



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**Determinación de la Vibración N-S en el Espectro del Infra
Rojo para Compuestos Inorgánicos**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
Q U Í M I C O
P R E S E N T A

Ma. Cristina Castro Pedrozo

México, D. F.

1973

2056



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

	PRESIDENTE:	Dr. Francisco Esparza Herrada
JURADO ASIGNADO	VOCAL:	Dra. Rocío Pozas Horcasitas
ORIGINALMENTE	SECRETARIO:	Dr. Víctor Coronado Bravo
SEGUN SU TEMA	1er. SUPLENTE:	Q.F.B. Graciela Chávez Beltrán
	2do. SUPLENTE:	Q.F.B. Rosa Martha González M.

SITIO DONDE SE DESARROLLO EL TEMA:

**División de Estudios Superiores
de la Facultad de Química**

SUSTENTANTE: Ma. Cristina Castro Pedrozo
ASESOR DEL TEMA Dr. Francisco Esparza Herrada

A MIS PADRES:

Con mi agradecimiento para toda la vida, por el cariño y apoyo moral que me han brindado, ya que han sido el motivo de la realización de mi carrera.

CON CARINO PARA MIS HERMANOS:

NORA

ROCIO

ALBERTO

ROGELIO

A FELIPE CON AMOR

A MI ABUELITA TERESITA

A LA MEMORIA DE MI ABUELITA AGUE

A MIS TIOS Y PRIMOS

A MIS MAESTROS:

Agradeciendo al Dr. Francisco Esparza Herrada,
con sus indicaciones tan valiosas para la realizaci
ción de este trabajo.

A MIS AMIGOS

A LA UNIVERSIDAD

C O N T E N I D O

1. INTRODUCCION
 - 1.1 HISTORIA

2. TEORIA
 - 2.1 ESPECTRO ELECTROMAGNETICO
 - 2.2 MOMENTO DIPOLO
 - 2.3 ENERGIA DE MOLECULAS Y GRADOS DE LIBERTAD
 - 2.4 CONSTANTE DE FUERZA
 - 2.5 VIBRACIONES DE MOLECULAS POLIATOMICAS
VARIACIONES DE LAS FRECUENCIAS DE GRUPO

3. UNION N-S
 - 3.1 TABLA DE COMPUESTOS ESTUDIADOS
 - 3.2 CALCULO DE LA CONSTANTE K
 - 3.3 GENERALIDADES DEL EFECTO RAMAN. VIBRACIONES
SIMETRICAS Y ASIMETRICAS EN EL RAMAN

4. CONCLUSIONES

5. BIBLIOGRAFIA

I N T R O D U C C I O N

Para un análisis químico espectroscópico, tenemos como herramienta principal la espectroscopía molecular; así en este - trabajo se hace un estudio sobre esta materia, enfocado hacia la radiación Infra-roja.

La espectroscopía ha tenido gran desarrollo en la química orgánica, sin embargo, son pocos los compuestos inorgánicos que se han analizado por este método, por la complejidad que suelen presentar los espectros al leerse, así es como este estudio - se inclinó por ayudar al desarrollo del análisis inorgánico, eligiéndose compuestos inorgánicos, que presentarán uniones N - S, que por su variedad e importancia es de gran utilidad conocer las vibraciones que presenta esta unión.

HISTORIA.

La palabra Infra-rojo surgió por primera vez en la literatura espectroscópica unos 75 años después de que la radiación I R fue descubierta por William Herschel en 1800 (1).

Esta radiación se descubrió poniendo un termómetro en diferentes puntos de la luz dispersada del sol, observándose que en ciertos puntos, la temperatura aumentaba.

En la década de 1900-1910, magníficos trabajos hechos por W.W. Coblentz (2), pusieron en evidencia el valor que tiene el I R en el campo de la química.

Los progresos del I R fueron pocos al principio, por la dificultad en detectar la radiación (5); los termopares resolvieron el problema y dieron un adecuado valor a esta radiación.

A principios de este siglo, los químicos orgánicos y después inorgánicos, consideraron al I R como materia útil para la identificación de grupos funcionales, así como para poder calcular uniones químicas, constantes termodinámicas, estructura molecular y otros.

El mayor impulso industrial en este campo, fue en la guerra, cuando observaron que el I R ofrecía un método rápido aproximado para analizar fracciones de hidrocarburos de interés en la producción de hule sintético; la respuesta a este interés fue que la -

producción comercial de espectrómetros de I R empezó en 1943 y 1944
(3) (4).

