

Plan 293 Lic. en Química

Asignatura 44219 QUIMICA FISICA III

Grupo 1

### Presentación

El papel esencial que hoy en día juega la Química Cuántica, en la resolución cuantitativa de problemas químicos, espectroscópicos, biológicos, farmacológicos, ....., es incuestionable.

### Programa Básico

### Objetivos

Como objetivo principal de esta asignatura, se pretende que el alumno asimile los fundamentos básicos, pero esenciales, de la Química Cuántica. De manera que, mediante la aplicación de los mismos, sea capaz de abordar sistemas sencillos. Asimismo, del análisis de la metodología aplicada a sistemas sencillos, vea con claridad que éstos constituyen la base del tratamiento de sistemas mucho más complejos.

### Programa de Teoría

#### Tema 1.- ORÍGENES DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Introducción.- Radiación del cuerpo negro. Hipótesis de Planck.- Efecto fotoeléctrico.- Capacidades caloríficas.- Espectros atómicos.- Experimentos de Franck-Hertz y Stern-Gerlach.- Principio de De Broglie: efecto Compton y difracción de electrones.

#### Tema 2.- FUNDAMENTOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Postulados de la Mecánica Cuántica. Operadores hermiticos. La ecuación de ondas de Schrödinger. Ortogonalidad de las funciones de onda.- Interpretación física de la función de onda.- Conmutación de operadores. Funciones propias simultáneas.- Principio de indeterminación de Heisenberg.- Estados estacionarios.

#### Tema 3.- SOLUCIÓN EXACTA: DINÁMICA DE LA TRASLACIÓN

La partícula libre.- Partícula en una caja monodimensional: examen de las soluciones.- Partícula en una caja tridimensional: estados degenerados.- Método del electrón libre.- Barreras de potencial finito y efecto túnel.- Oscilador armónico. Tratamientos clásico y mecanocuántico. La molécula diatómica como oscilador armónico monodimensional.

#### Tema 4.- SOLUCIÓN EXACTA: DINÁMICA DE LA ROTACIÓN

Partícula en una circunferencia a potencial constante.- Partícula en una superficie esférica: armónicos esféricos.- Momento angular: relaciones de conmutación.- La molécula diatómica como rotor rígido de dos partículas.

#### Tema 5.- EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO.

Movimiento en un campo de fuerzas centrales. Solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno.- Niveles de energía del átomo de hidrógeno.- Funciones de onda: orbitales.- Átomos hidrogenoides.- Momento angular orbital en el átomo de hidrógeno.- Spin electrónico. Postulados de los operadores de spin.- Sistema de unidades atómico.

#### Tema 6.- MÉTODOS APROXIMADOS

Introducción.- Método de perturbaciones independiente del tiempo.- Principio de variaciones de Rayleigh-Ritz: métodos lineal y no lineal de variaciones.

#### Tema 7.- ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS

Partículas indiscernibles: principio de exclusión de Pauli.- Átomos de helio y de litio.- Determinantes de Slater.- Método de campo autoconsistente de Hartree-Fock.- Correlación electrónica.

#### Tema 8.- ESPECTROS ATÓMICOS

Momento angular en átomos polielectrónicos: interacción spin-órbita.- Aproximación LS y jj. Términos, niveles y estados.- Espectros atómicos: reglas de selección.- Efectos Stark, Zeeman y Paschen-Back.

#### Tema 9.- INTRODUCCIÓN AL TRATAMIENTO MECANOCUÁNTICO DE MOLÉCULAS

Hamiltoniano molecular. Separación de los movimientos electrónicos y nucleares: aproximación de Born-Oppenheimer.- La molécula-ión de hidrógeno.- Separabilidad de los movimientos nucleares. Estados de rotación y vibración.

#### Tema 10.- ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS

Teoría de Orbitales Moleculares (MO).- Aproximación de la Combinación Lineal de Orbitales Atómicos (LCAO MO): El

## Programa Práctico

---

## Evaluación

---

Examen escrito.

---

## Bibliografía

---

- \* ATKINS, P.W., "Fisicoquímica", Omega, Barcelona (1999)
  - \* LEVINE, I.N., "Fisicoquímica", McGraw-Hill, Madrid (1996)
  - \* LEVINE, I.N., "Química Cuántica", Pearson, Madrid (2001)
  - \* DIAZ PEÑA, M. y ROIG MUNTANER, A., "Química Física", Alhambra, Madrid (1989)
  - \* J. Bertrán Rusca y co-autores, "Química Cuántica: Fundamentos y Aplicaciones Computacionales", Edit. Síntesis (2000).
  - \* O Mó Romero y M. Yáñez, "Enlace Químico y Estructura Molecular", Edit. J.M. Bosch, Barcelona (2000).
  - \* P.W. ATKINS, "Quanta: A Handbook of Concepts", 2ª Edic. Oxford University Press (1991)
-

## Presentación

El papel esencial que hoy en día juega la Química Cuántica, en la resolución cuantitativa de problemas químicos, espectroscópicos, biológicos, farmacológicos, ....., es incuestionable.

