

QUÍMICA QUÀNTICA I LA SEVA APLICACIÓ A L'ESPECTROSCÒPIA

CURS 1995-96

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, oscil·lador harmònic i rotor rígid.

2. Estructura atòmica. Àtom d'hidrogen

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

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

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

4. 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.

5. Introducció a l'estructura molecular

Introducció.- Aproximació de Born-Oppenheimer.- Molècula H_2^+ . Orbitals moleculars.- Aproximació CLOA.

6. Mètode del camp autoconsistent de Hartree-Fock

Introducció.- Mètode SCF de Hartree-Fock.- Aproximació CLOA. Equacions de Roothaan.- Energies dels orbitals. Teorema de Koopmans.

7. La molècula d'hidrogen

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

8. 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.

9. Molècules poliatòmiques

Estructura electrònica de molècules poliatòmiques.- Estats excitats. Aplicació a l'espectroscòpia.- Superfícies d'energia potencial.

BIBLIOGRAFIA

- P.W. Atkins, "Fisicoquímica", 3ª Ed. Addison-Wesley, 1991.
- R.S. Berry, S.A. Rice i J. Ross, "Physical Chemistry" Part I. J.Wiley, 1980.
- M.W. Hanna, "Mecánica Cuántica para Químicos", Fondo Educativo Interamericano, 1985.
- I.N. Levine, "Química Cuántica", Ed. AC, 1977.
- J.P. Lowe, "Quantum Chemistry", 2nd. Ed., Academic Press, 1993.
- J.N. Murrell, S.F.A. Kettle, J.M. Tedder, "The Chemical Bond", 2nd. Ed., Wiley, 1987.
- F.L. Pilar, "Elementary Quantum Chemistry", 2ª Ed., Mc Graw-Hill, 1990.
- J.L. Rivail, "Elements de Chimie Quantique à l'usage des chimistes", Inter-Edictions/Editions du CNRS, 1994.