

QUÍMICA QUÀNTICA I LA SEVA APLICACIÓ A L'ESPECTROSCÒPIA. Curs 2007-2008.

Professors

Grup 1: Ricard Gelabert (C7- 141)

Grup 2: Josep Maria Lluch (C7-139)

PROGRAMA

- 1. Introducció a la mecànica quàntica.** Introducció històrica.- Operadors, funcions pròpies i valors propis.- Postulats de la mecànica quàntica.- Funció d'ona.- Observables i operadors.- Equació d'Schrödinger dependent del temps. Estats estacionaris.- 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. L'àtom d'hidrogen.** Introducció.- Part radial i part angular.- Moment angular i harmònics esfèrics.- Equació radial i orbitals hidrogenoides.- Representació d'orbitals.- Funció de distribució radial.- Spin electrònic.
- 4. Àtoms polieletrònics.** Equació d'Schrödinger per a àtoms polieletrònics.- Aproximació orbital.- Partícules idèntiques i simetria de la funció d'ona.- Principi d'exclusió de Pauli.- Determinants d'Slater.- Mètode variacional. Teorema d'Eckart.
- 5. Introducció a l'estructura molecular.** Aproximació de Born-Oppenheimer.- Molècula-ió H_2^+ . Resolució de l'equació d'Schrödinger electrònica.- Concepte d'orbital molecular.- Mètode variacional lineal.- Aproximació OM-CLOA.- Densitat de càrrega i enllaç químic.
- 6. Mètode SCF de Hartree-Fock.** Energia d'una funció monoconfiguracional.- Equacions de Hartree-Fock.- Aproximació CLOA. Equacions de Roothaan.- Teorema de Koopmans.- Mètodes ab initio.- Funcions de base.
- 7. Modificacions del mètode de Hartree-Fock.** Mètodes semiempírics.- El problema de la correlació electrònica.- Interacció de configuracions.- Mètodes perturbacionals.- Aplicació a la molècula d'hidrogen.
- 8. El mètode de Hückel.** Sistemes conjugats.- Separació σ - π .- Mètode de Hückel.- Energia de ressonància i aromaticitat.- Índexs estàtics de reactivitat i orbitals frontera.
- 9. Teoria del funcional de la densitat.** Introducció.- Funcionals locals.- Correccions de gradient.- Funcionals híbrids.
- 10. 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.
- 11. Algunes aplicacions pràctiques.** Determinació d'estructures.- Aplicacions a l'espectroscòpia.- Mecanismes de reacció.

BIBLIOGRAFIA

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. (Traducció espanyola, Prentice-Hall, 2001).

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