



Química cuántica. La química cuántica en 100 problemas /

Bailey Chapman, Lorna Elizabeth

Electronic books

Monografía

<https://rebiunoda.pro.baratznet.cloud:28443/OpacDiscovery/public/catalog/detail/b2FpOmNlbGVicmF0aW9uOmVzLmJhcmF0ei5yZW4vMzQ4MDU1NjM>

Título: Química cuántica. La química cuántica en 100 problemas Bailey Chapman, Lorna Elizabeth

Edición: 1ª ed

Editorial: Madrid UNED 2014 2014

Descripción física: 1 recurso online

Mención de serie: Unidades didácticas (Universidad Nacional de Educación a Distancia (España))

Nota general: Description based upon print version of record

Contenido: QUÍMICA CUÁNTICA: LA QUÍMICA CUÁNTICA EN 100 PROBLEMAS ; PÁGINA LEGAL; ÍNDICE; PRÓLOGO; 1. INTRODUCCIÓN; 1.1. La radiación electromagnética; 1.2. Ecuación de Rydberg; 1.3. Teoría atómica de Bohr; 1.4. La longitud de onda de De Broglie; 1.5. El Principio de Incertidumbre de Heisenberg; 2. FUNDAMENTOS; 2.1. Funciones de onda; 2.2. Operadores; 2.3. Funciones propias y valores propios; 2.4. Valores medios; 2.5. Ecuación de Schrödinger; 2.6. Principio de Correspondencia de Bohr; 3. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER: SISTEMAS SIMPLES; 3.1. Movimiento lineal y oscilador armónico; 3.1.1. Traslación 3.1.2. Partícula en una caja 3.1.3. Pozo rectangular; 3.1.4. Barreras de potencial y efecto túnel; 3.1.5. Oscilador armónico; 3.2. Movimiento rotacional; 3.2.1. Partícula sobre un anillo; 3.2.2. Partícula sobre una esfera (rotor rígido); 4. MOMENTO ANGULAR: ORBITAL Y DE ESPÍN; 4.1. Momento angular; 4.2. Momento angular orbital; 4.3. Momento angular de espín; 4.4. Armónicos esféricos; 4.5. Operadores escalera; 5. EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO; 5.1. Introducción; 5.1.1. Sistemas de una partícula; 5.1.2. Sistemas de dos partículas; 5.2. Átomo hidrogenoide y orbitales atómicos 6. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER: MÉTODOS DE APROXIMACIÓN 6.1. Método de variaciones; 6.2. Método de perturbaciones: estacionarias y dependientes del tiempo; 7. ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS; 7.1. Antecedentes; 7.1.1. El espín electrónico; 7.1.2. Principio de Exclusión de Pauli; 7.2. Métodos del campo autoconsistente (SCF); 7.3. Orbitales de Slater; 7.4. Orbitales y Tabla Periódica; 7.5. Correlación electrónica; 7.6. Momento angular en átomos polielectrónicos; 7.6.1. Términos atómicos; 7.6.2. Regla de Hund; 7.7. Interacción espín-orbital; 8. MOLÉCULAS; 8.1. El operador Hamiltoniano molecular 8.2. Moléculas diatómicas. Aplicación al ión hidrógeno molecular H_2^+ ; 8.3. Estructura electrónica molecular; 8.3.1. La molécula de hidrógeno; 8.3.2. Orbitales moleculares σ y π ; 8.3.3. Solapamiento entre orbitales s y p ; 8.3.4. Ejemplo de estructura de moléculas diatómicas homonucleares; 8.3.5. Estructura de las moléculas diatómicas heteronucleares; 8.3.6. Hibridación; 8.3.7. Estructura electrónica de las moléculas poliatómicas; 8.3.8. La aproximación de Hückel;

8.4. Resumen de los métodos de cálculo para el estudio de propiedades moleculares; 8.5. Aplicaciones; APÉNDICE A.1. Constantes físicas A.2. Unidades de energía; A.3. Prefijos de unidades SI; A.4. Integrales; A.5. Álgebra de operadores; A.6. Álgebra de matrices; A.7. Divergencia, Rotacional, Gradiente y Laplaciana; A.8. Funciones asociadas de Legendre; A.9. Factores radiales de las funciones de onda hidrogenoides; A.10. Funciones de onda hidrogenoides reales; A.11. Alfabeto griego; A.12. Regiones del espectro electromagnético; A.13. Glosario de abreviaturas y acrónimos de los métodos de cálculo empleados en la Química Cuántica; BIBLIOGRAFÍA; BIBLIOGRAFÍA BÁSICA; BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA BIBLIOGRAFÍA DE AMPLIACIÓN

Lengua: Spanish

ISBN: 9788436266740

Materia: Química cuántica Quantum chemistry

Autores: Troitiño Núñez, María Dolores Troitiño Núñez, M^a Dolores

Enlace a formato físico adicional: 84-362-1350-5

Punto acceso adicional serie-Título: Unidades didácticas (Universidad Nacional de Educación a Distancia (España))

Baratz Innovación Documental

- Gran Vía, 59 28013 Madrid
- (+34) 91 456 03 60
- informa@baratz.es