

QUÍMICA CUÁNTICA Y SU APLICACIÓN A LA ESPECTROSCOPIA.

PROGRAMA

1. Introducción a la mecánica cuántica. Introducción histórica.- Operadores, funciones propias y valores propios.- Postulados de la mecánica cuántica.- Función de onda.- Observables y operadores.- Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Estados estacionarios.- Relaciones de indeterminación de Heisenberg.
2. Estudio mecano-cuántico de sistemas sencillos. Partícula en una caja monodimensional.- Partícula en una caja tridimensional. Estados degenerados.
3. El átomo de hidrógeno. Introducción.- Parte radial y parte angular.- Momento angular y armónicos esféricos.- Ecuación radial y orbitales hidrogenoides.- Representación de orbitales.- Función de distribución radial.- Spin electrónico.
4. Átomos polielectrónicos. Ecuación de Schrödinger para átomos polielectrónicos.- Aproximación orbital.- Partículas idénticas y simetría de la función de onda.- Principio de exclusión de Pauli.- Determinantes de Slater.- Método variacional. Teorema de Eckart.
5. Introducción a la estructura molecular. Aproximación de Born-Oppenheimer.- Molécula-ión H_2^+ . Resolución de la ecuación de Schrödinger electrónica.- Concepto de orbital molecular.- Método variacional lineal.- Aproximación OLMO-CLOA.- Densidad de carga y enlace químico.
6. Método SCF de Hartree-Fock. Energía de una función monoconfiguracional.- Ecuaciones de Hartree-Fock.- Aproximación CLOA. Ecuaciones de Roothaan.- Teorema de Koopmans.- Métodos ab initio.- Funciones de base.
7. Modificaciones del método de Hartree-Fock. Métodos semiempíricos.- El problema de la correlación electrónica.- Interacción de configuraciones.- Métodos perturbacionales.- Aplicación a la molécula de hidrógeno.
8. El método de Hückel. Sistemas conjugados.- Separación s-p.- Método de Hückel.- Energía de resonancia y aromaticidad.- Índices estáticos de reactividad y orbitales frontera.
9. Teoría del funcional de la densidad. Introducción.- Funcionales locales.- Correcciones de gradiente.- Funcionales híbridos.
10. Superficies de energía potencial. Análisis de la hipersuperficie de energía potencial. Puntos estacionarios.- Optimización de geometrías.- Estados de transición. Vector de transición.- Camino de reacción.
11. Algunas aplicaciones prácticas. Determinación de estructuras.- Aplicaciones a la espectroscopia.- Mecanismos de reacción.

BIBLIOGRAFÍA

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

JENSEN, F. Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999.

LEVINE, I.N. Quantum Chemistry, 5th ed., Prentice-Hall, 2000. (Traducción española, Prentice-Hall, 2001).

PANIAGUA, J. C.; ALEMANY, P. Química Quàntica, Llibres de l'Índex, 1999 (1^a parte) y 2000 (2^a parte).