

Q.I. (1)



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas

ORIENTACION: ---

1er. CUATRIMESTRE: AÑO 1997

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: Estructura Electrónica de Compuestos de Coordinación

CODIGO: en trámite

PUNTAJE: propuesto 3 puntos.

PLAN DE ESTUDIO: -----

CARACTER DE LA MATERIA: -----

DURACION: dos semanas

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- *Teóricas: 10
- * Problemas: 10
- * Laboratorio: 5

TOTAL: 25

CARGA HORARIA TOTAL: 50 hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: -----

FORMA DE EVALUACION: Examen Final.

PROGRAMA ANALITICO:

- Estructura electrónica de compuestos de coordinación, incluyendo organometálicos.
- Construcción cuantitativa de diagramas de energía, utilizando la Teoría de Grupos y diferentes enfoques computacionales (Hückel, Hückel extendido, INDO, DFT).
- Aplicaciones a niveles d-d; teoría de campo ligando y modelo del solapamiento angular.
- Análisis de la composición de los orbitales moleculares; delocalización y porcentaje de metal y/o ligando. Evaluación de las energías de las transiciones espectroscópicas.
- Espectros ópticos y parámetros electroquímicos.
- Conexión teórica entre las energías de las transiciones electrónicas y los potenciales electroquímicos.
- Espectroscopia de procesos de transferencia de carga.

BIBLIOGRAFIA:

* Inorganic Electronic Spectroscopy; A.B.P. Lever , Elsevier, Amsterdam, 1a. edición (1968) y 2a. edición (1984).

[Signature]
Dr. J. A. Olabe

APROBADO POR RESOLUCION 00 1279/93

[Signature]