

Codi: 20567

Curs 97-98  
1er. semestre

Llicenciació de Química

Espectroscòpia

### Introducció general a l'espectroscòpia

- Naturalesa de la radiació electromagnètica. Energia i tipus de radiació.
- Espectre electromagnètic i tècniques espectroscòpiques
- Aproximació de Born-Oppenheimer. Transicions atòmiques i moleculars. Moment dipolar de la transició i regles de selecció.
- Principi d'incertesa. Amplada de ratlla espectral. Escales de temps.

### Simetria i grups puntuals de simetria

- Elements de simetria
- Grups puntuals de simetria. La seva classificació.
- Determinació sistemàtica del grup puntual de simetria d'una molècula
- Algunes aplicacions de la simetria: isometria òptica. Moment dipolar.

### Teoria de grups i taules de caràcters

- Propietats dels grups
- Classes d'elements de simetria
- Comportament simètric o antisimètric d'una propietat molecular en relació a una operació de simetria. Comportament en relació a la simetria total de la molècula. Representacions irreductibles o espècies de simetria.
- Taules de caràcters. Les seves característiques.
- Representacions reductibles i descomposició en els components irreductibles

### Espectroscòpia rotovibracional (IR,Raman)

- Model del rotor rígid-oscil.lador harmònic. Nivells energètics rotacionals i vibracionals. Termes de correcció de l'energia. Anharmonia.
- Aplicació a molècules diatòmiques. Regles de selecció. Energia de dissociació.
- Vibració de molècules poliatòmiques. Modes normals de vibració. Tipus de vibracions: tensió i deformació. Regles de selecció rotovibracional.
- Efecte Raman. Regles de selecció Raman. Regla de mitjua exclusió.
- Espectroscòpies d'absorció IR i de dispersió Raman. Zona espectral rotovibracional.
- Aplicació de la teoria de grups a l'anàlisi vibracional.

### **BIBLIOGRAFIA**

COTTON, F.A. *La teoria de grups aplicada a la química*.2a ed. Limusa, 1977.

DAVIDSON, G. *Group theory for chemists*. McMillan, 1991.

ISBN 0-333-49297-8

Nota: podria substituir totalment o parcial el llibre següent.

DAVIDSON, G. *Introducción a la teoria de grupos para químicos*. Reverté, 1979.

Nota: esgotat.

ORCHIN; JAFF. *Simetria, orbitales y espectros*. Bellaterra, 1975.

ISBN 84-7290-014-2