

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN

LICENCIATURA EN: QUÍMICA.

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: QUÍMICA CUÁNTICA.

ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

DEPARTAMENTO DE: CIENCIAS QUÍMICAS.
SECCIÓN DE: FISICOQUÍMICA.

CICLO AL QUE PERTENECE: PROFESIONAL.

REQUISITO DE SERIACIÓN: MATEMÁTICAS III.
REQUISITO DE SERIACIÓN INDICATIVA: FÍSICA III.

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: OBLIGATORIA.

TIPO DE ASIGNATURA: TEÓRICO-PRÁCTICA.

MODALIDAD: CURSO / TALLER.

SEMESTRE: 5°.

NÚMERO DE HORAS /SEMANA/ SEMESTRE:

TEORÍA:

3

PRÁCTICA:

2

N° DE CRÉDITOS:

8

CLAVE

1517

OBJETIVOS GENERALES DE LA ASIGNATURA.

Identificar a la Mecánica Cuántica como una teoría que permite explicar la estructura electrónica de átomos y moléculas y exponer sus fundamentos.

Utilizar los resultados de la Mecánica Cuántica en la formulación electrónica de los elementos de la tabla periódica y el establecimiento de la periodicidad química.

Aplicar los resultados a la Mecánica Cuántica en la formulación electrónica de moléculas diatómicas y poliatómicas a través de los dos enfoques esenciales: La Teoría de Orbitales Moleculares y la Teoría de Enlaces de Valencia.

Identificar los pasos del modelo de Hückel y utilizarlo para predecir reactividades y espectros UV-visibles en sistemas conjugados lineales o aromáticos.

Desarrollar la capacidad de *pensamiento abstracto*, utilizando en primer lugar, leyes y conceptos de física, para formular operadores y ecuaciones matemáticas que describan a un modelo con determinadas características; y en segundo lugar, interpretando físicamente ecuaciones matemáticas, para arribar a conceptos importantes en el área de la Química, como son el concepto de cuantización energética, orbital atómico y orbital molecular, entre otros.

Completar la formación experimental de los estudiantes con una formación teórica en la cual puedan valorar la importancia de los métodos teóricos en la predicción y explicación de las propiedades de las sustancias y su reactividad, descubriendo el principio de la relación *estructura electrónica-propiedad física ó reactividad química*.

Brindar una base teórica sólida, que ayude a descubrir con más profundidad y rigor científico, aquellos conocimientos previos sobre estructura electrónica, que el estudiante trae de materias y niveles precedentes; mismos que al ser de naturaleza mecánico-cuántica, por desconocimiento de ésta teoría, solo los habían adquirido de forma superficial .

UNIDAD 1. ANTECEDENTES Y FORMULACIÓN DE LA MECÁNICA CUÁNTICA.

Número de horas de teoría: 12.

Número de horas de taller: 8.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Conocer los diferentes intentos de encontrar una ecuación que permita descubrir la distribución espectral de la radiación del cuerpo negro.

Explicar los aspectos esenciales de la hipótesis cuántica de Planck y aplicarla a la explicación del efecto fotoeléctrico y al modelo de Böhr.

Relacionar el modelo cuántico de Böhr con las evidencias experimentales acerca de la espectroscopia atómica.

Exponer los postulados de la Mecánica Cuántica, tanto desde el punto de vista de su formalismo matemático como conceptual.

Resolver ejercicios, basados en conceptos presentes en el formalismo matemático de la Mecánica cuántica.

Resolver la ecuación de Schrödinger utilizando ejemplos sencillos de sistemas físicos e inferir, la esencia del método mecánico-cuántico como vía de preparación para abordar más adelante sistemas atómicos y moleculares más complejos.

1.1 Introducción histórica: Antecedentes a la Teoría de Planck.

1.2 Max Planck y la hipótesis Cuántica.

- 1.2.1 Descripción e interpretación del efecto fotoeléctrico a la luz de la teoría Cuántica.
- 1.2.2 El modelo Cuántico de Böhr y los espectros atómicos.
- 1.3 Bases conceptuales de la Mecánica Cuántica.
 - 1.3.1 El concepto onda-corpúsculo y la relación de De Broglie.
 - 1.3.2 El principio de incertidumbre de Heisenberg.
 - 1.3.3 El fenómeno de difracción de electrones.
- 1.4 Relaciones entre la Mecánica Clásica y la Mecánica Cuántica. El principio de correspondencia de Böhr.
- 1.5 Los postulados de la Mecánica Cuántica y su formulación Matemática.
- 1.6 Aplicaciones de la Mecánica Cuántica a modelos físicos.
 - 1.6.1 La partícula en el pozo de potenciales unidimensional y tridimensional.
 - 1.6.2 Otros modelos: La partícula ante una barrera, el doble pozo simétrico.

UNIDAD 2. ÁTOMO DE HIDRÓGENO.

Número de horas de teoría: 9.