## Programa Básico

## Objetivos

Como objetivo principal de esta asignatura, se pretende que el alumno asimile los fundamentos básicos, pero esenciales, de la Química Cuántica. De manera que, mediante la aplicación de los mismos, sea capaz de abordar sistemas sencillos. Asimismo, del análisis de la metodología aplicada a sistemas sencillos, vea con claridad que éstos constituyen la base del tratamiento de sistemas mucho más complejos.

## Programa de Teoría

### Tema 1.- ORÍGENES DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Introducción.- Radiación del cuerpo negro. Hipótesis de Planck.- Efecto fotoeléctrico.- Capacidades caloríficas.- Espectros atómicos.- Experimentos de Franck-Hertz y Stern-Gerlach.- Principio de De Broglie: efecto Compton y difracción de electrones.

### Tema 2.- FUNDAMENTOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Postulados de la Mecánica Cuántica. Operadores hermiticos. La ecuación de ondas de Schrödinger. Ortogonalidad de las funciones de onda.- Interpretación física de la función de onda.- Conmutación de operadores. Funciones propias simultáneas.- Principio de indeterminación de Heisenberg.- Estados estacionarios.

### Tema 3.- SOLUCIÓN EXACTA: DINÁMICA DE LA TRASLACIÓN

La partícula libre.- Partícula en una caja monodimensional: examen de las soluciones.- Partícula en una caja tridimensional: estados degenerados.- Método del electrón libre.- Barreras de potencial finito y efecto túnel.- Oscilador armónico. Tratamientos clásico y mecanocuántico. La molécula diatómica como oscilador armónico monodimensional.

### Tema 4.- SOLUCIÓN EXACTA: DINÁMICA DE LA ROTACIÓN

Partícula en una circunferencia a potencial constante.- Partícula en una superficie esférica: armónicos esféricos.- Momento angular: relaciones de conmutación.- La molécula diatómica como rotor rígido de dos partículas.

### Tema 5.- EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO.

Movimiento en un campo de fuerzas centrales. Solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno.- Niveles de energía del átomo de hidrógeno.- Funciones de onda: orbitales.- Átomos hidrogenoides.- Momento angular orbital en el átomo de hidrógeno.- Spin electrónico. Postulados de los operadores de spin.- Sistema de unidades atómico.

### Tema 6.- MÉTODOS APROXIMADOS

Introducción.- Método de perturbaciones independiente del tiempo.- Principio de variaciones de Rayleigh-Ritz: métodos lineal y no lineal de variaciones.

### Tema 7.- ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS

Partículas indiscernibles: principio de exclusión de Pauli.- Átomos de helio y de litio.- Determinantes de Slater.- Método de campo autoconsistente de Hartree-Fock.- Correlación electrónica.

### Tema 8.- ESPECTROS ATÓMICOS

Momento angular en átomos polielectrónicos: interacción spin-órbita.- Aproximación LS y jj. Términos, niveles y estados.- Espectros atómicos: reglas de selección.- Efectos Stark, Zeeman y Paschen-Back.

### Tema 9.- INTRODUCCIÓN AL TRATAMIENTO MECANOCUÁNTICO DE MOLÉCULAS

Hamiltoniano molecular. Separación de los movimientos electrónicos y nucleares: aproximación de Born-Oppenheimer.- La molécula-ión de hidrógeno.- Separabilidad de los movimientos nucleares. Estados de rotación y vibración.

### Tema 10.- ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS

Teoría de Orbitales Moleculares (MO).- Aproximación de la Combinación Lineal de Orbitales Atómicos (LCAO MO): El ión-molécula de Hidrógeno.- Moléculas diatómicas homonucleares: Consideraciones de simetría.- Moléculas diatómicas, heteronucleares.- Teoría del Enlace de Valencia (VB): La molécula de hidrógeno.- Estudio comparativo MO y VB.

Evaluación

---

Examen escrito.

---

Bibliografía

---

- \* ATKINS, P.W., "Fisicoquímica", Omega, Barcelona (1999)
  - \* LEVINE, I.N., "Fisicoquímica", McGraw-Hill, Madrid (1996)
  - \* LEVINE, I.N., "Química Cuántica", Pearson, Madrid (2001)
  - \* DIAZ PEÑA, M. y ROIG MUNTANER, A., "Química Física", Alhambra, Madrid (1989)
  - \* J. Bertrán Rusca y co-autores, "Química Cuántica: Fundamentos y Aplicaciones Computacionales", Edit. Síntesis (2000).
  - \* O Mó Romero y M. Yáñez, "Enlace Químico y Estructura Molecular", Edit. J.M. Bosch, Barcelona (2000).
  - \* P.W. ATKINS, "Quanta: A Handbook of Concepts", 2ª Edic. Oxford University Press (1991)
-