



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

## 1. ASIGNATURA / COURSE

### 1.1. Nombre / Course Title

FUNDAMENTOS DE QUÍMICA CUÁNTICA / FUNDAMENTALS OF QUANTUM CHEMISTRY

### 1.2. Código / Course Code

12689

### 1.3. Tipo / Type of Course

Troncal / Compulsory

### 1.4. Nivel / Level of Course

Grado / Grade

### 1.5. Curso / Year of Course

Primero / First course

### 1.6. Semestre / Semester

2º

### 1.7. Número de Créditos / Number of Credits Allocated

5 créditos LRU, 4.2 ECTS / 5 LRU credits, 4.2 ECTS

### 1.8. Requisitos Previos / Prerequisites

Recomendable haber cursado Química, Física y Matemáticas en el bachillerato.



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

## 1.9. ¿Es Obligatoria la Asistencia? / Is Attendance to Class Mandatory?

Si / Yes

## 1.10. Datos del Profesor/a / Profesores / Faculty Data

### Grupo: 11

Florentino Borondo

Departamento: Química, UAM  
Facultad de Ciencias, Despacho C-IX, 605  
Teléfono: 91 497 4964  
e-mail: [f.borondo@uam.es](mailto:f.borondo@uam.es)  
Página Web:  
Horario de Tutorías Generales: Mañana o tarde según horario preacordado

Ismanuel Rabadán Romero

Departamento: Química, UAM  
Facultad de Ciencias, Despacho C-IX, 602  
Teléfono: 91 497 5259  
e-mail: [ismanuel.rabadan@uam.es](mailto:ismanuel.rabadan@uam.es)  
Página Web: <http://tcam.qui.uam.es/ismanuel>  
Horario de Tutorías Generales: Mañana o tarde según horario preacordado

### Grupo: 12

José Luís Pascual

Departamento: Química Física Aplicada, UAM  
Facultad de Ciencias, Despacho C-XIV, 400\_a  
Teléfono: 91 497 8753  
e-mail: [joseluis.pascual@uam.es](mailto:joseluis.pascual@uam.es)  
Página Web:  
Horario de Tutorías Generales: Mañana o tarde según horario preacordado

### Grupo: 16

Alfredo Aguado

Departamento: Química Física Aplicada, UAM  
Facultad de Ciencias, Despacho C-XIV, 504  
Teléfono: 91 497 4954  
e-mail: [alfredo.aguado@uam.es](mailto:alfredo.aguado@uam.es)  
Página Web:  
Horario de Tutorías Generales: Mañana o tarde según horario preacordado



## 1.11. Objetivos del Curso / Objective of the Course

Que el alumno sea capaz de comprender los conceptos básicos de la Mecánica Cuántica y aplicarlos en la descripción de átomos y moléculas.

### Adquisición de conocimientos

- Conceptos básicos de la Mecánica Cuántica.
- Conceptos básicos de la Química Cuántica.

### Adquisición de competencias y destrezas

- Resolver la ecuación de Schrödinger para sistemas simples y obtener conclusiones y aproximaciones necesarias para el tratamiento de sistemas más complejos.
- Búsqueda de información bibliográfica, tanto escrita como en Internet.
- Razonamiento crítico.

## 1.12. Contenidos del Programa / Course Contents

### BLOQUE I: MOTIVACIÓN DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

1. La radiación del cuerpo negro
2. El efecto fotoeléctrico
3. Dualidad onda-corpúsculo, difracción de electrones
4. Espectros atómicos

### BLOQUE II: LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

1. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo
2. La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo
3. Principio de incertidumbre
4. La función de onda y su interpretación
5. Partículas en cajas
6. Oscilador armónico
7. Rotor Rígido
8. Barreras de potencial, efecto túnel

### BLOQUE III: ÁTOMOS

1. El átomo de Hidrógeno
2. Orbitales, densidad electrónica y espín electrónico
3. Transiciones entre niveles de energía electrónica
4. Átomos polielectrónicos, aproximación orbital
5. Configuraciones electrónicas (Pauli y Aufbau)



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

## BLOQUE IV: MOLÉCULAS Y ENLACE QUÍMICO

1. La ecuación de Schrödinger molecular
2. La aproximación de Born-Oppenheimer
3. La ecuación de Schrödinger electrónica, orbitales moleculares
4. La molécula más simple: el  $H_2^+$
5. Otras moléculas biatómicas

