

Plan 293 Lic. en Química

Asignatura 44243 ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

Grupo 1

### Presentación

Interacción radiación-materia. Espectroscopía de rotación y vibración. Espectros electrónicos y fotoelectrónicos. Espectroscopía Láser. Espectroscopía Raman. Espectroscopías de resonancia magnética.

### Programa Básico

### Objetivos

Introducción a la Espectroscopía y a las técnicas Espectroscópicas

### Programa de Teoría

#### Tema 1. ESPECTROSCOPIA: FUNDAMENTOS

Introducción.- Radiación electromagnética y materia.- Procesos resonantes y no resonantes: Dispersión.- Tratamiento clásico de la interacción radiación-materia.- Tratamientos semiclásico: Coeficientes de Einstein y momento de transición.- Emisión espontánea.- Reglas de selección.

#### Tema 2.- TRANSICIONES ESPECTROSCÓPICAS

Regiones del espectro electromagnético: Tipos de Espectros.- Población de los niveles de energía: Intensidades.- Ley de Bouguer-Lambert-Beer.- Técnicas experimentales: Aspectos generales.- Forma y anchura de línea: Factores que la determinan.

#### Tema 3.- LÁSER

Fundamentos del Láser.- Métodos de inversión de población.- Propiedades de la radiación láser.- Láseres de estado sólido.- Láseres de gases.- Láseres químicos y de excímeros.- Láseres de colorantes.- Aplicaciones.

#### Tema 4.- ESPECTROS DE ROTACIÓN

Mecánica clásica de la rotación molecular: Clasificación de las moléculas.-Espectros de moléculas diatómicas y lineales.- Población de niveles e intensidad de las transiciones.- Distorsión centrífuga.- Espectros de Trompos simétricos.-Espectros de trompos asimétricos.- Determinación de la estructura molecular.- Aspectos experimentales de la Espectroscopía de microondas: Efecto Stark y momento dipolar.

#### Tema 5.- ESPECTROS DE VIBRACIÓN DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS

Introducción.- Aproximación del oscilador armónico: Niveles de energía.- Anarmonicidad.- Potenciales empíricos.- Reglas de selección: Espectros.- Energías de disociación.- Espectros de rotación-vibración.

#### Tema 6.- ESPECTROS DE VIBRACIÓN DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS

Introducción. Tratamiento clásico: Modos y coordenadas normales.- Tratamiento mecanocuántico: Niveles de energía.- Consideraciones de simetría.- Reglas de selección: Espectros de vibración.- Frecuencias de grupo.- Técnicas experimentales.

#### Lección 7.- ESPECTROS RAMAN

Introducción.- Polarizabilidad molecular: Tensor de polarizabilidad.- Teoría clásica de la dispersión Rayleigh y Raman.- Representación cuántica.- Espectros de rotación pura.- Espectros de vibración.- Polarización y Efecto Raman.- Técnicas experimentales.

#### Lección 8.- ESPECTROS ELECTRÓNICOS DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS

Introducción: Orbitales Moleculares y Configuraciones Electrónicas.-Términos y Estados electrónicos.- Reglas de

Selección.- Estructura de vibración: Principio de Frank-Condon.- Energías de disociación.- Estructura de rotación: parábola de Fortrat.- Predisociación.

#### Lección 9.- ESPECTROS ELECTRÓNICOS DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS

Introducción.- Moléculas AH<sub>2</sub>: Espectro del agua.- Espectro del amoníaco: Correlación de grupos puntuales.- Espectros del formaldehído, butadieno y benceno.- Cromóforos.- Fluorescencia y fosforescencia: Diagrama de Jablonski.- Fluorescencia inducida por láser.- Espectros multifotónicos.- Espectroscopía de UV-VIS: Técnicas experimentales y aplicaciones analíticas.

#### Lección 10.- ESPECTROS FOTOELECTRÓNICOS

Introducción.- Procesos de Ionización.-Técnicas experimentales.- Espectroscopía fotoelectrónica de ultravioleta (UPS): Interpretación de los espectros.- Interpretación de los espectros fotoelectrónicos de rayos X (XPS o ESCA): Desplazamiento químico.

