



**UNIVERSIDAD DE CHILE**  
FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS Y MATEMATICAS  
DEPARTAMENTO DE QUIMICA  
TELEX 40523 CENET CL - SANTIAGO - CHILE  
AV. TUPPER N° 2068 - CASILLA 2777

## QI-725 QUIMICA INORGANICA TEORICA

Unidades Docentes: 12 (4-0-8)  
Requisitos : QI-712

### Objetivos

Este curso pretende entregar una revisión actualizada de los modelos de Campo de Ligandos y de Polarización de Ligandos, en su aplicación al Estudio de la estructura molecular de complejos inorgánicos.

La utilidad del método de tensores irreductibles, en su formulación y aplicación a grupos de simetría moleculares será resaltada.

Diversas aplicaciones tales como: Evaluación de momentos dipolares eléctricos, momentos cuadrupolares eléctricos, momentos magnéticos, distorsiones estática y dinámica y acoplamientos vibrónicos, serán considerados.

### PROGRAMA

HRS.

#### 1.- Estados Electrónicos

- 1.1. Aproximación de Born-Oppenheimer
- 1.2. Aproximación Adiabática
- 1.3. Movimientos Nucleares
- 1.4. Teorema de Wigner-Eckart y coeficientes de acoplamiento
- 1.5. Superficies de Potencial
- 1.6. Teoremas de Jahn-Teller y de Renner
- 1.7. Acoplamiento Spin-Orbita

12

#### 2.- Transiciones Electrónicas

- 2.1. "Golden Rule" Número Dos Fermi
- 2.2. Probabilidad de absorción
- 2.3. Fuerza del Oscilador
- 2.4. Ancho de las líneas de absorción moleculares
- 2.5. Distribución de intensidades espectrales en transiciones permitidas
- 2.6. Distribución de intensidades en transiciones orbitales prohibidas
- 2.7. Transiciones prohibidas por spin. Grupos dobles
- 2.8. Formas de las bandas (tratamiento semiclásico)

20





**UNIVERSIDAD DE CHILE**  
FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS Y MATEMATICAS  
DEPARTAMENTO DE QUIMICA  
TELEX 40523 CENET CL - SANTIAGO - CHILE  
AV. TUPPER N° 2068 - CASILLA 2777

HRS.

**3.- Propiedades Magnéticas**

- 3.1. Movimiento de cargas en un campo electromagnético
- 3.2. Factores de reducción orbital
- 3.3. Hamiltoniano de spin
- 3.4. Susceptibilidades magnéticas
- 3.5. Interacciones de intercambio 10

**4.- Tensores Irreductibles y Grupos de Simetría Moleculares**

- 4.1. Coeficientes  $V$  en grupos octaédricos
- 4.2. Coeficientes  $V$  para grupos no octaédricos
- 4.3. Coeficientes  $W$
- 4.4. Productos Irreductibles y sus elementos matriciales
- 4.5. Formulismo de dos electrones y grupos octaédricos
- 4.6. Coeficientes de parentesco fraccionario
- 4.7. Coeficientes  $X$
- 4.8. Spin 12

**5.- Teoría de Polarización de Ligandos**

- 5.1. Formulación general
- 5.2. Ecuaciones fundamentales y evaluación de momentos dipolares eléctricos en complejos con y sin centro de inversión 6

**EVALUACION:** Habrá tres controles y un examen.

**BIBLIOGRAFIA GENERAL**

- 1.- Sugano, S., Tanabe, Y., and Kamimura, H. Multiplets of Transition Metal Ions In Crystals. (Academic Press. New York and London, 1970)
- 2.- Ballhausen, C.J. "Introduction to Ligand Field Theory" McGraw-Hill, New York, 1962.
- 3.- Di Bartolo, B. "Optical Interaction in Solids" Wiley. New York, 1968.
- 4.- Griffith, J.S. "The Theory of Transition Metal Ions". Cambridge University Press, London and New York, 1957.





**UNIVERSIDAD DE CHILE**

FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS Y MATEMATICAS

DEPARTAMENTO DE QUIMICA

TELEX 40523 CENET CL - SANTIAGO - CHILE

AV. TUPPER N° 2068 - CASILLA 2777

- 5.- Orgel, L. "An Introduction to Transition Metal Chemistry"  
Methuen (Wiley), London, 1960.
- 6.- Davydov, A.S. "Theory of Molecular Excitons"  
McGraw-Hill Book Company, Inc., 1962.
- 7.- Griffith, J.S. "The Irreducible Tensor Method for  
Molecular Symmetry Groups" Prentice-Hall, Inc.,  
Englewood Cliffs, N.J., 1962.