La instrumentación se ha perfeccionado; así que un gran número de modelos son ahora disponibles.

El instrumento de I R tiene en tan poco tiempo tal aceptación del químico, que este aparato en el laboratorio es de tanta utilidad como una balanza o una columna de destilación.

TEORIA.

ESPECTRO ELECTROMAGNETICO

Si dos niveles de energía cuantizados E_1 y E_2 están situados en un campo electromagnético y la diferencia en energías entre los dos estados es igual a una constante multiplicada por la frecuencia de la radiación incidente ν , una transferencia de -- energía puede ocurrir entre el campo y la molécula. Así que:

$$\Delta E = h\nu$$

donde:

h es la constante de Plank y es igual a 6.63×10^{-27} erg. seg.

ν es la frecuencia ciclos/seg. (Hertz) (9) (10).

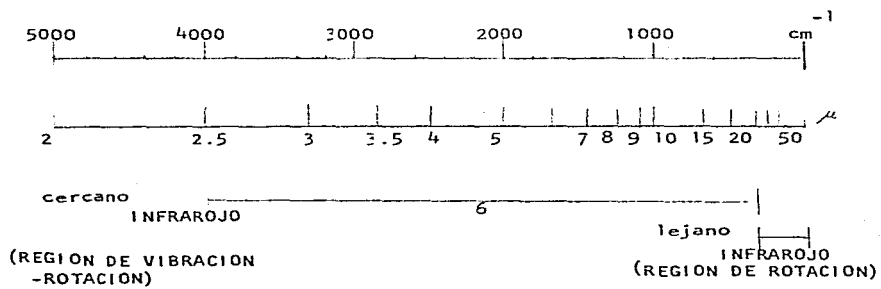
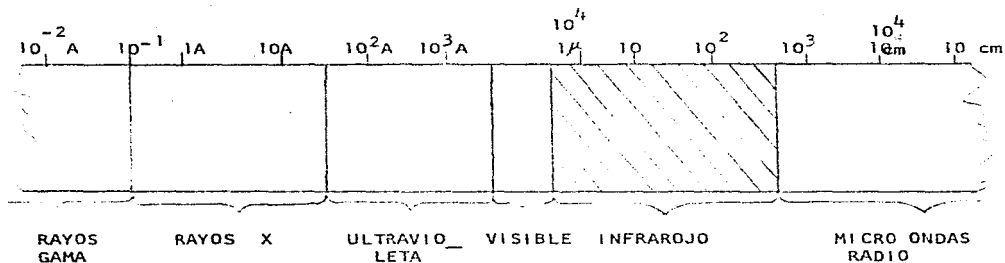
Todos los espectros se obtienen de la emisión o absorción de radiación que ocurre entre niveles de energía definitivamente cuantizados cuando la condición de arriba es cumplida (11).

Cuando ΔE es positiva, la molécula absorbe radiación y se produce un espectro de absorción, cuando ΔE es negativo, -- una radiación es emitida durante la transferencia de la energía y de esta manera obtenemos un espectro de emisión. En el caso de IR lo que sucede es una absorción de la radiación electromagnética. Dentro del espectro electromagnético el I R ocupa las regiones señaladas en el dibujo. Fig. No. 1.

La región del I R está dividida en tres partes, en la región del cercano I R, en la región del medio I R y en la del lejano I R, estas regiones son de 0.8 a 2.5 μ (12500 a 4000 cm^{-1}), 2.5 a 15 μ (4000 a 667 cm^{-1}) y de 15 a 200 μ (667 a 50 cm^{-1}) respectivamente.

FIGURA # 1

ESPECTRO ELECTROMAGNETICO



UNIDADES ESPECTRALES.

