

Densidad de carga electrónica de la molécula de etileno C_2H_4

The quantum Theory of Atoms in Molecules from a bohmian perspective

Jesus Alberto Jaimes Arriaga
Directora: Dra. Olimpia Lombardi

Objetivo General

Brindar un análisis epistemológico de la TCAEM con el fin de determinar su papel en la definición de estructura molecular.

Objetivos Específicos

1. Analizar los conceptos fundamentales de la TCAEM y su aplicación en el estudio de sistemas químicos.
2. Analizar la relación entre dichos conceptos y el lenguaje de la química estructural.
3. Analizar si la TCAEM puede ser considerada una teoría o un modelo en el marco de la química estructural.
4. Identificar y analizar que tipo de idealizaciones introduce la TCAEM para el estudio de la estructura molecular.

Antecedentes

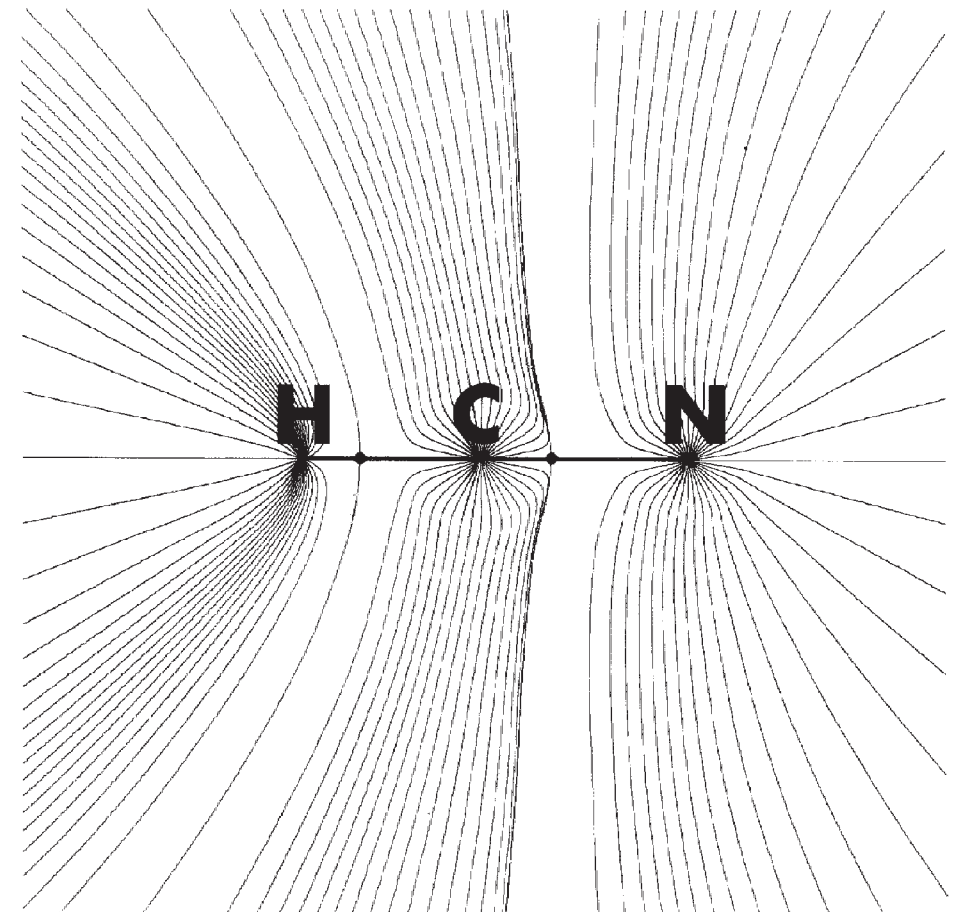
1. Relación entre química y física

2. Reduccionismo

3. Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas

4. Modelos en ciencia

5. Modelos en química



Ecuación de Schrödinger

1926 Schrödinger



Ecuación de Onda

Donde:

$$H \Psi = E \Psi$$

$$H = \frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 + V(x, y, z)$$

y

Densidad electrónica

$$\rho(r) = N \int d\tau \psi^* \psi$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2}{\partial^2 y} + \frac{\partial^2}{\partial^2 z}$$

