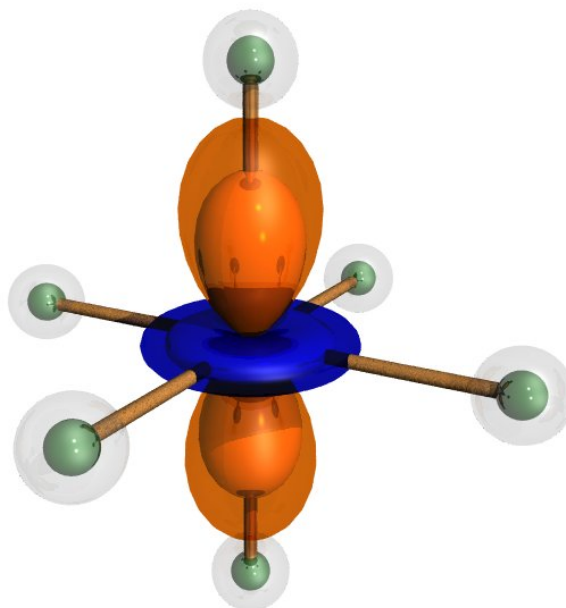


Espectroscopía Molecular

Víctor Luaña



Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Oviedo
Curso 2002-2003

Area de Conocimiento: Química Física
Departamento: Química Física y Analítica
Curso: 2001-2002

Curso: Tercero, **Ciclo:** Segundo, **Cuatrimestre:** Segundo

Especialidad: Común, **Caracter:** Troncal

Grupos de Teoría: 3, **Periodicidad:** 2 Horas/Semana

Grupos de Seminarios: 3, **Periodicidad:** 1 Horas/Semana

Tipo de Evaluación: Examen Final

Examen: 2002-06-15/10-14, 2002-09-06/9:30, 2003-02-?

Profesores: Víctor Luaña (A y C) y J. Manuel Recio (B)

E-mail: victor@nitrogeno.quimica.uniovi.es

Webpage: <http://www.uniovi.es/~quimica.fisica/qcg/asignaturas.html>

Libro de texto:

- V. Luaña, V. M. García Fernández, E. Francisco y J. M. Recio, *Espectroscopía Molecular*, (Universidad de Oviedo, 2002). ISBN: 84-8317-273-9. 269+x pag. 60 figs. 68 tablas.

Editado por el Servicio de Publicaciones de la Universidad.

Precio: 9.83 € (1636 pts.).

Se puede adquirir en: la librería de la Universidad en la calle Argüelles (10% de descuento con el carnet universitario).

Hay varios ejemplares en la biblioteca.

El precio está puesto para cubrir costes y que no compense fotocopiar el libro.

- V. Luaña, *Espectroscopía Molecular (transparencias docentes)*, 2003, <http://www.uniovi.es/~quimica.fisica/qcg/asignaturas.html>
- V. M. García Fernández y V. Luaña, *Problemas resueltos de Espectroscopía Molecular*, 2003, <http://www.uniovi.es/~quimica.fisica/qcg/asignaturas.html>

Temario:

- L1: Estados dependientes del tiempo y Espectroscopía** Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. Radiación electromagnética. Efecto de un campo EM sobre un sistema de cargas. Absorción y emisión de radiación electromagnética. Probabilidad de transición de Einstein. Reglas de selección. Forma y anchura de las líneas. Técnicas espectroscópicas y aplicaciones. Unidades usadas en Espectroscopía.
- L2: Rotación y vibración de moléculas diatómicas** La aproximación de Born-Oppenheimer. Movimiento nuclear de moléculas diatómicas. Reglas de selección roto-vibracionales. Espectros rotacionales de moléculas diatómicas. Espectros de rotación-vibración. El efecto Raman. Estados electrónicos degenerados: Acoplamiento de momentos angulares.
- L3: Rotación de moléculas poliatómicas** Movimiento nuclear en moléculas poliatómicas. Mecánica clásica de un rotor rígido. Mecánica cuántica de un rotor rígido. Espectroscopía de microondas: Aplicaciones estructurales.
- L4: Vibración de moléculas poliatómicas** Tratamiento clásico de las pequeñas

oscilaciones. Simetría molecular y vibraciones. Grupos funcionales y el espectro IR de baja resolución. Cálculo de la matriz de constantes de fuerza. Tratamiento mecanocuántico de la vibración.

