

Tema 12.- Espectroscopía Electrónica Molecular

12.1. Símbolo de los Términos Moleculares.

12.2. Transiciones entre estados electrónicos de moléculas biatómicas.

Estructura fina vibracional.*

12.3. Absorción de radiación UV-visible en moléculas poliatómicas.

12.4. Transiciones entre el estado fundamental y estados excitados.

12.5 Transiciones singulete-singulete: absorción y fluorescencia.

12.6 Cruzamiento entre sistemas y fosforescencia.

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, teal-colored font. The '99' is significantly larger and more prominent than the 'Cartagena' part. The text is set against a background of light blue and orange brushstrokes.

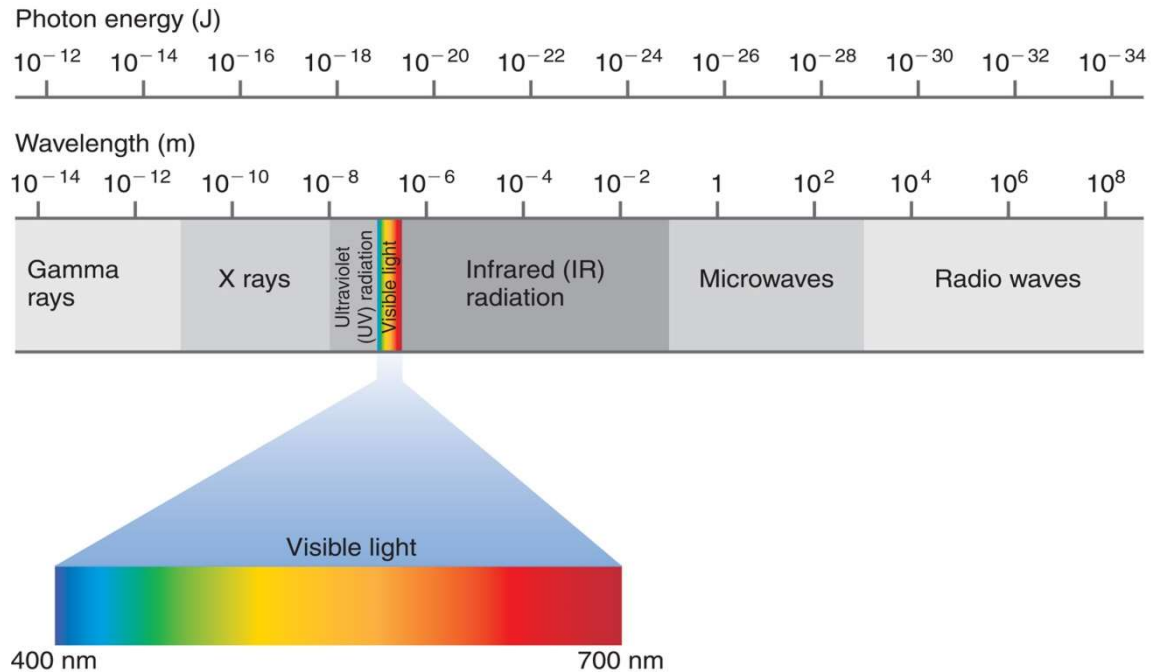
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

$$\Delta E_{\text{elec}} > \Delta E_{\text{vibrational}} > \Delta E_{\text{rotational}}$$

El espectro electromagnético



© 2010 Pearson Education, Inc.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Términos Moleculares Electrónicos

$$M_L = \sum_{i=1}^n m_{li} \quad \text{and} \quad M_S = \sum_{i=1}^n m_{si}$$

$$\Lambda = |M_L|$$

Λ	0	1	2	3
Symbol	Σ	Π	Δ	Φ

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

$$2S+1\Lambda$$

TABLE 25.1 TERMS FOR GROUND-STATE SECOND ROW DIATOMICS

Molecule	Electron Configuration	Ground-State Term
H_2^+	$(1\sigma_g)^1$	$2\Sigma_g^+$
H_2	$(1\sigma_g)^2$	$1\Sigma_g^+$
He_2^+	$(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^1$	$2\Sigma_u^+$
Li_2	$(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(2\sigma_g)^2$	$1\Sigma_g^+$
B_2	$(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(2\sigma_g)^2(2\sigma_u^*)^2(1\pi_u)^1(1\pi_u)^1$	$3\Sigma_g^-$
C_2	$(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(2\sigma_g)^2(2\sigma_u^*)^2(1\pi_u)^2(1\pi_u)^2$	$1\Sigma_g^+$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

