

QUÍMICA QUÀNTICA I LA SEVA APLICACIÓ A L'ESPECTROSCÒPIA

1. Introducció a la mecànica quàntica

Introducció.- Equació de Schrödinger.- Operadors i funcions.- Postulats de la mecànica quàntica.- Estats estacionaris.- Resolució de sistemes senzills: partícula en una caixa i oscil·lador harmònic.

2. Estructura atòmica

Resolució de l'equació de Schrödinger per a l'àtom d'hidrogen.- El moment angular.- Orbitals hidrogenoides.

3. Spin electrònic

Introducció.- Operadors de spin.- Orbitals i spin-orbitals.- Sistemes polieletrònics. Principi d'antisimetria.- Determinants de Slater.- Funcions pròpies de S^2 .- Aplicació a àtoms bielectrònics.

4. Mètodes aproximats de resolució de l'equació de Schrödinger

El mètode variacional.- Funcions variacionals lineals.- Mètode pertorbacional.- Aplicacions.

5. Introducció a l'estructura molecular

Aproximació de Born-Oppenheimer.- Molècula H_2^+ . Orbitals moleculars.- Aproximació CLOA.- La molècula d'hidrogen.- Mètode d'orbitals moleculars.- Mètode de l'enllaç de valència.- Comparació.

6. Mètode del camp autoconsistent de Hartree-Fock

Sistemes a capa tancada.- Optimització de la funció d'ona.- Equacions de Roothaan.- Energies dels orbitals. Teorema de Koopmans.- Anàlisi de la funció d'ona.- Sistemes a capa oberta.

7. Mètodes Ab Initio i mètodes semiempírics

Mètodes ab initio.- Conjunts de funcions de base.- Mètodes semiempírics.- Aproximació de Hückel.- Mètode de Hückel estès.- Mètodes semiempírics SCF. Aproximació ZDO.

8. Més enllà de l'aproximació de Hartree-Fock

El problema de la correlació electrònica.- Interacció de configuracions.- Tractament pertorbacional.- Mètode de l'enllaç de valència.

9. Aplicacions de la Química Quàntica

Estructura electrònica de molècules poliatòmiques.- Estats excitats. Aplicació a l'espectroscòpia.- Intermedis poc estables.- Reactivitat química.

BIBLIOGRAFIA

- R.S. Berry, S.A. Rice i J. Ross, "Physical Chemistry" Part I. J.Wiley, 1980.
- I.N. Levine, "Química Cuántica", Ed. AC, 1977.
- F.L. Pilar, "Elementary Quantum Chemistry", 2nd Ed., Mc Graw-Hill, 1990.
- J.L. Rivail, "Elements de Chimie Quantique à l'usage des chimistes", Inter-Edictions/Editions du CNRS, 1989.