

Q.I. '96
①


UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas
Doctorado en Ciencias Físicas

ORIENTACION: ---

1er. CUATRIMESTRE: AÑO 1996

CODIGO DE CARRERA: 51 - 52

MATERIA: **Espectroscopía con luz polarizada**

CODIGO: mat.nueva

PUNTAJE: propuesto 3

PLAN DE ESTUDIO: ----

CARACTER DE LA MATERIA: ----

DURACION: 2 semanas.

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- * Teórico: 16
- * Problemas: 4
- * Laboratorio: 2

TOTAL: 22 hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 44 hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS:

FORMA DE EVALUACION: Examen final.

PROGRAMA ANALITICO:

- 1) Introducción y marco teórico:
Luz polarizada. Estados moleculares y simetría. Repaso de espectroscopía óptica.
- 2) Momentos de transición:
Momentos de transición vibrónicos y expresiones para la intensidad polarizada. Computación de momentos de transición a partir de primeros principios. Ejemplo: espectroscopía de pireno parcialmente alineado.
- 3) Técnicas de alineamiento y medida:
Alineamiento molecular. Medidas ópticas.
- 4) Aspectos cuantitativos del alineamiento uniaxial:
La función de distribución de orientaciones. Factores de orientación. Representación de los factores de orientación. La matriz de orientación de Saupe. Parámetros de orden. Alineamiento y propiedades moleculares.

p.g.
C

1.



5) Procesos de rango dos:

Absorción y emisión dipolar eléctrica. Dicroísmo lineal en absorción y en luminiscencia espontánea. Métodos aproximados. Evaluación de espectros modulados.

6) Procesos de rango cuatro:

Procesos de dos fotones en moléculas alineadas. Eventos sucesivos. Fotoluminiscencia y dicroísmo fotoinducido. El caso estático y el caso dinámico. Eventos de dos fotones simultáneos. Absorción bifotónica. Dispersión Raman.

7) Ejemplos de aplicación:


Pireno. Momentos de transición en el IR y asignación de transiciones vibracionales. Detección y asignación de transiciones electrónicas en moléculas de alta simetría. Detección y asignación de transiciones electrónicas en moléculas de baja simetría. Actividad óptica de moléculas orientadas. Estructura molecular y conformación. Asociación molecular. Estructura de medios anisotrópicos. Movimiento rotacional anisotrópico.

Trabajo Práctico: Obtención del espectro electrónico de azobenceno en películas estiradas de polietileno.

Bibliografía:

- Spectroscopy with polarized light; J. Michl, E. Thulstrup; VCH (1995).
- Electronic aspects of organic photo chemistry; J. Michl, V. Bonacic-Koutecky; Wiley Interscience (1990).


Dr. P. Aramendía


Dr. E. San Román

Dr. ENRIQUE A. SAN ROMAN
Director
Dpto. QCA. INORG. ANAL. QCA. FIS.