

1963  
45

## PROGRAMA DE QUÍMICA ORGÁNICA "B"

2º Cuatrimestre 1963

Dr. Jorge Comín

### III- Método de los orbitales moleculares en Química Orgánica

Mecánica cuántica. Ecuación de Schrödinger. Orbitales atómicos, atomo de hidrógeno, números cuánticos. Atomos polielectrónicos, llenado de orbitales. Hibridación. Uniones químicas.

Moléculas. Imposibilidad de resolver la ecuación de Schrödinger. Métodos aproximados a simplificaciones. Combinación lineal de orbitales atómicos. Ecuaciones y determinante secular. Integrales de Coulomb, de superposición y de resonancia. Método de Hückel.

Molécula de hidrógeno. Cálculo de energías y orbitales. Tipos de orbitales moleculares. Moléculas poliatómicas no conjugadas y conjugadas. Orbitales moleculares di y policéntricos. Planteo y solución de determinante y ecuaciones seculares. Cálculo de energías y de orbitales. Simplificación mediante empleo de condiciones de simetría molecular.

Índices energéticos: energía de deslocalización, energía de orbital molecular ocupado más alto y desocupado más bajo, energías de transición, energía de unión. Índices estructurales: índice de carga, índice de unión, índice de valencia libre. Diagramas moleculares.

Heteroátomos y sustituyentes: planteo formal, distintos heteroátomos, valores de  $\alpha$  y  $\beta$ . Orbitales moleculares no ligantes de radicales alternantes. Propiedades características, cálculo de coeficientes, de índices de carga y de energías de conjugación.

Reactividad química. Diversos enfoques del problema. Métodos de molécula aislada. Métodos de localización. Diversos tipos de reacciones y métodos aproximados basados en orbital molecular no ligan te.

### BIBLIOGRAFÍA

- C.A.Coulson "Valence", Oxford, 1962  
J.D.Roberts "Molecular Orbital Calculations", New York 1961  
A. Streitwieser "Molecular Orbital Theory for Organic Chemists" New York, 1961.  
R.Daudel, R.Lefebvre and C. Moser "Quantum Chemistry, Methods and Applications" New York, 1959.  
B. Pullman and A. Pullman, "Quantum Biochemistry" New York 1963.  
H.C.Longuet-Higgins, Proc. Chem. Soc. 157 (1957).  
R.D.Brown, "Quat. Rev. 6, 63 (1952).