Número de horas de taller: 6.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Exponer el procedimiento para encontrar las soluciones de la ecuación de Schrödinger en el átomo de Hidrógeno y analizar su significado físico.

Destacar el concepto de función propia y valor propio y su relación con de orbital atómico.

Establecer el principio de cuantización energética, a partir de la deducción de los números cuánticos y su relación con el conjunto de funciones y valores propios, soluciones de la ecuación de Schrödinger.

2.1 La ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno y su solución.

2.2 Análisis de las soluciones.

2.2.1 Valores propios y números cuánticos.

2.2.2 Funciones propias. Orbitales *s*, *p* y *d*.

UNIDAD 3. ÁTOMOS DE N-ELECTRONES.

Número de horas de teoría: 9.

Número de horas de taller: 6.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Identificar y definir el procedimiento para encontrar las soluciones de la ecuación de Schrödinger con sistemas de más de un electrón, lo cual incluye un método variacional.

Explica la existencia del espín electrónico, como una cuarta variable dinámica, necesaria para explicar el comportamiento electrónico en sistema de n-electrones, y en relación con la evidencia experimental que sentaron las bases de su existencia.

Justificar la necesidad de definir la función espín-orbital.

Inferir, del principio de indistinguibilidad de las partículas cuánticas, el principio de Antisimetría o principio de exclusión de Pauli.

Identificar las características del estado singulete y triplete y derivar de estos la regla de máxima multiplicidad de Hund.

Utilizar el principio de expulsión de Pauli y la regla de máxima multiplicidad de Hund, para explicar la estructura del átomo y la periodicidad química.

Identificar y describir el método de Hartree Fock, sus limitaciones y sus extensiones introduciendo técnicas de modelación de la correlación electrónica.

Realizar cálculos de parámetros energéticos en átomos, utilizando vías empíricas como la Regla de Slater y teóricas como el Método de Hartree Fock y pos-Hartree Fock.

3.1 La ecuación de Schrödinger para el átomo de Helio y su solución.

3.1.1 Método de variación no lineal.

3.2 El espín electrónico. Función espín orbital.

3.3 La indistinguibilidad de las partículas cuánticas.

3.3.1 El principio de antisimetría o principio de expulsión de Pauli.

3.3.2 El fenómeno de la correlación electrónica. La regla de máxima multiplicidad de Hund.

3.4 La función de una onda para un sistema de n-electrones.

3.4.1 Orbitales de Slater y reglas de Slater. Cálculo de energía aproximadas.

3.4.2 El determinante de Slater.

3.5 El Método variacional para un sistema de n-electrones.

3.5.1 Método de Hartree Fock o método del campo autoconsistente.

3.5.2. Cálculo de Energías aproximadas.

3.5.3. Métodos pos - Hartree Fock. Aspectos Generales.

3.6 Estructura electrónica de átomos y periodicidad química.

UNIDAD 4. ENLACE QUÍMICO.

Número de horas de teoría: 12.

Número de horas de taller: 8.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Identificar y describir el procedimiento para encontrar las soluciones de la ecuación de Schrödinger para el H_2^+ y H_2 .

Interpretar las soluciones de ecuación de Schrödinger para el H_2^+ Y H_2 en términos de la teoría de orbitales de moleculares (TOM) y la teoría del enlace de valencia (TEV).

Relacionar el concepto de orbital molecular con el de la función de onda expresada como combinación lineal de orbitales atómicos (OM-CLOA).

Distinguir los fundamentos de la TOM Y TEV.

Aplicar la TOM y TEV para el estudio de las moléculas diatómicas con el fin de construir diagramas de energía y formular distribuciones electrónicas que permitan correlacionar índices como el orden de enlace y predecir propiedades magnéticas.

Aplicar la TEV a las moléculas poliatómicas, utilizando el concepto de hibridación en la formulación de distribuciones electrónicas.

Reconocer el concepto de mezcla de orbitales dentro de la TOM para moléculas poliatómicas y distinguir entre la TOM deslocalizados y localizados.

Valorar los aspectos positivos y las limitaciones de las dos teorías estudiadas, en los diferentes tipos de moléculas.

Realizar cálculos Hartree Fock de energía en moléculas sencillas.

4.1 El modelo de H_2^+ y su solución. La Teoría de orbitales Moleculares.

4.2 El modelo de H_2 y su solución. La Teoría de Enlaces de Valencia.

4.3 Aplicaciones de la TOM Y LA TEV.

4.3.1 Moléculas diatómicas homonucleares y heteronucleares.

4.3.2 Moléculas poliatómicas.

UNIDAD 5. EL MÉTODO DE HÜCKEL.

Número de horas de teoría: 6.

Número de horas de taller: 4.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Identificar los pasos del método de Hückel y justificar las aproximaciones y las simplificaciones realizadas al determinante secular.

Aplicar el método de Hückel a moléculas conjugadas lineales y compuestos aromáticos.

Construir el diagrama de energía de un sistema conjugado y estimar su posible λ_{\max} en un espectro UV-visible.

Dibujar la forma aproximada de los orbitales moleculares utilizando la tabla de coeficientes, y evaluar su carácter enlazante y antienlazante.

Generalizar el concepto de función de onda molecular a partir de su formulación como combinación lineal de orbitales atómicos (OM-CLOA)

Calcular índices como la carga atómica, el orden de enlace y la valencia libre y utilizarlos para predecir cualitativamente fortalezas de enlaces y reactividades.

5.1 Características de los sistemas conjugados. Enlace σ y π

5.2 Formulación de la función de onda. Separación de σ/π

5.3 Fundamentos del método de Hückel.

5.3.1 Construcción del determinante Secular y aproximaciones.

5.3.2 Diagrama de energía y cálculo de energía π

5.3.3 La función de onda molecular como combinación lineal de orbitales atómicos (OM-CLOA). Los coeficientes de la combinación lineal.

5.4 Aplicaciones al cálculo de parámetros electrónicos.

5.4.1 Cargas atómicas y orbitales.

5.4.2 Orden de enlace.

5.4.3 Valencia libre.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

Las horas de teoría o taller se pueden distribuir de forma combinada en función de las condiciones del grupo y el criterio del profesor. No obstante, se sugiere que los mismos aborden los siguientes contenidos:

- En la unidad 1, efectuar exposiciones por los estudiantes del tratamiento mecánico-cuántico de otros modelos físicos de importancia como la barrera, el doble pozo etc.; las actividades de taller, deberán tener como objetivos esenciales, la comprensión del formalismo matemático de la teoría mediante ejercicios y la realización de problemas de aplicación del modelo de la partícula en la caja de potenciales unidimensional, bidimensional, tridimensional y otros modelos.

- En la unidad 2, La actividad puede referirse a profundizar en el significado físico de las variables dinámicas y la información que dan los números cuánticos acerca de la energía y forma del orbital.

La actividad de taller debe centrarse en la identificación de la función de onda $\Psi_{n,1,m}(r, \theta, \phi)$ con el tipo de orbital, y podrá incluir el cálculos de radios de máxima probabilidad y la graficación de la función de onda en papel circular de coordenadas polares entre otras actividades.

- En la unidad 3, la actividad de taller podrá estar relacionada con la formulación de determinantes de Slater, distribución electrónica de átomos, cálculo de carga nuclear efectiva por las reglas de Slater y formulación del orbital de Slater, así como cálculo aproximado de energías. La actividad del curso tiene un carácter generalizador y deberá profundizar en aspectos de la configuración electrónica de las diferentes familias de elementos de la tabla periódica y en periodicidad química.

- Finalmente, en la unidades 4 y 5 se realizaran ejercicios de distribución electrónica, diagramas de energía y cálculos de índices aplicado a las teorías y métodos, que corresponden a los diferentes sistemas moleculares estudiados.

Por las características de la materia se sugiere combinar la exposición oral tradicional con gis y pizarrón con acetatos y videos.

Utilización de software especializado para la realización de cálculos, gráficas, diagramas, modelación molecular y visualización de modelos.

PROPUESTA DE EVALUACIÓN.

Se sugiere realizar dos evaluaciones escritas de las unidades 1 y 3 respectivamente, dos trabajos por equipo de las unidades 2 y 4 y un trabajo individual de la unidad 5. La evaluación final será el resultado de todas éstas evaluaciones más una evaluación cualitativa del trabajo y participación en los seminarios y talleres. Por la complejidad del contenido, no se considera apropiado evaluar más de una unidad simultáneamente.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DEL DOCENTE.

Profesional de la Química con experiencia en Fisicoquímica o estudios de especialidad, maestría o doctorado en el área de Química Cuántica.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA.

1. Levine, I. *Quantum chemistry* 5a., Prentice Hall, 1999.
2. Simons, J.; Nichols, J. *Quantum mechanics in chemistry*, Oxford University Press, Oxford, 1997.
3. Atkins, P.W. y R.S. Friedman. *Molecular quantum mechanism*, Oxford University Press, New York, 1999.
4. Ball, D.W. *Fisicoquímica*, Thomson, México, 2004.
5. Berry, R.S., S.A. Rice y J. Ross. *The structure of matter*, Oxford University Press, New York, 2001.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA.

1. Casabo, J. *Estructura atómica y enlace químico*, Reverté, Barcelona España, 1999.
2. Cramer, Ch. J. *Essentials of computational chemistry: Theory and models*, John Wiley and Sons, England, 2002.
3. Messiah, A. *Quantum mechanics*, Dover, New York, 2000.
4. Pilar, F.L. *Elementary quantum chemistry*, 2a., Dover, New York, 2001.
5. Smith, W. B. *Introduction to theoretical organic chemistry and molecular modelling*, John Wiley and Sons, New York, 1996.