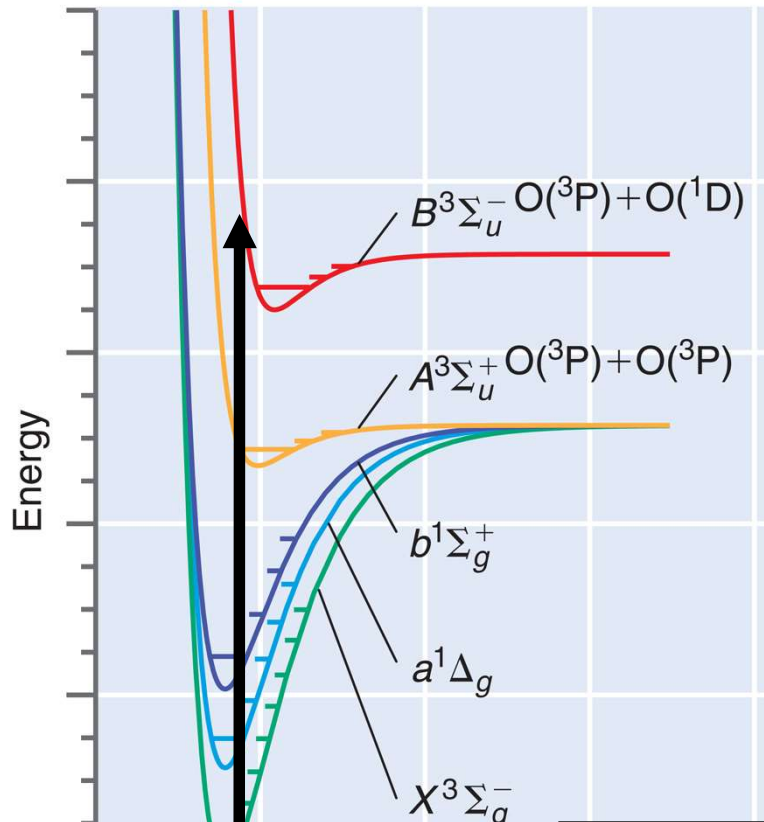
~ 2 $(1\sigma_g)^2(1\sigma_u)^2(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^2(3\sigma_g)^2(1\pi_u)^2(1\pi_u)^2(1\pi_g)^2(1\pi_g)^2$ $2\Sigma_g$

$(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(1\pi_g^*)^2(1\pi_g^*)^2$ $1\Sigma_g^+$

Transiciones entre estados electrónicos

Reglas de Selección: $\Delta\Lambda = 0, \pm 1$, and $\Delta S = 0$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

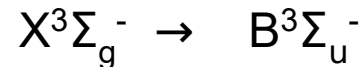


Biatómicas homonucleares:

$$u \leftrightarrow g$$

$$+ \leftrightarrow + \quad - \leftrightarrow -$$

Primer tránsito permitido:



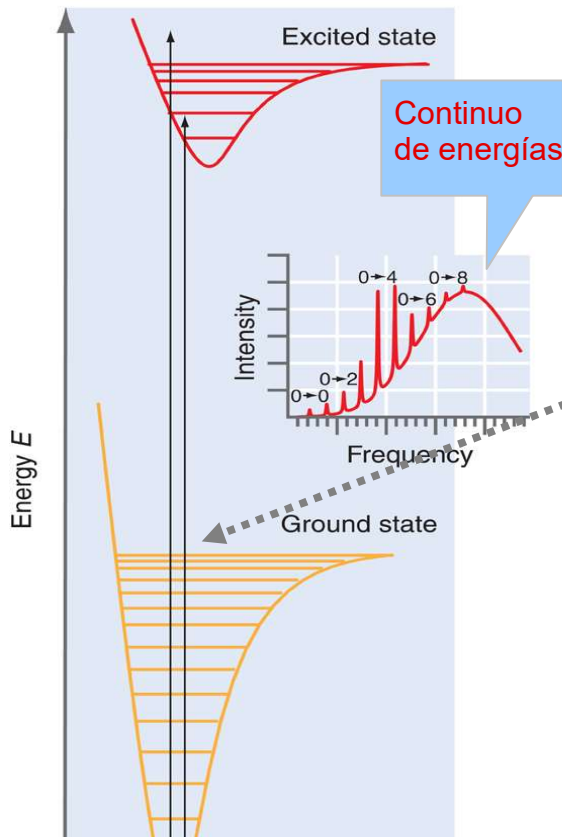
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

