

Química Física II

Grupo I (Enrique Sánchez Marcos, despacho 421-C)

Programa Teórico

1. Fundamentos de la Mecánica Cuántica. Ecuación de Schrödinger.
2. Postulados de la mecánica cuántica.
3. Aplicación de la mecánica cuántica a sistemas sencillos.
4. Conmutación de operadores.
5. Vibración y rotación en mecánica cuántica.
6. Termodinámica estadística.
7. Introducción a la espectroscopía. Espectroscopía rotacional y vibracional.
8. El átomo de hidrógeno.
9. Átomos polielectrónicos.
10. Estados cuánticos para átomos polielectrónicos y espectroscopía atómica.
11. Estructura electrónica molecular.
12. Espectroscopía electrónica molecular.
13. Espectroscopías de resonancia de espín.

Programa de Clases Prácticas

1. Moléculas diatómicas: orbitales moleculares y vibración molecular
2. Superficies de energía potencial.
3. Termoquímica. Cálculo teórico de magnitudes termodinámicas de reacción
4. Teoría de orbitales moleculares de Hückel

Bibliografía

Química Física Thomas Engel y Philip Reid
Edición:1a
Publicación: Pearson, Addison Wesley, 2006
ISBN: 978-84-7829-077-2

Physical Chemistry Peter Atkins y Julio de Paula
Edición:10ª
Publicación: Oxford University Press, 2014
ISBN: 978-0-19-969740-3

Atkin's Physical Chemistry, Charles Trapp, Marshal Cady, Carmen Giunta
Edición:10a
Publicación: Oxford University Press, 2014
ISBN: 978-0-19-870800-1

Química Física Peter Atkins y Julio de Paula
Edición:8a
Publicación: Editorial Médica Panamericana, 2006
ISBN: 978-950-06-1248-7

Fisicoquímica , Ira N. Levine
Edición:4a
Publicación: McGraw-Hill, 1996
ISBN:84-481-0618-0

Problemas de Química Física, Joan Bertrán Rusca y Javier Nuñez Delgado
Edición:1a
Publicación:Delta Publicaciones, 2007
ISBN:84-96477-48-7

Problemas de Espectroscopia Molecular, Luis Carballeira Ocaña e Ignacio Pérez Juste
Edition 1ª.
Publicación: Netbiblo, 2008
ISBN: 978-84-9745-359-2

Química Cuántica. La Química Cuántica en 100 problemas Lorna Elizabeth Bailey Chapman
María Dolores Troitiño Núñez
Publicación: UNED, 2004
ISBN:84-362-1350-5

Química Física. Problemas de Espectroscopía. Fundamentos, átomos y moléculas diatómicas
Alberto Requena y José Zúñiga
Publicación: Pearson, Prentice Hall, 2007
ISBN: 978-84-8322-367-3

Tema 1.-Fundamentos de la Mecánica Cuántica.

Ecuación de Schrödinger

1.1.Colapso de las ideas clásicas.

1.1.1. Radiación del cuerpo negro

1.1.2. Efecto fotoeléctrico

1.1.3. Dualidad onda-partícula.

1.2. Espectros atómicos y modelo de Bohr del átomo de hidrógeno.

1.3. La ecuación de Schrödinger.

1.4. Operadores, observables, funciones propias y valores propios.

1.5. Operadores y mecánica cuántica.

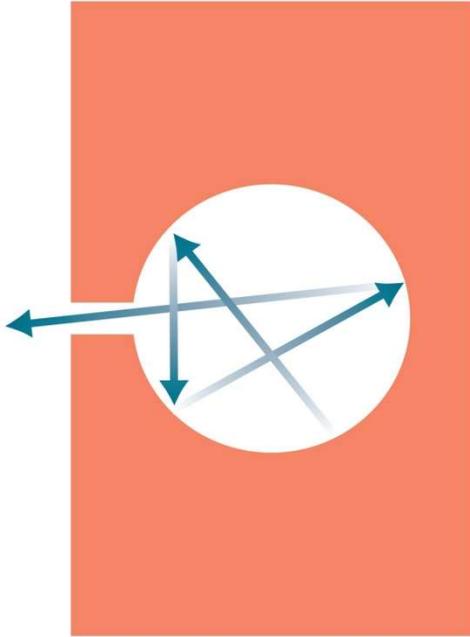
La Física Cuántica se distingue de la Física Clásica por 2 propiedades:

- Cuantización
- Dualidad Onda-Partícula

La Química es una Ciencia Molecular

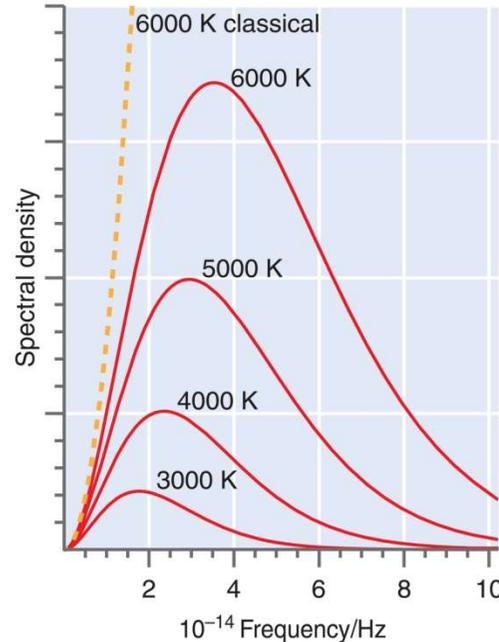
Comprender el comportamiento macroscópico en términos de propiedades moleculares precisa de la Química Cuántica

Radiación del Cuerpo Negro



© 2010 Pearson Education, Inc.

Cuerpo negro idealizado



© 2010 Pearson Education, Inc.

Intensidad espectral del cuerpo negro idealizado en función de la frecuencia a distintas temperaturas
(líneas rojas son experimento; línea marrón predicción clásica)

$$\rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \bar{E}_{osc} d\nu$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Teoría Clásica
(Rayleigh-Jeans)

$$\bar{E}_{osc} = kT$$

$$\rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi kT\nu^2}{c^3} d\nu$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Teoría Cuántica
(Planck)

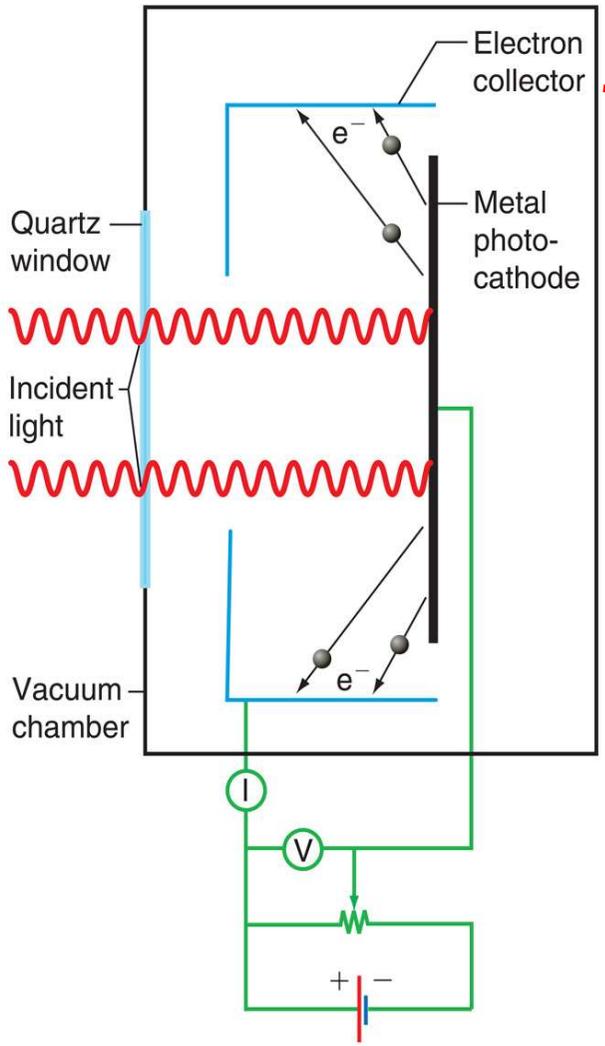
$$\bar{E}_{osc} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

