

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.

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, bold font. The 'C' is large and blue, while the rest of the text is in a dark green color. The logo is set against a light blue and orange gradient background.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

12. Espectroscopía electrónica molecular

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

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, teal-colored font. The '99' is significantly larger and more prominent than the 'Cartagena' part. The text is set against a background of light blue and orange brushstrokes.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

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

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

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.

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, teal-colored font. The '99' is significantly larger and more prominent than the rest of the text. The logo is set against a light blue and orange gradient background that resembles a stylized wave or a splash.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

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

- Cuantización
- Dualidad Onda-Partícula

La Química es una Ciencia Molecular

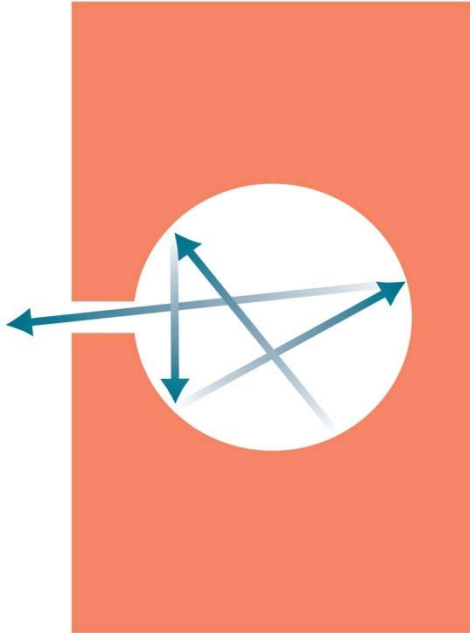
Comprender el comportamiento macroscópico en términos de propiedades moleculares precisa de la Química Cuántica

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, blue, serif font. The '99' is significantly larger and more prominent than the 'Cartagena' part. The text is set against a light blue, cloud-like background with a white outline. Below the text, there is a horizontal orange and yellow gradient bar.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

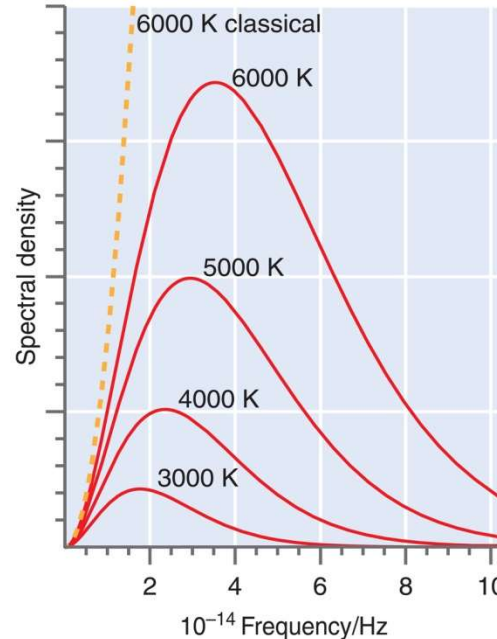
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

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)

Teoría Clásica
(Rayleigh-Jeans) $\bar{E}_{osc} = kT$

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

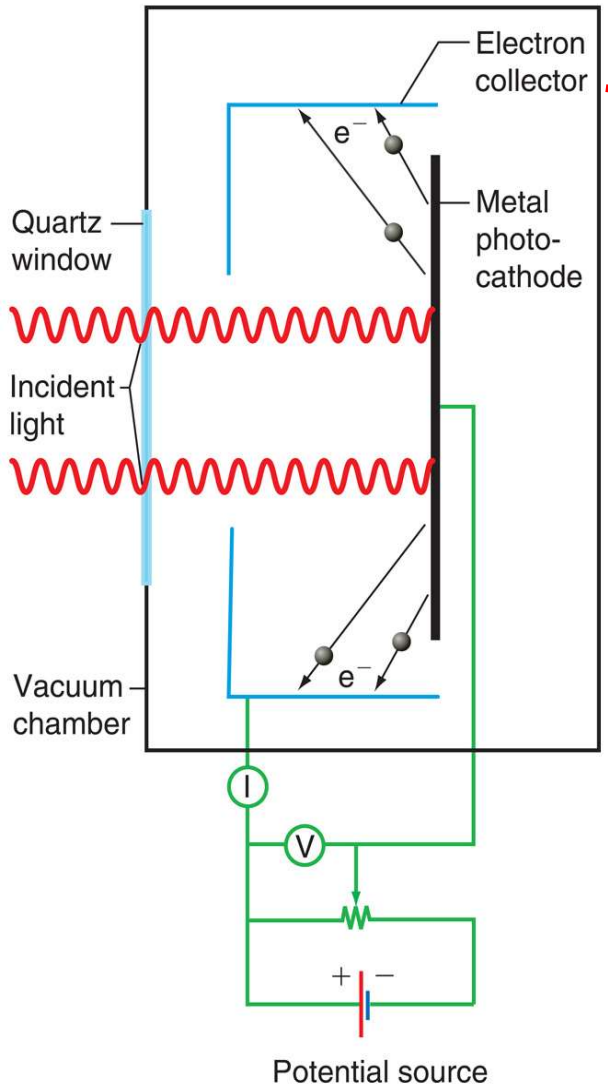
Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Cartagena99

