

F-1991  
(4)

3625-F  
10/91  
143709  
MSO 4-A

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: de Física

ASIGNATURA: **ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL**

CARRERA/S: Doctorado

ORIENTACION:

PLAN:

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA: 1 (un) cuatrimestre

HORAS DE CLASE: a) Teóricas.....<sup>4</sup>..... hs. b) Problemas.....<sup>2</sup>..... hs.  
 c) Laboratorio..... hs. d) Seminarios..... hs.  
 e) Totales.....<sup>6</sup>..... hs.

PROGRAMA

- 1) Teoría clásica de vibraciones moleculares.  
El modelo mecánico. Pequeñas oscilaciones. Coordenadas normales y modos normales. Ecuación secular.
- 2) Tratamiento cuántico.  
Procesos de un fotón. Absorción y emisión. Transiciones dipolares. Reglas de selección. Procesos de dos fotones, dispersión, efecto Raman.
- 3) El problema en coordenadas internas.  
La ecuación secular en coordenadas internas. Construcción de la matriz de cambio de base. El método de la matriz G. Constantes de fuerza.
- 4) Teoría de grupos puntuales. Vibraciones moleculares.  
Definiciones y propiedades. Partición de un grupo. Representaciones irreducibles. Clasificación de los grupos puntuales. Coordenadas de simetría. Tablas de correlación. Reglas de selección.
- 5) Vibraciones en sólidos.  
Cadenas lineal, ecuación clásica de movimiento y coordenadas normales. Fonones. Modos ópticos y acústicos. Cristales iónicos y moleculares.
- 6) Simetría traslacional.  
Grupos espaciales. Grupo factor. Red de Bravais. Celda primitiva. Espacio recíproco. Zonas de Brillouin. Cálculo de curvas de dispersión. Puntos singulares. Densidad de estados vibracionales.
- 7) Anarmonicidad en moléculas y cristales.  
Campos anarmónicos. Acoplamiento de modos normales. Vida media de estados vibracionales excitados. Vida media de fonones.
- 8) Espectroscopía infrarroja.  
Teoría básica, reglas de selección e intensidad. Espectrómetros dispersivos. Espectrointerferómetros de Fourier. Transformada rápida de Fourier. Aplicaciones de la espectroscopía infrarroja.

80

revisado por Resoluci/ 00 1614/91



- 9) Espectroscopía Raman.  
Teoría básica del efecto Raman. Espectrómetros Raman.  
Espectroscopía Raman coherente. Vida media de la fase y de la población.
- 10) Dispersión elástica de neutrones.  
Teoría básica. Sección eficaz de dispersión de neutrones.  
Dispersión coherente e incoherente de un fonón. Espectrómetros de triple eje (TACS) y de tiempo de vuelo (TOF). Aplicaciones.
- 11) Vibraciones en sólidos desordenados.  
Densidad local de estados. Método recursivo. Dinámica molecular. Reglas de selección y técnicas experimentales.

BIBLIOGRAFIA

- 1) J.C. Decius y R.M. Hexter. "Molecular vibrations in crystals".  
Mc.Graw-Hill, N. York (1977).
- 2) S.S. Mitra y S. Nudelman (Eds.). "Far infrared properties of solids".  
Plenum Press, N. York (1970).
- 3) S. Califano. "Vibrational states". J.Wiley, London (1975).
- 4) Mansel Davies (Ed.). "Infrared spectroscopy and molecular structure".  
Elsevier, Amsterdam (1963).
- 5) P.R. Griffiths. "Chemical infrared Fourier transform spectroscopy".  
J.Wiley and Sons. N. York (1975).
- 6) W. Kiefer y D.A. Long (Eds.). "Non linear Raman spectroscopy and its  
chemical applications". D. Reidel, Londo (1982)
- 7) S. Califano (Ed.), "Proc. Int. School Phys. Enrico Fermi.  
Course IV: Lattice dynamics and intermolecular forces". Academic Press,  
N.York. (1975).
- 8) S. Bratos y R.M. Pick. "Vibrational spectroscopy of molecular liquids  
and solids". Plenum Press. N. York. (1980)

Firma del Profesor:

Aclaración de Firma: Dr. Hernán Bonadeo

Firma del Director:

  
Dr. GUILLERMO DUSSEL  
DIRECTOR  
DEPARTAMENTO DE FISICA

12 NOV. 1991