

TEMARIO TEÓRICO: QUÍMICA CUÁNTICA

PRIMERA PARTE: FUNDAMENTOS DE MECANICA CUANTICA.

- 1.- ORIGEN Y UTILIDAD DE LA MECANICA CUANTICA
 - 1.1 Moléculas, espectros y Mecánica Cuántica
 - 1.2 Efecto fotoeléctrico y difracción de electrones
 - 1.3 Características fundamentales del comportamiento cuántico
 - 1.4 Principio de Incertidumbre
 - 2.- ELEMENTOS DE MECANICA ONDULATORIA
 - 2.1 Ondas clásicas, y grupos de ondas
 - 2.2 Ondas localizadas
 - 2.3 Ondas materiales
 - 2.4 Incertidumbre energía-tiempo.
 - 3.- LA ECUACION DE SCHRÖDINGER
 - 3.1 Ecuación de las ondas materiales
 - 3.2 Estados estacionarios
 - 3.3 Valores medios
 - 3.4 Partícula libre y caja monodimensional
 - 3.5 Oscilador armónico monodimensional.
 - 4.- FUNCIONES DE ONDA CON VARIAS VARIABLES
 - 4.1 Caja tridimensional y degeneración
 - 4.2 Modelo molecular de electrones en una caja (FEMO)
 - 4.3 Degeneración de Canje
 - 4.4 Determinantes de Slater y Principio de Exclusión
- Cálculo de valores medios con funciones determinantaes.

SEGUNDA PARTE: QUIMICA CUANTICA BASICA

- 5.- ORBITALES ATOMICOS
 - 5.1 Sistemas con potencial central
 - 5.2 Ecuación radial. Niveles de energía y degeneración
 - 5.3 Orbitales hidrogenoides reales e híbridos
 - 5.4 Orbitales de los átomos polielectrónicos
 - 5.5 Efecto de un campo magnético. Spín.
- 6.- EL ENLACE QUIMICO Y LA FUNCION DE ONDA ELECTRONICA MOLECULAR
 - 6.1 Separación de movimientos electrónicos y nucleares
 - 6.2 Funciones de onda electrónicas de las moléculas
 - 6.3 Ecuaciones de Hartree-Fock
 - 6.4 Método de Roothaan.
- 7.- MODELO MOLECULAR DE ELECTRONES INDEPENDIENTES
 - 7.1 Determinación semiempírica de los orbitales moleculares
 - 7.2 El Metodo Simple de Huckel (SHMO)
 - 7.3 Índices moleculares y de reactividad
 - 7.4 Extensiones del método de Huckel (AVE-EHMO)
- 8.- COORDENADAS NORMALES
 - 8.1 Oscilador armónico tridimensional
 - 8.2 Transformaciones ortogonales de coordenadas
 - 8.3 Sistemas con varias partículas
 - 8.4 Coordenadas normales y modos normales de vibración
 - 8.5 Vibraciones Moleculares

Código Seguro de verificación: +RVXrGav8hr2Ed+e/kB5Sw==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/5



+RVXrGav8hr2Ed+e/kB5Sw==

TEMARIO TEÓRICO: QUÍMICA CUÁNTICA
TERCERA PARTE: APLICACIONES DE LA QUÍMICA CUÁNTICA
9.- ELEMENTOS DE INFORMÁTICA APLICADA A LA QUÍMICA CUÁNTICA

- 9.1 Introducción al manejo de ordenadores personales (si fuera preciso).
- 9.2 Manejo de programas estándar
- 9.3 Modificación de programas estándar.
- 9.4 Consideraciones sobre la elaboración de programas.

10.- MODELOS MOLECULARES AB-INITIO

- 10.1 Clases de métodos Ab-Initio.
- 10.2 La molécula-ión de hidrógeno
- 10.3 El problema de la integración.
- 10.4 Bases más empleadas.
- 10.5 Programa de cálculo ab-initio "GAUSSIAN"

11.- MODELOS MOLECULARES SEMIEMPIRICOS

- 11.1 Métodos semiempíricos autoconsistentes (AVE-SCF)
- 11.2 Métodos CNDO: Aproximaciones y parametrización
- 11.3 Programa de cálculos semiempíricos "UCA-MOL".
- 11.4 Orbitales Moleculares Localizados..