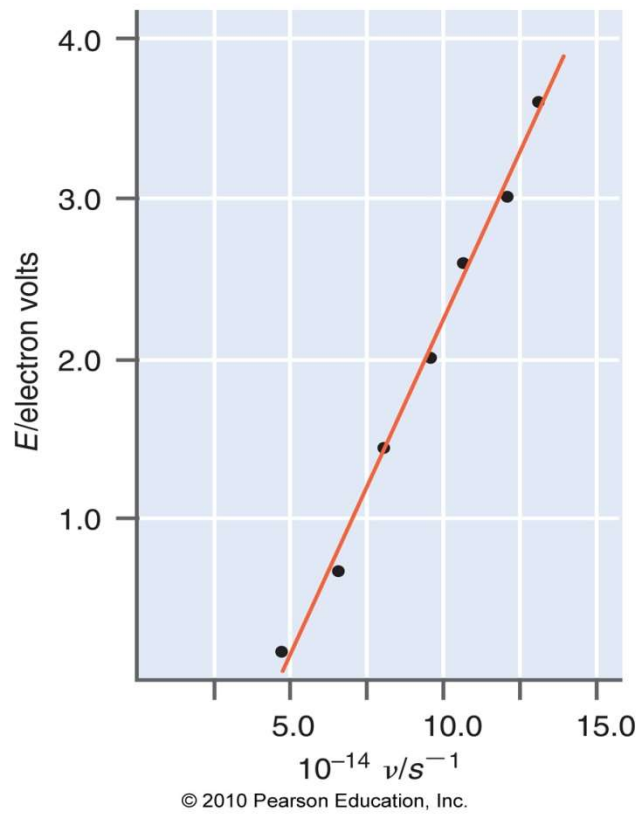
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Efecto Fotoeléctrico