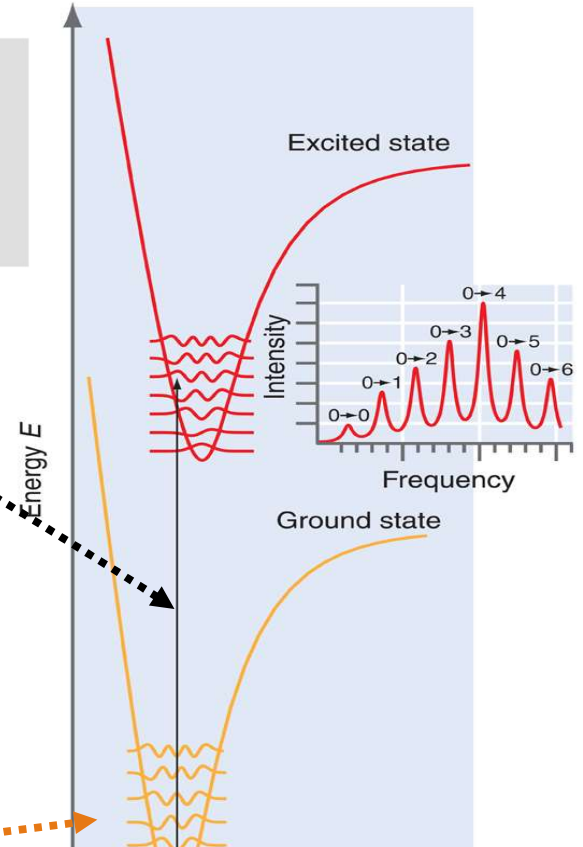
... los estados más bajos de O₂

Estructura Fina Vibracional de Transiciones Electrónicas



Continuo de energías

Principio de Franck-Condon:
 Los tránsitos entre estados electrónicos son verticales.
 (no hay cambio en la geometría nuclear)



$$S^2 = \left| \int (\phi_f^{vibrational})^* \phi_i^{vibrational} d\tau \right|^2$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

