PROGRAMA DE QUIMICA CUANTICA. Curso 1984-85 (5ª)

Lección 1.- Introducción. Postulados de la mecánica cuántica. Orbitales hidrogenoides. Orbitales tipo Slater (STO) y funciones de tipo Gaussiano (GTF). Representación matricial. Ecuación de valores propios.

Lección 2.- Métodos aproximados. Principio variacional, teorema de Eckart. Funciones variacionales lineales. Teoría de perturbación independiente del tiempo para estados no degenerados. Teoría de perturbación para niveles de energía degenerados. Aplicaciones al átomo de Helio.

Lección 3.- La molécula de hidrógeno. Método de orbitales moleculares. Método de enlaces de valencia. Mesomería. Comparación de resultados obtenidos por las teorías de E.V. y O.M. Cálculos más exactos.

Lección 4.- Mecánica Cuántica molecular. Principio de antisimetría. Spin orbitales. Producto de Hartree. Determinantes de Slater. Correlación de intercambio. Aproximación Hartree-Fock. CI y energía de correlación. Capa cerrada, RHF. Funciones adaptadas al spin. UHF.

Lección 5.- Teoría OM-SCF. Normalización de la función de onda de una configuración electrónica a capa cerrada. Expresión de la energía. Ecuación de Hartree-Fock para los orbitales moleculares. Localización de orbitales. Teorema de Brillouin y CI. Ecuación de Roothaan, desarrollo LCAO de los orbitales moleculares. Matriz densidad. Matriz de Fock. Análisis de población de Mulliken.

Lección 6.- Métodos de cálculo. Cálculos ab initio, Bases utilizadas. Aproximaciones semiempíricas: Hückel, extended Hückel, método PPP (Pariser-Parr-Pople), métodos CNDO, INDO, NDDO y MINDO.

Lección 7.- Sperficies de potencial. Separación Born Oppenheimer y existencia de superficies. Análisis de las superficies. Camino de reacción y puntos estacionarios.Localización del estado de transición a partir de superficies reducidas. Localización directa del estado de transición.

Lección 8.- Aplicación de la teoría de perturbación al estudio de la reactividad química. Indices estáticos. Justificación de los índices estáticos. Orbitales frontera. Aplicación de la teoría de perturbación a la primera etapa de la reacción. Potenciales electrostáticos.

Lección 9.- Estudio cualitativo de la barrera de potencial. Indices dinámicos: modelo localizado del estado de transición de Wheland, modelo deslocalizado de Evans. Simetría y orbitales. Reglas de Woodward y Hoffmann. Otras aplicaciones de los conceptos de simetría a la reactividad química: Salem, Pearson.

Professor: JOAN BERTRAN i RUSCA

curs : 1985-86

Vist i plau,

Signat: Joan Bertran

Cap de Departament

Data: 28-1-86