$$\rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

$$E = nh\nu$$

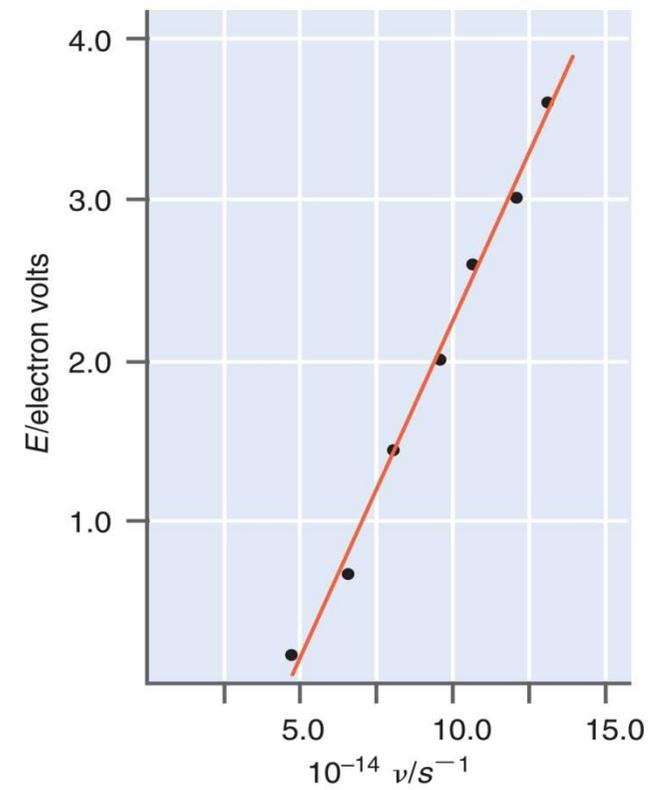
Efecto Fotoeléctrico



Potential source
© 2010 Pearson Education, Inc.

$$E_e = \beta v - \phi$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.



© 2010 Pearson Education, Inc.

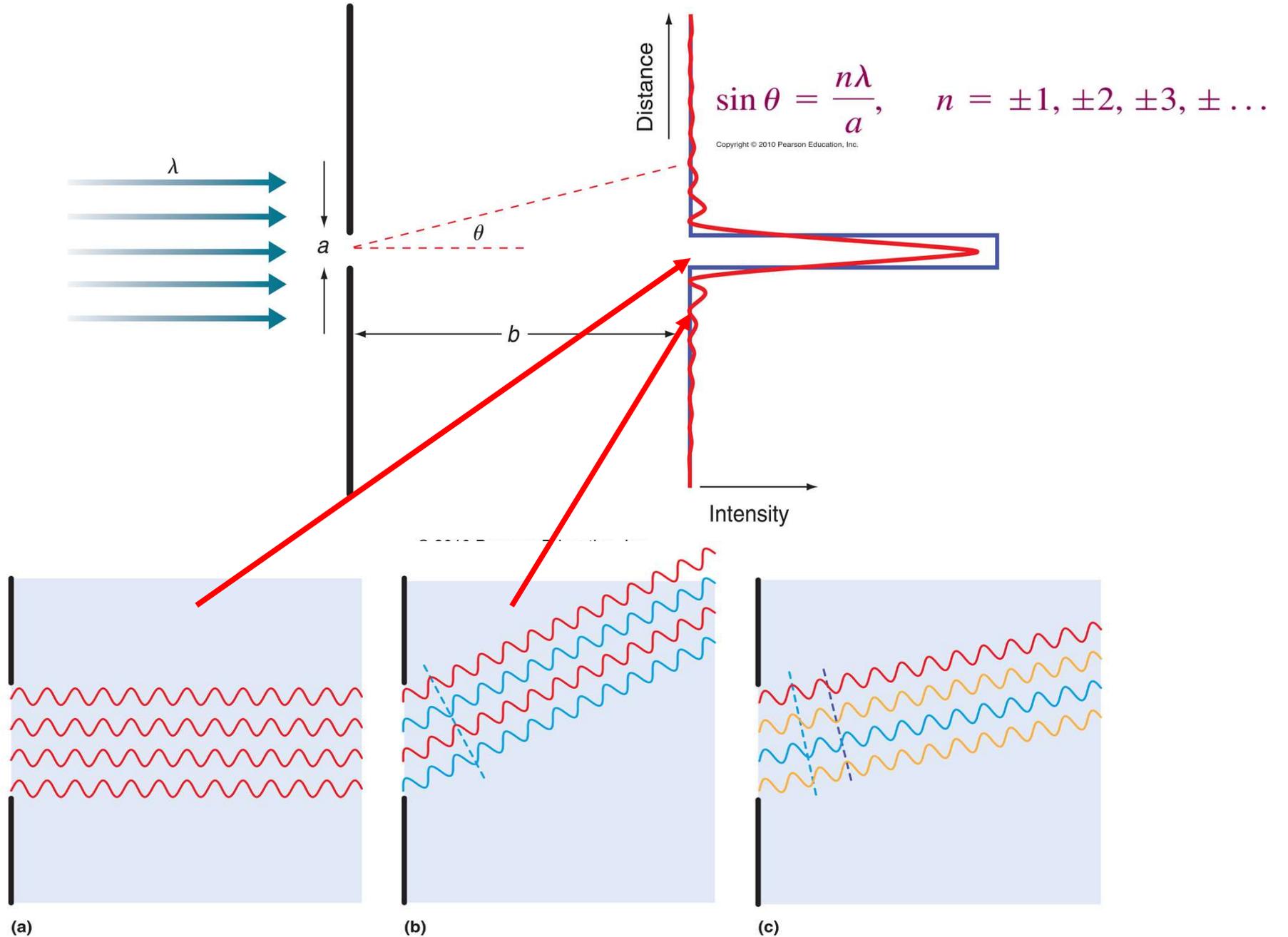
$$E = h\nu$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Fotón