#### Tema 11.- ESPECTROS DE RESONANCIA MAGNÉTICA

Introducción.- Estados de spin nuclear y electrónico: Reglas de selección.- Espectroscopia de resonancia magnética nuclear <sup>1</sup>H-NMR.- El desplazamiento químico: Contribuciones al factor de apantallamiento.- Estructura fina: Acoplamiento.- Aspectos experimentales: Espectroscopia con transformadas de Fourier.- Procesos de relajación.- Espectroscopia de resonancia de spin electrónico (ESR): estructura fina e hiperfina.- Técnicas experimentales y aplicaciones.

---

### Programa Práctico

Práctica 1.- ESPECTROS ATÓMICOS: Espectros de He, H, Na

Práctica 2.- ESPECTROS DE ROTACIÓN: Espectro de OCS

Práctica 3.- ESPECTROS DE VIBRACIÓN: Espectro de CO

Práctica 4.- ESPECTROS ELECTRÓNICOS: Espectro de I<sub>2</sub>

Práctica 5.- FLUORESCENCIA INDUCIDA POR LÁSER: Espectro de I<sub>2</sub>

Práctica 6.- ESPECTROSCOPIA LASER-RAMAN: Espectro de CCl<sub>4</sub>

---

### Evaluación

Examen escrito y valoración de trabajos personales (80%).

Trabajo de laboratorio (20%).

---

### Bibliografía

- \* HOLLAS, J.M., "Modern Spectroscopy", John Wiley & Sons (2004)
  - \* HOLLAS, J.M., "High resolution Spectroscopy", John Wiley & Sons (1998)
  - \* BERNATH, P., "Spectra of Atoms and Molecules", Oxford University Press (1995)
  - \* BANWELL, C.N., E. M. McCASH "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", McGraw-Hill (1994)
  - \* STEINFELD, J.I., "Molecules and Radiation", MIT Press (1985)
  - \* HARRIS, D.C., BERTOLUCCI, M.D., "Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy", Dover (1989)
  - \* REQUENA, A., ZÚÑIGA, J., "Espectroscopía", Pearson Prentice Hall (2004)
  - \* ELLIS, A. M., FEHER, M., WRIGHT, T. G., "Electronic and photoelectron Spectroscopy: Fundamentals and case studies", Cambridge University Press (2005)
-

## Presentación

Interacción radiación-materia. Espectroscopía de rotación y vibración. Espectros electrónicos y fotoelectrónicos. Espectroscopía Láser. Espectroscopía Raman. Espectroscopías de resonancia magnética.

## Programa Básico

## Objetivos

Introducción a la Espectroscopía y a las técnicas Espectroscópicas

## Programa de Teoría

### Tema 1. ESPECTROSCOPIA: FUNDAMENTOS

Introducción.- Radiación electromagnética y materia.- Procesos resonantes y no resonantes: Dispersión.- Tratamiento clásico de la interacción radiación-materia.- Tratamientos semiclásico: Coeficientes de Einstein y momento de transición.- Emisión espontánea.- Reglas de selección.

### Tema 2.- TRANSICIONES ESPECTROSCÓPICAS

Regiones del espectro electromagnético: Tipos de Espectros.- Población de los niveles de energía: Intensidades.- Ley de Bouguer-Lambert-Beer.- Técnicas experimentales: Aspectos generales.- Forma y anchura de línea: Factores que la determinan.

### Tema 3.- LÁSER

Fundamentos del Láser.- Métodos de inversión de población.- Propiedades de la radiación láser.- Láseres de estado sólido.- Láseres de gases.- Láseres químicos y de excímeros.- Láseres de colorantes.- Aplicaciones.

### Tema 4.- ESPECTROS DE ROTACIÓN

Mecánica clásica de la rotación molecular: Clasificación de las moléculas.-Espectros de moléculas diatómicas y lineales.- Población de niveles e intensidad de las transiciones.- Distorsión centrífuga.- Espectros de Trompos simétricos.-Espectros de trompos asimétricos.- Determinación de la estructura molecular.- Aspectos experimentales de la Espectroscopía de microondas: Efecto Stark y momento dipolar.

### Tema 5.- ESPECTROS DE VIBRACIÓN DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS

Introducción.- Aproximación del oscilador armónico: Niveles de energía.- Anarmonicidad.- Potenciales empíricos.- Reglas de selección: Espectros.- Energías de disociación.- Espectros de rotación-vibración.