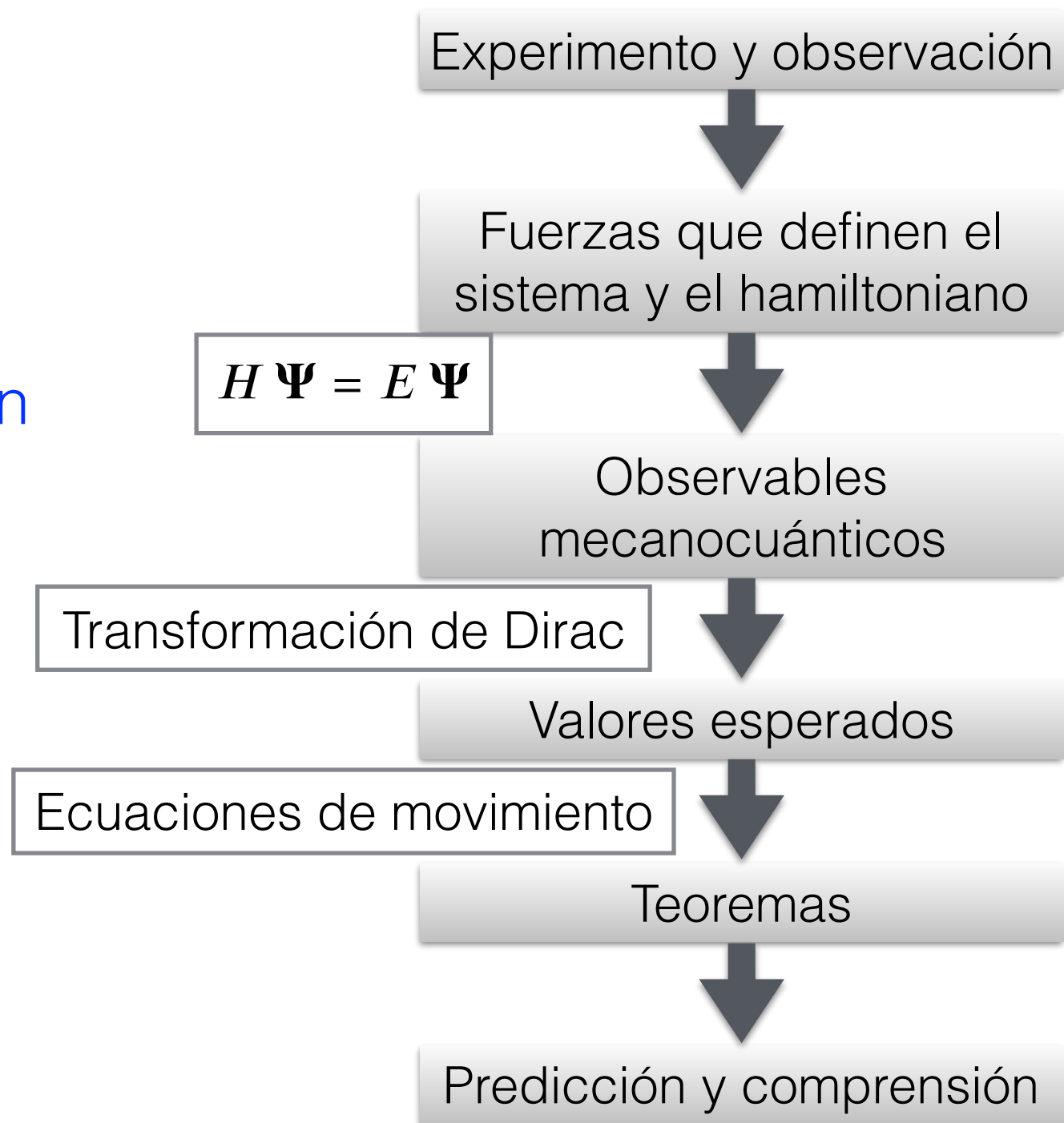
Observables en Mecánica Cuántica

Heisenberg

Teoría ↔ Observación

Dirac:

El objetivo de la teoría es entender y predecir las propiedades observables de un átomo.



Bader, R. F. W. (2011). "Worlds Apart in Chemistry: A Personal Tribute to J. C. Slater" *Journal of Physical Chemistry A* **115**: 12667-12676.

Bader, R. F. W. (2011). "On the non-existence of parallel universes in chemistry" *Foundations of Chemistry* **13**: 1137. 5

El principio de acción cuántica

Dirac encuentra una expresión para formular la teoría cuántica mediante el método del lagrangiano.

Función de transformación

$$\langle qt|qT\rangle = \exp \left\{ \left(\frac{i}{\hbar} \right) W \right\}$$

Integral de acción

$$W = \int_t^T L dt$$

Schwinger

↓
Principio de acción cuántica

↓
Principio de acción estacionaria

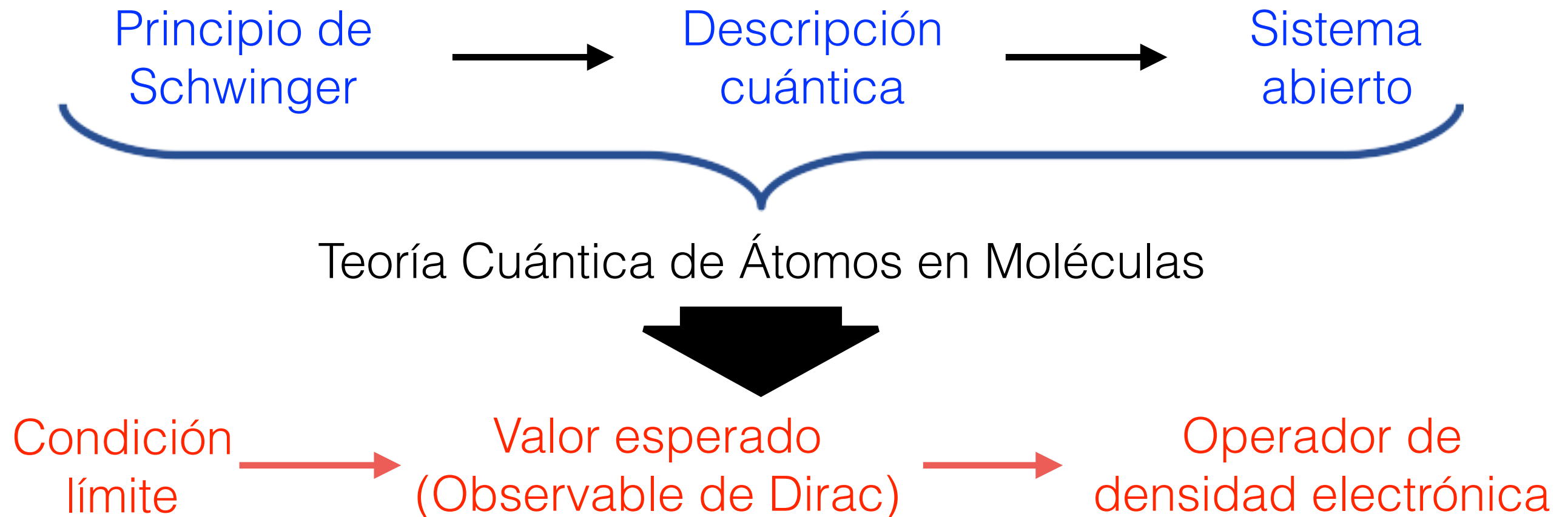
$$\delta \dot{W}_{tT} = \dot{F}_T - \dot{F}_t$$

Permite la extensión de la mecánica cuántica a un sistema abierto.

Schwinger, J. (1951). “The Theory of Quantized Fields. I” *Physical Review* **82**: 914–927.

Dirac, P. A. M. (1933). “The Lagrangian in Quantum Mechanics” *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* **3**: 64-72.

