

Programa 1966. (~~Desde entencer en se dicta~~)

1. Concepto de red cristalina y celda unitaria. Grupos espaciales y sistemas cristalinos. Planos cristalográficos. Difracción por red bidimensional y tridimensional. Ley de Bragg. (2 clases).
2. Factor de difracción atómica, factor de estructura. Determinación de simetría y grupo espacial. Síntesis de Fourier. Resolución. Problema de las fases. Red recíproca (2 clases).
3. Determinación de estructuras. Síntesis de Patterson, átomo pesado, reemplazo isomorfo. Refinamiento, error (1 clase).
4. Cristales iónicos. Empaquetamiento cerrado. Energía reticular. Constante de Madelung. Ciclo de Born-Haber. Tipos de Estructura:  $\text{ClNa}$ ,  $\text{ClCs}$ , fluorita, zincblenda, rutilo, espineles, silicatos. Factores que determinan la estructura, relación de radios. Covalencia y Fuerzas de Van der Waals (2 clases).
5. Paramagnetismo. Interacción momento magnético del átomo con campo externo. Anulación de momento orbital angular en complejos. Acoplamiento spin-órbita. Estereoquímica y magnetismo. Métodos de medición EPR y NMR. (2 clases).
6. Magnetismo en sólidos. Ley de Curie, Curie-Weiss. Ferromagnetismo. Antiferromagnetismo, ferrimagnetismo. Ejemplos de estructuras magnéticas. Difracción de neutrones. Transición de fase (3 clases).
7. Función de onda átomo de hidrógeno. Átomos multielectrónicos, función radial de Slater, repulsión interelectrónica, niveles de energía y notación espectroscópica de estados. Propiedades periódicas.
8. Función de onda de molécula  $\text{H}_2^+$ . Método variacional y de perturbación. Función de onda de  $\text{H}_2$ , orbitales moleculares (MO) y unión de valencia (VB). Molécula diatómica homonuclear, aproximación átomo unido y átomos separados, descripción MO y VB de la molécula. Idem molécula diatómica heteronuclear. Carácter iónico y momento dipolar. Electronegatividades.
9. Notación espectroscópica de moléculas. Nociones de simetría, grupos puntuales. Simetría de funciones, anulación de integrales de funciones. Nociones de representación y tabla de caracteres.
10. Molécula poliatómica, criterio de superposición, hibridización, estereoquímica, configuración más probable (efecto de electrones no unidos). Unión múltiple y orbitales no localizados, orbitales triséricos. Ejemplos.
11. Ejemplos de configuración con hibridización involucrando orbitales d. Estructura de interhalógenos, de compuestos del grupo 6 y del grupo 5, (1 clase).
12. Complejos de metales de transición. Campos cristalinos, campos ligantes (LCAO). Semejanza y diferencia. Estereoquímica de complejos y relación con configuración. Complejos de spin apareado y spin libre.
13. Espectroscopía. Características de radiación electromagnética. Zonas del espectro. Absorción y emisión inducidas. Espectroscopía de absorción en



zona microonda, IR, visible y UV. Espectroscopía Raman. Reglas de selección. (2 clases).

14. Interpretación de espectros de complejos. Diagramas de Orgel y Tanabe Sugano. Serie espectroquímica y nefelauxética. Relación entre espectros y estereoquímica ( 2 clases).
15. Estabilidad de complejos en solución acuosa. Equilibrios. Polarografía. Quelatos. Isomería óptica geométrica. Solventes no acuosos ( 2 clases).
16. Ejemplos de complejos de ligantes unidos por N, S y O ( $H_2O$ ,  $NH_3$ ,  $SCN^-$ , tiourea,  $NO_3^-$ , etc.) y metales tipo 'a' y 'b'. Factores que determinan su estereoquímica ( 1-2 clases).
17. Complejos con ligantes aceptores. Aril y Alquil fosfinas y arsinas. Carbonilos. Nitrosilos. Cianuros. Estereoquímica y propiedades. Hidruros de complejos (1-2 clases).
18. Complejos organo-metálicos. Pentadienilos. Etilenos. Bencenos, etc. ( 2 clases).



T E X T O S .

HARVEY, K.B. & PORTER, G.B., Introduction to Physical Inorganic Chemistry.  
Ed. Addison-Wesley. (nivel adecuado para bolillas 7-8, 10-12,  
y 6 ).

COULSON, Valence - Oxford University Press, 2nd Ed., (nivel excelente para  
bolillas 7- 12 ).

WHEATLEY, Molecular Structure. Oxford University Press (nivel adecuado para  
bolillas 1 - 3,; y difracción de neutrones).

BARROW, Introduction to Molecular Spectroscopy, McGraw-Hill ( nivel adecuado  
para bolillas 13-9'; y notación espectroscópica).

Artículos de CARBIN, J. Chem. Ed., 40, 135 (1963).

GRAY, J. Chem. Ed., 41, 2 (1964).

cubren las bolillas 14;

LEWIS & WILKINS , Modern Coordination Chemistry. Artículo de Dunn cubre  
bol. 14; Artículo de Figgis cubre bol. 5.

COTTON, Chemical applications of group theory. Ed. Interscience (nivel  
excelente para bolillas 9 - 12 y 14).

NYHOLM, Quart. Rev., Bol. 5.

ORGEL, Chemistry of Transition Metals, (Bol. 12, 14, parte de 15, 17 y 18).