

## GUÍA DOCENTE DE FUNDAMENTOS DE QUÍMICA CUÁNTICA

### 1. DATOS DE LA ASIGNATURA

Nombre de la asignatura: FUNDAMENTOS DE QUÍMICA CUÁNTICA		Código: 12689			
Titulación: LICENCIATURA EN QUÍMICA					
Breve Descripción					
Elementos básicos de Mecánica Cuántica no relativista. Aplicación a átomos y moléculas.					
Tipo Troncal	Curso 1	Semestre 2	Año del Plan de Estudios 1996		
Prerrequisitos si los hubiera/Recomendaciones para la matriculación:					
Recomendable haber cursado Química, Física y Matemáticas en el bachillerato.					
Créditos					
Créditos Totales (LRU/ECTS)		Créditos Teóricos (LRU/ECTS)		Créditos Prácticos (LRU/ECTS)	
5	4,2	4	3,4	1	0,8

### OBJETIVOS Y COMPETENCIAS A DESARROLLAR

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

#### 1. Adquisición de conocimientos.

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

#### 2. 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.

## REFERENCIAS DE CONSULTA BÁSICA

### Bibliografía General

- P. A. Cox, *Introduction to Quantum Theory and Atomic Structure*. Oxford Chemistry Primers 37, Ed. Oxford University Press, 1996.
- P. W. Atkins, *Química Física*, Ed. Omega 1999 (6ª ed.); P. W. Atkins and J. De Paula, *Physical Chemistry*. Oxford, 2006 (8ª ed.).
- N. Levine, *Fisico-química*, Ed. Mc Graw-Hill, 2004 (5ª edición).
- R. A. Alberty, *Physical Chemistry*, 2 ed., Wiley & Sons, 1996.
- H. Metiu, *Physical Chemistry: Quantum Chemistry*, Ed. Taylor&Francis, 2006.
- J. Bertrán y J. Núñez, *Química Física*, Ariel Ciencia, 2002.

Existe una página web a disposición de los alumnos en la dirección de Internet:  
<http://www.qfa.uam.es/fqc>

## PROCEDIMIENTOS DE ENSEÑANZA/APRENDIZAJE

1. Clases magistrales en las que se introducirán los principales contenidos teóricos de la asignatura.
2. Seminarios en los que se aplicará la metodología de la Mecánica Cuántica en casos concretos.
3. Trabajos tutorizados que los alumnos prepararán con ayuda de tutorías personalizadas, con la posibilidad de presentación en las clases de seminarios para su discusión.
4. Resolución de problemas por parte del alumno y discusión de dificultades en clases de seminario.

### Actividades Presenciales

1. **Clases teóricas.**
  - 23 clases magistrales
  - 15 clases de seminarios
2. **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

3. **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).
4. **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](http://www.qfa.uam.es/fqc).
5. **Tutorías (incluidas virtuales).**
  - 1 ó 2 horas
  - Consultas vía correo electrónico.

## 2. DATOS DEL PROFESOR

Grupo: 11		
Profesor/a: Joaquín Juan Camacho		
Correo electrónico: j.j.camacho@uam.es	Teléfono: 914978656	Web del profesor:
Departamento: Química Física Aplicada	Centro: Facultad de Ciencias	
Horario de tutorías generales: Mañana o tarde según horario preacordado	Despacho: C14-309	
Grupo:		
Profesor/a Ignacio Ema López		
Correo electrónico: Nacho.ema@uam.es	Teléfono: 914973987	Web del profesor:
Departamento: Química Física Aplicada	Centro: Facultad de Ciencias	
Horario de tutorías generales: Mañana o tarde según horario preacordado	Despacho: C14-505-3	
Grupo: 12		
Profesor/a Florentino Borondo ( <i>Coordinador de la Asignatura</i> )		
Correo electrónico: f.borondo@uam.es	Teléfono: 914974964	Web del profesor:
Departamento: Química	Centro: Facultad de Ciencias	
Horario de tutorías generales: Mañana o tarde según horario preacordado	Despacho: C9-605	
Grupo: 16		
Profesor Jose Luis Pascual		
Correo electrónico: joseluis.pascual@uam.es	Teléfono: 914978753	Web del profesor:
Departamento: Química Física Aplicada	Centro: Facultad de Ciencias	
Horario de tutorías generales: Mañana o tarde según horario preacordado	Despacho: C-14-400_a	
Grupo: 16		
Profesor/a Ismanuel Rabadán Romero		
Correo electrónico: ismanuel.rabadan@uam.es	Teléfono: 914975259	Web del profesor: <a href="http://tcam.qui.uam.es/ismanuel">http://tcam.qui.uam.es/ismanuel</a>
Departamento: Química	Centro: Facultad de Ciencias	
Horario de tutorías generales: Mañana o tarde según horario preacordado	Despacho: C9-602	

### 3. BLOQUES TEMÁTICOS

#### 3.1 CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

1. Motivación de la Mecánica Cuántica

- La radiación del cuerpo negro
- El efecto fotoeléctrico
- 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  $\text{H}_2^+$
- Otras moléculas diatómicas

#### 3.2 OBJETIVOS Y CAPACIDADES A DESARROLLAR

Las mismas a las dichas anteriormente

### 3.3 TIEMPO ESTIMADO DE TRABAJO DEL ESTUDIANTE

<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

### 3.4 BIBLIOGRAFÍA DE CONSULTA ESPECÍFICA

- J. Simons and J. Nichols, Quantum Mechanics in Chemistry, Oxford U. Press, 1997.  
J. Bertrán y otros, Química Cuántica, Síntesis, 2000  
I. N. Levine, *Química Cuántica*, Prentice-Hall, 2001  
M. Karplus y R. N. Porter, Atoms and Molecules, Benjamin, 1970

## **4. PROCEDIMIENTO DE EVALUACIÓN**

### **4.1 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.
- Evaluación continua en las clases de seminarios
- Evaluación del trabajo tutorizado.

### **4.2 PORCENTAJE EN LA CALIFICACIÓN FINAL**

La calificación final consta de dos bloques en cada uno de los cuales habrá que obtener una puntuación de 3.5 sobre 10 para que sea considerada:

1. Examen final con un peso del 50%
2. Dos exámenes parciales con un peso del 15% cada uno, más trabajos tutorizados y resolución de problemas con un peso del 20%