

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
Instituto de Química Orgánica

1390
1980

QUIMICA ORGANICA CUANTICA

2º Cuatrimestre 1980

Profesores: N.Sbarbati Nudelman, H. Grimberg, R. Contreras

1. FUNDAMENTOS DE LA MECANICA CUANTICA

1.1 Ecuación de Schrödinger. 1.2 La aproximación adiabática.
1.3 El método variacional. 1.4 La aproximación orbital. 1.5
Correlación de spin. 1.6 Determinantes de Slater. 1.7 Confi-
guraciones electrónicas y estados electrónicos. 1.8 Matriz
densidad.

2. TEORIA DEL CAMPO AUTOCONSISTENTE DE ORBITALES MOLECULARES

2.1 Expresión de la energía para las configuraciones de capa
cerrada. 2.2 Derivación de las ecuaciones de Hartree-Fock.
2.3 Hipótesis del método de Hartree-Fock. 2.4 Teorema de
Koopman. 2.5 El método LCAO. Proyección del espacio de Hilbert
sobre bases finitas. 2.6 Hibridización. 2.7 Ecuaciones de
Roothaan-Hall para sistemas de capa cerrada. Estados excita-
dos en sistemas de capa cerrada. 2.8 Interacción de configu-
raciones. 2.9. Matriz densidad en la aproximación LCAO. 2.10
Análisis de población. 2.11 Configuración de capa abierta.
2.12 Localización de orbitales. 2.13 Resolución de las ecua-
ciones de Roothaan-Hall, 2.14 Métodos "ab-initio".

3. MÉTODOS APROXIMADOS PARA GRANDES MOLECULAS

3.1 Niveles de aproximación. 3.2 Moléculas conjugadas. 3.3
Separación sigma-pi. 3.4 Derivación de las ecuaciones secu-
lares de Hückel. 3.5 Método de Hoffman (Hückel extendido).
3.6 Método de Pariser-Parr-Pople. 3.7 Carga, órdenes de unión.

4. APLICACIONES DEL METODO DE HUCKEL

4.1 Teoría orbital molecular de las propiedades magnéticas
de sistemas aromáticos. 4.2 Ecuaciones seculares modificadas
en presencia de un campo magnético externo. 4.3 Estados exci-
tados de sistemas conjugados. 4.4 Reglas de selección de
transiciones electrónicas. 4.5 Polarización de bandas de ab-
sorción. 4.6 Intensidades de transiciones espectrales y vida
media de estados excitados. 4.7 El principio de Frank-Condon.
4.8 Polienos lineales. El método del electrón libre.


Dr. EDUARDO G. GROS
Director Dto. Química Orgánica

///2

5. MÉTODOS PERTURBACIONALES

5.1 Principios básicos. 5.2 Perturbaciones de primero y segundo orden. 5.3 Método de Dewar. 5.4 Perturbaciones intramoleculares. 5.5 Hidrocarburos alternantes. 5.6 Densidad de carga y órdenes de unión en hidrocarburos alternantes. 5.7 Perturbaciones intermoleculares. Ejemplos

6. TEORÍA CUÁNTICA DE LA REACTIVIDAD QUÍMICA

6.1 Reactividad química en la aproximación del estado polarizado. 6.2 Aproximación del estado activado. 6.3 Complejo y energías de localización. 6.4 Número de reactividad de Dewar. 6.5 Teoría del orbital frontera y superdelocalizabilidad. 6.6 Reacciones pericíclicas. Derivación de las reglas de selección de Woodward-Hoffmann mediante diversas aproximaciones: teoría orbital frontera, aproximación del estado de transición aromático; diagramas de correlación de reacciones electrocíclicas y de cicloadición.-

7. ORBITALES MOLECULARES QUE INCLUYEN TODOS LOS ELECTRONES DE VALENCIA


7.1 Métodos semiempíricos 7.2 Niveles de aproximación. 7.3 Discusión de los métodos CNDO, INDO, MINDO. 7.4 Criterios de parametrización. 7.5 Bondades y limitaciones de cada método. 7.6 Modificaciones recientes introducidas en cada uno de estos métodos.

8. APLICACIONES DE MÉTODOS SEMIEMPIRICOS

8.1 Geometrías Moleculares; 8.2 Modelo de Pople-Gordon. Distribución de Cargas Electrónicas. 8.3 Desplazamiento químico. 8.4 Interacciones spin electrónico-spin nuclear. 8.5 Interacciones spin nuclear-spin nuclear 8.6 Técnica GINDP. Momentos dipolares. 8.7 Distancias de Unión. Orden de Enlace. 8.8 Barreras Rotacionales Conformaciones. Efecto Anomérico. 8.9 Puente de hidrógeno. 8.10 Calores de formación.-

Durante el desarrollo del curso se discutirán y usarán los programas de mayor aplicación. A saber:

CNINDO/2 (QCPE # 141). CNINDO Versión 3.3.3. (Cambridge)
CNDO 2/3R (QCPE # 261). CINDOM (QCPE # 240). OPTMO (QCPE #
217). GEOMIN (QCPE # 312). CNLVS-CI (QCPE # 174) FINITE
(QCPE # 224)


Dr. EDUARDO G. GROS
Director Dto. Química Orgánica