

Espec.

- 1) Elementos de simetría de un conjunto de puntos. Operaciones de simetría: Giros, Reflexiones, Inversión, Rotaciones impropias. Multiplicación de operaciones de simetría. Conmutatividad. Grupos de operaciones de simetría.
- 2) Tablas de multiplicación de operaciones de simetría. Clases conjugadas de operaciones de simetría. Clasificación y notación de los grupos de operaciones de simetría. Clasificación de las moléculas de acuerdo con sus elementos de simetría.
- 3) Grupos y subgrupos. Producto directo de grupos. Isomorfismo de grupos. Jerarquización de los grupos puntuales. Grupos puntuales de los sistemas cristalográficos.
- 4) Propiedades intrínsecamente ligadas a la simetría. Momento dipolar y actividad óptica. Estereoisomería. Otras propiedades.
- 5) Representaciones matriciales de grupos. Base de una representación. Representaciones equivalentes. Representaciones reducibles e irreducibles. Propiedades de las representaciones irreducibles.
- 6) Carácteres de las representaciones. Propiedades de los carácteres de las representaciones. Notación de las representaciones. Tablas de carácteres.
- 7) Grupos continuos. Clases de operaciones. Representaciones irreducibles. Carácteres de las representaciones irreducibles. Tablas de carácteres.
- 8) Las funciones de onda como base de representaciones. Aplicaciones de la Teoría de Grupos a la clasificación de estados estacionarios de átomos y moléculas.
- 9) Descomposición de representaciones reducibles. Desarrollo de funciones en términos de las de base de representaciones irreducibles. Operadores de proyección.
- 10) Aplicación de la teoría de grupos a la construcción de conjuntos de orbitales de simetría prefijada: Orbitales híbridos y orbitales de grupos.
- 11) Producto directo de representaciones. Carácteres del producto di-

recto de representaciones. Descomposición del producto directo de representaciones. Aplicación a la obtención de reglas de selección.

- 12) Reducción de la simetría. Desdoblamiento de las representaciones reducibles en las de simetría inferior. Perturbaciones como reductores de simetría. Campos eléctricos y magnéticos uniformes. Campos cristalinos.
- 13) Grupos de las permutaciones. Clases de operaciones. Representaciones irreducibles del grupo simétrico. Operadores de simetrización y antisimetrización.
- 14) Spín electrónico. Grupos extendidos. Representaciones dobles. Potencias de representaciones de grupos. Descomposición de las potencias de representaciones de acuerdo con las irreducibles del grupo simétrico.
- 15) Teoría de orbitales moleculares en compuestos inorgánicos. Definición y conceptos básicos. Orbitales moleculares en moléculas diatómicas homo y heteronucleares. Estados electrónicos de moléculas diatómicas.
- 16) Orbitales moleculares en moléculas tipos AX_n . Diagramas de Walsh. Consideraciones estructurales. Modelo del solapamiento angular.
- 17) Orbitales moleculares en moléculas lineales: Orbitales moleculares en moléculas cíclicas. Orbitales moleculares en moléculas tipo "Cluster".

BIBLIOGRAFIA

- F.A. Cotton. La teoría de Grupos Aplicada a la Química. Limusa. Mexico 1977
- L.H. Hall Group Theory and Symmetry in Chemistry. Mc. Graw Hill. New-York 1969
- J.A. Salthouse and M.J. Warc. Point Group Character Tables and related data. Cambridge University Press. 1972
- K.F. Purcell y J.C. Kotz. Química Inorgánica. Reverté 1979
- G. Davidson *Introducción a la teoría de Grupos para químicos*
Ed. Reverté 1979

ESPECIALITAT

Professor:

curs : 1983-84

Vist i plau,

Signat:

Cap de Departament
Q. Inorganica

Data:

c/ 82-83

c/ 81-82

c/ 80-81

BIBLIOTECARIA

- J. A. Cotton, *The Chemistry of the Actinoid Elements*, Butterworths, London, 1973

- J. H. Hill, *Group Theory and Chemistry*, McGraw-Hill, New York, 1971

- J. A. Cotton and G. M. Burnett, *Group Character Tables and Related Data*, Cambridge University Press, 1972

- J. F. Powell, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.*, 1970