

Llicenciatura de Química

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 Schrodinger**
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

- BERRY, R.S.; RICE, S.A.; ROSS, J. *Physical chemistry. Part 1*. J. Wiley, 1980.
 LEVINE, I.N. *Química cuántica*. AC, 1977.
 PILAR, F.L. *Elementary quantum chemistry*, 2a ed. McGraw-Hill, 1990.
 RIVAIL, J.L. *Elements de chimie quantique à l'usage des chimistes*. Inter-Edictions - Editions du CNRS, 1989.