

PROGRAMA

- B.1: Interacción entre la materia y la radiación electromagnética. Perturbaciones dependientes del tiempo. La absorción de radiación electromagnética. Probabilidades de transición y reglas de selección. El efecto Raman: modelo clásico y justificación cuántica. Factores que determinan la forma de los espectros de absorción y difusión Raman.
- B.2: La Energía de las moléculas: La aproximación de Born-Oppenheimer y la separación del movimiento de los electrones y de los núcleos. La energía cinética de una molécula aislada. Las condiciones de Eckart y la separación de la vibración y de la rotación. Forma del Hamiltoniano. Energía de una molécula en fase condensada. Magnitudes de las energías involucradas y zonas del espectro.
- B.3: Espectros de rotación pura: El rotor rígido. Tipos de rotor. El tensor de inercia. Niveles de energía para los distintos tipos de rotor. La distorsión centrífuga. Reglas de selección en IR y Raman. Influencia del spin nuclear. Ejemplos de espectros sencillos. La determinación de parámetros moleculares.
- B.4: Teoría de la simetría: La teoría de grupos. La simetría de las moléculas y los grupos puntuales. Teoría de las representaciones. Relación con la mecánica cuántica. Simetría de las funciones de onda y reglas de selección. Relación de la simetría con diversas propiedades moleculares.
- B.5: La vibración de las moléculas: La energía potencial y la aproximación armónica. Tratamiento clásico, los modos normales. Uso de las coordenadas internas. Elementos del método de Wilson. Nociones sobre las funciones potenciales y su determinación. El tratamiento cuántico. Reglas de selección. La anarmonicidad: sobretones y bandas de combinación. La resonancia de Fermi.
- B.6: Teoría de grupos y vibraciones moleculares: La representación vibracional y la simetría de los modos normales. Simetría de la función de onda. Reglas de selección por la simetría. Sobretones y bandas de combinación. Las coordenadas de simetría y el factor de la ecuación secular.
- B.7: Espectros de vibración-rotación: Moléculas lineales. Reglas de selección. Bandas paralelas y perpendiculares. Determinación de momentos de inercia y distancias interatómicas. Rotores simétricos, tipos de bandas. La interacción vibración-rotación.
- B.8: La determinación de la simetría de las bandas de vibración: Los contornos de bandas en fase gaseosa. La comparación de los espectros IR y Raman. La depolarización de las bandas del espectro Raman. El dieroísmo de los espectros del sólido.

- B.9: Análisis de los espectros IR: Las vibraciones características, origen. Zonas del espectro IR. La influencia de las interacciones intermoleculares y los espectros en fases condensadas. Notaciones sobre las intensidades de bandas y los factores que las influencian.. Ejemplos de aplicación de los conceptos vistos anteriormente al análisis de los espectros I de vibración.
- B.10: Espectros electrónicos: Clasificación de los estados electrónicos. Reglas de selección. Principio de Frank-Condon. Forma de las bandas. Ejemplos sencillos. Moleculas diatómicas. Efectos diversos: predisociación, etc.
- B.11: Espectroscopía de resonancia magnética: Fundamentos. Poblaciones de spin. Niveles de energía. Espectros del átomo de hidrógeno y del átomo de helio. Resonancia nuclear en sólidos. Espectros de banda ancha. Acomplamiento dipolar. Estudio estructural por el método de los momentos. Resonancia nuclear en líquidos. Análisis de espectros. Corrimientos químicos.
- B.12: Espectros de resonancia del spin electrónico en solución: Radicales libres. Separaciones hiperfinas. Densidad de spin no apareado. Radicales orgánicos atrapados en sólidos. Efectos de 2º orden en el espectro. Fundamentos de la instrumentación para resonancia magnética. Determinación de sensibilidad del espe-ctrómetro. Determinación del factor espectroscópico g. Determinación del número de spines no apareados.
- B.13: Difracción de Rayos X: Red cristalina, planos, índices. Red recíproca. Diagramas de polvo. Determinación de estructuras. Fotografías de rotación, oscilación de Weissenberg. Determinación del grupo espacial.

Dr. MARIANO MARQUINONES
DIRECTOR DEL DEPARTAMENTO DE
QUÍMICA INORGÁNICA, ANALÍTICA Y
QUÍMICA FÍSICA

OBM