

QUÍMICA QUÀNTICA I LA SEVA APLICACIÓ A LA ESPECTROSCOPIA. Curs 2001-2002

Professors

Grup 1: Vicenç Branchadell (C7-133)

Grup 2: Feliu Maseras (C7-110)

PROGRAMA

1. Introducció a la mecànica quàntica. Introducció històrica.- Àlgebra d'operadors.- Funcions pròpies i valors propis.- Postulats de la mecànica quàntica.- Postulat de quantificació. Significat físic de la funció d'ona.- Equació d'Schrödinger dependent del temps. Estats estacionaris.- Postulat de descomposició espectral.- Relacions d'indeterminació de Heisenberg.

2. Estudi mecano-quàntic de sistemes senzills.

Partícula en una caixa monodimensional.- Partícula en una caixa tridimensional. Estats degenerats.

3. Moment angular. Introducció.- Operadors de moment angular.- Relacions de commutació.- Valors propis i funcions pròpies dels operadors $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$. Harmònics esfèrics.

4. L'àtom d'hidrogen. Forces centrals.- Funcions d'ona de l'àtom d'hidrogen. Orbitals hidrogenoides.- Representació d'orbitals.- Funcions de distribució radial.- Spin electrònic.- Spin-orbitals i orbitals espacials.

5. Àtoms polieletrònics. Equació d'Schrödinger per a àtoms polieletrònics.- Mètode variacional. Teorema d'Eckart.- Model d'electrons independents. aproximació orbital.- Partícules idèntiques i simetria de la funció d'ona.- Principi d'exclusió de Pauli.- Determinants d'Slater.

6. Introducció a l'estructura molecular. Aproximació de Born-Oppenheimer.- Molècula-ió H_2^+ . Resolució de l'equació d'Schrödinger electrònica.- Concepte d'orbital molecular.- Aproximació OM-CLOA.- Densitat de càrrega i enllaç químic.

7. Teoria d'orbitals moleculars. Mètodes d'electrons independents. Sistemes conjugats.- Separació σ - π . Mètode de Hückel.- Energia de ressonància i aromaticitat.- Índexs estàtics de reactivitat i orbitals frontera.

8. La molècula d'hidrogen. Mètode d'orbitals moleculars.- Mètode de l'enllaç de valència.- Comparació d'ambdós mètodes i millora de resultats.

9. Teoria d'orbitals moleculars. Mètode SCF de Hartree-Fock. Sistemes a capa tancada.- Energia d'una funció monoconfiguracional.- Equacions de Hartree-Fock.- Aproximació CLOA. Equacions de Roothaan.- Teorema de Koopmans.

10. Teoria d'orbitals moleculars. Aplicacions pràctiques. Mètodes ab initio i mètodes semiempírics.- Funcions de base.- Anàlisi de la funció d'ona.- Teoria del funcional de la densitat.- Càlcul de propietats moleculars.

11. Superfícies d'energia potencial. Anàlisi de la hipersuperfície d'energia potencial. Punts estacionaris.- Optimització de geometries.- Estats de transició. Vector de transició.- Camí de reacció.

BIBLIOGRAFIA

BERTRAN, J., BRANCHADELL, V., MORENO, M., SODUPE, M. *Química Cuántica. Fundamentos y Aplicaciones Computacionales*, Síntesis, 2000.

LEVINE, I.N. *Quantum Chemistry*, 5th ed., Prentice-Hall, 2000. (Traducció espanyola, Prentice-Hall, 2001).

LOWE, J.P. *Quantum Chemistry*, 2nd ed., Academic Press, 1993.

PILAR, F. L. *Elementary Quantum Chemistry*, 2nd ed., McGraw-Hill, 1990.

RIVAIL, J.L. *Éléments de Chimie Quantique à l'Usage des Chimistes*, 2^{ème} ed., Inter-Éditions, 1994.