

FICHA UNIFICADA

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

QUÍMICA FÍSICA III

ACTIVIDADES TEÓRICAS

Las actividades teórico-prácticas de la asignatura tienen carácter **OBLIGATORIO** y se dictan los días lunes y miércoles de 9:00 a 12:30 hs.

CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES 2017

SEMANA	CLASES TEORICAS*	CLASES DE EJERCICIOS Y PROBLEMAS**
1 07/08	Capítulo I: Los postulados de la cuántica, dualidad onda partícula, funciones de onda, ecuación de autovalores. Partícula en caja 3D. Operador momento angular. Resolución exacta de ecuaciones de autovalores de rotor rígido y oscilador armónico.	Nº1 Ejercicios correspondientes
1 09/08	Capítulo II: Resolución exacta del hamiltoniano del átomo de hidrógeno.	Nº2 Ejercicios correspondientes
2 14/08	Capítulo III: Notación de Dirac. Representación matricial de un operador.	Nº3 Ejercicios correspondientes
2 16/08	Capítulo III: Cambios de base, transformación unitaria y el problema de autovalores de matrices.	Nº4 Ejercicios correspondientes
3 21/08	Capítulo IV: El teorema variacional. Funciones de onda antisimétricas y resolución exacta de la ecuación de Schrodinger. Interacción de configuraciones.	Nº5 Ejercicios correspondientes
3 23/08	Capítulo V: El hamiltoniano molecular. Funciones de onda moleculares. Autovalores y autovectores de las ecuaciones de Hartree-Fock.	Nº6 Ejercicios correspondientes
4 28/08	Capítulo V: El hamiltoniano molecular. Expresión de la energía para una función de onda monodeterminantal.	Nº7 Ejercicios correspondientes
4 30/08	Capítulo V: Ecuaciones de Hartree-Fock restringidas y no restringidas. Densidad de spin. Funciones base.	Nº8 Ejercicios correspondientes
5 04/09	Capítulo V: Cálculo de observables: densidad electrónica, momento dipolar, potencial electrostático. Laplaciano de la densidad electrónica. Reactividad molecular. Estados de transición y energía de activación	Nº9 Ejercicios correspondientes
5 06/09	Capítulo V: Partícula en pozo de potencial finito periódico. Modelo de Kronig-Penney. Estructura de bandas, bandas prohibidas.	Nº10 Ejercicios correspondientes
6 11/09	Capítulo V: Partícula en pozo de potencial finito periódico. Modelo de Kronig-Penney. Estructura de bandas, bandas prohibidas.	Nº11 Ejercicios correspondientes
6 13/09	Capítulo V: Partícula en pozo de potencial finito periódico. Modelo de Kronig-Penney. Estructura de bandas, bandas prohibidas.	Nº12 Ejercicios correspondientes
7 18/09	Capítulo V: Partícula en pozo de potencial finito periódico. Modelo de Kronig-Penney. Estructura de bandas, bandas prohibidas.	Nº13 Ejercicios correspondientes

FICHA UNIFICADA

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

7 20/09	Capítulo V: Estructura de bandas de metales y semiconductores. Grafeno.	Nº14 Ejercicios correspondientes
8 25/09	SEMANA DE PARCIALES	1º PARCIAL
9 02/10	SEMANA DE PARCIALES	1º PARCIAL
10 09/10	Capítulo VI: Teoría de perturbación de segundo orden	Nº15 Ejercicios correspondientes y programación fortran
10 11/10	Capítulo VI: Ecuaciones de Moller-Plesset. Teoría de perturbación vs Interacción de configuraciones	Nº16 Ejercicios correspondientes y programación fortran
11 16/10	Capítulo VII: Resolución exacta del Hamiltoniano nuclear en la aproximación armónica.	Nº17 Ejercicios correspondientes y programación fortran
11 18/10	Capítulo VII: Modos normales de vibración de moléculas poliatómicas. Efectos de anarmonicidad. Espectro vibro-rotacional.	Nº18 Ejercicios correspondientes y programación fortran
12 23/10	Capítulo VIII: Ecuación de Schroedinger dependiente del tiempo.	Nº19 Ejercicios correspondientes y programación fortran
12 25/10	Capítulo VIII: Ecuación de Schroedinger dependiente del tiempo.	Nº20 Ejercicios correspondientes y programación fortran
13 30/10	Capítulo VIII: Teoría de perturbación dependiente del tiempo.	Nº21 Ejercicios correspondientes y programación fortran
13 1/11	Capítulo VIII: Teoría de perturbación dependiente del tiempo. Probabilidades de transición. Reglas de selección.	Nº22 Ejercicios correspondientes y programación fortran
14 6/11	Capítulo X: Espectroscopía electrónica	Nº23 Ejercicios correspondientes y programación fortran
14 8/11	Capítulo X: Espectroscopía electrónica	Nº24 Ejercicios correspondientes y programación fortran
15 13/11	Capítulo X: Espectroscopía electrónica	Nº25 Ejercicios correspondientes y programación fortran
15 15/11	Capítulo X: Espectroscopía electrónica	Nº26 Ejercicios correspondientes y programación fortran
16 20/11	SEMANA DE PARCIALES	2º PARCIAL
17 27/11	SEMANA DE PARCIALES	2º PARCIAL

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.