

7-08

# GUÍA DE ESTUDIO DE LDI



## QUIMICA CUANTICA

CÓDIGO 0109534-

UNED

7-08

QUIMICA CUANTICA

CÓDIGO 0109534-

# ÍNDICE

OBJETIVOS

CONTENIDOS

EQUIPO DOCENTE

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

SISTEMA DE EVALUACIÓN

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

## OBJETIVOS

Esta asignatura parte de los conocimientos básicos de Química Cuántica que el alumno ha adquirido en la asignatura Química Física de tercer curso y, tras un breve repaso y ampliación de dichos aspectos básicos, se estudian los distintos métodos aproximados de resolución de la ecuación de ondas para los sistemas que no admiten una solución exacta. Una vez cubierta esta etapa preparatoria, se introducen los nuevos métodos de cálculo computacionales y sus aplicaciones a la Química. Así mismo se estudian las propiedades y el comportamiento de la materia a nivel atómico-molecular, a la luz de la teoría cuántica.

## CONTENIDOS

En cada uno de los temas se indican los capítulos de la bibliografía básica donde se encuentra desarrollado su contenido. Para una información más amplia puede consultar la Guía Didáctica de la asignatura a la que se hace referencia en el Apartado 5 (Bibliografía Complementaria).

### TEMA 1 La ecuación de Schrödinger

*Bibliografía: L cap. 1-7; B cap. 2; BT cap. 1-3*

Introducción a la Química Cuántica. Principio de incertidumbre.— Ecuación de Schrödinger dependiente e independiente del tiempo.— Resolución de la ecuación de Schrödinger para sistemas simples: Partícula libre; Partícula en una caja. Niveles de energía; Partícula en un pozo. Efecto túnel; Rotor rígido; Oscilador armónico.— Teoremas de la mecánica cuántica.—Ecuación de Schrödinger para sistemas con un electrón: Átomo de hidrógeno; Iones hidrogenoides.—Necesidad de los métodos aproximados para resolver la ecuación de ondas en sistemas con más de un electrón.—Unidades atómicas.

### TEMA 2 Método de Variaciones

*Bibliografía: L cap. 8; B cap. 5.1-5.2; BT cap. 5 y 6*

El teorema de variaciones: Estado fundamental; Estados excitados.—Ecuaciones lineales simultáneas.—Funciones variacionales lineales.—Cálculo variacional: valores propios; funciones propias.—Distancia entre funciones.

### TEMA 3 Teoría de perturbaciones

*Bibliografía: L cap. 9.1-9.8; B cap. 5.3; BT cap. 5 y 6*

Teoría de perturbaciones para estados no degenerados: Estado fundamental del átomo de helio; Comparación con el tratamiento de variaciones.—Teoría de perturbaciones para niveles de energía degenerados: Simplificación de la ecuación secular; Primeros estados excitados del helio; Comparación con el tratamiento de variaciones.—Simetría y perturbación.

### TEMA 4 Spin electrónico y Principio de Pauli

*Bibliografía: L cap. 10; BT cap. 4 y 5*

Momento angular de spin electrónico.—Átomo de hidrógeno.— Átomo de Helio.—Principio de Exclusión de Pauli.—Determinantes de Slater.—Estudio del estado fundamental del átomo de litio: Teoría de perturbaciones; Teoría de variaciones.—Momento magnético de spin.

### TEMA 5 Estructura electrónica de sistemas polielectrónicos

*Bibliografía: L cap. 11 y 13; B cap. 6, 8 y 9; BT cap. 7 y 8*

Átomos polielectrónicos: Orbitales atómicos aproximados; Campos autoconsistentes; Momento angular de átomos polielectrónicos; Acoplamientos  $jj$  y LS.—Moléculas diatómicas: Aproximación de Born-Oppenheimer; El ión de la molécula de hidrógeno (Método de orbitales moleculares (OM); Método del electrón de valencia (EV); Comparación de ambos métodos); Moléculas homonucleares: molécula de hidrógeno; Moléculas heteronucleares.—Moléculas poliatómicas. Términos electrónicos.

#### TEMA 6 Cálculos de orbitales moleculares. Métodos *ab initio*

*Bibliografía: L cap. 15.1-15.19; B cap. 12; BT cap. 7 y 8*

Determinantes de Slater. Reglas de Slater (STO).—Cálculo de orbitales de Hartree-Fock.—Método del campo autoconsistente (SCF).—Método de Roothaan-Hall.—Método del Hartree-Fock restringido (RHF).—Base de funciones de onda.—Integrales moleculares.—Correlación electrónica. Interacción configuracional (CI).—Algunas aplicaciones de los métodos *ab initio*.