### Tema 6.- ESPECTROS DE VIBRACIÓN DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS

Introducción. Tratamiento clásico: Modos y coordenadas normales.- Tratamiento mecanocuántico: Niveles de energía.- Consideraciones de simetría.- Reglas de selección: Espectros de vibración.- Frecuencias de grupo.- Técnicas experimentales.

### Lección 7.- ESPECTROS RAMAN

Introducción.- Polarizabilidad molecular: Tensor de polarizabilidad.- Teoría clásica de la dispersión Rayleigh y Raman.- Representación cuántica.- Espectros de rotación pura.- Espectros de vibración.- Polarización y Efecto Raman.- Técnicas experimentales.

### Lección 8.- ESPECTROS ELECTRÓNICOS DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS

Introducción: Orbitales Moleculares y Configuraciones Electrónicas.-Términos y Estados electrónicos.- Reglas de Selección.- Estructura de vibración: Principio de Frank-Condon.- Energías de disociación.- Estructura de rotación: parábola de Fortrat.- Predisociación.

### Lección 9.- ESPECTROS ELECTRÓNICOS DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS

Introducción.- Moléculas AH<sub>2</sub>: Espectro del agua.- Espectro del amoníaco: Correlación de grupos puntuales.-

---

Espectros del formaldehído, butadieno y benceno.- Cromóforos.- Fluorescencia y fosforescencia: Diagrama de Jablonski.- Fluorescencia inducida por láser.- Espectros multifotónicos.- Espectroscopía de UV-VIS: Técnicas experimentales y aplicaciones analíticas.

#### Lección 10.- ESPECTROS FOTOELECTRÓNICOS

Introducción.- Procesos de Ionización.-Técnicas experimentales.- Espectroscopía fotoelectrónica de ultravioleta (UPS): Interpretación de los espectros.- Interpretación de los espectros fotoelectrónicos de rayos X (XPS o ESCA): Desplazamiento químico.

#### Tema 11.- ESPECTROS DE RESONANCIA MAGNÉTICA

Introducción.- Estados de spin nuclear y electrónico: Reglas de selección.- Espectroscopia de resonancia magnética nuclear  $^1\text{H-NMR}$ .- El desplazamiento químico: Contribuciones al factor de apantallamiento.- Estructura fina: Acoplamientos.- Aspectos experimentales: Espectroscopia con transformadas de Fourier.- Procesos de relajación.- Espectroscopia de resonancia de spin electrónico (ESR): estructura fina e hiperfina.- Técnicas experimentales y aplicaciones.

---

#### Programa Práctico

Práctica 1.- ESPECTROS ATÓMICOS: Espectros de He, H, Na

Práctica 2.- ESPECTROS DE ROTACIÓN: Espectro de OCS

Práctica 3.- ESPECTROS DE VIBRACIÓN: Espectro de CO

Práctica 4.- ESPECTROS ELECTRÓNICOS: Espectro de I<sub>2</sub>

Práctica 5.- FLUORESCENCIA INDUCIDA POR LÁSER: Espectro de I<sub>2</sub>

Práctica 6.- ESPECTROSCOPIA LASER-RAMAN: Espectro de CCl<sub>4</sub>

---

#### Evaluación

Examen escrito y valoración de trabajos personales (80%).

Trabajo de laboratorio (20%).

---

#### Bibliografía

- \* HOLLAS, J.M., "Modern Spectroscopy", John Wiley & Sons (2004)
  - \* HOLLAS, J.M., "High resolution Spectroscopy", John Wiley & Sons (1998)
  - \* BERNATH, P., "Spectra of Atoms and Molecules", Oxford University Press (1995)
  - \* BANWELL, C.N., E. M. McCASH "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", McGraw-Hill (1994)
  - \* STEINFELD, J.I., "Molecules and Radiation", MIT Press (1985)
  - \* HARRIS, D.C., BERTOLUCCI, M.D., "Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy", Dover (1989)
  - \* REQUENA, A., ZÚÑIGA, J., "Espectroscopía", Pearson Prentice Hall (2004)
  - \* ELLIS, A. M., FEHER, M., WRIGHT, T. G., "Electronic and photoelectron Spectroscopy: Fundamentals and case studies", Cambridge University Press (2005)
-