A1: Origen de la espectroscopía: Hitos históricos tempranos

A2: Matrices y álgebra lineal Matrices. Determinantes. Transformaciones y Propiedades de las matrices. Sistemas lineales de ecuaciones. Algebra de vectores. Formas cuadráticas y Diagonalización de matrices.

A3: Simetría molecular y grupos puntuales de simetría Geometría molecular. Simetría puntual, elementos y operaciones de simetría. Grupos de operaciones de simetría. Los grupos de simetría molecular. Teoría de las representaciones matriciales de los grupos. Tablas de caracteres de los grupos puntuales de simetría. Producto directo de representaciones. Base de vectores propios de las *irreps* de un grupo. Operadores de proyección. Aplicaciones.

Bibliografía adicional:

- J. L. McHale, *Molecular spectroscopy* (Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 1999).
- I. N. Levine, *Espectroscopía molecular* (AC, Madrid, 1980).
- J. M. Hollas, *Modern Spectroscopy*, 3rd ed. (Wiley, Chichester, England, 1987).
- W. S. Struve, *Fundamentals of molecular spectroscopy* (John Wiley & Sons, New York, 1989).
- J. E. Bright Wilson, J. C. Decius, and P. C. Cross, *Molecular vibrations* (Dover, New York, 1980), corrected republication of the book originally published in 1955 by McGraw-Hill.
- J. D. Graybeal, *Molecular spectroscopy* (McGraw-Hill, New York, 1988).
- C. N. Banwell, *Fundamentos de espectroscopía molecular* (Ediciones del Castillo, Madrid, 1977), traducción de la segunda edición inglesa de McGraw-Hill.
- G. Herzberg, *Molecular structure and molecular spectra. I. Spectra of diatomic molecules*, 2 ed. (Van Nostrand Reinhold, New York, 1950).

- G. Herzberg, *Molecular structure and molecular spectra. III. Electronic spectra and electronic structure of polyatomic molecules* (Van Nostrand Reinhold, New York, 1966).
- P. F. Bernath, *Spectra of atoms and molecules* (Oxford University Press, Oxford, 1995).
- K. Nakamoto, *Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds. Part A: theory and applications in inorganic chemistry*, fifth ed. (Wiley-Interscience, New York, 1997).
- F. A. Cotton, *La teoría de grupos aplicada a la química* (Limusa, México, 1977), traducción de segunda edición inglesa publicada por Wiley en 1971.
- M. Hamermesh, *Group theory and its application to physical problems*, republication of the second (corrected) printing of the work first published by Addison-Wesley in 1962 ed. (Dover, New York, 1989).
- J. S. Lomont, *Applications of finite groups*, republication of the third printing of the work first published by Academic Press in 1959 ed. (Dover, New York, 1993).

Calendario del curso 2002–2003:

	Lu	Ma	Mi	Ju	Vi	Sa	Do	Lu	Ma	Mi	Ju	Vi	Sa	Do
Febrero	24	25	26	27	28									
Marzo						1	2	3	4	5	6	7	8	9
	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
	24	25	26	27	28	29	30	31						
Abril								1	2	3	4	5	6	
	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30				
Mayo											1	2	3	4
	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	
Junio														1
	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15

¡ 42 días \times 50' = 35.0 horas !

Exámenes: 2003-02-10, 16:00–20:00, A15; 2003-07-04, 10:00–14:00, A1,11,13,15; 2003-09-03,
9:00–12:30, A1