Un sistema abierto: un átomo en una molécula



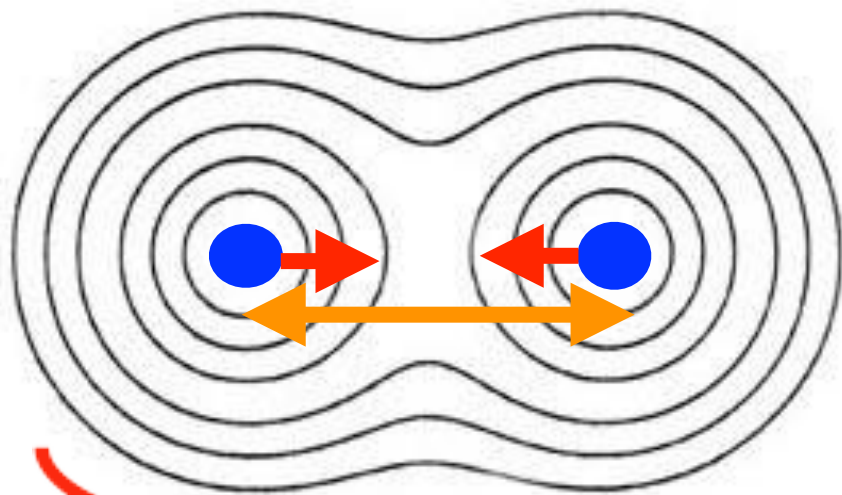
$$\nabla Q(r) \cdot n(r) = 0 \quad \text{para todos los puntos } \mathbf{r} \text{ sobre la superficie: } S(\Omega; r)$$

$$Q(r) = \delta(r' - r)$$

Teoremas de la mecánica cuántica

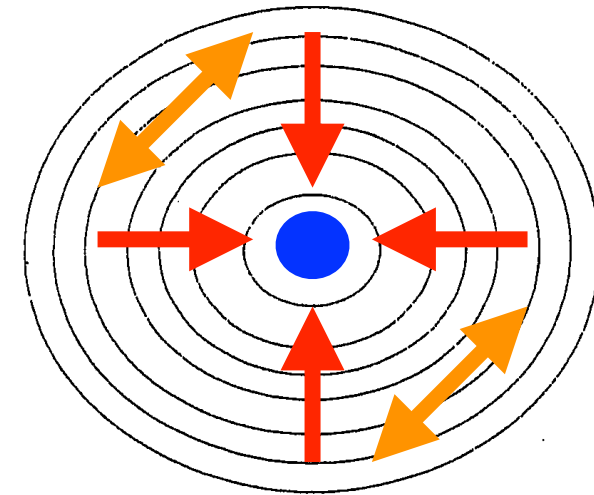
Fuerza de Feynman

Fuerza que actúa en el núcleo



Fuerza de Ehrenfest

Fuerza que actúa en un átomo



Atracción

Repulsión

Teorema del Virial



Relaciona las fuerzas con la energía de la molécula y sus contribuciones cinética y potencial

Feynman, R. P. (1939). "Forces in Molecules" *Physical Review* **56**: 340-343.

Bader, R. F. W. (2010). "Definition of Molecular Structure: By Choice or by Appeal to Observation?" *Journal of Physical Chemistry A* **114**: 7431-7444.

Slater, J. C. (1933). "The Virial and Molecular Structure" *Journal of Chemical Physics* **1**: 687-691.

El comienzo de la química cuántica

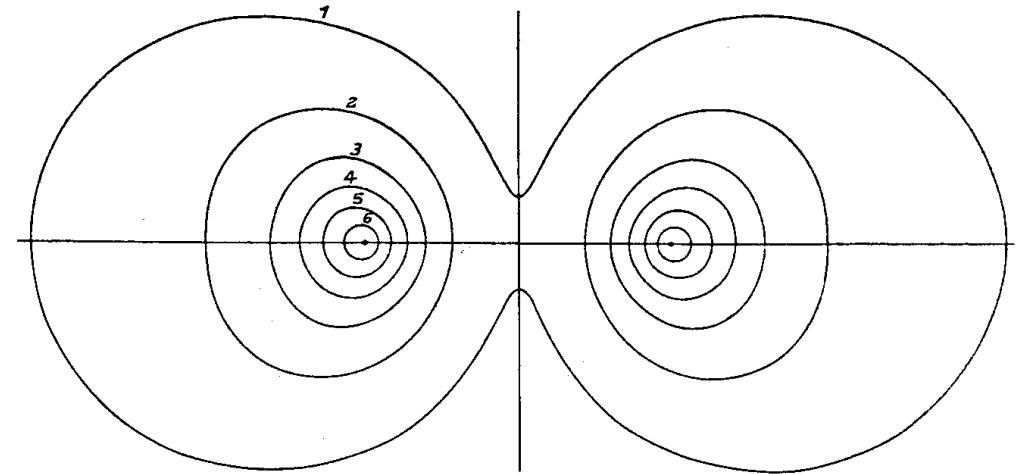
London:

“Con la ayuda de estas figuras, uno puede imaginar cómo en moléculas complicadas los átomos, que forman un enlace, están conectados por un puente de densidad electrónica ($\psi^*\psi$), mientras los átomos restantes permanecen separados”

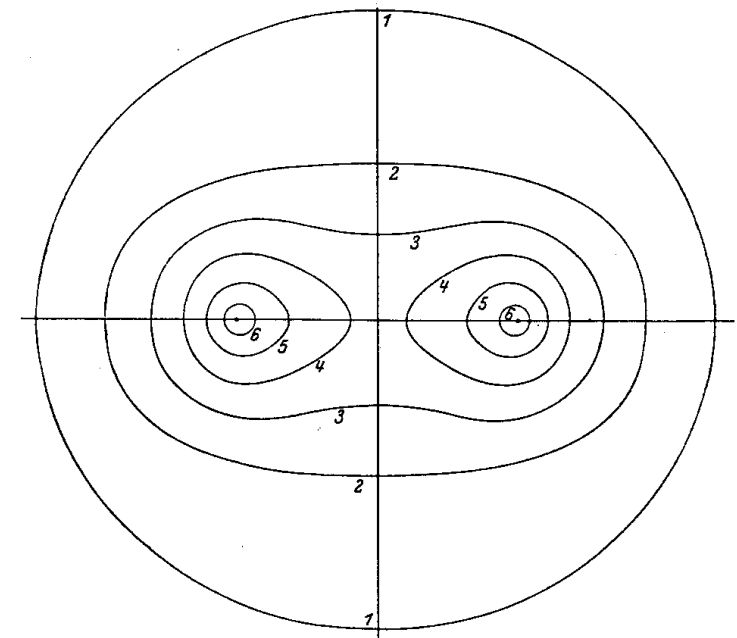
Distribuciones de densidad electrónica para la molécula de H₂



Antisimétrica



Simétrica



Heitler, W. & London, F. (1927). “Interaction between neutral atoms and homopolar binding according to quantum mechanics” *Zeitschrift für Physik* **44**: 455-472.

