



Cinvestav

QUÍMICA II

(60 horas = 6 créditos)

Contenido

1. Teoría de grupos (15 hrs)

Conocimientos previos necesarios: funciones trigonométricas, matrices, transformadas de similitud, cálculo diferencial e integral, ecuaciones diferenciales.

1.1. Elementos y operaciones de simetría

- a. Identidad
- b. Centro de inversión
- c. Eje propio de rotación
- d. Plano de reflexión
- e. Eje impropio de rotación

1.2. Grupos matemáticos

- a. Propiedades de un grupo matemático
- b. Clases de operaciones (elementos conjugados)

1.3. Grupos de Simetría Molecular

- a. Un elemento de simetría
- b. E+1 elemento
- c. E+2 elementos (uno de ellos C_n con $n>2$)
- d. E+1 C_n con $n>2$ + 2 elementos (uno de ellos $\perp C_2$)
- e. E+1 C_n con $n=\infty$
- f. E+>1 C_n con $n>2$

1.4. Representación matricial de operaciones de simetría

- a. Definición de funciones base
- b. Representaciones reducibles e irreducibles

1.5. Tablas de caracteres

- a. Teorema sobre las representaciones irreducibles y sus caracteres (Teorema de Ortogonalidad)
- b. Símbolos de Mulliken

2. Teoría de Orbitales Moleculares (20 hrs)

Conocimientos previos necesarios: orbitales atómicos, estructura atómica, curvas de energía potencial, configuraciones electrónicas, electronegatividad, conceptos básicos de mecánica cuántica, teoría de grupos.



Cinvestav

- 2.1. Aproximación de combinaciones lineales de orbitales atómicos
 - a. Molécula diatómica con un electrón
 - b. Introducción a los conceptos de integral de traslape, integral de Coulomb e integral de intercambio.
 - c. Moléculas diatómicas homonucleares (H_2 , N_2 , O_2)
 - d. Molécula diatómica heteronuclear (ScO)
 - e. Moléculas poliatómicas (CO_2 , HCN, etileno)
 - f. Interacción configuracional
 - g. Configuraciones electrónicas
- 2.2. Combinaciones lineales adaptadas por simetría (SALC's)
 - a. Operadores de proyección
 - b. Construcción de SALC's usando operadores de proyección
- 2.3. Teoría de Orbitales moleculares aplicada a compuestos orgánicos
 - a. Método de Hückel
 - b. Energía de deslocalización o resonancia
 - c. Reglas de Woodward-Hoffmann
 - d. Ejemplos
- 2.4. Teoría de orbitales moleculares aplicada a compuestos inorgánicos
 - a. Propiedades de transformación de orbitales atómicos
 - b. Combinaciones lineales de orbitales atómicos
 - c. Ejemplos

3. Introducción a la Espectroscopía Electrónica (10 hrs)

- a. Niveles de energía molecular
- b. Configuraciones electrónicas y estados electrónicos
- c. Términos espectroscópicos (símbolos de términos moleculares)
- d. Probabilidad e intensidad de transiciones electrónicas
- e. Reglas de selección y polarización de transiciones (productos directos)
- f. Principio de Franck-Condon
- g. Tipos de transiciones electrónicas: compuestos saturados, insaturados, transiciones d-d, transferencia de carga.

4. Introducción a la Espectroscopía Vibracional (15 hrs)

- a. Espectros Infrarrojos y Raman
- b. Moléculas diatómicas
- c. Transiciones entre estados estacionarios
- d. Modos normales de vibración en moléculas poliatómicas
- e. Coordenadas de simetría y modos normales



Cinvestav

Bibliografía.

- Cotton, F.A. Chemical Applications of Group Theory, 3rd ed. John Wiley & Sons (1990).
- Harris, D.C. y Bertolucci, M.D. Symmetry and Spectroscopy. Dover Publications Inc. (1989).
- Hargittal, I. Symmetry through the eyes of a chemist. 2nd ed. Saunders College Pub. (1992).
- Drago, R. Physical Methods for Chemists. 2nd ed. Saunders College Pub. (1992)
- Cruz-Garriz D.; Chamizo J.A.; Garriz A. Estructura Atómica: Un enfoque químico. Addison-Wesley Iberoamericana (1987).
- Bishop, D.M. Group Theory and Chemistry. Dover Publications Inc. (1993).
- Wilson E.B. Jr., Decius J.C., Cross P.C., Molecular Vibrations. Dover Publications Inc. (2000).