(paquete de luz espacialmente localizado)

Difracción de ondas



Dualismo Onda-Partícula

(Louis De Broglie, 1923)

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Experimento de Davisson y Germer (1927): difracción de electrones por un cristal de NiO

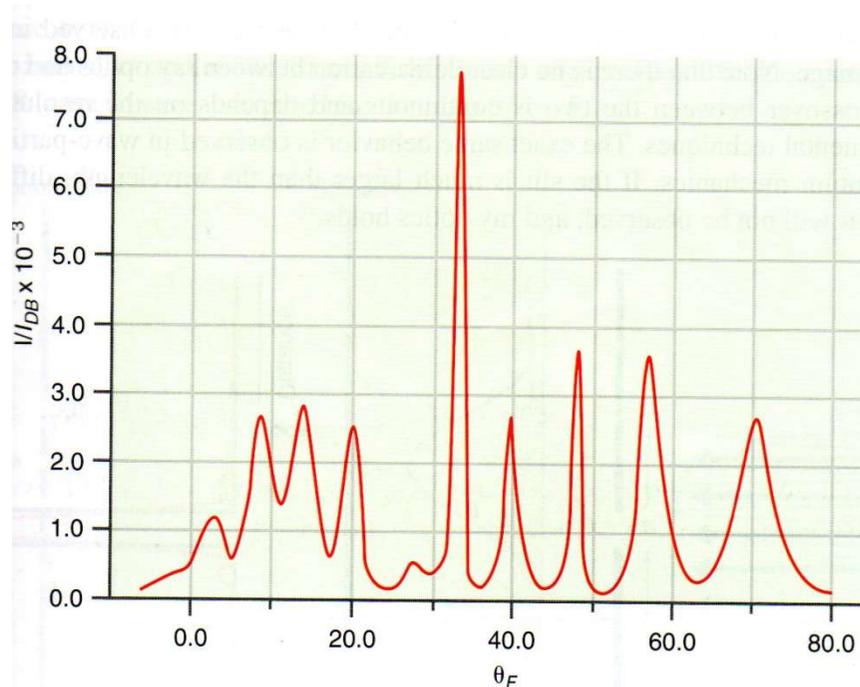
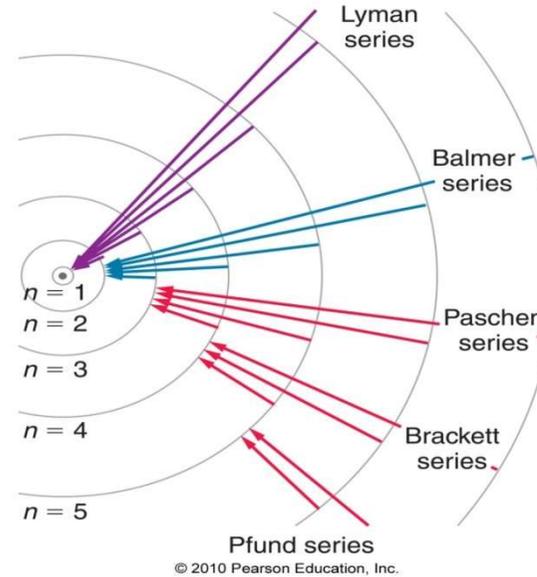
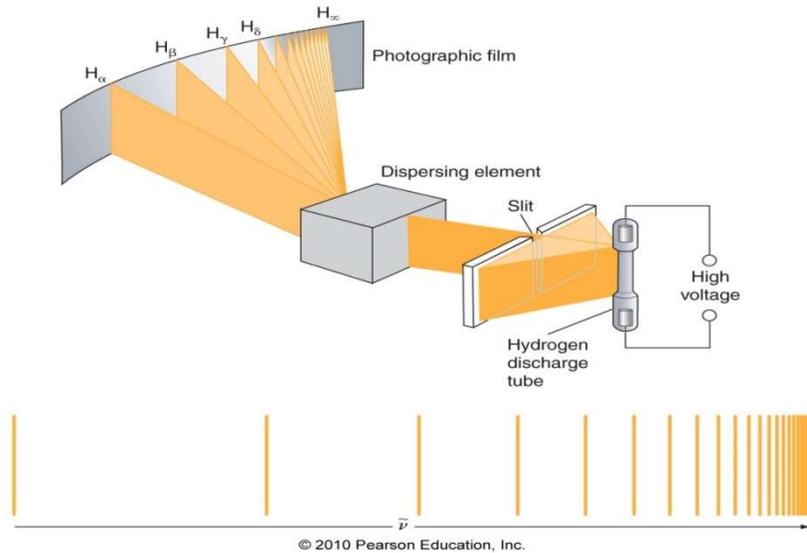