London, F. (1928). “On the quantum theory of homo-polar valence number” *Zeitschrift für Physik* **46**: 156-174.

La densidad electrónica



Teoría de átomos en moléculas



Permite vincular el lenguaje de la química con el de la física

Topología



Átomo, enlace, estructura
y estabilidad estructural

Topología de la densidad electrónica

Fuerza de atracción
núcleo-electrón



Propiedad
topológica universal



$$\nabla \rho(r) \cdot n(r) = 0$$

Topología

$$\rho(r)$$



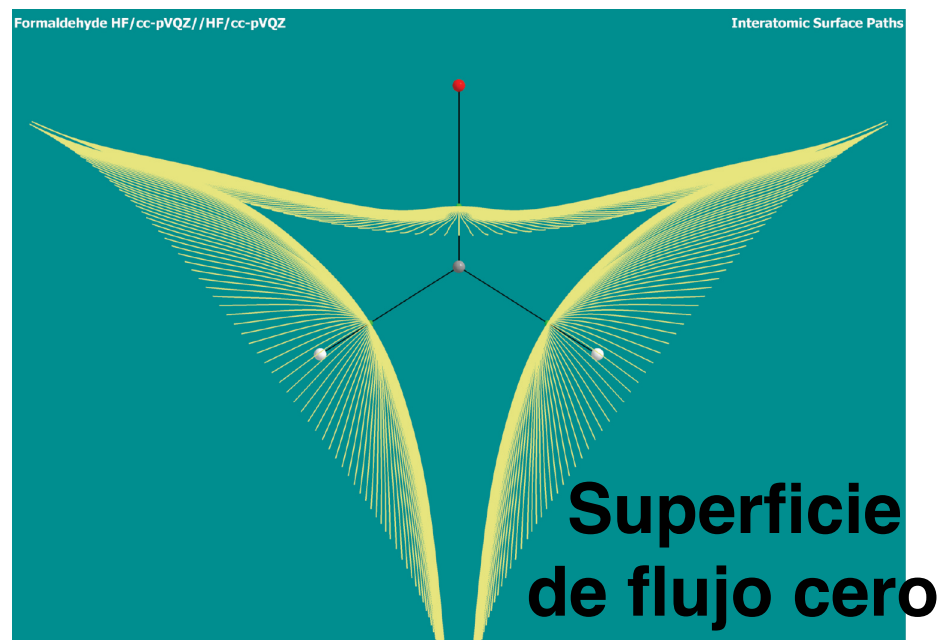
Campo vector gradiente



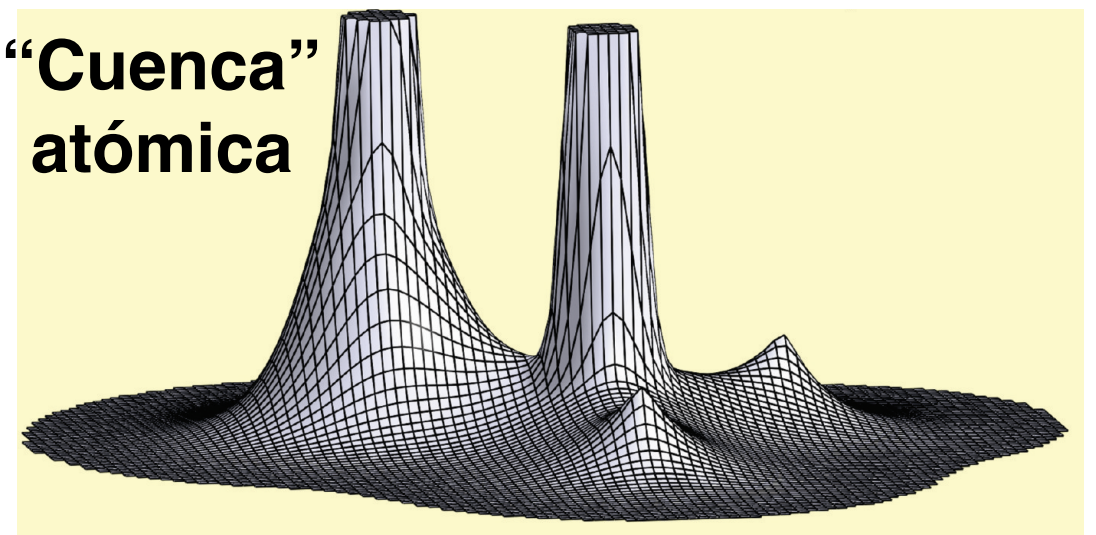
Trayectorias del vector gradiente

$$\nabla \rho(r)$$

Formaldehido



“Cuenca”
atómica



Bader, R. (1994). Atoms in molecules. A quantum theory. Oxford: Clarendon Press.

Bader, R. F. W. (2011). “On the non-existence of parallel universes in chemistry” *Foundations of Chemistry* **13**: 1137.

Puntos críticos

Característica topológica
máximo, mínimo, silla



$$\nabla Q(r)=0$$

Donde:

$$(\omega, \sigma)$$

Rango Signatura

$$\nabla Q(r)=i\frac{\partial Q}{\partial x} + j\frac{\partial Q}{\partial y} + k\frac{\partial Q}{\partial z}$$

