

Plan 293 Lic. en Química

Asignatura 44222 SIMETRÍA Y ESTRUCTURA MOLECULAR

Grupo 1

Presentación

Teoría de Grupos. Estructura Electrónica de las moléculas poliatómicas. Reactividad química.

Programa Básico

Objetivos

Introducción a la simetría y su importancia en todas las áreas de la química. Teoría de grupos. Aplicación de estos conocimientos para la obtención de funciones electrónicas moleculares y para el estudio de las reacciones químicas.

Programa de Teoría

Tema 1.- OPERACIONES DE SIMETRÍA Y GRUPOS PUNTUALES.

Importancia de la Simetría en la Química.- Elementos y Operaciones de Simetría: Definiciones.- Algebra de Operadores.- Operaciones de Simetría: Algebra.- Momentos Dipolares y Actividad Óptica.- Estructura de Grupo: Grupos Puntuales.- Homomorfismo e Isomorfismo.- Subgrupos.- Determinación del Grupo Puntual de la Molécula.- Notación de Grupos.

Tema 2.- REPRESENTACION MATRICIAL DE GRUPOS.

Algebra de matrices.- Representación matricial de operaciones derivada del vector de posición, vectores base y funciones base.- Representaciones equivalentes, reducibles e irreducibles: Reducción de una representación.- Teorema de la Gran Ortogonalidad: Corolarios.- Tabla de Caracteres: Notación de Mulliken.

Tema 3.- TEORÍA DE GRUPOS Y QUÍMICA CUÁNTICA

Hamiltoniano molecular: Aproximación de Born-Oppenheimer.- Representación matricial del Hamiltoniano.- Propiedades de simetría del Hamiltoniano: Funciones propias como base para las representaciones irreducibles.- Producto directo.- Integrales mecanocuánticas y reglas de selección.- Operador de Proyección: Funciones adaptadas a la simetría.

Tema 4.- ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE MOLECULAS POLIATÓMICAS.

Aproximación LCAO-MO: Aspectos de simetría.- Tratamiento de las moléculas del agua, amoníaco y metano.- Estudio de las moléculas del etano, etileno, diborano y acetileno.- Otros ejemplos.

Tema 5.- HIBRIDACIÓN

Geometría molecular e hibridación.- Orbitales híbridos en enlaces de tipo "sigma".- Esquemas de hibridación.- Orbitales híbridos en sistemas "pi".

Tema 6.- SISTEMAS CON DESLOCALIZACIÓN ELECTRÓNICA

Introducción.- Separabilidad "sigma"- π "; Teoría de orbitales moleculares: Aproximación de Hückel (HMO).- Estudio de las moléculas de etileno, aleno y butadieno: Consideraciones de simetría.- Benceno.- Diagramas moleculares.

Tema 7.- COMPUESTOS DE COORDINACIÓN

Introducción.- Teoría del campo cristalino: Los ligandos como una perturbación electrostática.- Aproximaciones del campo fuerte y campo débil.- Orbitales moleculares: Teoría del campo de ligandos.

Tema 8.- TEORÍA CUALITATIVA DE ORBITALES MOLECULARES

Introducción.- Reglas básicas de la teoría cualitativa de Orbitales Moleculares: (QMOT): Aplicación a moléculas diatómicas homonucleares.- Diagramas de Walsh.- Orbitales frontera: HOMO y LUMO.

Tema 9.- SIMETRÍA Y REACTIVIDAD QUÍMICA

Introducción.- Superficie de energía potencial: Reglas de simetría para la coordenada de reacción.- Método de orbitales frontera.- Conservación de la simetría orbital: Reglas de Woodward-Hoffmann.- Ejemplos de aplicación.

Programa Práctico

No presenta créditos prácticos

Evaluación

Examen escrito de cuestiones y problemas.

Bibliografía

COTTON F.A., "Chemical Applications Of Group Theory ", Wiley-Interscience (1971). Existe versión en castellano, Limusa, México (1983).

- * BISHOP D.M, "Group Theory And Chemistry", Dover (1993).
 - * HARGITTAI, I and HARGITTAI, M.; "Symmetry through the Eyes of a Chemist". Plenum Press (1995).
 - * KETTLE S.F.A., "Symmetry And Structure", John Wiley & Sons (1985).
 - * JAFFÉ, H.H. y ORCHIN, M.; "Simetría en Química", Alhambra (1967).
 - * LOWE, J.P., "Quantum Chemistry", Academic Press (1993)
 - * ATKINS, P.W. and Friedman, R.S. "Molecular Quantum Mechanics", Oxford University Press (1997)
-