Código Seguro de verificación: +RVXrGav8hr2Ed+e/kB5Sw==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/5



+RVXrGav8hr2Ed+e/kB5Sw==

TEMARIO PRÁCTICO: QUÍMICA CUÁNTICA

Consta de diez sesiones de dos a tres horas de duración, relacionadas con el uso de los ordenadores personales en el campo de la Química Cuántica. En el laboratorio se realizan las siguientes prácticas:

1.- INTRODUCCION AL EMPLEO DE LOS ORDENADORES PERSONALES

- 1.1 Programación BASIC
- 1.2 Operaciones con matrices.

2.- PROGRAMAS ESTANDAR DE CALCULO MATEMATICO

- 2.1 Programa DERIVE
- 2.2 Programa STATGRAPHICS

3.- PROGRAMAS DE CALCULO SEMIEMPIRICO

- 3.1 Programa UCAMOL
- 3.2 Determinación de geometrías moleculares
- 3.3 Determinación de energías de ionización
- 3.4 Energías de atomización y de disociación
- 3.5 Potenciales de vibración
- 3.6 Barreras de rotación e inversión

4.- PROGRAMAS AB-INITIO

- 4.1 Programa GAUSSIAN
- 4.2 Determinación de propiedades moleculares.
- 4.3 Influencia de la base empleada
- 4.4 Influencia de la correlación electrónica.

Código Seguro de verificación: +RVXrGav8hr2Ed+e/kB5Sw==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/5



+RVXrGav8hr2Ed+e/kB5Sw==

CRITERIOS DE EVALUACIÓN: QUÍMICA CUÁNTICA

2 exámenes parciales y un examen final.

Tanto los parciales como el final constarán de cuestionarios de teoría (40% de la nota), problemas (40% de la nota) y temas de desarrollo (20% de la nota).

Código Seguro de verificación: +RVXrGav8hr2Ed+e/kB5Sw==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	4/5



+RVXrGav8hr2Ed+e/kB5Sw==

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL: QUÍMICA CUÁNTICA

El texto mas adecuado para esta asignatura es:

FERNANDEZ, M. y RIUS, P. "Elementos de Mecánica Cuántica Molecular" Universidad de Cádiz (1997)

En este texto puede encontrar Vd. prácticamente todo el material del curso. Actualmente este texto se encuentra agotado, pero puede encontrarlo en las bibliotecas del campus. A mediados del curso 2002-03 aparecerá una nueva edición del libro con algunas mejoras, y un texto de problemas resueltos.

Para ampliar, resultan especialmente recomendables:

DE CARACTER GENERAL:

- LEVINE, I.N. "Química Cuántica"
 AC, Madrid 1977

 AVERY, J. "Teoría Cuántica de Átomos, Moléculas y Fotones"
 Alhambra, Madrid 1975

 FERNANDEZ, M. "Unidades Didácticas de Química Cuántica"
 UNED, Madrid 1991

 LOWE, J.P. "Quantum Chemistry"
 Academic Press, New York 1978

DE CARACTER MAS ESPECIALIZADO:

- CHRISTOFFERSEN, R.E.
 "Basic Principles and Techniques of
 Molecular Quantum Mechanics"
 Springer-Verlag, Berlín 1989

 DAUDEL, R.; LEROY, G.; PEETERS, D. y SANA, M.:
 "Quantum Chemistry"
 John Wiley, N. York 1983

 CARSKY, P. y URBAN, M.
 "Ab-Initio Calculations"
 Springer-Verlag, Berlín 1980

 HERE, W.J.; RADOM, L.; SCHEILER, P.V. y POPLE, J.A.
 "Ab-Initio Molecular Orbital Theory"
 John Wiley, N. York 1986

 SADLEJ, J.
 "Semiempirical Methods of Quantum Chemistry"
 Ellis Horwood, N. York 1985

Código Seguro de verificación: +RVXrGav8hr2Ed+e/kB5Sw==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	5/5



+RVXrGav8hr2Ed+e/kB5Sw==