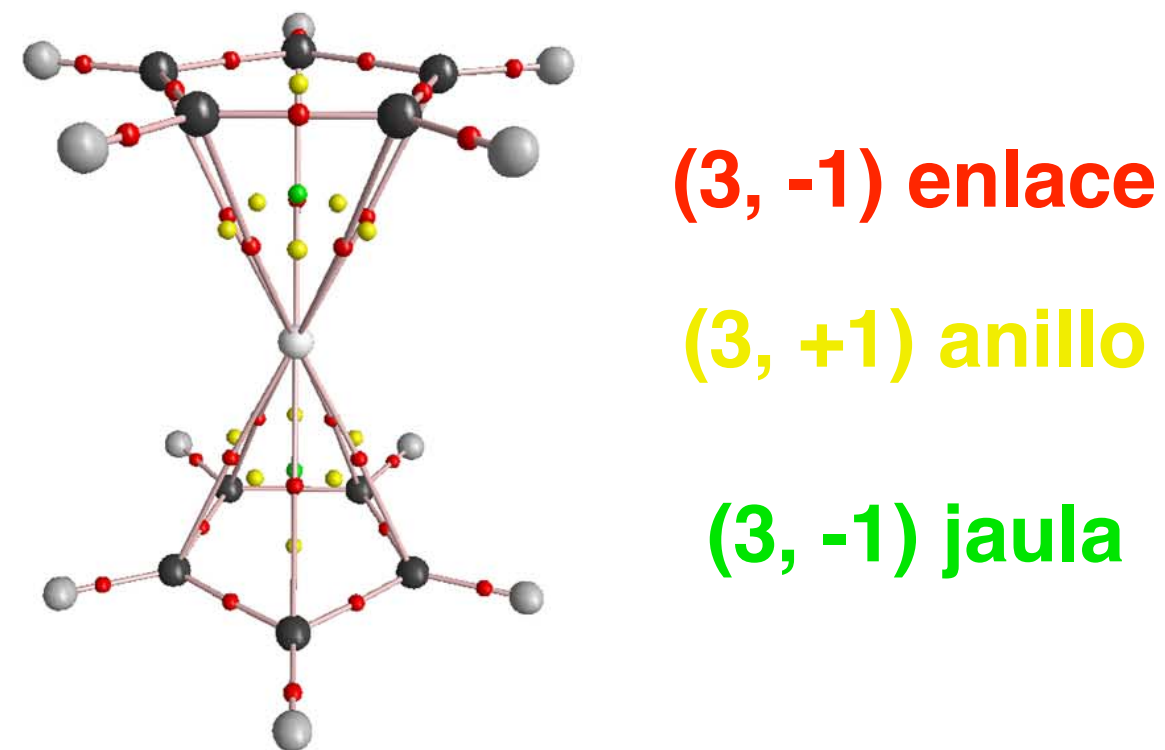
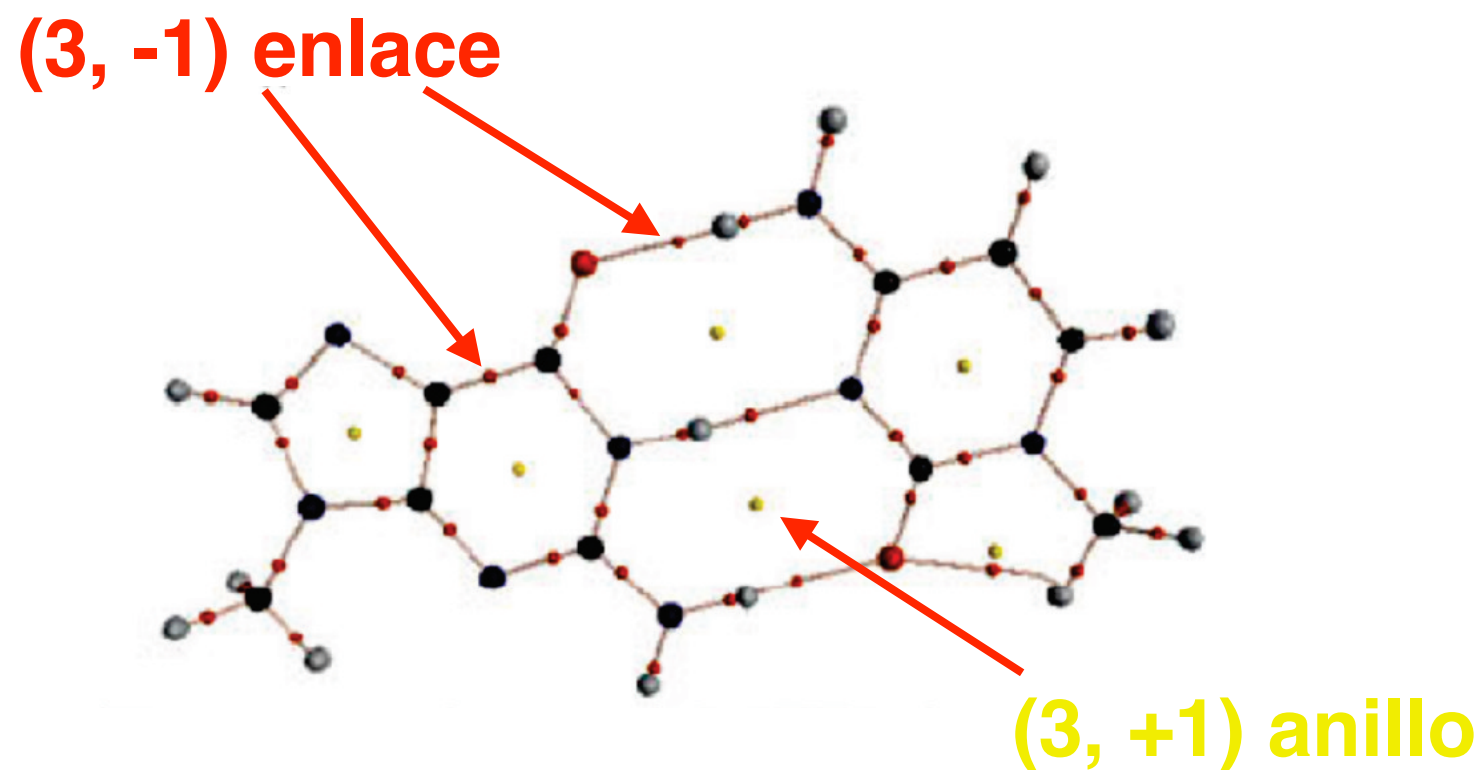
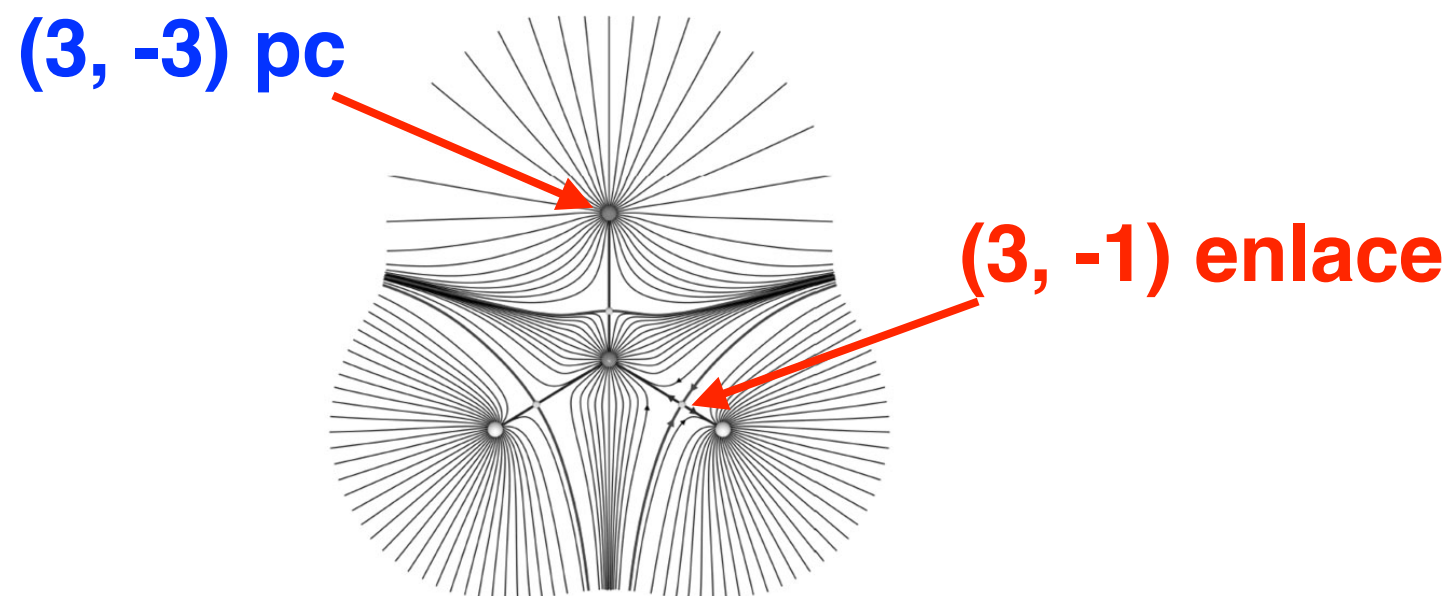
