



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

SEMINARIO DE

ORBITALES MOLECULARES

Dirigido por: Dra. Olga Brioux de Mandirola

BOLILLA N° I: Teoría del campo autoconsistente con orbitales moleculares. La molécula de hidrógeno. Consideraciones generales del problema de muchos electrones. Los métodos SCF y LCAO-SCF. Aplicación a pequeñas moléculas.

BOLILLA N° II: Tratamiento de moléculas no-saturadas. La aproximación de electrones π . El método de Hückel. El método de Goeppert-Hayer. El método de Sklar. El método de Hückel extendido. Aplicación a la molécula de etileno, Benceno, otras moléculas orgánicas y moléculas no-hidrocarbonadas. Otros métodos para electrones π .

BOLILLA N° III: Teorías de la aproximación de Orbitales Moleculares. Introducción. Desprecie completo del recubrimiento diferencial (CNDO). El CNDO/1 parametrización. El CNDO/2 parametrización. Desprecie intermedio del recubrimiento diferencial (INDO). Desprecie del recubrimiento diferencial diatómico (MINDO).

BOLILLA N° IV: Aplicación de la teoría aproximada de orbitales moleculares: Geometría molecular y distribución de cargas electrónicas. Interacciones Electrones-Spin-Nuclear-Spin. Interacciones Nuclear-Spin-Nuclear-Spin. Otras aplicaciones.

BOLILLA N° V: Estudio de la aplicabilidad de la computación para resolver estos métodos aproximados. Confección en Fortran IV de un programa para cálculos en los métodos CNDO e INDO.

BIBLIOGRAFIA:

- Approximate Molecular Orbital Theory - John A. Pople, David L. Beveridge (McGraw-Hill Book Company)
- Computing Methods in Quantum Organic Chemistry - H.H. Greenwood (Wiley-Interscience)
- The Quantum Theory of Molecular Electronic Structure - Robert G. Parr (W.A. Benjamin)
- Quantum Chemistry, Methods and Applications - R. Daudel, R. Lefebvre, C. Moser (Interscience Publishers Ind.)
- Salem L.-The Molecular Orbital Theory of Conjugated System - (W.A. Benjamin)
- Pople J.A., Santry, S.A. Segal - (J.C.P. 41, 5129 (1965))
- Pople J.A., S.A. Segal (J.C.P. 41, 5136 (1965))

DURACIÓN: un cuatrimestre

Bdo. de TRIGOYEN 276

37 - 1158 - 59 - 50

38 - 6647

37 - 0231

PARANÁ 1133

41 - 0202

42 - 3909

BUENOS AIRES



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

TIEMPO POR SEMANA: 4 horas

EXAMEN FINAL: Consiste en la escritura de programas relacionados con el método de interacción de configuración y CMO.