

## **Programa analitică**

Disciplina: Chimie cuantică  
Anul de studiu: II  
Semestrul I: 2 ore curs, 1,5 ore seminar / săptăm.  
Cod:  
Anul universitar: 2008/2009

### 1. Obiectivele cursului

Prezentarea principiilor generale ale mecanicii și chimiei cuantice. Aplicarea metodelor cuantice la studiul unor sisteme simple, de interes pentru chimie, urmărindu-se, în principal, dezvoltarea modelului hidrogenoid al structurii atomice și fundamentarea conceptului de orbitală atomică.

### 2. Conținutul de bază

#### Cap. 1. Noțiuni introductive de mecanică cuantică. Ecuația lui Schrödinger.

- 1.1. Introducere. Natura cuantică a materiei. Obiectul Chimiei cuantice.
- 1.2. Dualismul undă – corpuscul. Ipoteza de Broglie.
- 1.3. Principiul de incertitudine al lui Heisenberg.
- 1.4. Ecuația lui Schrödinger.
- 1.5. Proprietăți generale ale ecuației lui Schrödinger.
- 1.6. Sensul fizic al funcției de undă.

#### Cap. 2. Aplicații ale mecanicii cuantice.

- 2.1. Mișcarea unei particule într-o cutie de potențial.
- 2.2. Oscilatorul armonic liniar.
- 2.3. Bariera de potențial. Efectul tunel.
- 2.4. Mișcarea unei particule sub acțiunea unei forțe centrale.
- 2.5. Rotatorul rigid format din două particule.
- 2.6. Atomul de hidrogen (hidrogenoidul).
- 2.7. Funcțiile de undă (orbitalele atomice) pentru atomul de hidrogen.
- 2.8. Semnificația fizică a orbitalelor atomice hidrogenoide. Aplicații

#### Cap.3. Formularea generală a mecanicii cuantice

- 3.1. Noțiunea de spațiu liniar.
- 3.2. Stări și observabile.
- 3.3. Transformări și operatori.
- 3.4. Proprietăți generale ale operatorilor

- 3.5. Valori proprii și vectorii proprii ale operatorilor
- 3.6. Postulatele mecanicii cuantice în formularea lui Dirac.
- 3.8. Teoria reprezentării stărilor și operatorilor.
- 3.9. Reprezentarea de coordonată. Ecuația lui Schrödinger.

#### Cap. 4. Spinul electronic în mecanica cuantică. Teoria lui Dirac.

- 4.1. Necesitatea spinului electronic.
- 4.2. Teoria lui Pauli a spinului electronic. Operatorii de spin.
- 4.3. Principiul lui Pauli.
- 4.4. Aplicație a principiului lui Pauli. Funcția de undă pentru starea fundamentală a atomului de heliu.

#### Cap. 5. Metode aproximative ale mecanicii cuantice aplicabile în chimia cuantică

- 5.1. Metoda variațională.
- 5.2. Metoda perturbațiilor independente de timp.
- 5.3. Perturbații dependente de timp.
- 5.4. Reguli de selecție pentru atomul de hidrogen.
- 5.5. Spectrul hidrogenoidului.

3. Sistemul de evaluare a studentului: evaluare pe parcurs și examen final

4. Bibliografie minimală pentru curs

- 1. C. Ghirvu, „Mecanică cuantică”, I. P. Iași, 1983
- 2. R. Daudel, G. Leroy, D. Peeters, M. Sana, „Chimie cuantică”, Ed. Academiei Române, București, 1988
- 3. A. Szabo, N. Ostlund, “Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory”, Dover Publications, 1996
- 4. L. Pauling, E. Bright Wilson, „Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry”, Dover Publications, 1985
- 5. I.G. Murgulescu, „Introducere în Chimia fizică - Atomi, molecule, legătura chimică”, vol. I, 1, Ed. Academiei Române, București, 1976
- 6. C. Ghirvu, „Structură chimică”, Universitatea “Al. I. Cuza” Iași, 1973
- 7. A. Messiah, „Mecanică cuantică”, Ed. Științifică, București, 1974
- 8. I.N. Levine, „Quantum Chemistry”, Allyn and Bacon, New York, 1974

9. Tematică seminar

- 1. Sisteme de coordonate în chimia cuantică.
- 2. Studiul comportării unei particule într-o cutie de potențial.
- 3. Studiul oscilatorului armonic liniar.
- 4. Trecerea unei particule printr-o barieră de potențial dreptunghiulară.
- 5. Operatorii momentului cinetic în coordonate polare sferice
- 6. Studiul relațiilor de comutare ale operatorilor momentului cinetic.
- 7. Valorile proprii și funcțiile proprii ale operatorului proiecției momentului cinetic pe axa z,  $\hat{L}_z$ .

8. Valorile proprii și funcțiile proprii ale operatorului momentului cinetic,  $\hat{L}^2$ .
9. Studiul părții radiale a funcției de undă pentru hidrogenoid.
10. Reprezentarea grafică și interpretarea fizică a orbitalelor atomice pentru hidrogenoid.
11. Studiul reprezentării spinului electronic prin matricea Pauli.

#### 6. Bibliografie seminar

1. Diverse surse de programare proprii și comerciale de Chimie cuantică.
2. I. Humelnicu, Iuliana Voicu, C. Ghirvu, M. Constantinescu, “*Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea I – atomistică*”, Editura Universității <Al.I. Cuza> Iași, 2002, reeditată în 2004;
3. C. Ghirvu, I. Humelnicu, “*Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea II – Structură moleculară*”, Editura Universității <Al.I. Cuza> Iași, 2005.

Titular disciplină,

Prof. dr. Constantin GHIRVU