

PROGRAMA DE FÍSICA FÍSICA IV (Espectroscopía
Molecular)

- 1971 -

Profesor: O. Brioux de Macdircla

- 1.- Teoría de perturbaciones independientes del tiempo de 1er. orden, ejemplos. Oscilador anarmónico. Atomo de Helio. Teoría de perturbaciones de 2o. orden y órdenes superiores.
- 2.- Método variacional. Principio variacional. Aplicaciones. Atomo de Helio. Método de Hartree-Fock. Método L.C. A.O. - Técnicas mixtas. Métodos W.K.B. Aprox: Born-Oppenheimer. Cálculo de parámetros físicos de una molécula: distancias internucleares, ángulos, momentos dipolares.
- 3.- Átomos, estados atómicos. Problema de muchos electrones. Reglas de Hund. Métodos de cálculo. Método de Hartree-Fock ó S.C.F. - Acoplamiento Spin órbita. Efecto Zeeman.
- 4.- Moléculas Ion, molécula de hidrógeno. Molécula de hidrógeno: unión de valencia. Sistemática de la mecánica cuántica molecular para moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas. Resonancia. Orbitales moleculares. Método de Hückel.
- 5.- Espectroscopía Molecular: Introducción. Tipos de espectros. Niveles de energía de átomos y moléculas. Reglas de selección: Espectroscopía de microondas, Raman, de Absorción en el Infrarrojo y en el Ultravioleta visible. Espectrógrafo. Ancho de banda. Ancho de Raman. Resolución. Tipos de espectrógrafos. Fuentes, elementos dispersores. Amplificación y registro. Parámetros físicos que influyen en su funcionamiento. Esquemas.

//..

- 6.- Algebra matricial, repaso. Mecánica de Newton y de Hamilton, repaso. Resolución del problema de pequeñas vibraciones.
- 7.- Coordenadas. Tratamiento matemático de Wilson. Matriz F. Matriz G. Análisis de las coordenadas normales. Funciones potenciales. Regla del producto. Resonancia de termino. Anarmonicidad.
- 8.- Vibración. Rotación. Contorno de bandas. Tensores: tipos de tensores. Invariencias. Momento de inercia. Tensor de inercia. Ejes principales de inercia. Bandas s y s' .
- 9.- Teoría de grupos. Grupo factor. Grupo Abeliiano. Tabla de caracteres. Representación. Determinación de las especies de simetría.. Caracteres de Rotaciones propias e impropias. Coordenadas de Simetría. Regla de la mutua exclusión.
- 10.- Perturbación en el tiempo. Repaso de electricidad y magnetismo. Ecuaciones de Maxwell. Ecuación de onda para un sistema de partículas cargadas bajo la influencia de un campo magnético eléctrico externo. Emisión espontánea, emisión inducida y Absorción della radiación. Probabilidades de la Transición de Einstein. Reglas de Selección para el átomo de Hidrógeno. ídem para el oscilador armónico.
- 11- Difusión Raman. Difusión Raylengh. Polarisabilidad. Reglas de selección. Espectroscopía Raman.
- 12.- Espectroscopía de Resonancia Magnética, electrónica y nuclear. RME. Interacciones hiperfinas. Constantes de acoplamiento y estructura electrónica nuclear. R.M.N. Corrimiento químico. Acoplamiento spin-spin. Ancho de líneas. Tiempo de relajación. Principio de incerteza.