



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

QUIMICA FISICA IV/76  
ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

PROGRAMA

B.1: Introducción: Métodos fisicoquímicos para determinar estructuras moleculares. Niveles de energía de átomos y moléculas (aspecto cuántico). Curvas de energía potencial de una molécula diatómica. Espectroscopía de absorción. Espectroscopía Raman. Reglas de selección. Zonas del espectro. (unidades nomenclatura). Leyes de absorción. Espectrógrafos. Ancho de banda, de ranura, resolución. Aplicaciones.

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 la molécula aislada. Las condiciones de Eckart y la separación de la vibración de la rotación. Forma del Hamiltoniano. Energía de una molécula en fase condensada.

B.3: Espectros de rotación pura: El rotor rígido. Tipos de rotos. El tensor de inercia. Niveles de energía para distintos tipos de rotor. Distorsión centrífuga. Reglas de selección en IR y Raman. Influencia del spin nuclear. Ejemplos de espectros sencillos. 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 regla 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. Tratamiento cuántico. Reglas de selección. La anarmonicidad los sobretonos y las 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.

0824  
Aprobado por Resolución DR. 174/76



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

///...

**Simetría de las funciones de onda. Reglas de selección por la simetría. Sobretonos 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 las bandas en fase gaseosa. Comparación de los espectros IR y Raman. La depolarización de las bandas del espectro Raman. El efecto 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. Nociones sobre las intensidades de banda y los factores que las influyen. Ejemplos de aplicación de los conceptos vistos anteriormente al análisis de los espectros IR de vibración.**

**B.10: Espectros electrónicos: Clasificación de los estados electrónicos. Reglas de selección. Principio de Frank-Condon. Formas de las bandas. Ejemplos sencillos. Moléculas diatómicas. Efectos diversos: predissociación, etc. Sistemas aromáticos. Complejos.**

**B.11: Instrumental de espectroscopia molecular: Componentes de un espectrógrafo. Fuentes. Elementos dispersores. Prismas y redes: ventajas y desventajas. Colimadores. Lentes y espejos. Aplicación y registro. Ruido. Espectrógrafos de absorción de simple y doble haz. Parámetros físicos que influyen en su funcionamiento. Esquemas.**

**B.12: Espectroscopia de resonancia magnética: Fundamentos. Poblaciones de spin. Niveles de energía. Espectros del átomo de hidrógeno y del de helio. Resonancia nuclear en sólidos. Espectros de banda ancha. Acoplamiento dipolar. Estudio estructural por el método de los momentos. Resonancia**



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

///...

nuclear en líquidos. Análisis de los espectros. Corrimientos químicos.

B.13: Espectros de resonancia del spin electrónico en solución: Radicales libres. Separaciones hiperfinas. Densidad de spin n o apareado. Radicales orgánicos atrapados en sólidos. Efectos de segundo orden en el espectro. Fundamentos de la instrumentación para resonancia magnética. Determinación del número de spins no apareados.

B.14: Difracción de rayos X: Red cristalina, planos, índices. Red recíproca. Diagrama de polvo. Determinación de estructura. Fotografías de rotación, oscilación de Weissenberg. Determinación del grupo espacial.

*Olga Braxux de Mandiola*

*[Handwritten signature]*  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
DIRECCIÓN DE INVESTIGACIONES EN FÍSICA Y QUÍMICA FÍSICA

DR. OLGA BRAXUX de MANDIOLA  
Profesora Asociada  
Universidad Nacional de Bs. As.

Aprobado por Resolución DR. 174/76