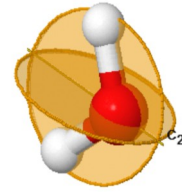


una nueva versión revisada del curso de 2021 a 2023

Espectroscopía Atómica y Molecular I

(15.5. - 30.7.2024) PEDECIBA

Inscripciones hasta el 15 de mayo

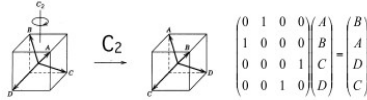


Teoría de grupos con aplicaciones en física molecular

Relación entre la teoría de la representación y la mecánica cuántica

Vibraciones en las moléculas - Modos normales

Reglas de selección IR y Raman

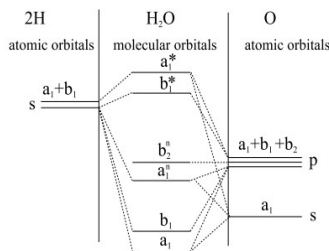


Espectroscopia electrónica

Espectroscopia rotacional

Espectroscopia vibracional

Espectroscopia Raman



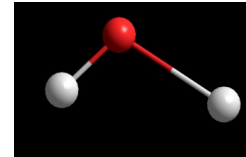
Representation Γ_N

Characters of reducible representation

E	C_2 (z)	σ_v (xz)	σ_d (yz)
3	1	3	1

Direct sum of irreducible representation

A_1	A_2	B_1	B_2
2	0	1	0



Allowed / forbidden vibronational transitions

Operator	A_1	A_2	B_1	B_2	Total
Linear (IR)	2	0	1	0	3/0
Quadratic (Raman)	2	0	1	0	3/0
IR + Raman	2	----	1	0	3/0

Espectroscopía atómica y molecular I

responsable: Martina Kieninger

Tema 1: Simetría molecular y Teoría de grupos

La noción de simetría (Simetría molecular - Operaciones de simetría - Elementos de simetría - Teoría de grupos (Definición de grupo - Grupos puntuales- Clasificación de grupos puntuales)

Tema 2: Representaciones matriciales de grupos: Tablas de Caracteres

Representación matricial de grupos puntuales - Representaciones equivalentes y reducibles- Tablas de caracteres y aplicaciones de ellos

Tema 3: Mecánica cuántica y la teoría de grupos

Representación matricial de la ecuación de Schrodinger - Simetría del operador Hamiltoniano - Operadores de proyección - Representaciones directas del producto - Integrales y reglas de selección

Tema 4: Espectroscopia atómica

Momento angular - El átomo de hidrógeno y el espectro de un electrón - Modelo vectorial - Acoplamiento espín-órbita - Átomos multielectrónicos - Reglas de selección

Tema 5: Estructura Hiperfina y los Efectos Zeeman, Paschen-Back, Stark

Espectros atómicos - Estructura hiperfina - Intensidad de las líneas atómicas - Efecto Zeeman - Efecto Paschen-Back - Efecto Stark

Tema 6: Espectroscopia rotacional y sus reglas de selección

Rotación de los cuerpos rígidos Moléculas diatómicas y lineales Reglas de selección Distorsión centrífuga Momento angular vibratorio - Intensidades de línea para las moléculas diatómicas y lineales - Estadística de Boltzmann

Tema 7: Espectroscopia rotacional y el uso en la determinación de la estructura Topes simétricos Molécula y Momento Angular Fijado en el Espacio - o Espectro de rotación Distorsión centrífuga Intensidad de la línea Topes asimétricos (Reglas de selección, Intensidad de la línea) Determinación de la estructura

Tema 8: Espectroscopia Vibracional

Moléculas diatómicas Funciones de onda para los osciladores armónicos y anarmónicos - Reglas de selección vibratoria para moléculas diatómicas - Transiciones rotación-vibración - Movimiento vibratorio en moléculas poliatómicas: Descripción mecánica clásica - Descripción mecánica cuántica Coordenadas internas Coordenadas de simetría Simetría de los modos normales

Tema 9: Transiciones vibratorias

Reglas de selección para las transiciones vibratorias Transiciones rotación-vibración en moléculas lineales Estados vibratorios excitados en moléculas lineales

Tema 10: Efecto Raman - Espectroscopia Raman: Vibración-Rotación

Modelo clásico - Modelo cuántico - Polarización - Efecto Raman (rotación) - Moléculas diatómicas Líneas de Stoke - Acoplamiento Vibración-Rotación - Intensidades de las líneas: Rayleigh y Raman Cálculos de la intensidad para las vibraciones

Ejercicios que corresponden al curso Espectroscopia computacional

Taller 1: Introducción en gaussian16 y orca

Taller 2: Programas para la determinación de simetrías en moléculas orgánicas e inorgánicas

Taller 3: Derivación de las tablas de caracteres, programas para la determinación de caracteres

Taller 4: Aplicación de la teoría de grupos a mecánica cuántica. Ejemplos usando programas como Hyperchem. Base mecánica cuántica para el análisis de la población de Mulliken

Aplicaciones

Tras la introducción a los paquetes de programas utilizados para calcular e interpretar espectros, pasaremos a algunos ejemplos de aplicación

1: Calculando los espectros infrarrojos y Raman de tioles simples y complejos de tioles-agua

2: Modelización de la espectroscopia de microondas: Espectro hiperfino para H₂C₆N

3: Dicroísmo circular vibratorio (VCD): Estudiando la quiralidad:

La oxidación Baeyer-Villiger de (+)-(1R,5S)-biciclo[3.3.1]-nonano-2,7-diona tiene cuatro posibles productos de ceto-lactona. Los cálculos del VCD pueden determinar cuál es el producto real comparando sus espectros previstos con el observado.

4: Espectros de ORD de Oxiranos sustituidos

Cuando la luz polarizada viaja a través de algunos materiales, se rota con respecto a la dirección del movimiento. Tales materiales incluyen cristales, moléculas de espín polarizadas en la fase gaseosa y moléculas quirales. Al igual que otros efectos observados de la quiralidad, la rotación óptica difiere para la luz polarizada circularmente a la izquierda y a la derecha, y puede proporcionar información importante sobre la estructura molecular de las moléculas quirales. Las rotaciones ópticas observadas varían para la misma sustancia según la longitud de onda de la luz incidente. Esta variación se conoce como dispersión rotatoria óptica (ORD). Los resultados de la ORD grafican la rotación observada para varias longitudes de onda de la luz incidente. Este gráfico muestra las rotaciones ópticas previstas para una serie de compuestos de oxirano sustituidos para una serie de frecuencias de luz incidente en el rango de 350-650 nm

5: Constantes de acoplamiento hiperfino y densidad del espín $F_2CC\equiv CH$

Se ha estudiado el radical 1,1-difluoroprop-2-ynyl, $F_2CC\equiv CH$, una variante parcialmente fluorada del radical propargilo: La combinación de los datos espectrales de microondas observados y el cálculo de varios tensores hiperfinos determinó que el compuesto tiene una estructura plana, un resultado algo inesperado.