



DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Física Física

ASIGNATURA: **Química Física IV - Espectroscopía Molecular**

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas y/o Doctor de

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.

ASEGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura en Ciencias Químicas

PROGRAMA:

- 1.- Vibraciones Moleculares: Introducción. Moléculas poliatómicas. Modos normales. Constantes de fuerza. Matrices, determinantes, autovalores. Transformaciones de similitud.
 - 2.- Geometría Molecular: Notación matricial. Teoría de grupos: Subgrupos. Grupo factor, grupos espectales. Producto directo.
 - 3.- Representaciones de vibraciones moleculares. Bases cartesianas. Coordenadas internas. Reglas de selección. Matriz G.
 - 4.- Utilización de la simetría Factorización 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 continuo. Pulso gigante. Fenómeno resonante y no resonante. Coherencia y Polarización. Difusión Rayleigh. Difusión Raman. Difusión Raman estimulada. Hiperpolarizabilidad. Efectos de multifonones.
 - 8.- Intensidades Raman y relaciones de depolarización. Interpretación de intensidad Raman y medidas de depolarización. Teoría de Vekstein.

1987
Dr. JOSE A. OLAVE
Director de la Cátedra de
Química Inorgánica y Física Física

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. Espectro. Trabajos de Honira, 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. Similitud. Elección de ejes para cristales monoclinicos.
- 11.- Orientación por dicroísmo en infrarrojo. Relación dicroica R. Polarizador. 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.

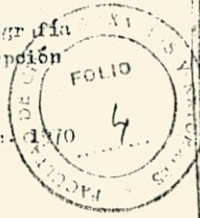
BIBLIOGRAFIA

- 1.- "Molecular Vibrations", E. Bright Wilson, Jr. J.G. Decina, F.J. Gross, Mc Graw Hill Book Co. 1955.
- 2.- "Spectroscopy and Molecular Structure" G. King, T. Rinchart and Aston, 1964.
- 3.- "Vibrating Molecules" P. Gans, Chapman and Hall. 1971.
- 4.- "Introduction to IR and Raman Spectroscopy" J. Colthup, J.H. Dalg, S.W. Wiberley, Mc. Press, 1964.
- 5.- "IR of Inorganic and Coordination Compounds" K. Nakamoto, J. Wiley and Sons 1963.
- 6.- "Absorption Spectroscopy", R. Puumu, J. Wiley and Sons, 1962.
- 7.- "Techniques of Organic Chemistry", Vol IX, "Chemical Applications of Spectroscopy", J. West, Intersc. Pub. Inc. 1955.
- 8.- "Physical Methods of Organic Chemistry", Vol I. Part. III, A. Weissberger. Ont. Pub. Inc. 1960.
- 9.- "The determination of Molecular Structure", P.J. Heatley, Oxford at Clarendon Press, 1960.
- 10.- "Structure of Crystalline Polymers" H. Fitchero, A. Wiley Intersc. Publications, 1979
- 11.- "Infrared Spectroscopy of high Polymers", R. Zbinden, Academic Press, 1964
- 12.- "Infrared Spectroscopy of Crystals" J. Zeldner 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, "Infrared Spectra Of Solids", Dichroism and Polymers", S. Krim, Mansel Davies ed. Elsevier Pub. Co, Amsterdam, 1963.

DSJ
Alle
Dr. JOSE A. OLIVERA
Director Adjunto
Catedra de Anal y C.

14 "Espectroscopia Raman y Estructura Molecular" J.G. Contreras Monografía
PNUD/ Unesco N°2 CHI84/005, 1987. Editor: Anibal Pinto SA, Concepción
Chile.

15.- "Láser Raman Spectroscopy" Ed. Wilson, F.J. Madrid. Wiley Interscience. 1970



158

Roberto Schmidt

Sticelle

Dr. JOSE A. CHARRÉ
Director de Investigación
Ces. Inorg. Anal. y Fis.

Firma del profesor

Firma del director

0162 0111
3-11-1987

no
e
s
le