

PLAN DOCENTE DE ASIGNATURA

CÓDIGO NOMBRE

Asignatura	206019	QUÍMICA CUÁNTICA APLICADA A LA ESPECTROSCOPÍA
Titulación	0206	LICENCIATURA EN QUÍMICA
Departamento	C127	QUIMICA FISICA
Curso	5	
Duración (A: Anual, 1Q/2Q)	2Q	
Créditos ECTS	5,7	
Créditos Teóricos	3	Créditos Prácticos 3
		Tipo Troncal

Profesores	Manuel Fernández Núñez David Zorrilla Cuenca
Objetivos	<p>- En primer lugar, ampliar los conocimientos elementales de Química Cuántica adquiridos en el curso de Química Física General, HACIENDO HINCAPIE EN LOS ASPECTOS DE LA MECANICA CUANTICA MAS RELEVANTES EN EL CAMPO DE LA ESPECTROSCOPIA DE ATOMOS Y MOLECULAS.</p> <p>- En segundo lugar, explicar con algún detalle los fundamentos del calculo teórico de las propiedades de átomos y moléculas por métodos ab initio y semiempíricos.</p> <p>- Por último, aplicar los citados métodos al tratamiento de algunos problemas químicos representativos, extraídos preferentemente del campo de la espectroscopía.</p>

Código Seguro de verificación:Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/6



Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==

Programa	<p>Tema 1.- INTRODUCCIÓN: LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER</p> <p>1.1 Espectroscopia y Mecánica Cuántica. Componentes de las moléculas.</p> <p>1.2 Tipos de espectroscopia. Color de los electrones.</p> <p>1.3 Ecuación de las ondas materiales</p> <p>1.4 Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo</p> <p>1.5 Valores medios e incertidumbres</p> <p>1.6 La partícula libre. Estados degenerados</p> <p>1.7 Escalones y barreras. Efecto túnel</p> <p>1.8 Partícula en una caja. Niveles de energía</p> <p>Tema 2.- AXIOMÁTICA DE LA MECÁNICA CUÁNTICA</p> <p>2.1 Introducción: Principios, postulados y teoremas</p> <p>2.2 Postulados I, II y III: Estática de la Mecánica Cuántica</p> <p>2.3 Postulado IV: Evolución de los sistemas mecanocuánticos</p> <p>2.4 Postulado V: Bases ortonormales</p> <p>Tema 3.- SOLUCIONES EXACTAS DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER I: VIBRACIÓN Y ROTACIÓN</p> <p>3.1 El oscilador armónico monodimensional</p> <p>3.2 El oscilador armónico tridimensional</p> <p>3.3 Sistemas con potencial central y coordenadas polares</p> <p>3.4 Sistemas con dos partículas y masa reducida</p> <p>3.5 Vibración en moléculas diatómicas: Espectroscopías IR y Raman</p> <p>3.6 Ecuación de Schrödinger en coordenadas polares. Separación de las variables</p> <p>3.7 El rotor rígido y la espectroscopia de rotación pura.</p> <p>Tema 4.- SOLUCIONES EXACTAS DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER II: ÁTOMOS HIDROGENOIDES.</p> <p>4.1 Átomos Hidrogenoides. Ecuación radial: Estados ligados y estados de colisión.</p> <p>4.2 Niveles de energía y degeneración de los estados ligados.</p> <p>4.3 Funciones propias de la energía. Orbitales hidrogenoides.</p> <p>4.4 Orbitales hidrogenoides reales e híbridos.</p>
----------	---

Código Seguro de verificación:Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/6



Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==

	<p>4.5 Representaciones gráficas de los orbitales H-oides.</p> <p>4.6 Tamaño del átomo de hidrógeno. Concepto de radio atómico.</p> <p>Tema 5.- ESPÍN ELECTRÓNICO Y NUCLEAR.</p> <p>5.1 Átomo en un campo magnético</p> <p>5.2 Espín electrónico. Teoría de Pauli</p> <p>5.3 Espín nuclear: Espectroscopias de RMN</p> <p>Tema 6.- INTERACCIÓN ENTRE LAS MOLÉCULAS Y LA RADIACIÓN</p> <p>6.1 Ondas electromagnéticas</p> <p>6.2 Resumen de la teoría clásica de la radiación</p> <p>6.3 Coeficientes de Einstein. Fundamento del LASER</p> <p>6.4 Radiación en la mecánica de Schrödinger: Transiciones espontáneas.</p> <p>6.5 Radiación en la mecánica de Schrödinger: Transiciones inducidas.</p> <p>Tema 7.- RESOLUCIONES APROXIMADAS DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER</p> <p>7.1 El método variacional: Fundamento y aplicación en sistemas monodimensionales.</p> <p>7.2 Aplicación en sistemas con tres o mas dimensiones.</p> <p>7.3 Combinación lineal de funciones de base.</p> <p>7.4 Métodos Perturbacionales.</p> <p>7.5 Métodos variacionales (CI) y perturbativos (MP) en el tratamiento de la correlación electrónica.</p> <p>Tema 8.- FUNCIONES DE ONDA DE LOS ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS.</p> <p>8.1 Separación de variables: Modelo de electrones independientes</p> <p>8.2 Modelos que mantienen la aproximación orbital</p> <p>8.3 Propiedades atómicas: Ionización, electronegatividad, tamaño (radio atómico), polarizabilidad.</p> <p>8.4 Modelos con correlación.</p> <p>8.5 Niveles de energía "ópticos": Espectros atómicos</p> <p>Tema 9.- FUNCIONES DE ONDA DE LAS MOLÉCULAS</p> <p>9.1 Separación de movimientos electrónicos y nucleares</p> <p>9.2 Soluciones exactas en el sistema</p> <p>9.3 Soluciones aproximadas en el</p>
--	---

