

NOMBRE: Enlace Químico

CLAVE: 2146037

GRUPO: CO13

HORAS TEORÍA: 4.5

NOMBRE DEL PROFESOR:

Annia Galano Jiménez (27642), cubículo R-105

Ana María F. Vivier Jegoux (2985), cubículo R-144

HORARIO: Lunes y viernes de 12:30 a 14:45.

HORARIO DE ASESORÍAS:

Lunes y Viernes de 15:00 a 17:00 hrs

## OBJETIVOS

Que el alumno comprenda de manera cuantitativa, apoyándose en los resultados de la mecánica cuántica, los principales tipos de enlaces conocidos en las moléculas químicas, así como la naturaleza de las principales interacciones entre ellas.

## CONTENIDO SINTETICO

1. Introducción a la Química Computacional.
2. Introducción al enlace químico.
3. Energías de ionización, afinidades electrónicas, índices de reactividad globales y locales.
4. Enlace covalente:
  - 4.1. Representaciones de Lewis, estructuras resonantes, regla del octeto y sus excepciones.
  - 4.2. Modelo de repulsión de pares de electrones en la capa de valencia.
  - 4.3. Teoría de enlace de valencia, hibridación de orbitales y enlaces múltiples.
  - 4.4. Polaridad de enlace, forma molecular y polaridad molecular.
  - 4.5. Teoría de orbitales moleculares.
  - 4.6. Separación s/p, método de Hückel.
  - 4.7. Conjuntos de funciones de base.
5. Orbitales Naturales.
6. Introducción a Átomos en Moléculas (conceptos básicos).
7. Simetría molecular (grupos puntuales).

8. Enlace iónico: teoría del campo cristalino.
9. Interacciones moleculares (polarización, dispersión, fuerzas de London, puentes de hidrogeno).

#### MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE

Exposición oral por parte del profesor con auxilio de las técnicas audiovisuales idóneas.  
Presentación de temas y problemas por parte de los alumnos a través de seminarios.

#### MODALIDADES DE EVALUACION

Evaluaciones periódicas durante el curso. Presentación y discusión de proyectos realizados mediante el uso de las herramientas aprendidas.

#### BIBLIOGRAFIA

1. B. Douglas, D. McDaniel, J. Alexander, Concepts and Models of Inorganic Chemistry, 3'd ed., Wiley New York, 1994.
2. R. Me Weeny, Coulson's Valence, 3'd ed., Oxford Science Publishing, Oxford, 1990.
3. D. C. Harris, M.D. Bertolucci, Symmetry and Spectroscopy, Dover: New York, 1989.
4. R. Bader, Atoms in Molecules, Oxford University Press, Oxford, 1988.
5. J. N. Israelachvili, Intermolecular and Surface Forces, Academic Press, New York, 1985.
6. S.P. McGlynn, L. G. Vanquickenbome, M. Kinoshita, D. G. Carroll, Introduction to Applied Quantum Chemistry, Holt Rinehart and Winston, New York, 1972.
7. H. Margenau, N. R. Kestner, Theory of Intermolecular Forces, 2"d ed., Pergamon Press, New York, 1969.
8. L. Pauling, The Nature of the Chemical Bond, 3rd ed., Cornell University Press, Ithaca, 1960.
9. Artículos especializados de investigación.