

Q I 2000
5

**UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES**

DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas

ORIENTACION: -----

CUATRIMESTRE: Segundo

AÑO: 2000

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: Simetría molecular. Su estudio a través de teoría de grupos **CODIGO:** nuevo

PUNTAJE: 3 puntos (propuestos)

PLAN DE ESTUDIO: AÑO 1987

CARACTER DE LA MATERIA: -----

DURACION: 10 semanas

HORAS DE CLASE SEMANAL:

* Seminarios teóricos-prácticos: 6 hs.

TOTAL: 6 horas

CARGA HORARIA TOTAL: 60 horas

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura en Cs. Químicas

FORMA DE EVALUACION: Examen final

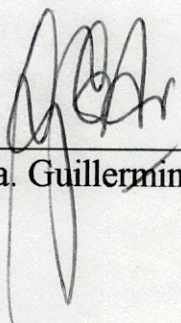
PROGRAMA ANALITICO:

- Importancia de las consideraciones de simetría en el tratamiento de moléculas. Teoría de grupos para su estudio.
- Definición de grupos. Propiedades. Subgrupos-clases. Grupos de simetría. Elementos y operaciones de simetría. Equivalencia. Relaciones.
- Grupos puntuales de simetría. Clasificación de moléculas en grupos puntuales. Clases de operaciones de simetría.

- Propiedades de matrices.
Representación matricial de grupos y de operaciones de simetría.
Representaciones reducibles e irreducibles. Metateorema de ortogonalidad.
Tablas de caracteres. Grupos cíclicos.
- Aplicación de teoría de grupos a problemas de química cuántica.
Función de onda como base de representaciones irreducibles. Funciones orbitales.
Producto directo. Probabilidad de las transiciones espectrales.
Combinaciones lineales adaptadas por simetría (SALC). Orbitales moleculares (OM) como combinación lineal de orbitales atómicos adaptados por simetría. Operadores de proyección
Propiedades de simetría de los OM. Factorización de las ecuaciones seculares.
Aplicación a distintos sistemas. Diagramas de correlación.
Orbitales híbridos. Esquemas de hibridación σ y π
- Desdoblamiento orbital en entornos de distinta simetría.
Teoría del campo cristalino/campo ligante
Diagramas de niveles de energía- Diagramas de Tanabe-Sugano
Reglas de selección- Transiciones electrónicas permitidas y prohibidas en complejos centrosimétricos y no-centrosimétricos.
- Vibraciones moleculares
Modos normales. Su simetría
Constantes de fuerza. Matrices G y F.
Reglas de selección.

Bibliografía:

- Chemical Applications of Group Theory; F. A. Cotton; Wiley Interscience, 2da edición, 1971
- Symmetry and Spectroscopy. An Introduction to vibrational and electronic spectroscopy; D.C. Harris y M.D. Bertolucci; Oxford University Press, 1978.


Dra. Guillermina Estiú


Dr. JOSE A. OLABE
DIRECTOR
DEPTO. QCA. INORG. ANAL. QCA. FIS.