Código Seguro de verificación:Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/6



Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==

	<p>sistema</p> <p>9.4 Moléculas Polielectrónicas (aspectos generales)</p> <p>Tema 10.- METODOS AUTOCONSISTENTES Y CORRELACIÓN ELECTRÓNICA.</p> <p>10.1 Métodos Autoconsistentes: Hartree y Hartree-Fock</p> <p>10.2 Ecuaciones de Roothaan</p> <p>10.3 Funciones de Base e Integrales Moleculares</p> <p>10.4 Discusión de un Cálculo Roothaan Representativo</p> <p>10.5 Sistemas con Electrones Desapareados</p> <p>10.6 Correlación electrónica: Métodos CI, MP y DFT.</p>
Actividades	<p>Determinación Químico-cuántica de las propiedades de una molécula individualizada y de todos los átomos que la componen mediante los programas UCA-ATO, UCA-MOL y GAUSSIAN.</p>
Metodología	<p>Un 50% de la carga lectiva consistirá en clases teóricas apoyadas en el texto de teoría que se cita en "Recursos bibliográficos"</p> <p>Un 25% consistirá en clases de problemas apoyadas en el texto de problemas que se cita en "Recursos bibliográficos".</p> <p>El 25% restante consistirá en prácticas de laboratorio de cálculo teórico de propiedades moleculares, realizadas directamente con ordenador si el número de alumnos lo permite, o en seminarios en los que se discutirán resultados de este tipo de cálculos, si el número de alumnos fuera superior al previsto por el rectorado.</p>
Criterios y sistemas de evaluación	<p>Dos exámenes parciales de tipo cuestionario y un examen final. El examen final constará de cuestionario de teoría (40% de la nota), problemas (40% de la nota) y temas de desarrollo (20% de la nota).</p>

Código Seguro de verificación:Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	4/6



Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==

	<p>En caso de que las prácticas puedan ser obligatorias, un 25% de la calificación correspondería a la realización de una memoria de prácticas individualizada.</p>
Recursos bibliográficos	<p>El texto mas adecuado para estudiar esta asignatura es: FERNANDEZ, M. , RIUS, P., C. FERNANDEZ y D. ZORRILLA: "Elementos de Mecánica Cuántica Molecular" Universidad de Cádiz, 2ª edición (2002)</p> <p>Los problemas propuestos en el curso, junto a algunos otros parecidos, se encuentran resueltos en: FERNANDEZ, M. , C. FERNANDEZ, D. ZORRILLA y M.C. EDREIRA: "Problemas de Mecánica Cuántica Molecular" Universidad de Cádiz (2001)</p> <p>Para ampliar, resultan especialmente recomendables:</p> <p>DE CARACTER GENERAL:</p> <p>BERTRAN, J., BRANCHADEL, V., MORENO, M. Y SODUPE, M.: "Química Cuántica" Ed. Síntesis, Madrid 2000</p> <p>PANIAGUA, J.C. Y ALEMANY, P.: "Química Cuántica" Llibres de l'Index, Barcelona 1999 (está escrito en catalán, pero se entiende bien y es muy recomendable)</p> <p>LEVINE, I.N. "Química Cuántica" Prentice-Hall, Madrid 2001</p> <p>AVERY, J. "Teoría Cuántica de Átomos, Moléculas y Fotones" Alhambra, Madrid 1975</p> <p>FERNANDEZ, M. "Unidades Didácticas de Química Cuántica" UNED, Madrid 1991</p> <p>LOWE, J.P. "Quantum Chemistry" Academic Press, New</p>

Código Seguro de verificación:Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	5/6
			
Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==			

	<p>York 1978</p> <p>DE CARACTER MAS ESPECIALIZADO:</p> <p>CHRISTOFFERSEN, R.E. "Basic Principles and Techniques of Molecular Quantum Mechanics" Springer-Verlag, Berlín 1989</p> <p>DAUDEL, R.; LEROY, G.; PEETERS, D. y SANA, M.: "Quantum Chemistry" John Wiley, N. York 1983</p> <p>CARSKY, P. y URBAN, M. "Ab-Initio Calculations" Springer-Verlag, Berlín 1980</p> <p>HERE, W.J.; RADOM, L.; SCHEILER, P.V. y POPLE, J.A. "Ab-Initio Molecular Orbital Theory" John Wiley, N. York 1986</p> <p>SADLEJ, J. "Semiempirical Methods of Quantum Chemistry" Ellis Horwood, N. York 1985</p>
--	--

Código Seguro de verificación:Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	6/6



Uty7WeRXpnXCzqoS+KxMkA==