

15-16

GUÍA DE ESTUDIO DE LDI



QUIMICA CUANTICA

CÓDIGO 0109534-

UNED

15-16

QUIMICA CUANTICA

CÓDIGO 0109534-

ÍNDICE

OBJETIVOS

CONTENIDOS

EQUIPO DOCENTE

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

SISTEMA DE EVALUACIÓN

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

AVISO IMPORTANTE

En el Consejo de Gobierno del 30 de junio de 2015 se aprobó, por unanimidad, que la convocatoria de exámenes extraordinarios para planes en extinción de Licenciaturas, Diplomaturas e Ingenierías, prevista para el curso 2015-2016, se desarrolle según el modelo ordinario de la UNED, esto es, en tres convocatorias:

- febrero de 2016 (1ª y 2ª semana), para asignaturas del primer cuatrimestre y primera parte de anuales.
- junio de 2016 (1ª y 2ª semana) para asignaturas del segundo cuatrimestre y segunda parte de anuales.
- septiembre de 2016 para todas las asignaturas.

Si en alguna guía aparecen referencias sobre una sola convocatoria en febrero, esta información queda invalidada ya que tiene prevalencia la decisión del Consejo de Gobierno.

En el curso 2015-2016 esta asignatura no tendrá activado el curso virtual.

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 los textos que aparece reseñados más abajo y donde se encuentra desarrollado su contenido. Para una información más amplia puede consultar los Apartados 4 y 5 de esta Guía Didáctica dedicados a la Bibliografía Básica y Complementaria.

TEMA 1 La ecuación de Schrödinger

Bibliografía: (1) cap. 1-3; (2) cap. 2; (3) cap 1-7

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: (1) cap. 5 y 6; (2) cap. 5.1-5.2; (3) cap. 8

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: (1) cap. 5 y 6; (2) cap. 5.3; (3) cap. 9.1-9.8

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: (1) cap. 4 y 5; (3) cap. 10

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: (1) cap. 7 y 8; (2) cap. 6, 8 y 9; (3) cap. 11 y 13

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: (1) cap. 7 y 8; (2) cap. 12; (3) cap. 15.1-15.19

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: (1) cap. 8; (3) cap. 15.20

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: (1) cap. 8; (3) cap. 16

Teorías de OM: aproximación π -electrónica: Método OM de electrón libre (EL); Método OM

de Hückel (HMO); Método de Pari-ser-Parr-Pople (PPP).—Teorías de OM semiempíricas: 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: (1) cap. 8; (2) cap. 16-19; (3) cap. 15.21

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: (3) cap. 9; (4)

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

- (1) L. E. Bailey Chapman, M. D. Troitiño Nuñez, *La Química Cuántica en 100 Problemas*, UNED, Madrid, 2004.
- (2) J. Bertran Rusca, V. Branchadell Gallo, M. Moreno Ferrer, M. Sodupe Roure, *Química Cuántica*, Síntesis, Madrid, 2002.
- (3) Ira N. Levine, *Química Cuántica*, Prentice Hall, 2001.
- (4) A. Requena y J. Zúñiga, *Espectroscopía*, Prentice Hall, 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

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

TROITIÑO, M. D., BAILEY, L. E.: *Química Cuántica. Guía Didáctica*. UNED, 2004.

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

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

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

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13):9780136131069

Título:QUANTUM CHEMISTRY (6ª)

Autor/es:Levine, I.N. ;

Editorial:Upper Saddle River, N.J. : Prentice Hall

ISBN(13):9780199274987

Título:MOLECULAR QUANTUM MECHANICS (4ª)

Autor/es:Friedman, R.S. ; Atkins, P. W. ;

Editorial:: OXFORD UNIVERSITY PRESS

ISBN(13):9780201054866

Título:PROBLEMS IN QUANTUM CHEMISTRY

Autor/es:Jorgensen, P. ; Oddershede, Jens ;

Editorial:ADDISON-WESLEY

ISBN(13):9780470011874

Título:INTRUDUCTION TO COMPUTATIONAL CHEMISTRY (2ª)

Autor/es:Jensen, F. ;

Editorial:Chichester Wiley

ISBN(13):9780470091821

Título:ESSENTIAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY THEORIES AND MODELS (2ª)

Autor/es:Cramer, C.J. ;

Editorial:Chichester Wiley

ISBN(13):9780486652368

Título:PROBLEMS AND SOLUTIONS IN QUANTUM CHEMISTRY AND PHYSICS

Autor/es:Johnson, C.S. ; Pedersen, Lee G. ;

Editorial:DOVER PUBLICATIONS

ISBN(13):9788420536774

Título:ESPECTROSCOPIA (1ª)

Autor/es:Requena Rodríguez, Alberto ; Zúñiga Román, José ;

Editorial:PEARSON ALHAMBRA

ISBN(13):9788476654637

Título:PROBLEMAS DE QUÍMICA CUÁNTICA: II. SISTEMAS MOLECULARES (1ª)

Autor/es:Novoa, J.J. ; Pérez, J.J. ;

Editorial:: PPU

ATKINS, P. W. y FRIEDMAN, R.S.: *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford Univ. Press, 2005.

CRAMER, C.: *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, Wiley, Chichester, 2007.

JENSEN, F.: *Introduction to Computational Chemistry*, Wiley, Chichester, 2008.

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.

LEVINE, I. N.: *Quantum Chemistry*, Upper Saddle River, N. J.: Pearson Prentice Hall, 2009.

LEVINE, I. N.: *Espectroscopía Molecular*, Ed. AC, 1986.

PÉREZ GONZÁLEZ, J. J. y NOVOA VIDE, J. J.: *Problemas de Química Cuántica*, (vol. 2), Ed. Promociones y Publicaciones Universitarias, 1989.

REQUENA, A., ZÚÑIGA, J.: *Espectroscopía*, Prentice Hall, 2004.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

PRUEBA PRESENCIAL

Al ser esta una asignatura incluida en el plan de extinción del título de Licenciatura en Ciencias Químicas, **SOLO CONTARÁ CON UNA CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA DE EXAMEN QUE TENDRÁ LUGAR DURANTE LA CELEBRACIÓN DE LAS PRUEBAS PERSONALES DE FEBRERO DE 2016** siguiendo el horario que se publicará oportunamente.

La Prueba Presencial de **Febrero** tendrá una duración de 2 horas. Durante su realización podrá disponer, como material permitido, de la Guía Didáctica de la Asignatura (*Química Cuántica. Guía Didáctica*, UNED, 2004) que contiene tablas de constantes, integrales, formulario de la asignatura, ...y de calculadora **NO** programable.

La calificación final de la asignatura dependerá **exclusivamente** de la nota obtenida en este examen. **Este criterio de evaluación anula el que aparece en el apartado 1.10 de la pág.**

36 de *Química Cuántica. Guía Didáctica*, UNED, 2004.

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

Durante este curso **LA ASIGNATURA NO TENDRÁ TUTORÍA NI SEGUIMIENTO DOCENTE.**

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.