El tránsito más favorable se da entre los niveles vibracionales que

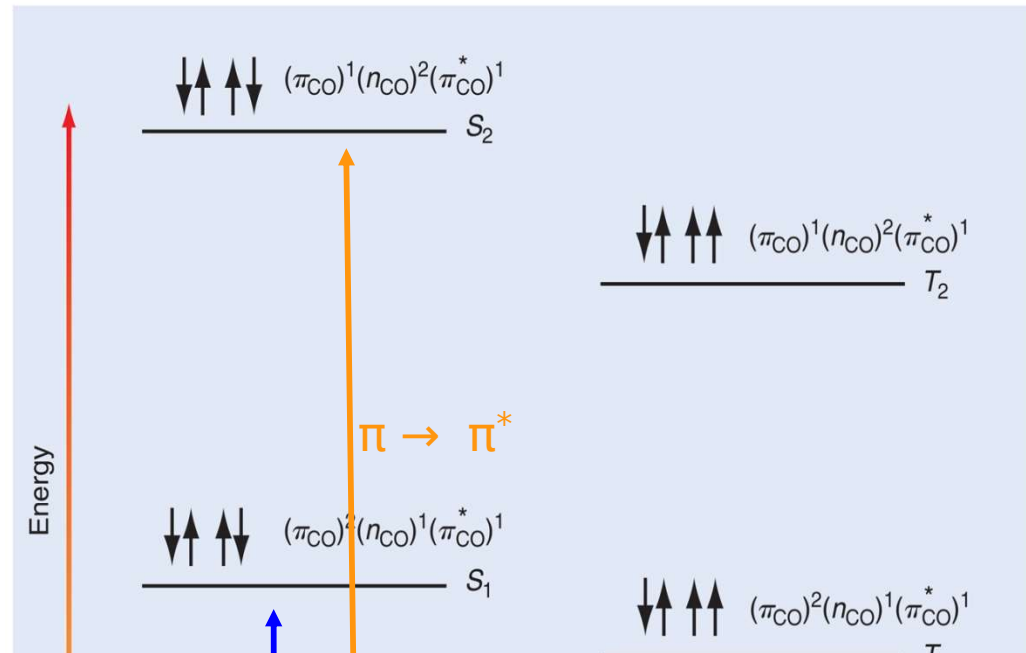
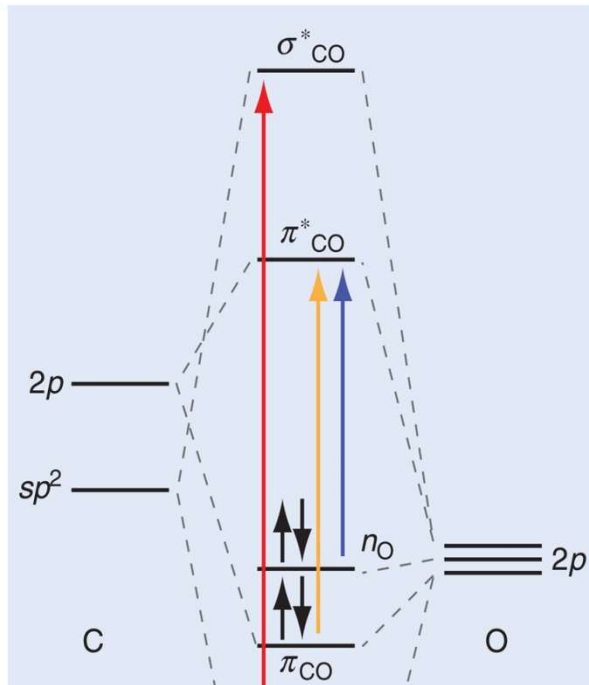
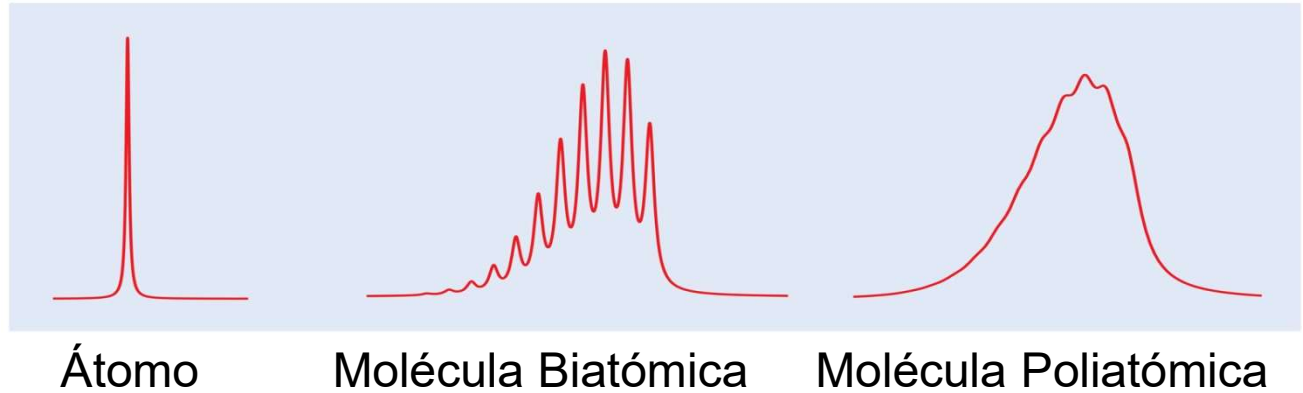
CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Absorción de luz UV-Vis en moléculas poliatómicas

Intensidad de absorción en el UV-Vis



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Transiciones entre el Estado Fundamental y Estados Excitados

Cromóforo es un motivo químico incluido en una molécula que absorbe radiación a casi la misma longitud de onda en diferentes moléculas.

Ley de Lambert-Beer

$$\log\left(\frac{I_t}{I_0}\right) = -\epsilon l c$$

Coefficiente de absorción integral

$$A = \int \epsilon(\nu) d\nu$$

Medida de la probabilidad que un fotón incidente sea absorbido para un tránsito electrónico dado.

