

# Módulo EPM: Conclusiones

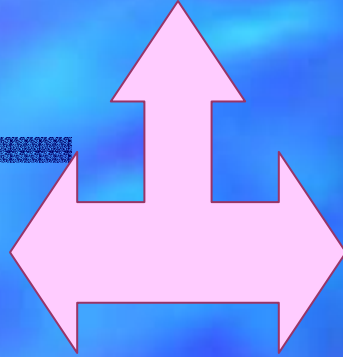
## ■ ¿Qué hemos visto en este módulo?

- Bases teóricas para describir el mundo atómico y molecular empleando la Mecánica Cuántica.
- Métodos disponibles actualmente para modelar sistemas químicos de dimensión variada.
- Propiedades que es posible modelar
- Fundamento de varios tipos de espectroscopía molecular
- Conexión entre las moléculas y las muestras macroscópicas.

# Propiedades Moleculares

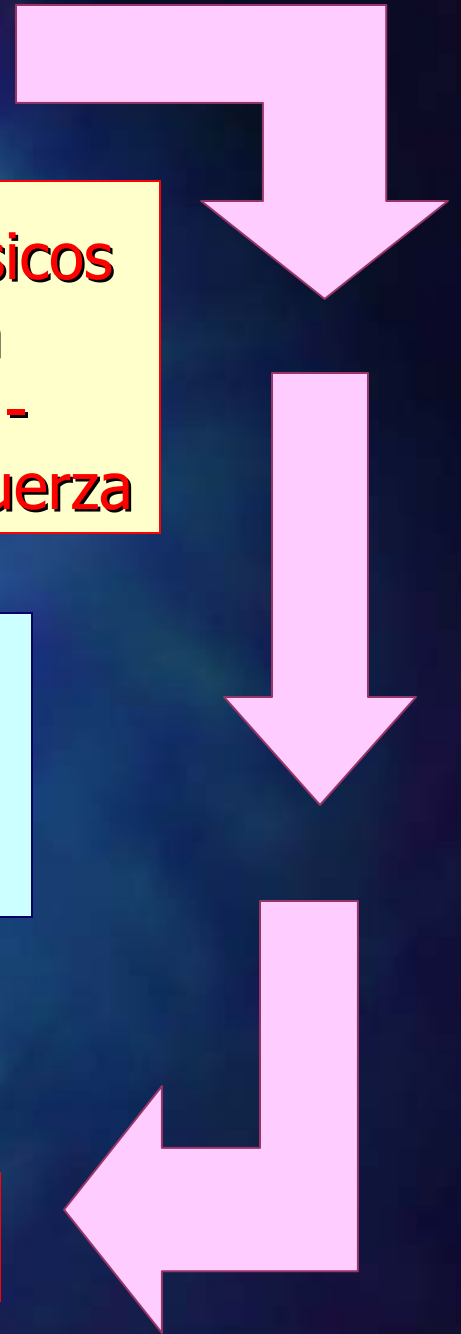
Métodos Cuánticos  
Ecuación de Schrödinger  
 $H\psi = E\psi$

Métodos Clásicos  
Mecánica Molecular -  
Campos de Fuerza



 **Bases Teóricas**  
 **Aplicaciones prácticas**  
 **Criterios de Elección**  
**(Todo Modelo tiene límites de aplicación)**

# Propiedades Macroscópicas



## Propiedades Moleculares

Relaciones entre estructura química y función biológica.

Bases para el reconocimiento molecular

Mecanismo y cinética de transformaciones químicas: su control a nivel molecular

Identificación de sustancias desconocidas  
(Espectroscopía-Análisis Cualitativo y Cuantitativo)

## Propiedades Macroscópicas

Temperatura como variable en el problema

Funciones de estado  
( $E, S, U, C_v, H, G, A, P$ )

Sistemas de dimensiones reales: efectos del entorno  
(solvente, proteína, membrana, etc.)

Equilibrio químico:  $K_{eq}$

Cinética: cálculo de  $k_{vel}$

# Conceptos Clave

## Ecuación de Schrödinger

$$H\psi = E\psi$$

☞ Cuantización

☞ Interpretación de  $\psi$

☞ Cálculo de propiedades (valor esperado)

☞ Modelo traslación (degen./efect.túnel)

☞ Modelo vibración

☞ Modelo rotación (momento angular orbital y de spin)

## Estructura atómica

☞ **At. Hidrogenoides**  
-Soluciones exactas  
Orbitales atómicos (OA)  
-N<sup>o</sup>s cuánticos orbitales, degenerac.

☞ **Átomos Polielectrónicos**  
-Aprox. HF-SCF  
-Orbitales aprox.  
Error de correlación  
-Apantall-Penetración  
-Determinante de Slater (RHF vs. UHF)  
Reglas construcción

## Estructura molecular

☞ **Born-Oppenheimer**

$ES_{nuc}$  ---  $ES_{el}$   
↕ ↕  
**SEP**      **HF : OM**  
**Puntos**      **Det Slater**  
**Estacionarios**      **molecular**

☞ Clasificación OM  
☞ Condiciones OA ↓ OM  
☞ Teorías para obt. OM  
TEV (VB) --- TOM  
**CLOA: Conjunto de base de OA (STO-GTO/Tipos)**

### Tipos de Métodos EPM

-cuánticos sin/con correlación  
-Clásicos(MM)

**Espectroscopía Molecular**

**Term. Estadística**