

QUÍMICA QUÀNTICA I LA SEVA APLICACIÓ A L'ESPECTROSCÒPIA.

Curs 2004-2005

PROGRAMA

1. Introducció a la mecànica quàntica. Introducció històrica.- Operadors, funcions pròpies i valors propis.- Postulats de la mecànica quàntica.- Funció d'ona.- Observables i operadors.- Equació d'Schrödinger dependent del temps. Estats estacionaris.- Relacions d'indeterminació de Heisenberg.
2. Estudi mecano-quàntic de sistemes senzills. Partícula en una caixa monodimensional.- Partícula en una caixa tridimensional. Estats degenerats.
3. L'àtom d'hidrogen. Introducció.- Part radial i part angular.- Moment angular i harmònics esfèrics.- Equació radial i orbitals hidrogenoides.- Representació d'orbitals.- Funció de distribució radial.- Spin electrònic.
4. Àtoms polieletrònics. Equació d'Schrödinger per a àtoms polieletrònics.- Aproximació orbital.- Partícules idèntiques i simetria de la funció d'ona.- Principi d'exclusió de Pauli.- Determinants d'Slater.- Mètode variacional. Teorema d'Eckart.
5. Introducció a l'estructura molecular. Aproximació de Born-Oppenheimer.- Molècula-ió H_2^+ . Resolució de l'equació d'Schrödinger electrònica.- Concepte d'orbital molecular.- Mètode variacional lineal.- Aproximació OM-CLOA.- Densitat de càrrega i enllaç químic.
6. Mètode SCF de Hartree-Fock. Energia d'una funció monoconfiguracional.- Equacions de Hartree-Fock.- Aproximació CLOA. Equacions de Roothaan.- Teorema de Koopmans.- Mètodes ab initio.- Funcions de base.
7. Modificacions del mètode de Hartree-Fock. Mètodes semiempírics.- El problema de la correlació electrònica.- Interacció de configuracions.- Mètodes perturbacionals.- Aplicació a la molècula d'hidrogen.
8. El mètode de Hückel. Sistemes conjugats.- Separació s-p.- Mètode de Hückel.- Energia de ressonància i aromaticitat.- Índexs estàtics de reactivitat i orbitals frontera.
9. Teoria del funcional de la densitat. Introducció.- Funcionals locals.- Correccions de gradient.- Funcionals híbrids.
10. Superfícies d'energia potencial. Anàlisi de la hipersuperfície d'energia potencial. Punts estacionaris.- Optimització de geometries.- Estats de transició. Vector de transició.- Camí de reacció.
11. Algunes aplicacions pràctiques. Determinació d'estructures.- Aplicacions a l'espectroscòpia.- Mecanismes de reacció.

BIBLIOGRAFIA

BERTRAN, J.; BRANCHADELL, V.; MORENO, M.; SODUPE, M. Química Cuántica. Fundamentos y Aplicaciones Computacionales, Síntesis, 2000.

JENSEN, F. Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999.

LEVINE, I.N. Quantum Chemistry, 5th ed., Prentice-Hall, 2000. (Traducció espanyola, Prentice-Hall, 2001).

PANIAGUA, J. C.; ALEMANY, P. Química Quàntica, Llibres de l'Índex, 1999 (1^a part) i 2000 (2^a part).