$$E_e = \beta\nu - \phi$$



Cartagena99

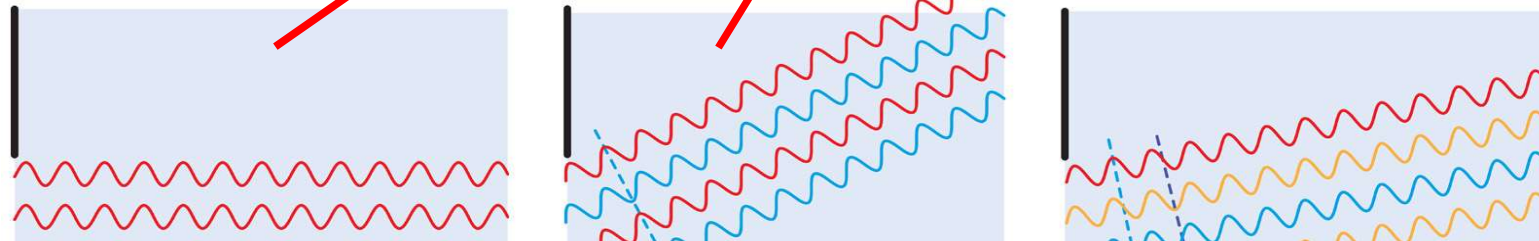
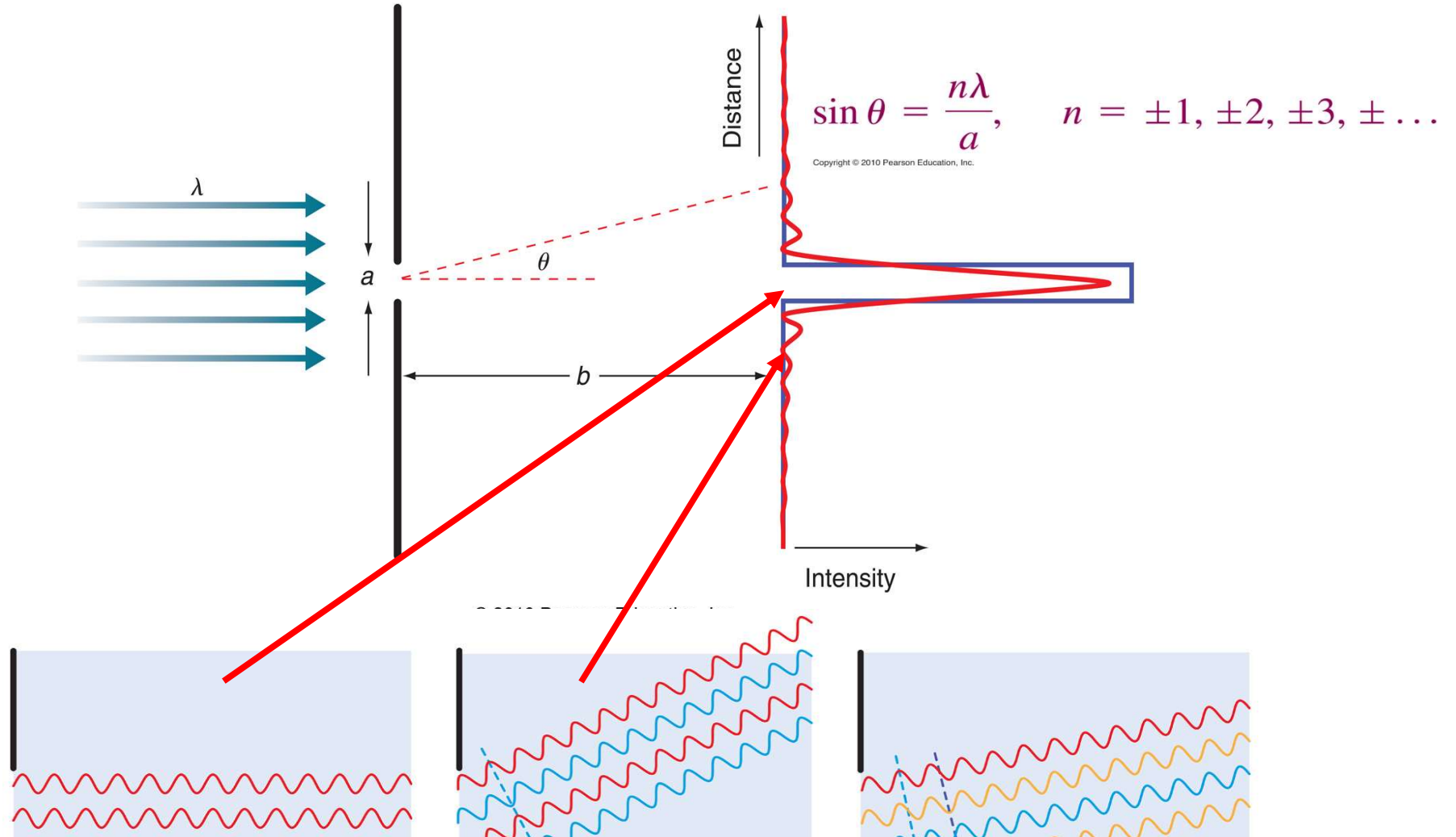
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

(paquete de las españolas)

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Difracción de ondas



(a)

(b)

(c)

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

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

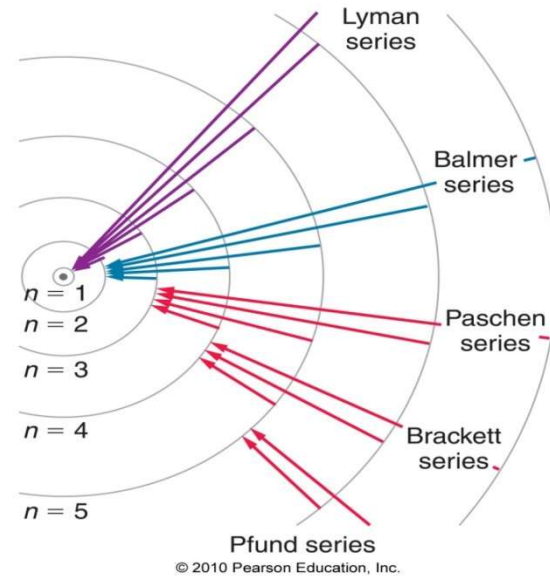
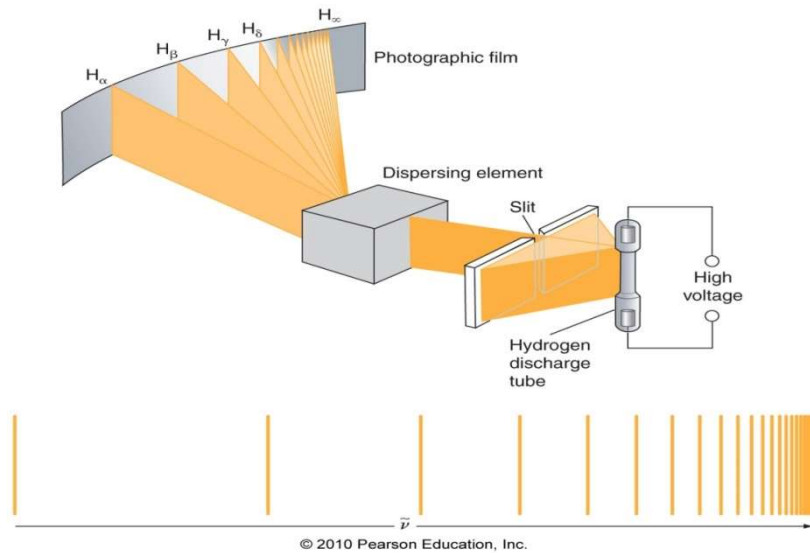
Diffraction scan obtained by rotating a mass spectrometer around a nickel single