TABLE 25.2 CHARACTERISTIC PARAMETERS FOR COMMON CHROMOPHORES

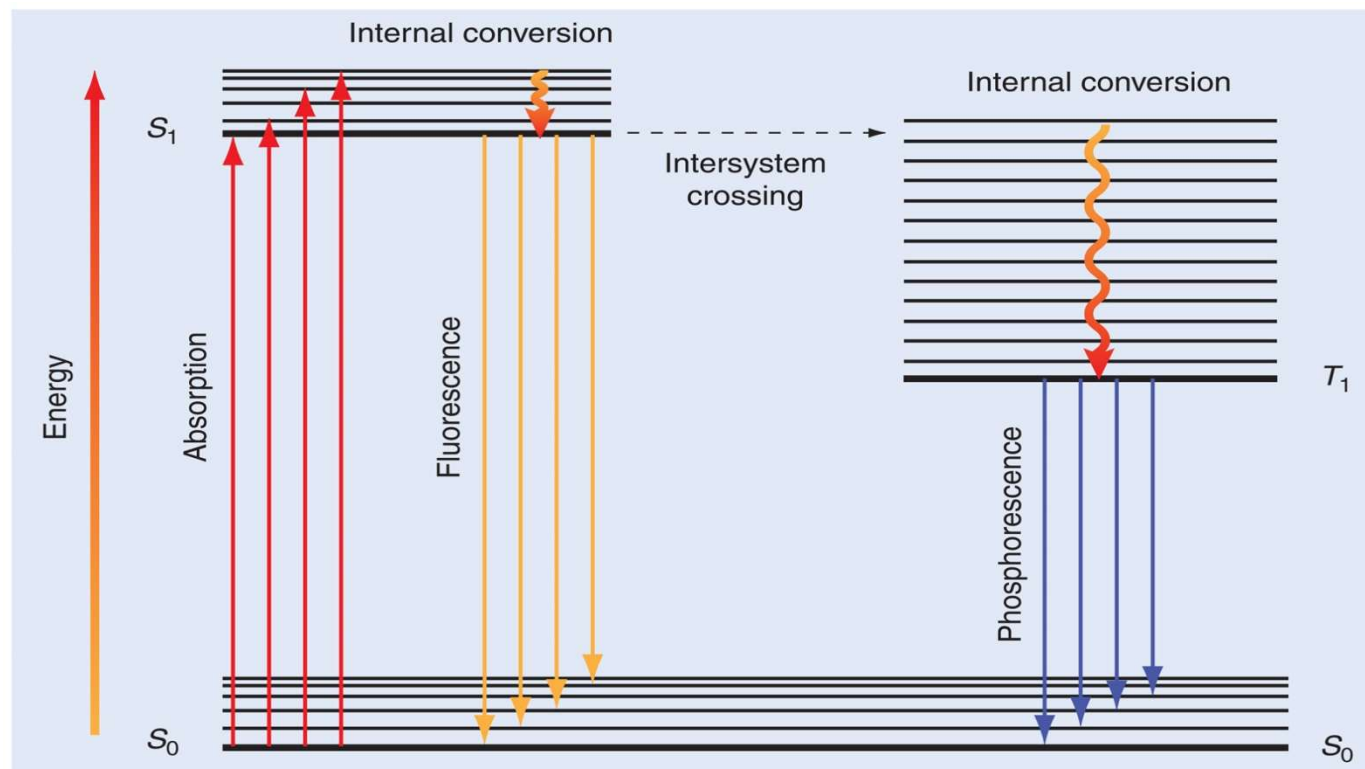
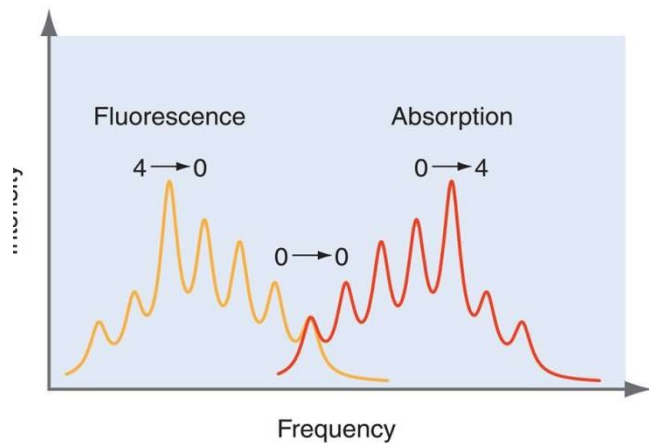
Chromophore	Transition	λ_{max} (nm)	ϵ_{max} (dm ³ mol ⁻¹ cm ⁻¹)
N=O	$n \rightarrow \pi^*$	660	200
N=N	$n \rightarrow \pi^*$	350	100
C=O	$n \rightarrow \pi^*$	280	20
NO ₂	$n \rightarrow \pi^*$	270	20
C ₆ H ₆ (benzene)	$\pi \rightarrow \pi^*$	260	200
C=N	$n \rightarrow \pi^*$	240	150
C=C—C=O	$\pi \rightarrow \pi^*$	220	2×10^5

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

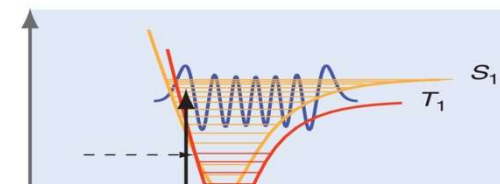
Procesos de Absorción y Desexcitación Electrónica Radiativos y No Radiativos



© 2010 Pearson Education, Inc.

© 2010 Pearson Education, Inc.

Cruzamiento entre Sistemas:



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Distance R