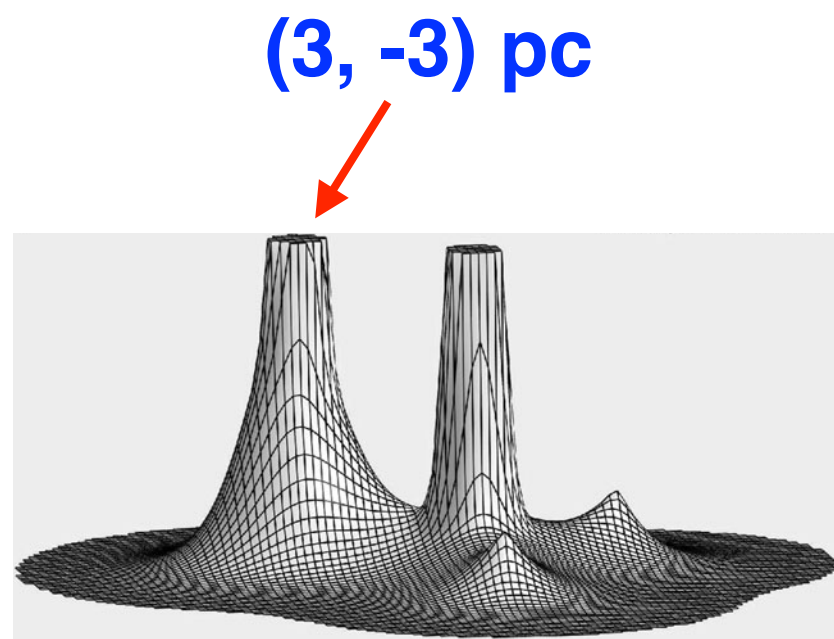
(3, -3) Esta asociado a posiciones nucleares.