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TECNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

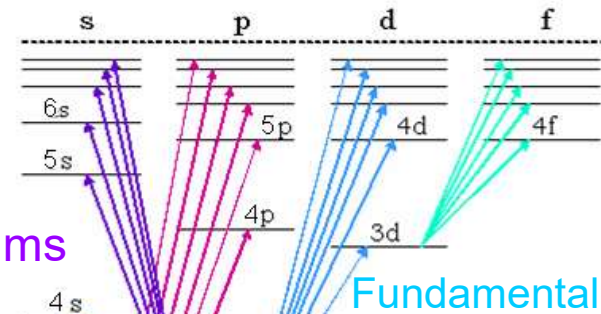
The Journal of Chemical Physics, Vol. 86,
issue 6, pp. 3682 (1987). Copyright 1987,
Institute of Physics.

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.



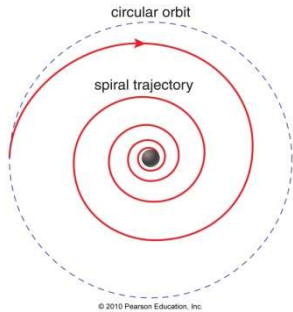
Series de líneas en el

Cartagena99

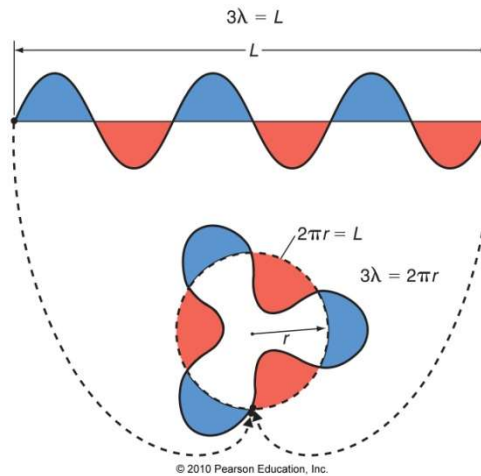
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Modelo atómico de Niels Bohr



predicción clásica



cuantización del momento angular

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

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

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

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

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

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

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

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.

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, bold font. The 'C' is large and blue, while the rest of the text is in a dark green color. The logo is set against a light blue and orange background.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

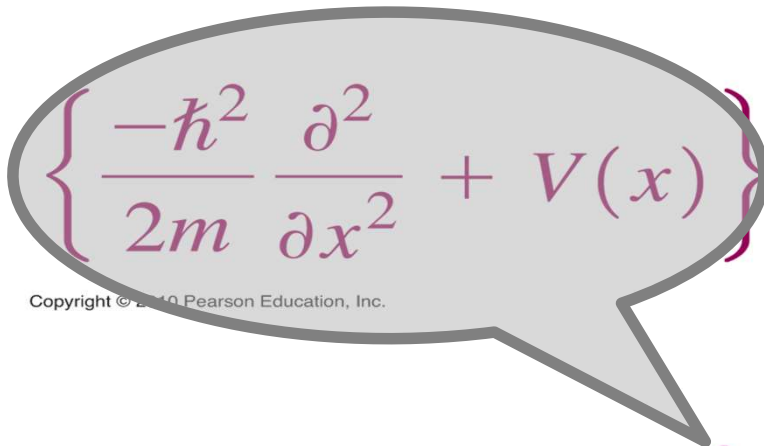
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

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

Ortogonalidad

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

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70