QUIMICA (2º SEMESTRE) CUARTO CURSO

QUIMICA CUANTICA

1.- Introducción.
Concepto y significado de la Química Cuántica.- Método mecanocuántico.

2.- Base experimental de la teoría cuántica.
Efecto fotoeléctrico.- Espectros atómicos.- Hipótesis de Broglie.- Principio de Indeterminación.

3.- Postulados básicos de la Mecánica Cuántica.
Función de onda.- Operadores.- Valores propios.

4.- Aplicacion a algunos casos sencillos.
Partícula en una caja.- Rotor rígido.- Oscilador armónico.

5.- Estudio del átomo de hidrógeno,
Función radial y esférica.- Impulso angular orbital.- Spin del electrón.- Impulso angular total.-

6.- Métodos aproximados para resolver la ecuación de Schrodinger.
Teoría de Perturbaciones.- Teoría de variaciones.

7.- Aproximación de Born Oppenheiner.
Niveles de rotación.- Niveles de vibración.

8.- Moleculas y enlaces.
Molécula ión hidrógeno.- Molécula de hidrógeno.- Estados excitados.

9.- Hibridación de orbitales.
Principio de hibridación.- Diferentes tipos.- Aplicación de la teoría de grupos para obtener los híbridos tetraédricos.

10.- Aproximaciones cuantitativas del método OM.
Aproximación CLOA.- Aproximación CAC.- forma del operador de Hamilton.

11.- Integrales moleculares.
Diferentes tipos.- Métodos de integración.- Tablas de integrales moleculares.

12.- Estructura electrónica de sistemas conjugados.
Teoría CLOA-OM para hidrocarburos conjugados.- Estudio del butadieno y benceno.-

13.- Sistemas aromáticos heterocíclicos y substituidos.
Efecto inductivo.- Efecto mesómero.-

14.- Espectroscopía de rotación y vibración.
Espectros de pura rotación.- Espectroscopía de rotación vibración.- Anarmonicidad.- Espectros Raman.

15.- Espectros electrónicos.
Principios de Frank-Condon.- Reglas de selección.- Aplicaciones.

16.- Espectros de resonancia.
Resonancia magnética nuclear.- Resonancia de spin electrónico.

BIBLIOGRAFIA:

Daudel, R., Lefebre, R., Moser, C. "Quantum Chemistry", Inters. Publis., New York. 1965.

Eyring, H., Walter, J., Kimball, G. "Quantum Chemistry", J. Wiley Sons,. New York 1967.

Hanna, M. "Quantum Mechanics in Chemistry", Benjamin, New York, 1969.

Kauman, W., "Quantum Chemistry", Academic Press, New York 1967.

Pauling, L., Wilson, E. "Introduction to Quantum Mechanics", McGraw Hill, New York, 1935.

Phillips, L. "Basic Quantum Chemistry", J. Wiley Sons., New York 1965. Trad. Colección Exedra. Ed. Alhambra, 1970.

Pilar, F. "Elementary Quantum Chemistry", McGrae Hill, New York, 1968.

Riggs, N.V. "Quantum Chemistry", McMillan Company, Londres, 1969.