



1391
1980

QUIMICA FISICA IV /1980

ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

PROGRAMA :

B.1: Introducción : Métodos fisicoquímicos para determinar estructuras moleculares. Niveles de energía de átomos y moléculas, a spectro 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. Espectrógrafos, 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 de la retación. Forma del Hamiltoniano. Energía de la molécula en la fase condensada.

B.3 : Espectrógrafos e instrumental complementario : Componentes de un espectrógrafo. Fuentes. Elementos dispersores. Prismas y Redes : ventajas y desventajas. Colimadores , lentes y espejos. Ampliación y registro. Detectores. Ruido . Espectrógrafos de absorción de simple y de doble haz. Parámetros físicos que influyen en su funcionamiento. Esquemas.

B.4 : 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 en Raman. Influencia del spin nuclear. Ejemplos. Determinación de parámetros moleculares

B.5 : 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.6 : 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 de las funciones potenciales y su determinación. Tratamiento cuántico. Reglas de selección. La armonicidad: los sobretonos y las bandas de combinación. La resonancia de Fermi.

B.7 : 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 factoreo de la ecuación secular.

B.8 : Espectros de vibración y de 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.9: Los contornos de banda en fase gaseosa : Determinación de simetría de las bandas. Comparación de los espectros de IR y Raman. Depolarización de las bandas Raman . El dicroísmo de los espectros del sólido.

B.10 : Análisis de los espectros : Las vibraciones características, origen. Zonas del espectro IR . La influencia de las interacciones intermoleculares y los espectros en la fase condensada. Intensidad de bandas , factores que la influyen



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Ejemplos de aplicación de los conceptos vistos anteriormente al análisis de los espectros IR de vibración.

B 11: Espectros electrónicos : Clasificación de los estados electrónicos. Reglas de selección. Principio de Franck -Condon. Formas de bandas. Ejemplos sencillos. Moléculas diatómicas. Efectos diversos: predisociación, etc. Sistemas aromáticos.

B 12: Espectroscopía de Resonancia Magnética : Fundamentos. Poblaciones de spin. Niveles de energía. Espectros del átomo de hidrógeno y del helio. Resonancia nuclear en sólidos. Espectros de banda ancha. Acoplamiento dipolar. Estudio estructural por el método de los momentos. Resonancia nuclear en líquidos. Análisis de los espectros. Corrimientos químicos.

B 13: Espectros de Resonancia del Spin Electrónico en solución : Radicales libres. Separaciones hiperfinas. Densidad de spin no apareado. Radicales orgánicos atrapados en sólidos. Efectos de segundo orden en el espectro. Fundamentos de la instrumentación para resonancia magnética. Determinación de sensibilidad del espectrómetro. Determinación del factor espectroscópico g . Determinación del número de spines no apareados.

B 14: Difracción de Rayos X : Red cristalina, planos índices. Red recíproca. Diagrama de polvo. Determinación de estructuras. Fotografías de rotación, de oscilación de Weisenberg. Determinación del grupo especial.

M. J. Spino de Albini

J. F. Possidoni
Dra. J. F. POSSIDONI de ALBINATI
DIRECTORA DEL DPTO. DE
QUÍMICA INORGÁNICA ANALÍTICA
Y QUÍMICA - FÍSICA