

Química quàntica i la seva aplicació a l'espectroscòpia

Codi 20556

1er semestre

Professor: V. Branchadell, J. Bertrán

Requisits: Estructura atòmica i enllaç (aprovada)

- 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.
- Estructura atòmica.
Resolució de l'equació de Schrödinger per l'àtom d'hidrogen. El moment angular. Orbitals hidrogenoides.
- 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.
- Mètodes aproximats de resolució de l'equació de Schrödinger.
El mètode variacional. Funcions variacionals lineals. Mètode pertorbacional. Aplicacions.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- Aplicacions de la química quàntica.
Estructura electrònica de molècules poliatòmiques. Estats excitats. Aplicació a l'espectroscòpia. Intermedis poc estables. Reactivitat química.