FIGURE 12.5

Diffraction scan obtained by rotating a mass spectrometer around a nickel single crystal surface on which a collimated He beam was incident. Each peak corresponds to a different diffraction maximum.

Source: Reprinted with permission from "A helium diffraction study of the structure of the Ni(115) surface," by D.S. Kaufman et al., from *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 86, issue 6, pp. 3682 (1987). Copyright 1987, American Institute of Physics.

Espectros Atómicos

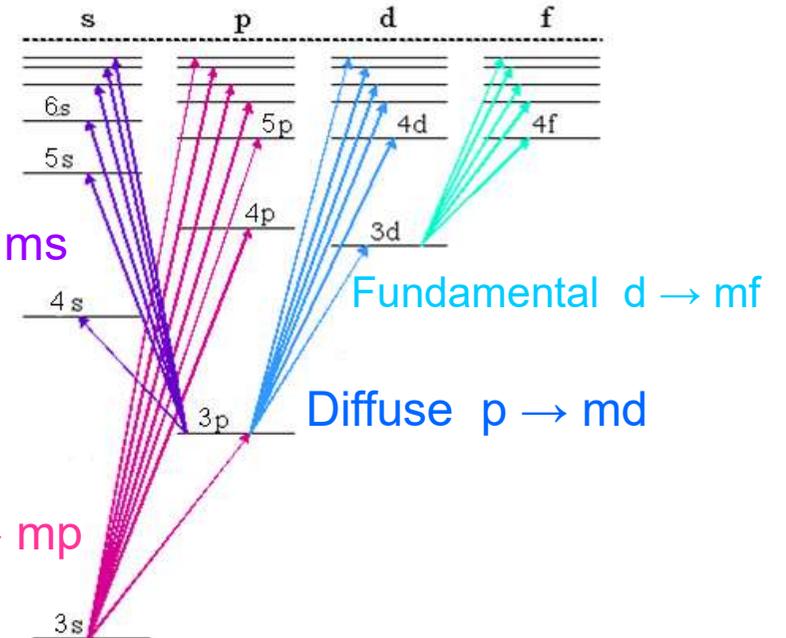


Ec. Rydberg
$$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1} = \frac{R_H}{\text{cm}^{-1}} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > n_1$$