#### TEMA 7 Cálculos de orbitales moleculares. Método del funcional de la densidad

*Bibliografía: L cap. 15.20; BT cap. 8*

Teoría del funcional de la densidad.—Aproximación de densidad local (LDA).—Aproximación de densidad de spin local (LSDA).— Gradientes corregidos e híbridos.—Pasado y futuro del DFT.

#### TEMA 8 Cálculos de orbitales moleculares: Métodos semiempíricos y de Mecánica Molecular

*Bibliografía: L cap. 16; BT cap. 8*

Teorías de OM: aproximación  $\pi$ -electrónica: Método OM de electrón libre (EL); Método OM de Hückel (HMO); Método de Pariser-Parr-Pople (PPP).—Teorías de OM semiempíricos: Método Hückel extendido (EH); Métodos CNDO, INDO y NDDO; Métodos MINDO, MNDO, AM1, PM3.—Métodos de Mecánica Molecular (MM).—Efecto del disolvente: Tratamientos empíricos; Tratamientos semiempíricos.—Reacciones químicas.

#### TEMA 9 Aplicaciones de la Química Computacional

*Bibliografía: L cap. 15.21; B cap. 16-19; BT cap. 8*

Estudio de la geometría molecular.—Energía. Cambios de energía.—Estudio de otras características moleculares: Propiedades eléctricas. Momento dipolar; Propiedades termodinámicas; Frecuencias vibracionales; Constantes de apantallamiento en RMN; Estudios conformacionales.—Reactividad química: Termodinámica de las reacciones químicas; Cinética. Mecanismos de reacción.—Estudio del enlace de hidrógeno.

#### TEMA 10 Aplicación al estudio de la interacción de la radiación con la materia.

*Bibliografía: L cap. 9; Levine: Espectroscopía Molecular; Requena: Espectroscopía*

Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo: Perturbación debida a un campo eléctrico; Perturbación debida a un campo magnético.—Probabilidad de una transición entre estados.—Procesos radiativos: Absorción y emisión inducidas; Emisión espontánea; Coeficientes de Einstein de absorción y de emisión.—Momento dipolar de la transición.—Reglas de selección.—Perfil de línea: Ensanchamiento natural; Ensanchamiento Doppler.—Tipos de transiciones espectrales: Rotación de moléculas. Reglas de selección; Vibraciones moleculares. Reglas de selección; Espectros electrónicos. Reglas de

selección.—Momentos magnéticos y Espectroscopía: Momentos magnéticos nucleares. RMN; Momentos cuadrupolares nucleares. RCN; Momentos de spin electrónico. RSE.

### **Bibliografía**

**(L)** Ira N. Levine, *Química Cuántica*, Prentice Hall, 2001.

**(A)** Peter W. Atkins, R. S. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford Univ. Press, 1996.

**(B)** J. Bertran Rusca, V. Branchadell Gallo, M. Moreno Ferrer, M. Sodupe Roure, *Química Cuántica*, Síntesis, Madrid, 2002.

**(BT)** L. E. Bailey Chapman, M. D. Troitiño Nuñez, *La Química Cuántica en 100 Problemas*, UNED, Madrid, 2004.

## **EQUIPO DOCENTE**

## **BIBLIOGRAFÍA BÁSICA**

ISBN(13):9788420530963

Título:QUÍMICA CUÁNTICA (5ª)

Autor/es:Levine, Ira N. ;

Editorial:PRENTICE-HALL

ISBN(13):9788436213508

Título:QUÍMICA CUÁNTICA. LA QUÍMICA CUÁNTICA EN 100 PROBLEMAS (1ª)

Autor/es:Bailey Chapman, Lorna Elizabeth ; Troitiño Núñez, Mª Dolores ;

Editorial:U.N.E.D.

ISBN(13):9788477387428

Título:QUÍMICA CUÁNTICA (1ª)

Autor/es:Bertrán Rusca, Joan ;

Editorial:SÍNTESIS

LEVINE, I. N.: *Química Cuántica*, Prentice Hall, 2001.

BERTRAN RUSCA, J., BRANCHADELL GALLO, V., MORENO FERRER, M., SODUPE ROURE, M., *Química Cuántica*, Síntesis, Madrid, 2002.

BAILEY, L. E., TROITIÑO, M. D.: *La Química Cuántica en 100 Problemas*, UNED, 2004.

Este libro puede adquirirse en la librería de la UNED (Bravo Murillo, 38 y Senda del Rey n.º 7, Madrid).

## BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- TROITIÑO, M. D., BAILEY, L. E.: *Química Cuántica*. Guía Didáctica. UNED, 2004.
- LEVINE, I. N.: *Quantum Chemistry*, Prentice Hall, 2000.
- LEVINE, I. N.: *Espectroscopía Molecular*, Ed. AC, 1986.
- REQUENA, A., ZÚÑIGA, J.: *Espectroscopía*, Prentice Hall, 2004.
- ATKINS, P. W.: *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford Univ. Press, 1996.
- JENSEN, F.: *Introduction to Computational Chemistry*, Wiley, Chichester, 2002.
- CRAMER, C.: *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, Wiley, Chichester, 2002.
- JOHNSON, Ch., S. y PEDERSEN, L. G.: *Problems and Solutions in Quantum Chemistry and Physics*, Dover, 1986.
- JORGENSEN, P., y ODDERSHEDE, J.: *Problems in Quantum Chemistry*, Ed. Benjamin, 1983.
- PÉREZ GONZÁLEZ, J. J. y NOVOA VIDE, J. J.: *Problemas de Química Cuántica*, (vol. 2), Ed. Promociones y Publicaciones Universitarias, 1989.

## SISTEMA DE EVALUACIÓN

El estudio de esta asignatura admite dos enfoques: un enfoque aplicado (apartado 6.1) y un enfoque teórico (apartado 6.2).

### 6.1. PRUEBAS DE EVALUACIÓN A DISTANCIA

Si opta por el enfoque aplicado de la asignatura, deberá resolver la Prueba de Evaluación a Distancia (PED). Contiene ejercicios y preguntas relativos a los Temas del programa, y podrá conseguirla en su Centro Asociado, en la Página Web de la asignatura, Debe entregar esta prueba **obligatoriamente** para poder realizar el examen final.

### 6.2 TRABAJOS

Si opta por una orientación teórica de la asignatura, será obligatorio realizar un trabajo relacionado con el contenido del Temario. Le recomendamos que estudie los temas y piense en qué enfoque y qué tema le interesa más: entorno científico histórico de una época o una teoría, metodología empleada en la resolución de un problema, estudio de una molécula o de una propiedad abordada desde distintos puntos de vista,... etc. El trabajo deberá ser el resultado de una consulta bibliográfica lo más amplia posible y deberá incluir un apartado de la bibliografía empleada. Debe entregar esta prueba obligatoriamente para poder realizar el examen final.

### 6.3. PRUEBAS PRESENCIALES

Las Pruebas Presenciales de Febrero y de Septiembre tendrán una duración de 2 horas. Podrán disponer del material didáctico que deseen utilizar (libros de texto y esquemas elaborados por el propio alumno) y de una calculadora. En ningún caso se permite el uso de problemas resueltos o de la PED. Habrá dos exámenes distintos: uno para quienes decidan resolver la PED y el otro para aquellos que hagan el trabajo. La primera parte de ambos exámenes consistirá en un problema común para todos los alumnos, y la segunda parte, en

un problema para los alumnos que hayan elegido la opción práctica (PED) y un tema a desarrollar por los alumnos que hayan elegido la opción teórica (trabajo).

#### **6.4. CRITERIOS GENERALES PARA LA EVALUACIÓN FINAL**

Para la calificación final se tendrá en cuenta la obtenida en la Prueba Presencial y en los Trabajos presentados (este criterio anula el que aparece en el apartado 1.10 de la pág. 36 de Química Cuántica . Guía Didáctica, UNED, 2004).

La calificación final será un suspenso si en cualquiera de los dos componentes de la nota final se obtuviera un cero. La fecha límite para presentar, tanto los Trabajos es, o bien la primera semana de exámenes, a  **finales de Enero**, o bien el **15 de Julio** para aquellos alumnos que se examinan en Septiembre. En cualquiera de los casos los Trabajos deben estar entregados **antes** de la realización de la Prueba Presencial"

## **HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE**

**Dra. D.<sup>a</sup> M.<sup>a</sup> Dolores Troitino Núñez**

**Dra. D.<sup>a</sup> Lorna Bailey Chapman**

Día de guardia: jueves, de 15 a 19 horas

Despachos: 306 y 342

Tels.: 398 73 88 / 73 91

Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas

Facultad de Ciencias. UNED

Paseo Senda del Rey, n.º 9

28040 Madrid

E-mail: mtroitino@ccia.uned.es y lbailey@ccia.uned.es

#### **NOTA IMPORTANTE**

Si usted se ha matriculado en esta asignatura, deberá enviar una de las fichas que encontrará en el apartado dedicado a la información general del Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas, a las profesoras de la asignatura.

## **MATERIALES AUDIOVISUALES Y TELEMÁTICOS**

La asignatura dispone de una página de información actualizada en el servidor de la UNED en la dirección: <http://www.uned.es/09534->.

---

## **IGUALDAD DE GÉNERO**

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por

términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.