

Fundamentos de Química Cuántica

1. Motivación de la Mecánica Cuántica

- La radiación del cuerpo negro
- El efecto fotoeléctrico
- Capacidad calorífica de los sólidos
- Dualidad onda-corpúsculo, difracción de electrones
- Espectros atómicos

2. La ecuación de Schrödinger

- La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo
- La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo
- Principio de incertidumbre
- La función de onda y su interpretación
- Partículas en cajas
- Oscilador armónico
- Rotor Rígido
- Barreras de potencial, efecto túnel

3. Átomos

- El átomo de Hidrógeno
- Orbitales, densidad electrónica y espín electrónico
- Transiciones entre niveles de energía electrónica
- Átomos polielectrónicos, aproximación orbital
- Configuraciones electrónicas (Pauli y Aufbau)

4. Moléculas y enlace químico

- La ecuación de Schrödinger molecular
- La aproximación de Born-Oppenheimer
- La ecuación de Schrödinger electrónica, orbitales moleculares

- La molécula más simple: el H_2^+
- Otras moléculas diatómicas
- Mapas de densidad electrónica
- Moléculas poliatómicas, geometrías moleculares
- Reacciones Químicas, superficies de energía potencial

Página web: www.qfa.uam.es/fqc/

Bibliografía

1. Bibliografía general

- a) P.A. Cox, Introduction to Quantum Theory and Atomic Structure, Oxford Chemistry Primers 37, Ed. Oxford University Press, 1996
- b) R.A. Alberty and R.J. Silbey, Physical Chemistry, Ed. Wiley and Sons, 2001
- c) I.N. Levine, Fisico-química, Ed. Mc. Graw-Hill, 1999 (4a edición)
- d) G.M. Barrow, Química Física, Ed. Reverté, 1985
- e) W.J. Moore, Química Física, Ed. Urmo, 1978
- f) P.N. Atkins, Fisicoquímica. Addison-Wesley, 1991.
- g) P.W. Atkins, Fisicoquímica. Ed. Omega, 1999 (6ª Edición); P. Atkins y J. de Paula, *Atkins' Physical Chemistry*, Oxford Univ. Press, 8ª Ed., 2006.
- h) H. Metieu, Physical Chemistry: Quantum Chemistry, Ed. Taylor & Francis, 2006.

2. Bibliografía avanzada

- a) R.S. Berry, S.A. Rice and J. Ross, Physical Chemistry, Ed. John Wiley and Sons, 2000
- b) Bertran Rusca y otros, Química Cuántica, Ed Síntesis, 2000
- c) M. Karplus and R. Porter, Atoms and Molecules, Ed. Benjamin, 1970
- d) I.N. Levine, Química Cuántica, Ed. Prentice Hall, 2001
- e) H. Hanna, Mecánica Cuántica para Químicos, Ed. Fondo Educativo Interamericano, 1969