(3, -1) Se encuentra entre dos núcleos enlazados químicamente.

(3, +1) Se encuentra en el interior de un anillo de átomos enlazados.

(3, +3) Se encuentra en el interior de una “jaula” de átomos enlazados.

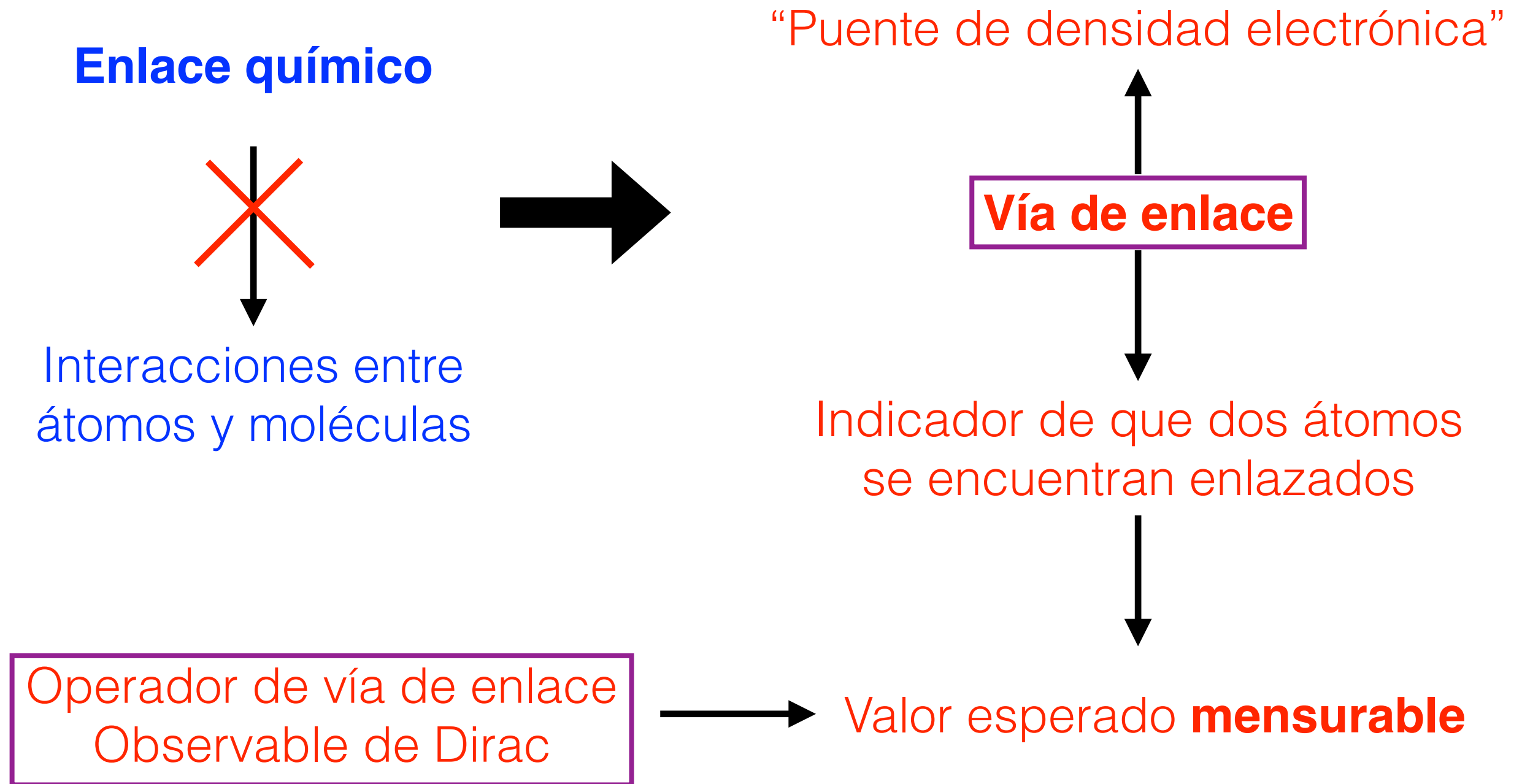
Definición de estructura molecular



Bader, R. F. W. (2010). "Definition of Molecular Structure: By Choice or by Appeal to Observation" *Journal Physical Chemistry A* **114**: 7431-7444.

Bader, R. F. W. (2011). "On the non-existence of parallel universes in chemistry" *Foundations of Chemistry* **13**: 1137.

