9-10

GUÍA DE ESTUDIO DE LDI

QUIMICA CUANTICA

CÓDIGO 0109534-

UNED

9-10

QUIMICA CUANTICA

CÓDIGO 0109534-

ÍNDICE

OBJETIVOS
CONTENIDOS
EQUIPO DOCENTE
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE
MATERIALES AUDIOVISUALES Y TELEMÁTICOS
IGUALDAD DE GÉNERO

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 Pari-ser-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, 2005.

(B) J. Bertran Rusca, V. Branchadell Gallo, M. Moreno Ferrer, M. Sodupe Roure, *Química Cuántica,* Sintesis, 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:
Editorial:PRENTICE-HALL

ISBN(13):9788436213508
Título:QUÍMICA CUÁNTICA. LA QUÍMICA CUÁNTICA EN 100 PROBLEMAS (1ª)
Autor/es:
Editorial:U.N.E.D.

ISBN(13):9788477387428
Título:QUÍMICA CUÁNTICA (1ª)
Autor/es:
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

ISBN(13):9780136131069
Título:QUANTUM CHEMISTRY (6ª)
Autor/es:
Editorial:Upper Saddle River, N.J. : Prentice Hall

ISBN(13):9780199274987
Título:MOLECULAR QUANTUM MECHANICS (4ª)
Autor/es:
Editorial:: OXFORD UNIVERSITY PRESS

ISBN(13):9780201054866
Título:PROBLEMS IN QUANTUM CHEMISTRY
Autor/es:
Editorial:ADDISON-WESLEY

ISBN(13):9780470011874
Título:INTRUDUCTION TO COMPUTATIONAL CHEMISTRY (2ª)
Autor/es:
Editorial:Chichester Wiley

ISBN(13):9780470091821
Título:ESSENTIAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY THEORIES AND MODELS (2ª)
Autor/es:
Editorial:Chichester Wiley

ISBN(13):9780486652368
Título:PROBLEMS AND SOLUTIONS IN QUANTUM CHEMISTRY AND PHYSICS
Autor/es:
Editorial:DOVER PUBLICATIONS

ISBN(13):9788420536774
Título:ESPECTROSCOPIA (1ª)
Autor/es:
Editorial:PEARSON ALHAMBRA

ISBN(13):9788476654637
Título:PROBLEMAS DE QUÍMICA CUÁNTICA: II. SISTEMAS MOLECULARES (1ª)
Autor/es:
Editorial:: PPU

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

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

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

REQUENA, A., ZÚÑIGA, J.: *Espectroscopía*, Prentice Hall, 2004.
ATKINS, P. W. y FRIEDMAN, R.S.: *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford Univ. Press, 2005.
JENSEN, F.: *Introduction to Computational Chemistry*, Wiley, Chichester, 2008.
CRAMER, C.: *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, Wiley, Chichester, 2007.
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

6.1. PRUEBAS DE EVALUACIÓN A DISTANCIA

Durante el curso se deberá responder a una Prueba de Evaluación a Distancia (PED) que podrá conseguir en la página web de la asignatura.
A pesar de ser de carácter **voluntario**, se recomienda la resolución de esta PED ya que resulta ser una buena medida de autocontrol para el alumno, puesto que los ejercicios propuestos en ella son del tipo de los que luego deberá resolver en las Pruebas Presenciales (ver apartado 1.10.1 de *Química Cuántica. Guía Didáctica*, UNED, 2004).
El Cuadernillo de la PED deberá ser entregado o enviado para su corrección al Profesor-Tutor del Centro Asociado. Si en su Centro Asociado no existe Profesor-Tutor para esta asignatura, puede enviar el Cuadernillo al Equipo Docente en la Sede Central de Madrid para su corrección.

6.2 TRABAJOS

Los alumnos deben realizar una serie de trabajos de carácter **obligatorio**, que se les propondrán a lo largo del cuatrimestre. El estudio de esta asignatura admite dos enfoques: un enfoque **aplicado** (Opción ***a***) y un enfoque **teórico** (Opción ***b***). Le recomendamos que estudie los temas y piense en qué enfoque le interesa más. La evaluación final será distinta en cada caso.
Opción ***a***. Si opta por el enfoque aplicado de la asignatura, deberá resolver una colección de ejercicios y preguntas relativos a los Temas del programa. Dicha colección de ejercicios le será enviada por el equipo docente de la asignatura una vez que usted se decida por esta opción de la asignatura. En *Química Cuántica*. *Guía Didáctica*, UNED, 2004 (apartado 1.10.1) encontrará diversas indicaciones sobre la PED que resultan también adecuadas para la realización de esta prueba.
Opción ***b***. Si opta por una orientación teórica, será obligatorio realizar un trabajo relacionado con el contenido del Temario. Piense qué tema le interesa más: metodología empleada en la resolución de un problema, estudio de una molécula o de una propiedad abordada desde distintos puntos de vista, entorno científico histórico de una época o una teoría,... etc. El

trabajo deberá ser el resultado de una consulta bibliográfica lo más amplia posible y deberá incluir un apartado de la bibliografía empleada. En *Química Cuántica*. *Guía Didáctica*, UNED, 2004 (apartado 1.10.2) encontrará las indicaciones adecuadas para la realización de dicho trabajo.

Debe entregar o enviar obligatoriamente una de estas pruebas, práctica o teórica, para poder realizar el examen final.

6.3. PRUEBAS PRESENCIALES

Las Pruebas Presenciales de Febrero y de Septiembre tendrán 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. Habrá dos exámenes distintos: uno para quienes decidan el enfoque **aplicado** (Opción **a**) y el otro para aquellos que elijan el enfoque **teórico** (Opción ***b***). 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 ***a*** y un tema a desarrollar por los alumnos que hayan elegido la Opción ***b***.

6.4. CRITERIOS GENERALES PARA LA EVALUACIÓN FINAL

Para la calificación final se tendrá en cuenta:

a) La calificación obtenida en la Prueba Presencial (apartado 6.3)

b) La calificación obtenida en los Trabajos de carácter **obligatorio** presentados (apartado 6.2).

La calificación final será un suspenso si en cualquiera de los dos apartados anteriores se obtuviera un cero.

c) la calificación obtenida en la PED, si ha sido presentada (apartado 6.1), y que servirá **siempre** para subir la nota obtenida en los apartados anteriores.

La fecha límite para presentar, tanto los Trabajos (apartado 6.2) como la PED (apartado 6.1) 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.

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

Dra. D.ª M.ª Dolores Troitiño Núñez
Dra. D.ª Lorna Bailey Chapman

Día de guardia: jueves, de 15 a 19 horas
Despachos: 342 y 306
Tels.: 398 73 91 / 73 88
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@cccia.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: https://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.