciones de Hartree-Fock restringidas y no restringidas. Densidad de spin. Funciones base.	Nº4 Ejercicios correspondientes
5 4 /09	Cálculo de observables: densidad electrónica, momento dipolar, potencial electrostático. Laplaciano de la densidad electrónica. Reactividad molecular. Estados de transición y energía de activación	Nº5 Ejercicios correspondientes
6 11 /09	Partícula en pozo de potencial finito periódico. Modelo de Kronig-Penney. Estructura de bandas, bandas prohibidas.	Nº6 Ejercicios correspondientes
7 18 /09	Capítulo V: Estructura de bandas de metales y semiconductores. Grafeno.	Nº7 Ejercicios correspondientes
8 25/09	Teoría de perturbación de segundo orden. Ecuaciones de Moller-Plesset. Teoría de perturbación vs Interacción de configuraciones	Nº8 Ejercicios correspondientes
9 1 /10	Resolución exacta del Hamiltoniano nuclear en la aproximación armónica. Modos normales de vibración de moléculas poliatómicas. Efectos de anarmonicidad. Espectro vibro-rotacional.	Nº9 Ejercicios correspondientes
10 8 /10	Primer parcial	
11 15 /10	Primer parcial	

FICHA UNIFICADA

Organización de Asignaturas 2º Cuatrimestre. Facultad de Ciencias Químicas (UNC).

12 22 /09	Ecuación de Schroedinger dependiente del tiempo	Nº10 Ejercicios correspondientes
13 29 /09	Teoría de perturbación dependiente del tiempo.	Nº11 Ejercicios correspondientes
14 5/10	Teoría de perturbación dependiente del tiempo. Probabilidades de transición. Reglas de selección. Espectroscopía electrónica	Nº12 Ejercicios correspondientes
15 12/10	Segundo parcial	
16 19/10	Segundo parcial	

ACTIVIDADES PRÁCTICAS

-Cronograma de Actividades prácticas:

La resolución de problemas se realizará dentro del marco de los teórico-prácticos obligatorios, como se describió más arriba.

El desempeño global del alumno luego de la finalización de cada tema se evaluará en forma escrita en la parte final del correspondiente teórico-práctico. Los alumnos deberán aprobar el 80% para obtener la condición de regular

Las recuperaciones de actividades que sean en días feriados se anunciarán oportunamente. Se especificará lugar, día y hora de la clase de recuperación.