



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

PROGRAMA DE ESTUDIOS

UNIDAD	IZTAPALAPA	DIVISION	CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA	1 / 4
NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA				
CLAVE	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE		CRED.	9
2141143	TEORIA DE GRUPOS Y APLICACIONES EN QUIMICA		TIPO	OPT.
H. TEOR. 3.0	SERIACION		TRIM.	VI-XII
H. PRAC. 3.0	2130035			

OBJETIVO(S) :

Objetivos Generales:

Que al final de la UEA 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.

Objetivos Específicos:

Que al final de la UEA 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.

CONTENIDO SINTETICO:

1. Conceptos básicos de la Teoría de Grupos.
 - 1.1 Definición de grupo.
 - 1.2 Subgrupos.
 - 1.3 Operaciones de semejanza.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

[Handwritten signature]

- 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.



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

[Handwritten signature]

CLAVE 2141143

TEORIA DE GRUPOS Y APLICACIONES EN QUIMICA

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.

MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

Se asignarán 3 horas de teoría y 3 de práctica por semana. 1. 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:

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

MODALIDADES DE EVALUACION:

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.

BIBLIOGRAFIA NECESARIA O RECOMENDABLE:

1. Bishop, D. M. Group Theory and Chemistry, Dover, Nueva York, 1993.
2. Cotton, F. A. Chemical Applications of Group Theory, 3a. ed.; Wiley-Interscience: Nueva York 1990.
3. Software para visualizar los elementos y operaciones de simetría:
<http://www.molwave.com/software/3dmolsym/3dmolsym.htm>



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA		4 / 4
CLAVE 2141143	TEORIA DE GRUPOS Y APLICACIONES EN QUIMICA	

4. Tsukerblat, B. S. Group Theory in Chemistry and Spectroscopy. A simple guide to advanced usage; Academic Press: Londres, 2006.



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

Casa abierta al tiempo.

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

[Handwritten signature]