Enlace químico versus vía de enlace

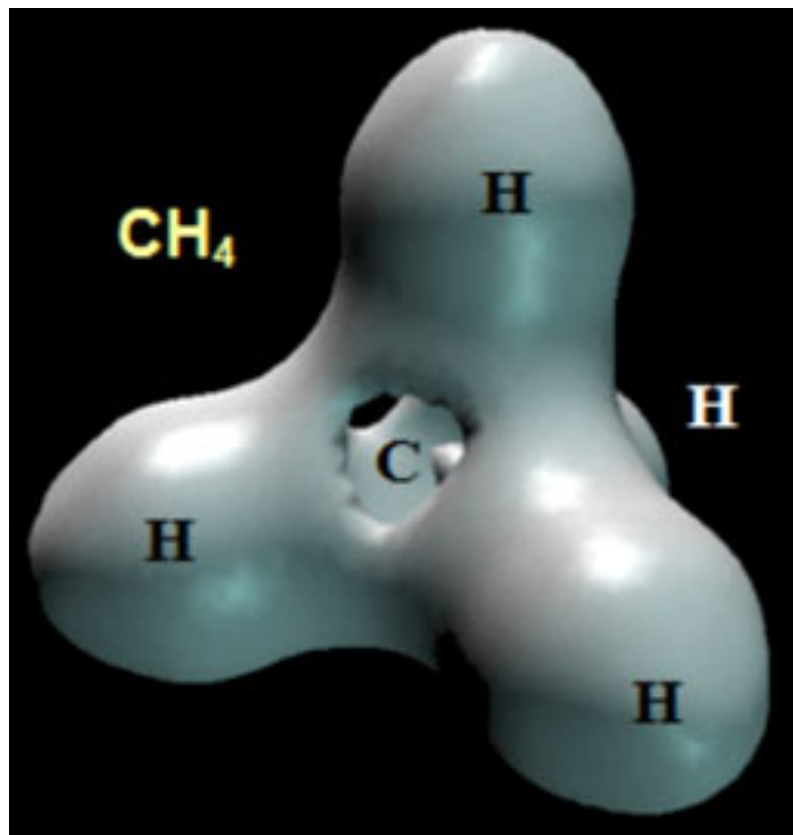


El Laplaciano de la densidad electrónica

$$L(r) = -\nabla^2 \rho(r)$$

(-) Concentración de carga

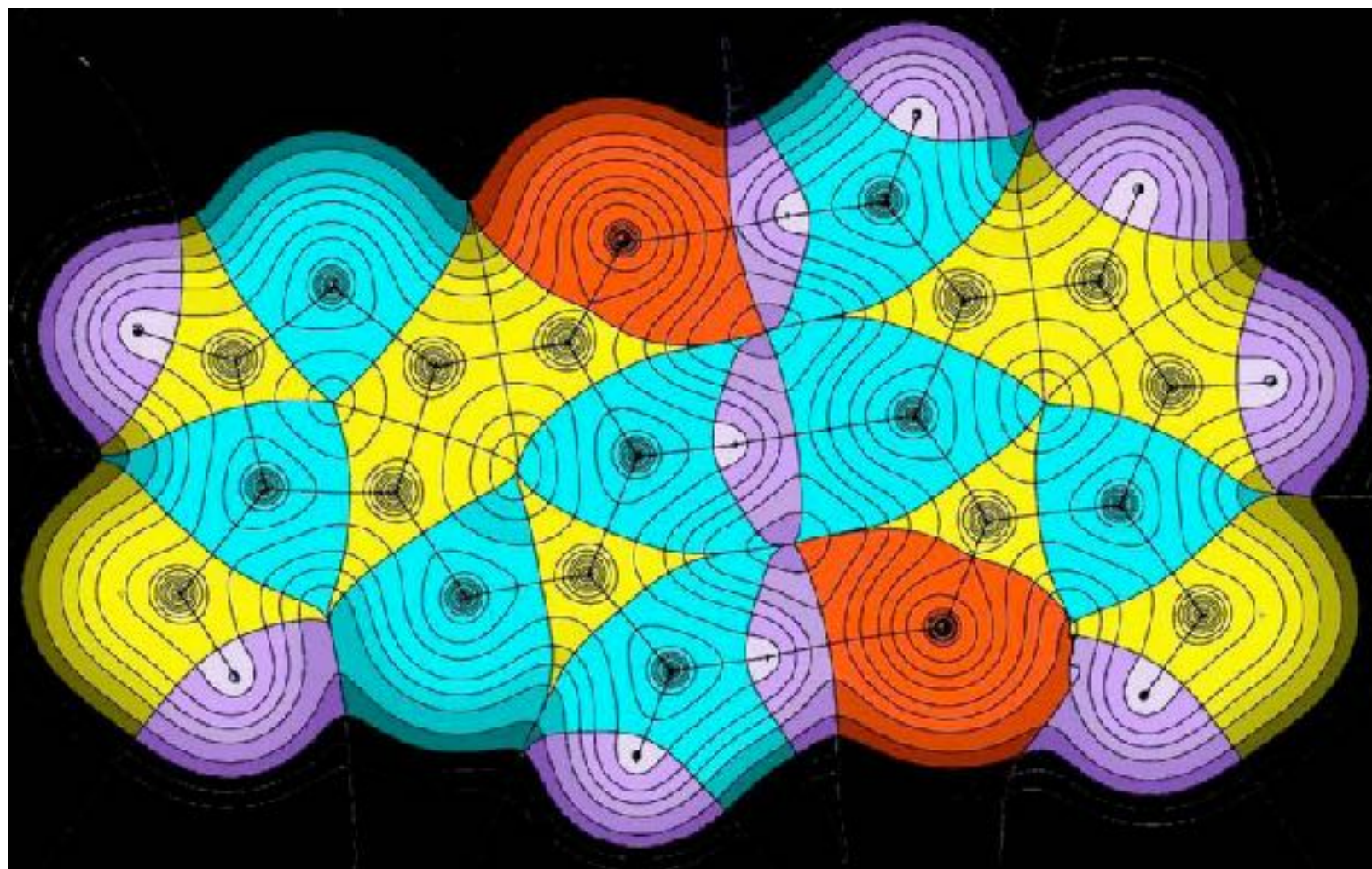
(+) Reducción de carga



Teoría ácido-base
de Lewis

Teoría de Repulsión de
Pares Electrónicos en la
Capa de Valencia

Gracias



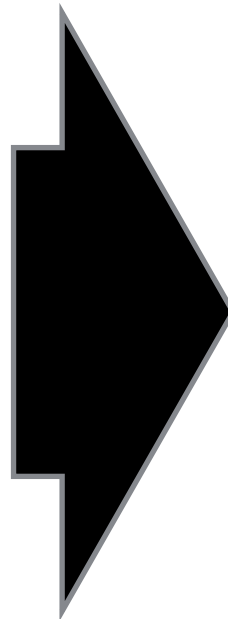
Apéndice

Ley aditiva de composición

Schwinger:

El operador de la integral de acción debe satisfacer la ley aditiva de composición.

$$\delta \dot{W}_{13} = \delta \dot{W}_{12} + \delta \dot{W}_{13}$$

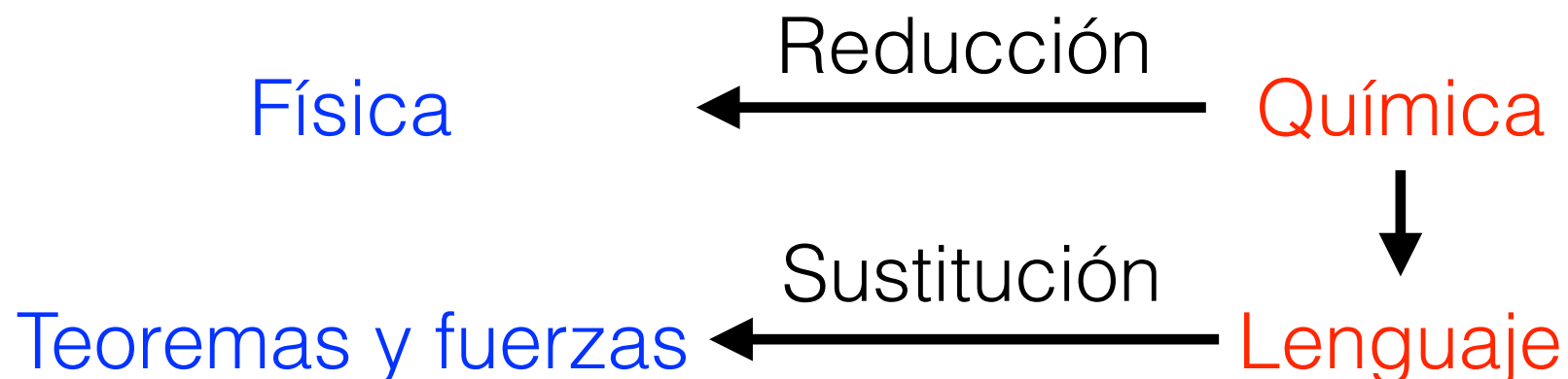


Asegura que el operador de la integral de acción pueda expresarse como una suma sobre los operadores para todos los sistemas abiertos (átomos) en una molécula.

$$\dot{W}_{12} = \sum_{\Omega} \delta \dot{W}[\Omega]_{12}$$

Reduciendo la química a la física

Richard Bader
TCAEM



Algunas posturas críticas

Hetema:

TCAEM es ciertamente sensible a la química y por ello juega un importante rol en el desarrollo de teorías químicas.

Ahlstrom:

El enfoque monista de la TCAEM rechaza una visión pluralista de la química, cuyo principal valor reside en la capacidad para realizar predicciones.

Bader, R. F. W. (2009). "Bond Paths Are Not Chemical Bonds" *Journal Physical Chemistry A* **113**: 10391-10396.

Bader, R. F. W. (2011). "On the non-existence of parallel universes in chemistry" *Foundations of Chemistry* **13**: 1137.

Hettema, H. (2013) "Austere quantum mechanics as a reductive basis for chemistry" *Foundations of Chemistry* **15**: 311-326.

Ahlstrom, T. (2016) "The function of the concept of the atom in the molecule" *International Society Philosophy of Chemistry, 20th Annual Symposium*