### 1.13. Referencias de Consulta Básicas / **Recommended Reading**

- ATKINS, P.W., *Química Física*, 6ª edición, Ed. Omega, 1999/ ATKINS, P.W. y DE PAULA, J., *Physical Chemistry*, 8ª edición, Ed. Oxford, 2006
- LEVINE, N., *Fisico-química*, 5a edición, Ed. Mc Graw-Hill, 2004
- ALBERTY, R.A., *Physical Chemistry*, 2 edición, Ed. Wiley & Sons, 1996
- METIU, H., *Physical Chemistry: Quantum Chemistry*, Ed. Taylor & Francis, 2006
- BERTRÁN, J. y NÚÑEZ, J., *Química Física*, Ed. Ariel Ciencia, 2002
- ENGEL, T. y REID P., *Química Física*, Ed. Pearson Addison Wesley, 2006

Página Web de la Asignatura: <http://www.qfa.uam.es/fqc>

#### Bibliografía de Consulta Específica

- SIMONS, J. y NICHOLS, J., *Quantum Mechanics in Chemistry*, Oxford U. Press, 1997.
- BERTRÁN, J. y otros, *Química Cuántica*, Síntesis, 2000
- LEVINE, I.N., *Química Cuántica*, Prentice-Hall, 2001
- KARPLUS, M. y PORTER, R.N., *Atoms and Molecules*, Benjamin, 1970

## 2. Métodos Docentes / **Teaching Methods**

- Clases magistrales en las que se introducirán los principales contenidos teóricos de la asignatura.
- Seminarios en los que se aplicará la metodología de la Mecánica Cuántica en casos concretos.



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

- Trabajos tutorizados que los alumnos prepararán con ayuda de tutorías personalizadas, con la posibilidad de presentación en las clases de seminarios para su discusión.
  - Resolución de problemas por parte del alumno y discusión de dificultades en clases de seminario.
- **Actividades Presenciales**
    - Clases teóricas
      - 23 clases magistrales
      - 15 clases de seminarios
    - Clases prácticas  
Clases en aulas de informática y/o salas de proyección de iniciación al manejo de programas de cálculo en Química Cuántica.
  - **Actividades Dirigidas**
    - Trabajos individuales y/o en grupo  
Los alumnos formarán grupos para la realización de trabajos tutorizados que se podrán presentar en la clase de seminario (podría disponer de 10 minutos por alumno para exposición, y 10 minutos de coloquio).
    - Docencia en red  
Los alumnos dispondrán de material relacionado con la asignatura en Internet: enunciados de problemas, resolución de algunos de ellos, bibliografía de interés, comunicación con los profesores (a parte de las horas de tutoría), en la dirección <http://www.qfa.uam.es/fqc>
    - Tutorías (incluidas virtuales)
      - 1 ó 2 horas
      - Consultas vía correo electrónico.



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

### 3. Tiempo Estimado de Trabajo del Estudiante / **Estimated Workload for The Student**

<i>Actividad académica</i>	<i>Horas presenciales</i>	<i>Factor</i>	<i>Horas no presenciales</i>	<i>Total horas</i>	<i>Créditos ECTS</i>
Clases magistrales	23	1	23	46	
Clases seminarios	15	2	30	45	
Clases en aulas de informática	3		3	6	
Trabajo tutorizado			7.5	7.5	
Preparación exámenes			10	10	
Realización exámenes	10			10	
Revisión exámenes	0.5			0.5	
Total	51.5		73.5	125	4,2



## 4. Métodos de Evaluación y Porcentaje en la Calificación Final / **Assessments Methods and Percentage in the Final Marks**

- **Descripción detallada del procedimiento para la evaluación.**
  - Se realizará un examen final en convocatoria oficial dividido en una parte de teoría tipo test con respuestas de opción múltiple y otra de resolución de problemas.
  - Se realizarán además dos exámenes parciales, que incluirán una parte de teoría y otra de problemas.
  - Evaluación continua en las clases de seminarios
  - Evaluación del trabajo tutorizado.

- **Porcentaje en la calificación final**

**Convocatoria ordinaria de Junio:**

- Examen final con un peso del 50%
- Dos exámenes parciales con un peso total del 50%. La calificación de cada uno de los parciales podrá incluir como máximo un 20% debido a la evaluación continua y el trabajo tutorizado.

**Convocatoria extraordinaria de Septiembre:**

- un examen con el 100% de peso en la calificación



## 5. Cronograma de Actividades (opcional) / **Activities Chronogram (optional)**

Un cuatrimestre se imparte habitualmente en 14 semanas de clase, y en cada semana se imparte en promedio una hora y media de teoría y una hora de seminarios. Este cronograma se adaptará, en la medida de lo posible, al calendario aprobado por la Junta de Facultad.

BLOQUE I	Semanas 1 a 2	
BLOQUE II	Semanas 2 a 7	
Examen	BLOQUES I y II	Semana 7 u 8
BLOQUE III	Semanas 8 a 11	
BLOQUE IV	Semanas 12 a 14	
Examen	BLOQUES III y IV	Semana 14