Programa Asignatura: Estructura Electrónica y Reactividad Química

Unidad Académica Responsable: Departamento de Físico-Química

CARRERA a las que se imparte: Programa de Graduado

MÓDULO:

I.- IDENTIFICACION

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Nombre: Estructura Electrónica y Reactividad Química | | | |
| Código: | Créditos: 4 | Créditos SCT: 9 | |
| Prerequisitos: Físico Química de graduados | | | |
| Modalidad: Presencial | Calidad: Electivo | | Duración: Semestral |
| Semestre en el plan de estudios: |  | | |
| Trabajo Académico: 15 | | | |
| Horas Teóricas: 3 Horas Prácticas: 0 Horas Laboratorio: 2  Horas de otras actividades: 10 | | | |

II.- DESCRIPCION

Asignatura diseñada para que la (el) estudiante logre una comprensión de los principios físicos de la estructura la electrónica en átomos y moléculas, como también entender aspectos de reactividad química derivados de esta.

III.- RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPERADOS

(N-5) Establecer y formular metodologías que permiten calcular la estructura electrónica en átomos y moléculas a partir de primeros principios.

(N-5) Analizar y predecir reactividad química a partir de la estructura electrónica de moléculas.

IV.- CONTENIDOS

**1. Fundamentos de la Estructura Electrónica**

1.1 Introducción a la mecánica cuántica de sistemas atómicos, álgebra lineal, funciones de onda de Slater, set de bases, método Hartree-Fock en átomos polielectrónicos, soluciones iterativas de la ecuación Hartree-Fock, momento angular en átomos polielectrónicos

1.2 Aproximación de Born-Oppenheimer, ecuaciones de Roothaan y sus soluciones.

**2. Correlación Electrónica.**

2.1 Solución exacta de la ecuación de Schrödinger en la base de Slater y definición de correlación

electrónica,

2.2 Método de interacción de configuraciones, teoría de perturbaciones, método coupled cluster,

2.3 Teoría de funcionales de la densidad.

**3. Efectos del Solvente.**

3.1 Descripción del solvente como un continuo dieléctrico, termodinámica de solvatación, ecuación de Poisson-Boltzmann, modelo de solvatación de Born,

3.2 Polarizabilidad en medios dieléctricos, hamiltoniano efectivo, modelo de solvente PCM, modelo de solvente SMD.

**3. Reactividad Química.**

3.1 Interpretación de las soluciones de Hartree-Fock, teorema de Koopmans, orbitales moleculares (OM) en moléculas diatómicas (análisis poblacional y momento dipolar),

3.2 Análisis de OM en moléculas poliatómicas simples, diagramas de Welsh, orbital mixing, conjugación, aromaticidad, hiperconjugación y otros efectos orbitales,

3.3 Teoría de funcionales de la densidad conceptual, descriptores globales y descriptores locales.

**TRABAJOS PRÁCTICOS**

Se realizarán para cada unidad 1-2 trabajos prácticos computacionales en donde se aplicarán los conocimientos adquiridos.

V.- METODOLOGIA

Sesiones de discusión de capítulos de lectura y resolución de problemas junto a laboratorios computacionales en donde se aplican los aprendizajes logrados a simulaciones de sistemas químicos.

VI.- EVALUACION

Los resultados de aprendizaje serán evaluados a través de una presentación oral de un trabajo bibliográfico (50%) e informes de laboratorio escritos (50%).

**VII.- BIBLIOGRAFIA Y MATERIAL DE APOYO**

1. Atilla Szabo, Neil Oslund “Modern Quantum Chemistry” Dover Publications 1996
2. Trygve Helgaker, Paul Jorgensen, Jeppe Olsen, “Molecular Electronic Structure Theory” Wiley New York 2012

# Michael Springborg, Jan-Ole Joswig “Chemical Modelling : Volume 11”, The Royal Society of Chemistry 2014