

Llicenciatura de Física

Curs 2006-07

Codi assignatura : 25482

ENLLAÇ I ESTRUCTURES QUÍMIQUES

Conceptes fonamentals de Mecànica Quàntica

1. Introducció històrica a la Mecànica Quàntica

Teoria atòmica. Evidències experimentals de la quantització de la energia. Dualitats partícula-ona, ona-partícula. Funció d'ona.

2. Postulats i fonaments matemàtics

Interpretació de Born de la funció d'ona. Operadors y funcions. Postulat de descomposició espectral. Equació de Schrödinger. Principi d'incertesa de Heisenberg. Aplicació a sistemes senzills.

Estructura atòmica

3. Àtom d'hidrogen

Àtom d'hidrogen i ions hidrogenoides. Ecuació de Schrödinger electrònica : component radial y component angular. Orbitals hidrogenoides. Spin electrònic.

4. Àtoms polieletrònics

Equació de Schrödinger per a àtoms polieletrònics. Model d'electrons independent : aproximació orbital. Producte de Hartree. Partícules idèntiques i simetria de la funció d'ona. Principi d'exclusió de Pauli. Determinants de Slater. Configuració electrònica. Mètode del camp autocoherent de Hartree-Fock.

5. La taula periòdica

Introducció històrica. Ordenació dels elements i classificació. Propietats periòdiques dels àtoms. Potencial d'ionització. Afinitat electrònica.

Estructura electrònica molecular

6. Introducció a l'estructura electrònica de les molècules : la molècula H_2^+ .

Equació de Schrödinger molecular. Aproximació de Born-Oppenheimer. Equació de Schrödinger electrònica. Concepte de superfície de potencial. Equació de Schrödinger nuclear. Resolució de l'equació electrònica per a la molècula de H_2^+ . Orbitals moleculars. Orbitals moleculars obtinguts com a combinació lineal lineal d'orbitals atòmics (CLOA). Corba d'energia potencial. Densitat de càrrega i enllaç químic. Tipus d'enllaç.

7. Enllaç covalent. Estudis qualitatiu

Molècula d'hidrogen. Mètode d'orbitals moleculars. Mètode d'enllaç de valència. Molècules diatòmiques homonuclears y heteronuclears. Molècules poliatòmiques. Estructures de Lewis. Teoria de la repulsió dels parells d'electrons de la capa de valència (VSEPR).

8. Generalització del mètode d'orbitals moleculars a molècules polieletròniques. Mètodes de càlcul quantitatiu.

Energia d'una funció d'ona descrita per un determinant de Slater. Minimització de l'energia. Equacions de Hartree-Fock. Energia dels orbitals i teorema de Koopmans. Sistemes a capa tancada. Aproximació CLOA : equacions de Roothaan-Hall. Correlació electrònica i mètodes més avançats. Mètodes *ab initio*. Funcions de base. Mètodes semiempírics. Correlació electrònica i mètodes més avançats.

Bibliografia :

- J. Casabó *Estructura atòmica y enlace*, Ed. Reverté, 1996.
- O. Mó Romero y M. Yáñez *Enlace químico y estructura molecular* 2^a ed. Cálamo, MANUBAS (Manuales Básicos), 2002.
- J.M. Costa, J.M. Lluch, J.J. Pérez *QUÍMICA. Estructura de la Materia*, Biblioteca Universitària. Enciclopèda Catalana. 1993.
- P. W. Atkins, J. de Paula, *Atkins' Physical Chemistry*, 7th Edition, Oxford University Press, 2002. (Edició traduïda : *Química Física* 6^a Ed, Omega, 1999)
- I.N. Levine, *Quantum Chemistry*, 5a ed. Prentice-Hall, New Jersey, 2000.
- J. Bertrán, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe, *Química Cuántica*, 2a ed. Síntesis, Madrid, 2002.
- P.W. Atkins, R.S. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, 3a ed. Oxford University Press, Oxford, 2000.
- F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*. Wiley, 1999.

Professor de Teoria : Mireia Garcia, Institut de Biotecnologia i de Biomedicina, IBF/-116, E-Mail : mireia.garcia@uab.es

Professor de Problemes : Xavier Bagán, Departament de Química, C7-151, E-Mail : xavierb@klingon.uab.es