

Q0209 Química Inorgánica II - Plan 2013

Correlatividades Fisicoquímica II y Química Inorgánica

Horas de dictado: Asignatura cuatrimestral, 8 horas semanales. Dictada en ambos cuatrimestres

Programa de Química Inorgánica II - 2018

1. Simetría Molecular. Análisis de Simetría. Aplicaciones de la simetría. Polaridad. Quiralidad. Simetría Orbital. Interpretación de la Tabla de Caracteres. Construcción de orbitales moleculares. Modos Normales. Consideraciones de Simetría.
2. Estructura y Enlace. Teoría del Enlace de Valencia. Moléculas diatómicas homonucleares. Teoría de Orbitales Moleculares. Las aproximaciones de la Teoría. Orbitales enlazantes y antienlazantes. Espectros fotoelectrónicos. Desarrollo de la espectroscopia fotoelectrónica. Efecto fotoeléctrico. Desarrollo histórico. Desarrollo de la espectroscopia fotoelectrónica de rayos X. ESCA. Espectroscopia Fotoelectrónica Ultravioleta UPS. Transiciones de ionización. Definición de estados. Descripción de la superficie de energía potencial para la ionización de H_2 . Ejemplo del N_2 . Modelos para describir la estructura electrónica molecular. Estructura vibracional/rotacional. Descripción de la superficie de energía potencial para la ionización de hidrógeno. Integral de solapamiento vibracional. Carácter enlazante de los orbitales. Modelo equivalente del core. Medidas cuantitativas del cambio de geometría. Detalles experimentales de la PES. Fuente de radiación sincrotrón. Importancia de la fuente fotónica. Diferentes analizadores de la energía cinética electrónica. Fotoexcitación. Fotoionización. Procesos radiactivos y no radiactivos del aluminio excitado electrónicamente. Autoionización. Procesos Auger. Fragmentación ultrarrápida. Disociación ultrarrápida. Espectroscopia PEPICO. Espectroscopia PEPIICO. Espectro total de iones. Espectro parcial de iones. Ejemplos seleccionados de diferentes compuestos moleculares. Estudios electrónicos sobre complejos de coordinación con ligandos del tipo de los xantatos en los bordes de absorción de rayos X de la región cercana al borde de la capa K de S, Ni y Mn (XANES). Complemento con UV-Vi, Raman Resonante y complemento de cálculos computacionales TD-DFT. Moléculas diatómicas heteronucleares. Orbitales Moleculares constituidos por átomos de diferentes elementos. Complejos moleculares. Moléculas Poliatómicas. H_3^+ , NH_3 . Diagramas de Walsh. Teoría de orbitales Moleculares para Sólidos. Formación de bandas por solapamiento orbital. Empleo del análisis de los resultados provenientes del espectro fotoeléctrico y de

diagramas de rayos X. Aisladores. Semiconductores. Semiconductores Intrínsecos y extrínsecos. Conductores. Superconducción.

3. Estructura de sólidos. Celda unidad y descripción de la estructura cristalina. Empaquetamiento compacto de esferas. Huecos en esferas compactos. Estructura de metales. Técnica de rayos X. Politipismo. Estructuras no compactas. Polimorfismo. Aleaciones. Sólidos iónicos con diferentes estequiometrías. Análisis de estructuras (radios iónicos, relación de radios, mapas estructurales). Energética del enlace iónico. Energía reticulares y consecuencias derivadas. Ciclo de Born-Haber. Estabilidad térmica y de los estados de oxidación. Solubilidad.
4. Propiedades de los sólidos. Defectos. Origen de las imperfecciones.. Clases. Compuestos no estequiométricos.. Óxidos y Fluoruros típicos. Defectos y no- estequiometría. Conductividad eléctrica. Espinelas. Perowskitas. Superconductores. Vidrios. Su formación. Compuestos del tipo MS_2 e intercalación. Estructura.
5. Diagramas de Orgel. Modelos. Interacción de los orbitales d con ligandos de diferentes simetrías. Diagramas de energía para diferentes configuraciones electrónicas. Espectros electrónicos. El espectro electrónico de los átomos.
6. Términos espectroscópicos. Parámetros de Racah. Campos fuertes y débiles. Diagramas de Tanabé Sugano. Serie nefelaucética. Bandas de transferencia de carga. Espectroscopias vinculadas: UV y Raman. Espectro de RR (Raman Resonante). Su aplicación al estudio básico de complejos, análisis químico y arte. Luminiscencia. Resonancia paramagnética electrónica. Química Bioinorgánica.
7. Generalización de procesos fotoquímicos. Estados electrónicos. Fenómenos vinculados. Estudios estructurales asociados. Técnicas de determinación. Difracción de electrones.
8. Algunos aspectos avanzados de la química de los elementos representativos. El grupo del oxígeno. Propiedades. Oxígeno Singlete. Reacciones. Azufre. Características salientes del elemento y sus compuestos. Propiedades. Reacciones. Aplicación de técnicas vibracionales. Ejemplos seleccionados. Química de los elementos actínidos, lantánidos y transactínidos.

Trabajos Prácticos

El objetivo que se persigue es la familiarización del alumno con nuevas experiencia sintéticas en el vasto campo de la química inorgánica, utilizando sustancias en todos los estados de agregación caracterizando eductos y productos por las técnicas y metodologías modernas. Se utilizarán métodos difractométricos, espectroscopia vibracional, electrónica y resultados

provenientes de técnicas útiles según los casos bajo análisis. El curso se asienta sobre una amplia discusión de los temas teóricos y prácticos impartidos en trabajos de seminarios.

Bibliografía

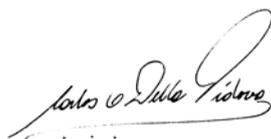
- F.A.Cotton, G. Wilkinson, C. Murillo, M. Bochmam, **"Advanced Inorganic Chemistry"**, 6th Edition, J.willey and Sons, New York, 1999.
- N.N.Greenwood, **"Cristales Iónicos, Defectos Reticulares y No Estequiometría"**, Alhambra, Madrid, 1970.
- N.N.Greenwood and A. Earnshaw, **"Chemistry of the Elements"**, 2nd Edition, Butterwort-Heinenmann, Oxford, 1997.
- J.H.Huheey, E.A. Keiter, R.L.Keiter, **"Inorganic Chemistry. Principles of Structure and Reactivity"**, 4th Edition, harper Collins Publisherrs, New York, 1993.
- W.W.Poterfield, **"Inorganic Chemistry. A Unified Approach"**, 2nd Edition, Academic Press, San Diego, 1993.
- D.F.Shiver, P.W.Atkins and C.H. Langford, **"Química Inorgánica"**, Reverté, Barcelona, 1998.
- L.Smart, E. Moore, **"Química del Estado Sólido"**, Addison-Wesley Iberoamericana, Argentina, 1995.

Evaluación

El alumno debe aprobar 2 exámenes parciales promocionales de acuerdo a la reglamentación vigente. Debe sumar 11 puntos entre los dos parciales aprobados (mínimo de 5 puntos en cada uno).

En caso de aprobación de los trabajos prácticos si no alcanzara los 11 puntos mencionados pasa a rendir examen final.

Complementariamente el alumno ofrecerá un coloquio sobre un tema seleccionado y diseñara un trabajo práctico especial. Estos dos últimos ítems favorecerán la integración de la nota final de la asignatura.



Carlos O. Della Védova
Dr. en Quím. (Argentina)
Dr. en Cs. Nat. (Alemania)
Prof. Tit. d.e. Fac. Cs. Ex.-UNLP
Prof. Honorario de la UNTucumán
Investigador Superior (CONICET)
Dir. de CEQUINOR (UNLP-CONICET)