

Alguns perquè? referents a la forma en que ensenyarem la química quàntica.

Introduïm la mecànica quàntica des de la mecànica ondulatoria perquè la mecànica quàntica qüestiona la dicotomia del concepte d'ona i de partícula. Volem remarcar com les partícules son també descrites ondulatoriament (equació de Schrödinger) i les ones (e.g. radiació electromagnètica, vibracions a una xarxa cristal·lina, etc.) ho són com partícules (fotons, fonons, etc).

Fem un èmfasi especial en els models resolubles, perquè, contràriament al que pugués pensar el neòfit, la descripció de l'estructura de la matèria no es realitza a través de la resolució d'una equació de Schrödinger complicadíssima de M cossos, si no que s'analitza en termes de rotors, oscil·ladors, sistemes hidrogenoides, etc.

Utilitzem les com a eines bàsiques els creadors/anihiladors per múltiples raons. Una primera podria ser la simplicitat que aquesta eina permetrà resoldre les regles de selecció vibracions, rotacionals, de MNR, de SER, etc. quant s'estudia espectroscòpia. Hi ha però, també raons didàctiques, com ara que l'estudi de rotacions via creadors/anihiladors condueix, de manera natural, a fer lloc als moments angulars fraccionaris (en particular introduir l'espín).

Presentem els mètodes aproximats de la mecànica quàntica com una manera sòlida d'anar més enllà del sistema de partícules independents i dels problemes model. No entrem però en descriure els múltiples mètodes de la química quàntica per considerar no essencial el seu coneixement per a entendre la química.

Presentem el tema dels estats estacionaris del àtoms polieletrònics a través d'un procés d'estudi de les simetries aproximades del seu hamiltonià: aquell operador que commuta amb l'hamiltonià representa una magnitud conservada, un número quàntic que co-defineix l'estat estacionari. Una espectroscòpia fina trobarà desdoblaments que deriven de la inclusió de termes petits de l'hamiltonià que trenquen la seva simetria. Creiem que és la millor manera de fer entendre el concepte de número quàntic o simetria aproximada, concepte essencial per a entendre la química quàntica.

Presentem un tema introductori de molècules perquè aquest és un tema molt variat i extens, però l'objectiu ara i ací és ajudar a entendre el que s'estudiarà més endavant en altra assignatures, en particular dos conceptes clau: orbital molecular i superfícies d'energia potencial. També fem una pinzellada a la correlació electrònica (els electrons no tenen moviment independent sinó que és repelen) que permet interpretar les coses quan la visió simplificada d'orbitals moleculars pot no ser suficient.