

S @ I  
1983

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: Espectroscopía Molecular (Química Física IV)

CARRERA: Ciencias Químicas

ORIENTACION: Química Física

PLAN:

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: a) Teóricas 4hs/sem. b) Problemas 4hs/sem.  
c) Laboratorio 4hs/sem. d) Total: 12hs/sem.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Química Física II (orientación en Química Física) ; Licenciatura en Química (Doctorado)

PROGRAMA

- 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 Raman. Reglas de selección. Zonas del espectro (unidades y nomenclatura). Leyes de absorción. Espectrógrafos. Ancho de banda de renuro, resolución. Aplicaciones.
- 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 Born-Eckart y la separación de la vibración y de la rotación. Forma de Hamiltoniano. Energía de una molécula en fase condensada/
- 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.

DR. R. H. RODRIGUEZ PASQUES  
DIRECTOR DEPTO.  
QCA. INORG. ANAL. Y QCA. FIS.

OSM  
RP

Aprobado por Resolución 515/83

- 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.
- 5.- La vibración de las moléculas: La energía potencial y la aproximación armónica. Tratamiento clásico, los modos normales. Use de las coordenadas internas. Elementos del método 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.
- 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.
- 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 vibracional rotación.
- 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.
- 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 la influyen. Ejemplos de aplicación de los conceptos vistos anteriormente al análisis de los espectros IR de vibración.

0154 RHA  
DR. R. H. RODRIGUEZ PASQUES  
DIRECTOR DEPTO.  
QCA. INORG. ANAL. Y QCA. FIS.

- 10.- Espectros electrónicos: Clasificación de los estados electrónicos. Reglas de selección. Principio de Franck-Condon. Formas de las bandas. Ejemplos sencillos. Moléculas diatómicas. Efectos diversos predissociación, etc. Sistemas aromáticos. Complejos.
- 11.- Instrumental de espectroscopia molecular: Componentes de un espectrógrafo. Fuentes, elementos dispersores. Prismas y redes: ventajas y desventajas. Colimadores. Lentes y espejos. Aplicación y registro. Ruido. Espectrógrafos de absorción de simple y doble haz. Parámetros físicos que influyen en su funcionamiento. Esquemas.
- 12.- Espectroscopia de resonancia magnética: Fundamentos. Poblaciones de  $sp^n$ . Niveles de energía. Espectros del átomo de hidrógeno y del de 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.
- 13.- Espectros de resonancia del spin electrónico en solución: Radicales libres. Separación hiperfinas. Densidad de spin o 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 número de spines no apareados. Determinación del factor espectroscópico  $g$ .
- 14.- Difracción de Rayos X: Red cristalina, planos, índices. Red recíproca. Diagramas de polvo. Determinación de estructuras. Fotografías de rotación, oscilación de Weisemberg. Determinación del grupo espacial.
- 15.- Cálculo de modos normales con aplicación de programas de computación para casos sencillos. Ejemplos.

#### BIBLIOGRAFIA

- 1.- "Molecular Vibrations - E. Bright Wilson, Jr., J.C. Decius, P.C. Cross Mac Graw Hill Book Co. (1955).

05/16 *rw*  
DR. R. H. RODRIGUEZ PASQUEB  
DIRECTOR DEPTO.  
DCA. INORG. ANAL. Y DCA. FÍS.

//.

- 2.- "Spectroscopy and Molecular Structure" - G.King, H.Rinchart and Wiston (1964).
- 3.- "Vibrating Molecules" - P.Gang, Chapman and Hall (1971).
- 4.- "Introduction to IR and Roman Spect" - N. Colthup, L.H. Daly & Wiberley, Ac. Press (1964).
- 5.- "IR of Inorg. and Geord. Compeunds" - K. Nakamoto, J. Wiley & Sons (1963).
- 6.- "Int. to Magnetic Resonance" - A. Carrington, A.D. Mc Lechlan, Harper & Row (1963).
- 7.- "Interpretation of NMRS" - R. Bauman, John Wiley & Sons (1962).
- 8.- "Absorption of Organic Chemistry" - Vol. IX "Chemical Applications of Spectroscopy" W.West Intersc. Pub. Inc. (1956).
- 9.- "Physical Methods of Organic Chemistry" - Vol. I Part III, A. Weissberger, Ont. Pub. Inc. (1960).
- 10.- "Thedetermination of Molecular Structure" - P.J. Wheatley, Oxford ot Clarendon Press (1960).

Fecha: FEB/1983.-

*O. Breux de Mandirola*

Firma del Profesor:

O. Breux de Mandirola

Aclaración de la firma:

*R. Rodríguez Pasques*

Firma del Director:

R. RODRIGUEZ PASQUES  
DIRECTOR DEPTO.  
DE INORG. ANAL. Y QCA FIS.

Aclaración de la firma: