

PROGRAMA DE DOCTORADO EN QUIMICA

Programa de Curso.

Nombre : Química Inorgánica Avanzada
Código : QI-752
Nivel : Primer año de postgrado
Requisitos : Autorización Docente
U.D. : 15 (4,5-1,5-9)

PROGRAMA

1. ALGUNOS ASPECTOS TEÓRICOS.

(20 hrs.)

1.1 Descripción de sistemas atómicos.

Sistemas monoeléctronicos: funciones de densidad de probabilidad, funciones de densidad de radios y energías de orbitales atómicos. Funciones angulares y forma de orbitales atómicos. Funciones de densidad total.

Sistemas multielectronicos: configuraciones electrónicas y sistema periódico. Orbitales de Slater y sus usos. Configuraciones y términos atómicos.

1.2 Descripción de sistemas moleculares.

Modelo de repulsión de pares de electrones. Descripción del enlace químico a través de orbitales atómicos dirigidos. Utilización de conceptos de simetría. Orbitales atómicos dirigidos y propiedades moleculares. Distancias de enlace. Fuerzas de enlace, momentos dipolares, energías de enlace.

Descripción del enlace químico a través de orbitales atómicos deslocalizados. Funciones de probabilidad y orbitales moleculares. Principios para construcción e interpretación de orbitales molecu-

lares. Moléculas simples: H_2 ; BeH_2 ; HCl . Moléculas diatómicas de elementos representativos. Orbitales moleculares y geometría molecular.

2. ELEMENTOS REPRESENTATIVOS

(22 hrs.)

2.1 Interacciones Dador-Aceptor.

Tipos de aductos. Enlaces por hidrógeno. Ácidos y bases de no metales.

2.2 Energética y estructura de compuestos de elementos representativos.

Estimación de espontaneidad de reacciones químicas. El concepto de estabilidad química.

Calores de reacción, energías de enlace. Estabilización de estados altos de oxidación.

Compuestos iónicos. Modelo iónico. Energías reticulares. Estequiometría y estructura. El concepto de radio iónico y estructuras reticulares, compuestos parcialmente covalentes.

Principios útiles en síntesis. Estados de oxidación de cationes. Agentes fluorantes. Tamaño iónico y separación de compuestos desde soluciones.

Compuestos no metálicos. Compuestos de boro y aluminio; de carbono y silicio: nitrógeno y fósforo; oxígeno y azufre, halógenos; gases nobles.

2.3 Mecanismos de reacción.

Expresión e interpretación de velocidades de reacción. Cinéticas de 2º orden; pseudo primer orden y primer orden.

Diferentes tipos de reacciones. Sistemas con un par de electrones de valencia (hidrógeno); 3 pares de electrones de valencia (boro); tetravalentes (boro, silicio, nitrógeno y fós-

foro, halógenos); pentavalentes (fósforo y azufre).

3. METALES DE TRANSICION

(30 hrs.)

3.1 Conceptos fundamentales en la química de compuestos complejos de los metales de transición.

Introducción: lenguaje en la química de transición.

Propiedades generales espectroscópicas y magnéticas de los complejos de iones de elementos de transición.

El modelo de los orbitales moleculares. Descripción general de estructuras ML_6 y ML_4 . El modelo de solapamiento angular. Energía de estabilización por el campo de los ligandos y estructura molecular. Distorsiones Jahn-Teller a la simetría octaédrica.

Estados electrónicos y espectros. Estados fundamental, excitado, transiciones electrónicas, serie espectroscópica, complejos paramagnéticos.

3.2 Aspectos estructurales.

Compuestos con centros metálicos con números de coordinación bajos, poliedros con alto número de coordinación.

3.3 Mecanismos de reacción y métodos de síntesis.

Reacciones de transferencia electrónica. Mecanismos de transferencia electrónica. Reacciones de transferencia de esfera externa. Reacciones de transferencia de esfera interna. Transferencia de 2 electrones. Reacciones no complementarias.

Reacciones de sustitución. Reacciones de desplazamiento en compuestos cuadrados planares. Reacciones de sustitución en compuestos octaédricos. Síntesis de compuestos de coordinación por reacciones de sustitución.

3.4 Química de compuestos organometálicos.

Transición de la química de metales de transición clásica a la de compuestos organometálicos. Las reglas de los dieciseis y de los dieciocho electrones.

Ligandos orgánicos dadores δ
Ligandos orgánicos dadores π

EVALUACION

Se efectuarán controles y un examen final.

REFERENCIAS

Texto Guía: "Química Inorgánica" K.F. Purcell & T.C. Kotz Ed.
Reverté, 1979.