



FACULTAD DE CIENCIAS

## CURSO DE POSTGRADO

<b>Nombre del curso</b>	Fisicoquímica Inorgánica (Inorganic physical chemistry)
<b>Tipo de curso</b> (Obligatorio, Electivo, Seminario)	Electivo
<b>Nº de horas totales</b> (Presenciales + No presenciales)	16.5 hrs.
<b>Nº de Créditos</b>	10 créditos
<b>Fecha de Inicio – Término</b>	25 agosto – diciembre
<b>Días / Horario</b>	A determinar
<b>Lugar donde se imparte</b>	Departamento de Química
<b>Profesor Coordinador del curso</b>	Prof. Dr. Irma Crivelli
<b>Profesores Colaboradores o Invitados</b>	
<b>Descripción del curso</b>	<p>El curso está orientado a profundizar en forma conceptual y haciendo uso de la Teoría de Grupos, el estudio de la unión química en los compuestos de coordinación. <b>En lo fundamental, está orientado a la aplicación de tales conceptos</b> en el área de la espectroscopia electrónica y a su aplicación a temas de investigación actuales (celdas solares, ONL, fotoquímica, emisión), considerándose también algunos tópicos que puedan ser de interés de los estudiantes.</p> <p>El lenguaje fundamental es el lenguaje de la teoría de grupos y de la mecánica cuántica básica. Derivado de ello, el programa contempla un capítulo de Teoría de grupos, presentado en forma conceptual.</p>
<b>Objetivos</b>	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Conocer los teoremas y fundamentos de la Teoría grupos para la descripción de simetría de orbitales atómicos y moleculares de una molécula.</li><li>2. Conocer los estados (términos espectrales) de sistemas multielectrónicos</li><li>3. Aplicar los conceptos de enlaces a la teoría del campo cristalino y campo ligante.</li><li>4. Conocer las reglas de selección para transiciones en sistemas complejos con metales de transición</li></ol>

## Contenidos

**1.-TEORÍA de GRUPOS:** Teoremas y definiciones básicas de la teoría de grupo. Elementos y operaciones de simetría. Multiplicación de operaciones de simetría. Grupos puntuales de simetría. Clasificación sistemática de moléculas. Representaciones de grupos. Propiedades de los caracteres de las representaciones. Tablas de caracteres. Reducción de representaciones reducibles Producto directo. Funciones de estado y simetría molecular. Funciones de estado como base para las representaciones irreducibles. La simetría de los orbitales atómicos y moleculares en una molécula.

### **2.-ESTADOS EN SISTEMAS MULTIELECTRONICOS**

Obtención de los términos espectrales derivados de una configuración en la aproximación de Russell Sanders, base para la interpretación de espectros. Su número con relación a la simetría de la molécula. Representación de los términos en el lenguaje de la teoría de grupos y su sentido físico desde la mecánica cuántica

### **3.-ESTUDIO DE LA UNION QUIMICA EN COMPLEJOS DE METALES DE TRANSICION.**

a) **Teoría del campo cristalino y de Campo Ligante :** Bases conceptual de la teoría. Interacción electrónica y campo cristalino: Acoplamiento spin-órbita Formulismo de campo fuerte y campo débil. Diagramas de desdoblamiento. Diagramas de Orgel y diagramas de Tanabe y Sugano. Diagramas de correlación de términos. Desdoblamiento según el grupo puntual al que pertenece el sistema. Efecto Jahn Teller

b) **Teoría de Orbitales moleculares:** diagramas de desdoblamiento en simetría octaédrica con ligantes donores aceptores y sin posibilidad de interacción pi. Relación del carácter del ligante con la fuerza del campo cristalino. La serie espectroquímica y la serie nefelauxética

**4.- INTERPRETACIÓN de ESPECTROS ELECTRÓNICOS:** Tipos de transiciones.

a) Reglas de selección. Espectros de acuo complejos.

	<p>Introducción e interpretación del valor del parámetro B de Racab. Limitaciones de la interpretación.</p> <p>b) La transición de transferencia de carga: características.</p> <p><b>4.- APLICACIONES desarrollado en bases a publicaciones</b></p> <p><b>a)</b> Presentación del uso de los compuestos de coordinación como tinturas en el aprovechamiento de la energía solar (<b>celdas solares</b>). Fundamento y requisitos</p> <p><b>b)</b> los compuestos de coordinación y su aplicación en el área de la <b>ONL (óptica no lineal)</b></p>
<p><b>Modalidad de evaluación</b></p>	<p>(Pruebas de cátedra, tareas y eventuales presentaciones de seminarios)</p>
<p><b>Bibliografía</b></p>	<p><b>F. Albert Cotton : Chemical Applications of Group Theory,</b>  <b>A.B.P. Lever, Inorganic Electronic Spectroscopy, 2a. Edición, 1984,</b>  <b>Elsevier.</b>  <b>fotocopias</b>  <b>Entrega de material vía</b>  <b>A la que se pueden sumar otros textos de teoría de grupos y de</b>  <b>fisicoquímica Inorgánica de los que pueda disponer el estudiante</b>  <b>Las aplicaciones se trabajarán en base a la presentación de</b>  <b>publicaciones.</b></p>