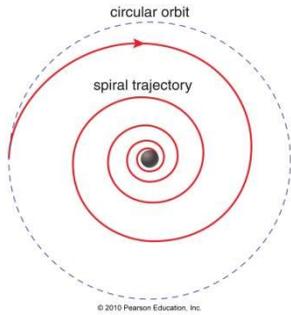
Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Series de líneas en el espectro de emisión atómico

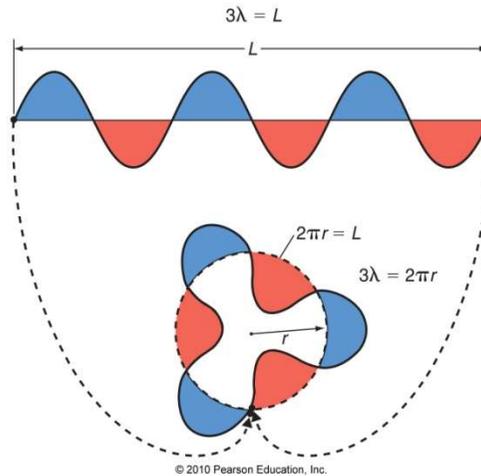
Sharp $p \rightarrow ms$
 Fundamental $d \rightarrow mf$
 Diffuse $p \rightarrow md$
 Principal $s \rightarrow mp$



Modelo atómico de Niels Bohr



predicción clásica



cuantización del momento angular

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{p}$$

$$m_e v r = n\hbar, \text{ where } n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$$

$$E_{total} = E_{kinetic} + E_{potential} = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$E_{total} = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\nu_{2 \rightarrow 1} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad n_2 > n_1$$

R_H

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2}$$

Ecuación de ondas no dispersiva clásica

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t)$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

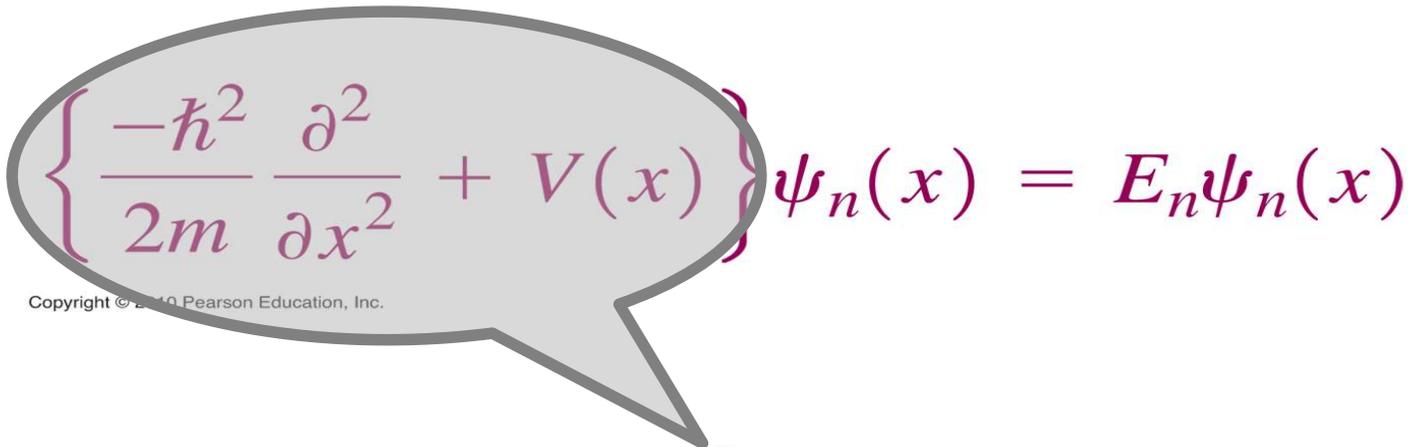
Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Operadores, funciones propias y valores propios

Ecuación de valor propio

$$\hat{O}\psi_n = a_n\psi_n$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.


$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

La ecuación de Schrödinger es una ecuación de valor propio

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Las funciones propias de un operador tienen 2 propiedades

Ortogonalidad

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x)\psi_j(x) dx = 0 \quad \text{unless } i = j$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Complejitud

$$f(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x) + c_3\psi_3(x) + \dots$$