



Q.I 2006  
(4)

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

---

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

**CARRERA:** Doctorado en Ciencias Químicas

**CUATRIMESTRE:** Primero

**AÑO:** 2006

**CODIGO DE CARRERA:** 51

**MATERIA:** Teoría de Grupos Aplicada a la Química

**CODIGO:** nuevo

**PUNTAJE:** 3 (tres)

**PLAN DE ESTUDIO:** -----

**CARÁCTER DE LA MATERIA:** -----

**DURACIÓN:** 8 semanas

**HORAS DE CLASE SEMANAL:**

- **Teóricas:** 6 hs
- **Seminarios:** 2 hs

**TOTAL:** 8 hs.

**CARGA HORARIA TOTAL:** 64 hs.

**ASIGNATURAS CORRELATIVAS:** Lic. en Cs. Químicas, Lic. en Cs. Físicas

**FORMA DE EVALUACIÓN:** 1 Parcial y 1 evaluación final por examen o por seminario.

**PROGRAMA ANALÍTICO:**

1. Simetría molecular y teoría de grupos:

Elementos de simetría. Operaciones de simetría. Combinación de elementos de simetría. Grupos puntuales de simetría. Clases de simetría. Representaciones de los grupos. Gran teorema de ortogonalidad. Tablas de caracteres. Reducción de representaciones.

2. Orbitales moleculares:

Orbitales adaptados de simetría. Simplificación del determinante secular en base a argumentos de simetría. Identificación de integrales no nulas. Compuestos lineales y cíclicos. Complejos inorgánicos.

3. Teoría del campo ligando:

Orbitales atómicos. Desdoblamiento en el campo ligando. Diferentes geometrías. Construcción de diagramas de energía.

4. Reacciones químicas:

Orbitales de frontera. Simetría de la transformación. Orbitales de reactivos y de productos. Conservación de la simetría y diagramas de correlación.

5. Espectroscopía:

Representación de la vibraciones. Representación de los estados electrónicos. Estados vibrónicos. Simetría de las vibraciones. Espectroscopía IR y Raman. Reglas de selección. Matriz de las constantes de fuerza.

6. Cristalografía:

Red espacial. Simetría cristalográfica. Elementos adicionales de simetría en cristales. Grupos espaciales. Espectroscopía de rayos X.

**Bibliografía:**

- Cotton, F. A. Chemical applications of Group Theory. Wiley. 1990.
- Ferraro, J. R., Ziomek, J. S. Introductory group theory and its applications to molecular structure. Plenum Press New York, NY, 1969
- Baumann, R. P. Absorption spectroscopy. Wiley New York, 1962
- Barrow, G. M. Introduction to molecular spectroscopy. McGraw-Hill New York, 1962
- Klessinger, M., Michl, J. Excited states and photochemistry of organic molecules. VCH. 1995.
- Michl, J., Thulstrup, E. W. Spectroscopy with polarized light. VCH. 1995.
- Atkins, P. W. Quanta: a book of concepts. Oxford: Oxford University Press, 1991
- Hall, Lowell H. Group theory and symmetry in chemistry. McGraw-Hill, 1969

Prof. Dr. E. San Román

Prof. Dr. P. Aramendia

Prof. Dra. L Dicelio

Dr. MARTÍN NEGRÍ  
DIRECTOR ADJUNTO  
D Q.I.A.Q.F./FCEY