

ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

1969

Prof. Dra. O.Brieux de Mandirela

- 1.- Perturbación independiente del tiempo en 1er y 2do orden. Efecto Stark. Método variacional. Aplicaciones. Método de Hartree y Hartree-Fock. Método LCAO. Método variacional g de perturbación.
- 2.- Atomos: Estados atómicos. Atomo de hidrógeno. Atomos de varios electrones. Reglas de Hund. Interacción magnética de átomos. Acoplamiento spin-órbita. Efecto Zeeman.
- 3.- Moléculas. Orbitales moleculares. Ión Hidrógeno. Molécula de Hidrógeno. Unión de valencia. Sistemática de la Mecánica Cuántica Molecular para moléculas diatómicas. Ejemplos. Moléculas poliatómicas.
- 4.- Tratamiento orbital para moléculas poliatómicas pequeñas. Método de Hückel.
- 5.- Teoría de las perturbaciones dependientes del tiempo. Repaso de electricidad y magnetismo. Ecuaciones de Maxwell. Radiación electromagnética. Emisión y absorción inducida, Probabilidad de transición. Reglas de selección para el momento angular. Reglas de selección para el problema de las fuerzas centrales. Reglas de selección para el oscilador armónico. Reglas de selección para moléculas. Principio de Franck-Condon. Reglas de selección basadas en la simetría. Reglas de selección para spin. Otros fenómenos ópticos: efecto Raman.
- 6.- Dispersion. Introducción. Dispersion de partículas en tres direcciones. Comportamiento asintótico. Dispersion de una esfera rígida. Dispersion Raman. Dispersion Rayleigh.
- 7.- Espectros electrónicos moleculares. Transiciones electrónicas. Ejemplos. Modelo molecular. Vibraciones moleculares. Mecánica clásica de las pequeñas vibraciones. Ecuaciones de Newton. Coordenadas. Modos normales de vibración. Degeneración. Coordenadas normales. Ecuación de Schrödinger.
- 8.- Principales componentes de un espectrógrafo. Fuentes, prismas, redes, detectores. Golay. Aparatos a simple y doble haz. Poder lumínoso de un espectrógrafo. Ejemplo de un espectrógrafo a simple y a doble haz. Circuito óptico y electrónico.
- 9.- Teoría de grupos. Grupo abeliano. Tabla de multiplicación. Grupo cíclico, subgrupo. Coconjunto. Clase. Grupo factor. Representación.

10.- Simetría de las vibraciones normales y reglas de selección. Modos normales. Representaciones irreducibles. Carácter. Números de vibraciones normales de cada especie. Representación en base de coordenadas cartesianas, coordenadas internas y coordenadas normales. Reglas de selección teniendo en cuenta la simetría para transiciones en espectros de absorción en IR y Raman.

11.- Coordenadas internas. Coordenadas de simetría. Redundancia. Vibraciones anaharmonicas. Resonancia de Fermi. Vibración-retación, forma de las bandas. Análisis de vibraciones normales (rotación matricial). Expresión matemática de las coordenadas internas. Matriz C. Utilización de las propiedades de simetría. Campo potencial y constantes de fuerza. Función del campo de valencia. Generalizada, función de Urey-Bradley. Solución de la ecuación secular. Regla del producto. Cerramiento isotópico.