



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

QUÍMICA FÍSICA IV/78.

ESPECTROSCOPIA MOLECULAR.

PROGRAMA:

B/1: Introducción: Métodos fisicoquímicos para determinar estructuras moleculares. Niveles de energía de átomos y moléculas (aspecto cuántico). Curvas de energía potencial de una molécula diatómica. Espectroscopía de absorción. Espectroscopía Raman. Reglas de selección. Zonas del espectro (unidades y nomenclatura). Leyes de absorción. Espectrografos. Ancho de banda, de ranura, resolución. Aplicaciones.

B 2: La energía de las moléculas: La aproximación de Born-Oppenheimer y la separación del movimiento de los electrones y de los núcleos. La energía cinética de la molécula aislada. Las condiciones de Eckart y la separación de la vibración y de la rotación. Forma del Hamiltoniano. Energía de una molécula en fase condensada.

B 3: Espectros de rotación pura: El rotor rígido. Tipos de rotor. El tensor de inercia. Niveles de energía para distintos tipos de rotor. Distorsión centrífuga. Reglas de selección en IR y Raman. Influencia del spin nuclear. Ejemplos de espectros sencillos. Determinación de parámetros moleculares.

B 4: Teoría de la simetría: La teoría de grupos. La simetría de las moléculas y los grupos puntuales. Teoría de las representaciones. Relación con la mecánica cuántica. Simetría de las funciones de onda y reglas de selección. Relación de la simetría con diversas propiedades moleculares.

B 5: La vibración de las moléculas: La energía potencial y la aproximación armónica. Tratamiento clásico, los modos normales. Uso de las coordenadas internas. Elementos del método de Wilson. Nociones sobre las funciones potenciales y su determinación. Tratamiento cuántico. Reglas de selección. La anarmonicidad los sobretonos y las bandas de combinación. La resonancia de Fermi.

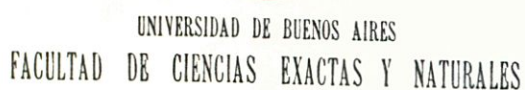
B 6: Teoría de grupos y vibraciones moleculares: La representación vibracional y la simetría de los modos normales. Simetría de las funciones de onda. Reglas de selección por la simetría. Sobretonos y bandas de combinación. Las coordenadas de simetría y el factor de la ecuación secular.

B 7: Espectros de vibración rotación: Moléculas lineales. Reglas de selección. Bandas paralelas y perpendiculares. Determinación de momentos de inercia y distancias interatómicas. Rotores simétricos, tipos de bandas. La interacción vibración rotación.

B 8: La determinación de la simetría de las bandas de vibración: Los contornos de las bandas en fase gaseosa. Comparación de los espectros IR y Raman. La depolarización de las bandas del espectro Raman. El dichroísmo de los espectros del sólido.

B 9: Análisis de los espectros IR: Las vibraciones características, origen. Zonas del espectro IR. La influencia de las interacciones intermoleculares y los espectros en fases condensadas. Nociones sobre las intensidades de banda y los factores que las influyen. Ejemplos de aplicación de los conceptos vistos anteriormente al análisis de los espectros IR de vibración.

Aprobado por Resolución DT 495/78



B 14: Difracción de rayos X: Red cristalina, planos, índices. Red recíproca. Diagrama de polvo. Determinación de estructuras. Fotografías de rotación, oscilación de Weissenberg. Determinación del grupo espacial.

Dra. J. F. POSE DONI de ALBINATI
DIRECTORA DEL DPTO. DE
QUIMICA INORGANICA ANALITICA
Y QUIMICA - FISICA

Ag. B. P. Schach

Bibliografía de Química Física IV

- "Molecular Vibrations.-The Theory of IR and Raman Vibrational Spectra".- E. Bright Wilson, Jr., J. C. Decius, Paul C. Cross, McGraw-Hill Book Co, Inc. (1955).
- "Spectroscopy and Molecular Structure", Gerald W. King; Holt, Rinehart and Winston, Inc. (1964).
- "Vibrating Molecules", P. Gans; Chapman and Hall (1971).
- "IR of Inorganic and Coordination Compounds", Kazuo Nakamoto, John Wiley & Sons (1963).
- "Introduction to IR and Raman Spectroscopy", N. Colthup, Lawrence H. Daly, Stephen E. Wiberley; Academic Press (1964).
- "An Introduction to the Theory of Molecular Structure", Jean- Joseph Charatte; Reinhold Pub. Co (1966).
- "Techniques of Organic Chemistry".- Vol. IX: "Chemical Applications of Spectroscopy", W. West; Interscience Pub., Inc. (1956). Vol. I, Part III: "Physical Methods of Organic Chemistry", A. Weissberger (1960).
- "Absorption Spectroscopy", Robert F. Bauman; John Wiley & Sons (1962).
- "The Determination of Molecular Structure", P. J. Wheatley; Oxford at the Clarendon Press (1960).
- "Introduction to Magnetic Resonance", A. Carrington, A. D. McLachlan; Harper & Row (1968).
- "Interpretation of NMR Spectra", R. E. Bible; Plenum Press (1965).
- "High-Resolution NMR.-Theory and Chemical Applications", E. D. Becker; Academic Press (1969).
- "Electron Spin Resonance in Chemistry", P. E. Ayscough; Methuen (1968).
- "Electron Paramagnetic Resonance: Techniques and Applications", R. S. Alger; John Wiley & Sons (1969).

Dr. J. E. P. GONZÁLEZ ALBINATI
DIRECTOR DE INVESTIGACIÓN DE
QUÍMICA INORGÁNICA, ANALÍTICA
Y QUÍMICA FÍSICA