

QI-32B INTRODUCCION A LA ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

Error! No se encuentra el origen de la referencia.

UNIDADES DOCENTES : 08 U.D. (4-0-4)

REQUISITOS : Autor

OBJETIVO : Estudio de la interacción electromagnética con la materia y de la información de estructura molecular y propiedades química que pueden obtenerse de los espectros moleculares. El nivel es introductorio y el énfasis se ha puesto en cubrir una amplia variedad de ramas de la espectroscopía y sus aplicaciones.

CONTENIDO

- 1) Introducción
 - Principio de Mecánica Cuántica
 - Partícula en caja. Atomo de hidrógeno
 - Rotor rígido. Oscilador armónico
 - Reglas de selección., ancho de banda, fotometría
2. Teoría de Grupos y Simetría Molecular
 - Operaciones de simetría
 - Representaciones, reducibilidad, tabla de caracteres. Aplicaciones a Teoría M.O.
3. Espectroscopía Microondas
 - Teoría, clasificación de moléculas, acoplamiento spin nuclear-rotación, efecto stark.
 - Aplicaciones a determinación estructural
4. Infrarrojo y Raman
 - IR, Molécula diatómica, reglas de selección, moléculas lineales y symmetric top, estadística de spin y simetría.
 - Teoría de Grupos y modos normales de vibración en moléculas poliatómicas, reglas de selección
 - Overtonos y bandas de combinación, resonancia de Fermi, frecuencias de grupos.
 - Raman: Scattering, reglas de selección, razón de depolarización exclusión mutua.
 - Aplicaciones a análisis químico, técnicas experimentales.
5. Resonancia Magnética Nuclear (NMR)
 - Teoría, desplazamiento químico, interacción dipolar, interacción spin-spin.
 - Equivalencia magnética, forma y ancho de banda
 - Técnicas experimentales, aplicaciones.

6. Ultravioleta y Visible

- Átomos: Espectro de hidrogenoides, acoplamiento spin-orbital, términos espectroscópico, efecto Zeeman y Stark.
- Moléculas Diatómicas: Introducción a Grupos continuos, tratamiento M.O. de moléculas diatómicas, correlación, reglas de selección, principio de Frank-Condon.
- Molécula Poliatómicas: Tratamiento M.O. Símbolo espectroscópico, reglas de selección e intensidad, modelos del electrón libre, cromóforos, aplicaciones.

Tentativas: Si hay disponibilidad de tiempo, Masers y Lasers, dicroísmo circular, Fotoluminiscencia.

BIBLIOGRAFIA

- R. Chang. Basic Principles of Spectroscopy. Mc Graw-Hill, N.Y. 1971.
- Y.D. Harmony. Introduction to Molecular Energies and Spectra. Holt Rinehart & Winston, N.Y. 1972.
- J.A. Salthouse. Point Groups Character Tables. Cambridge Univ. Press. London. 1972.
- L.H. Hall. Group Theory and Symmetry in Chemistry. Mc Graw-Hill, N.Y. 1969.
- E.J. Haws. The Interpretation of Proton Magnetic Resonance Spectra Heyden & Son, London. 1973.
- D. Steele Theory of Vibrational Spectroscopy. W.B. Saunders Phila. 1971.
- G. Herzberg Molecular Spectra and Molecular Structures I, II, III. Van Nostrand, N.Y. 1945.
- N.W. Hanna Quantum Mechanics in Chemistry. W.A. Benjamin. N.Y. 1966.

PUBLICACIONES

- | | | | | | |
|---|----------------------|--------------|-----|---------------|--------|
| - | M. Zeldin | J. Chem. Ed. | 43, | 17 | (1966) |
| - | J. White | J. Chem. Ed. | 44, | 128 | (1967) |
| - | M. Orchin | J. Chem. Ed. | 47, | 246, 372, 510 | (1970) |
| - | H.N. Voltrauer et al | J. Chem. Ed. | 47, | 526 | (1970) |
| - | O.H. Wheeler | J. Chem. | 37, | 234 | (1960) |
| - | F.E. Stafford | J. Chem. Ed. | 40, | 245 | (1963) |
| - | R.S. Tobías | J. Chem. Ed. | 44, | 2, 70 | (1967) |
| - | J.H. Wortman | J. Chem. Ed. | 39, | 630 | (1962) |
| - | F.E. Stafford | J. Chem. Ed. | 39, | 626 | (1962) |
| - | H.H. Jaffé | J. Chem. Ed. | 43, | 469 | (1966) |
| - | N.J. Juster | J. Chem. Ed. | 39, | 597 | (1962) |
| - | R.E. Gerkin | J. Chem. Ed. | 42, | 490 | (1963) |
| - | B. Chu | J. Chem. Ed. | 45, | 224 | (1968) |
| - | D.L. Rousseau | J. Chem. Ed. | 43, | 566 | (1966) |

ggc.