

PROGRAMA DE FISICO QUIMICA IV-ESPECTROSCOPIA MOLECULAR  
Dto. de Fisico Química  
Curso 1970

Prof: O.B. de Mandirala

Capítulo I-Introducción. Historia. Métodos fisicoquímicos para determinar estructuras moleculares. Niveles de energía de átomos y moléculas (Aspecto cuántico). Curvas de energía potencial de una molécula diatómica. Espectroscopia de absorción. Espectroscopia Raman. Reglas de selección. Zonas del espectro (unidades y nomenclatura) Leyes de absorción. Espectrógrafos. Ancho de banda, ancho de ranura, resolución. Aplicaciones

Capítulo II-Álgebra matricial. Tipos de matrices, propiedades. Transformaciones lineales y de similaridad. Operaciones elementales de matrices. Ortogonalidad. Espacio euclidiano y espacio hermitiano. Norma.

Capítulo III-Principio de Born - Oppenheimer. Rotor. Molécula diatómica. Tipos de rotores. Niveles de energía del rotor. Series espectrales. Reglas de selección. Intensidad de líneas. Moléculas lineales poliatómicas. Vibración molecular. Armonicidad, anarmonicidad. Moléculas poliatómicas. Condiciones de Eckart. Ecuaciones de Newton. Ecuación secular. Autovalores, autovectores. Normalización. Modos normales de vibración. Coordenadas normales. Otras coordenadas: cartesianas, ponderadas, internas, generalizadas.

Capítulo IV-Coordenadas internas en términos de vectores unitarios. Tratamiento matemático de Wilson. Matriz G. Principio del análisis de las coordenadas normales.

Capítulo V-Funciones potenciales. Aproximación cuadrática. Campo de fuerzas centrales. Aproximación de campo de fuerzas de valencia. Campo de fuerzas generalizado. Efectos de resonancia. Resonancia de Fermi. Efectos de el seguimiento de los orbitales durante las vibraciones. Cambios de hibridación. Repulsión entre los átomos no ligados. Campo de Urey Bradley.

Corrimiento isotópico. Regla del producto. Otras relaciones de las frecuencias en función de las constantes físicas. Fuerza de Coriolis. Método de ajuste del cálculo de V. Anarmonicidad de V. Reglas de Denninson. Constantes de fuerza en función de parámetros físicos. Tratamiento matricial de la ecuación secular.

Capítulo VI-Vibración-rotación: separación de los términos de energía. Tipos de rotores. Contornos de bandas. Tensores. Transformación de los tensores. Tipos de tensores. Invariancias. Momento de inercia. Momento angular. Tensor de inercia (componentes) Diagonalización, significado físico. Ejes principales de inercia. Reglas de selección: criterios. Rotor



Facultad de Ciencias Exactas  
y Naturales

lineal. Bandas //s y l Estructuras de bandas.

Capítulo VII-Teoría de grupos. Simetría de las moléculas. Grupos puntuales Subgrupos. Grupo factor. coconjunto. Representaciones. Clase. Simetría de coordenadas normales. Tabla de caracteres. Determinación de las especies de simetría. Caracteres de las rotaciones propias e impropias Degeneración.

Capítulo VIII-Efecto Raman. Historia. Difusión Rayleigh y Difusión Raman Interpretación clásica. Tensor de polarisabilidad. Caracter del tensor de polarisabilidad Reglas de selección Factor de depolarización. Intensidad de la luz difundida

Capítulo IX- Coordenadas de simetría internas Caso degenerado. Teorema de correlación. Tablas de correlación. Utilización de las propiedades de simetría. Factorización de la ecuación secular. Redundancia. Reglas de selección por simetría Caracteres  $\chi_{\alpha}$  y  $\chi_{\mu}$  para rotaciones propias e impropias. Regla de la mutua exclusión. Simetría de bandas de combinación

Capítulo X- Espectroscopia electrónica: información que se obtiene mediante la misma. Niveles electrónicos. Estados electrónicos fundamentales y excitados Tipos de transiciones y contornos de bandas. Principio de Franck-Condon. Espectros electrónicos. Estados electrónicos atómicos. Momento angular orbital. Spin. Números cuánticos. Términos de energía. Simbología Acoplamiento LS y  $jj^B$ . Esquemas de niveles de energía para un electrón de valencia. Caso de varios electrones. Principio de exclusión de Pauli Configuraciones electrónicas Regla de Hund. Paridad. Orbitales moleculares. Multiplicidad Reglas de selección para moléculas.

Capítulo XI-Instrumental de Espectroscopia molecular. Componentes de un espectrógrafo. Fuentes. Elementos dispersores. Prismas y redes: ventajas y desventajas. Colimadores. Lentes y espejos Amplificación y registro. Ruido Espectrografos de absorción: simple y doble haz. Parámetros físicos que influyen en su funcionamiento. Esquemas.