

PROGRAMA DE ESTRUCTURA MOLECULAR1) Estados dependientes del tiempo y espectroscopía.

Revisión de algunos conceptos de Mecánica Cuántica. Teoría de Perturbaciones dependientes del tiempo. Interacción de la materia con la radiación. Cinética de las transiciones. Absorción inducida y emisión estimulada. Emisión espiralante. Coeficientes de Einstein para la probabilidad de transición. Ley de Beer. Reglas de selección. Regla de Laporte. Tipos de espectroscopía. Laser.

2) Vibración y rotación de moléculas diatómicas.

Aproximación de Born-Oppenheimer. Solución de la ecuación de Schrödinger para el movimiento nuclear en una molécula diatómica. Energía total. Corrección mediante aplicación de la teoría de perturbaciones. Anarmonicidad. Acoplamiento vibración-rotación. Distorsión centrífuga. Funciones de Morse y de Verschni. Reglas de selección. Espectros de rotación pura. Espectros de vibración-rotación. Ramas P, Q y R.

3) Espectroscopía Raman.

Teorías cuántica y clásica de la difusión de la luz. Difusión Rayleigh y difusión Raman. Espectro de rotación pura. Líneas Stokes y anti-Stokes. Espectro de vibración-rotación.

4) Rotación de moléculas poliatómicas.

Movimiento nuclear en moléculas poliatómicas. Rotor rígido. Tensor de inercia. Operador Hamiltoniano rotacional. Operadores de momento angular. Trompo esférico. Trompo simétrico. Moléculas lineales, Trompo asimétrico. Espectros de rotación pura. Aplicación a la determinación estructural. Efecto Stark.

5) Vibración de moléculas poliatómicas.

Estudio clásico y cuántico de la vibración. Modos normales. Reglas de selección para transiciones de rotación pura y de vibración-rotación. Relación de despolarización. Regla de exclusión mutua. Sobretones y bandas de combinación. Resonancia de Fermi. Frecuencias de grupo. Espectros de vibración.

6) Espectroscopía electrónica.

Espectros electrónicos de moléculas diatómicas. Reglas de selección. Principio de Frank-Condon. Disociación y predistribución. Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas. Fluorescencia y Fosforescencia.

7) Espectroscopía fotoelectrónica.

Principios básicos. Espectros fotoelectrónicos atómicos y moleculares. Potenciales de ionización: adiabático y vertical. Teorema de Koopman. Espectroscopía fotoelectrónica de rayos X. Efecto Auger.

8) Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear.

Resonancia magnética. Momento magnético nuclear. Interacción con un campo magnético. Reglas de selección de las transiciones. Desplazamiento químico. Constante de apantallamiento. Contribuciones diamagnética, paramagnética y del disolvente. Interacción dipolar. Interacción spin-spin. Constante de acoplamiento. Forma y anchura de las líneas. Aplicaciones.

9) Espectroscopía de Resonancia de Spín Electrónico.

Dipolo magnético del electrón. Interacción con un campo magnético. Resonancia del electrón libre. Radicales. Interacción

nes de contacto de Fermi, Zeeman y dipolo-dipolo. Energía total de las interacciones magnéticas. Transiciones permitidas. Moléculas en estado triplete. Aplicaciones.

10) Espectroscopía Mössbauer.

Efecto Mössbauer. Desplazamiento isómero. Desdoblamientos cuadripolares. Desplazamiento Zeeman nuclear. Aplicaciones.

11) Difracción de electrones.

Fenómenos de interferencia. Ondas sinusoidales: Propagación y suma. Difracción de electrones. Ecuación de Wierl. Curvas experimental y teórica de difracción. Método de distribución radial. Aplicaciones.

12) Difracción de rayos X.

Cristales y sistemas cristalinos. Índices de Miller. Ley de difracción de Laue. Ley de difracción de Bragg. Método de Debye-Scherr. Determinación del tipo de red y de las dimensiones de la celda elemental. Factor de estructura. Síntesis de Fourier.

13) Propiedades eléctricas de las moléculas.

Revisión de conceptos electrostáticos en dieléctricos. Polarización. Campo molecular en un dielectrónico. Ecuación de Clausius-Mossotti. Dielectrónicos polares. Ecuación de Langevin. Ecuación de Debye. Determinación del momento dipolar y de la polarizabilidad molecular. Método de Halverstadd-Kumler.

14) Propiedades magnéticas de las moléculas.

Campos magnéticos en los medios materiales. Susceptibilidad magnética. Campo molecular dentro de la materia. Disgregamiento. Paramagnetismo. Ferromagnetismo. Ley de Curie.

BIBLIOGRAFIA

- Levine, I., N., Molecular Spectroscopy, first ed., Wiley-Interscience, New-York, 1975. (Para los capítulos 1 al 9).
- Chang, R., Principios básicos de espectroscopía, 1^a ed., Trad. I. Katime, Ed. AC, Madrid, 1977. (Para los capítulos 1 al 10).
- Barrow, G., M., Introduction to Molecular Spectroscopy, McGraw-Hill, New-York, 1973. (1 al 6).
- Herzberg, G., Molecular Spectra and Molecular Structure, Van Nostrand, New Jersey, 1966. (3 vol.) (1 al 9).
- Poole, C., F., y Faraeh, H., A., Teoría de la Resonancia Magnética, 1^a ed., Trad. de J. Vilardell, Reverté, Barcelona, 1976. (E, 11).
- Wheatley, P., J., The determination of Molecular Structure, University Press, 1959. (11 y 12).
- Lorrain, P., y Corson, D., F., Campos y Ondas Electromagnéticas, 1^a ed., Trad. de J. A. Vallés, Selecciones Científicas, Madrid, 1972. (13 y 14).
- Reitz, J., y Milford, F., Fundamentos de la Teoría Electromagnética, 1^a ed., Trad. de S. Blumovicz, UTEHA, México, 1969. (13).
- Messiah, A., Mecánica Cuántica, Trad. de C. Azcárate y J. Tornero, Madrid, 1973.(2 vol.). (Para el cap. 1).