UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: Química Física IV - Espectroscopía Molecular

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas y/o Doctorado

ORIENTACION: Química Física

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: A) Teóricas 4 hs. b) Problemas 4 hs.
(Semanales) c) Laboratorio 4hs. d) Totales: 12 hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura en Ciencias Químicas

PROGRAMA:

1.- Vibraciones Moleculares: Introducción. Moléculas poliatómicas. Modos normales. Constantes de fuerza. Matrices, determinantes, autovalores. Transformaciones de similaridad.

2.- Geometría Molecular: Notación matricial. Teoría de grupos: Subgrupos. Grupo factor, grupos espaciales. Producto directo.

3.- Representaciones de vibraciones moleculares. Bases cartesianas. Coordenadas internas. Reglas de selección. Matriz G.

4.- Utilización de la simetría Factorizo de F y G. Degeneración. Número de coordenadas independientes. Efectos del estado Sólido.

5.- Cálculo de constantes de fuerza. Aspecto computacional Programas de cálculo Método de cuadrados mínimos. Asignación de frecuencias. Campo de fuerzas.

6.- Concepto de frecuencia de grupo. Relación entre frecuencias y constantes de fuerzas. Mezcla de coordenadas de simetría. Jacobiano.

Espectroscopía Raman Láser

7.- Espectroscopía de Resonancia Láser. El Láser. El láser contínuo. Pulso gigante. Fenómeno resonante y no resonante. Coherencia y Polarización. Difusión Rayleigh. Difusión Raman. Difusión Raman estimulada. Hiperpolarisabilidad. Efectos de multifonones.

8.- Intensidades Raman y relaciones de depolarización. Interpretación de intensidad Raman y medidas de depolarización. Teoría de Volkenstein.

Dr. JOSE A. OLABE
Director Adjunto Int.
Qca. Inorg. Anal. y Qca. Fis.

Aprobado por Resolución CD 1617/89

Q189
10

9.- Vibraciones en sólidos; Vibraciones en polímeros y cristales. Grupo de situación. Simetría en cristales. Grupos espaciales y grupo factor. Grupos planos y lineales. Polímeros helicoidales. Modos transversales y longitudinales. Sub y superestructuras. Desorden. Trabajos de Hendra, Zbinden y Horning.

10.- Identificación de elementos de simetría. Teoremas de correlación. Aproximación de la fase de gas orientado. Relación del tensor Raman con la intensidad de bandas observadas. Birrefringencia. Elección de ejes para cristales monoclínicos.

11.- Orientación por dicroismo en infrarrojo. Relación dicroica R. Polarisador. Microespectrometro de IR. Fuentes de error en la medida de dicroísmo. Transformación de coordenadas. Elipsoide de intensidades de absorción. Comportamiento dicroico para distintas orientaciones. Relación entre los momentos de transición con los grados de libertad rotacionales. Orientación axial parcial. Grados de orientación. Orientación planar. Orientación planar preferencial.

BIBLIOGRAFIA

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

2.- " Spectroscopy and Molecular Structure" G.King, H.Rinehart and Wiston,1964.

3.- "Vibrating Molecules" P.Gans, Chapman and Hall. 1971.

4.- "Introduction to IR and Raman Spectroscopy" N.Colthup, L.H.Daly, S.W.Wiberley, ac. Press, 1964.

5.- " IR of Inorganic and Coordination Compounds" K. Nakamoto, J.Wiley and Sons 1963.

6.- " Absorption Spectroscopy", R.Bauman,J.Wiley and Sons, 1962.

7.- "Techniques of Organic Chemistry", Vol IX, "Chemical Applications of Spectroscopy", W.West, Intersc. Pub. Inc. 1956.

8.- "Physical Methods of Organic Chemistry", Vol I. Part. III, A.Wessberger. Ont. Pub. Inc. 1960.

9.- "The determination of Molecular Structure", P.J.Wheatley, Oxford at Clarendon Press, 1960.

10- "Structure of Crystalline Polymers" H.Tadokoro, A.Wiley Intersc. Publications, 1979

11- "Infrared Spectroscopy of high Polymers", R.Zbinden, Academic Press, 1964

12- "Infrared Spectro of Crystals" W.Vedder and D.Hornig "Advances in Spectroscopy, Vol II Edited by H.W. Thompson.Intersc. Publishers Inc N.Y. 1961

13- "Infrared Spectroscopy and Molecular Structure". "Raman Spectroscopy" J.C. Evans, "Infared Spectra Of Solid", Dichroism and Polymers", S.Krim, Mansel Davies ed. Elsevier Pub. Co,Amsterdam, 1963.

Dr. JOSE A. OLABE
Director Adjunto Int.
Qca. Inorg. Anal. y Qca. Fis.

14.- "Espectroscopía Raman y Estructura Molecular" J.G.Contreras Monografía PNUD/ Unesco Nº2 CHI84/C06, 1987. Editora Anibal Pinto SA, Concepción Chile.

15.- "Láser Raman Spectroscopy" TR Gilson, P.J. Hendra, Wiley Intersc. 1970

Firma del profesor

Dr. JOSE A. OLABE
Director Adjunto Int.
Qca. Inorg. Anal y Qca Fis.

Firma del director