



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

UNIDAD: IZTAPALAPA		DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA	
NIVEL: LICENCIATURA		EN QUÍMICA	
CLAVE: 2141143	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: TEORÍA DE GRUPOS Y APLICACIONES EN QUÍMICA		TRIMESTRE VI-XII
HORAS TEORÍA: 3	SERIACIÓN 213035		CRÉDITOS: 9
HORAS PRÁCTICA: 3			OPT./OBL: OPT.

OBJETIVO(S):

GENERALES

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Visualizar los elementos de simetría de las moléculas.
- Conocer las bases de la teoría de grupos
- Aplicar la teoría de grupos en algunos temas de la química

ESPECÍFICOS

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Determinar el grupo puntual de una molécula
- Utilizar la tabla de caracteres de un grupo puntual
- Identificar las integrales que son iguales a cero por razones de simetría
- Construir orbitales atómicos híbridos
- Conocer la simetría de los diferentes orbitales moleculares
- Aplicar los conceptos básicos de las Reglas de Woodward-Hoffmann
- Prever el número y simetría de las bandas IR y Raman de una molécula
- Utilizar la simetría en la aplicación de la Teoría del Campo de los Ligandos.

NOMBRE DEL PLAN		LICENCIATURA EN QUÍMICA	2/3
CLAVE 2141143	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE TEORÍA DE GRUPOS Y APLICACIONES EN QUÍMICA		

CONTENIDO SINTÉTICO:

1. Conceptos básicos de la Teoría de Grupos
 - 1.1 Definición de grupo
 - 1.2 Subgrupos
 - 1.3 Operaciones de semejanza
 - 1.4 Clases de un grupo
 - 1.5 Grupos cíclicos y grupos Abelianos
2. Simetría molecular
 - 2.1 Elementos de simetría
 - 2.2 Operaciones de simetría
 - 2.3 Grupos puntuales
 - 2.4 Identificación del grupo puntual de una molécula
3. Representaciones de grupos
 - 3.1 Operaciones con matrices
 - 3.2 Representaciones de grupos
 - 3.3 Representaciones reducibles e irreducibles
 - 3.4 Representaciones de grupos cíclicos
 - 3.5 Caracteres de una representación
 - 3.6 Tabla de caracteres
4. Funciones con simetría
 - 4.1 Teorema de la Gran Ortogonalidad
 - 4.2 Operadores de proyección
 - 4.3 Construcción de funciones con simetría
5. Orbitales híbridos
 - 5.1 Simetría de los orbitales atómicos
 - 5.2 Construcción de orbitales híbridos adaptados a la simetría molecular
6. Teoría de grupos y mecánica cuántica
 - 6.1 Simetría de la función de onda
 - 6.2 Producto directo de dos representaciones
 - 6.3 Identificación de integrales iguales a cero por simetría
 - 6.4 Utilización de la simetría para diagonalizar en bloques el determinante secular
7. Simetría en la Teoría de Orbitales Moleculares
 - 7.1 Simetría de los orbitales moleculares
 - 7.2 Método de Hückel de orbitales moleculares
 - 7.3 Reglas de Woodward-Hoffmann
8. Teoría de grupos y Espectroscopia
 - 8.1 Simetría de los modos normales de vibración
 - 8.2 Vibraciones activas en Infrarrojo
 - 8.3 Vibraciones activas en Raman.
9. Teoría del Campo de los Ligandos
 - 9.1 Construcción de diagramas de niveles de energía.
 - 9.2 Diagramas de Tanabe-Sugano
 - 9.3 Reglas de selección y polarización.
 - 9.4 Grupos dobles

NOMBRE DEL PLAN		LICENCIATURA EN QUÍMICA	3/3
CLAVE 2141143	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE TEORÍA DE GRUPOS Y APLICACIONES EN QUÍMICA		

MODALIDADES DE CONDUCCIÓN DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

Se asignarán 3 horas de teoría y 3 de práctica por semana.

- Se procurará que en la exposición de la teoría se introduzcan los conceptos haciendo uso de ejemplos reales, resaltando los aspectos conceptuales en forma intuitiva y matemática, sin descuidar los aspectos de formalización.

Se entenderá por práctica:

- Sesiones de taller en la que los alumnos resuelvan ejercicios dirigidos por el profesor.
- Sesiones de taller para aprender a utilizar modelos moleculares e identificar ejes, planos y centros de inversión.

MODALIDADES DE EVALUACIÓN:

Evaluación Global:

- Se realizarán tres evaluaciones periódicas de dos horas cada una.
- Se dejarán tareas semanales.
- Se entregará un trabajo individual.

Evaluación de Recuperación:

- El curso podrá acreditarse mediante una evaluación de recuperación que podrá ser global o complementaria a juicio del profesor.

BIBLIOGRAFÍA NECESARIA O RECOMENDABLE:

1. Bishop, D. M. *Group Theory and Chemistry*, Dover, Nueva York, 1993.
2. Cotton, F. A. *Chemical Applications of Group Theory*, 3^a. ed.; Wiley-Interscience: Nueva York 1990.
3. Software para visualizar los elementos y operaciones de simetría:
<http://www.molwave.com/software/3dmolsym/3dmolsym.htm>
4. Tsukerblat, B. S. *Group Theory in Chemistry and Spectroscopy. A simple guide to advanced usage*; Academic Press: Londres, 2006.