La relación entre la frecuencia ν y la longitud de onda λ está dada por la ecuación:

$$\lambda\nu = c$$

donde c es la velocidad de la luz (3×10^{10} cm/seg.). La longitud de onda puede ser expresada en varias unidades, la más común es el micrón, μ .

$$\begin{aligned} 1 \text{ micrón } (\mu) &= 10^{-4} \text{ cm} = 10^4 \text{ \AA} \\ 1 \text{ mili micrón } (m\mu) &= 10^{-7} \text{ cm} = 10 \text{ \AA} \end{aligned}$$

es más razonable reportar datos de longitud de onda que estén directamente relacionados con la energía y ahora es común usar número de onda $\bar{\nu}$, el cual es recíproco a la longitud de onda. Para propósitos prácticos, el número de onda es dado en cm^{-1} , así que:

$$\bar{\nu}(\text{cm}^{-1}) = 1/\lambda \text{ (cm)} = 10^4/\lambda(\mu)$$

la energía y la frecuencia son directamente proporcionales uno y otro, y se relacionan por la siguiente ecuación:

$$E = h\nu = hc/\lambda = hc\bar{\nu}$$

un electrón volt (eV) = $8068 \text{ cm}^{-1} = 23.063 \text{ kcal}$.

MOMENTO DIPOLO

Dos átomos diferentes tendrán generalmente distintas electronegatividades. Cuando se combinan los electrones de enlace, pasan una mayor cantidad de tiempo cerca del átomo con electronegatividad más alta, de modo que hay una carga positiva en el otro -- átomo y la molécula adquiere un carácter polar. Cuando la molécula consta de dos formas idénticas, no hay esta tendencia.

El momento dipolar μ de una molécula que tenga dos cargas $+e$ y $-e$ separadas por una distancia l , se determina por medio de:

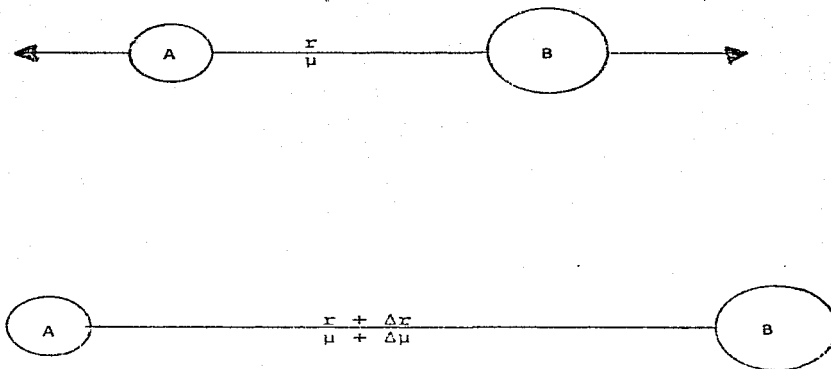
$$\mu = l e$$

Cuando se expresan los momentos dipolares, las distancias se indican generalmente en centímetros y las cargas en unidades electrostáticas (uee).

Un (uee) dipolo formado por electrón separado por una unidad de carga positiva y a una distancia de 1A tendrá un momento dipolar de $(4.80 \times 10^{-10} \text{uee}) (10^{-8} \text{cm}) = 4.80 \times 10^{-18} \text{uee cm.}$ ó 4.8 unidades debye. En memoria de la contribución de Debye en este campo, a un 10^{-18} uee cm. se le llama unidad debye (12).

Una molécula diatómica (A-B) puede vibrar en una sola forma. La unión se estira y forma una longitud de unión l , un momento dipolo μ también (5).

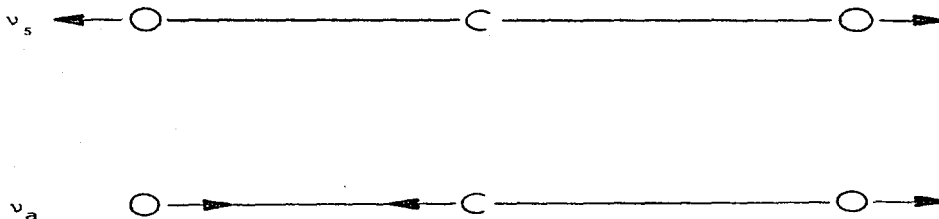
FIGURA # 2



A y B difieren en electronegatividad $\Delta\mu \neq 0$ y durante la vibración hay un cambio de momento dipolo con variación de la longitud de unión, así que $\Delta\mu/\Delta l$ (en el límite), $d\mu/dl \neq 0$, es la condición necesaria para que las vibraciones sean activas en el I R., fig. # 2.

No es necesario, sin embargo, que la molécula por sí misma sea polar. Por ejemplo el dióxido de carbono tiene dos vibraciones de unión stretching.

FIGURA # 3



La figura No. 3 nos indica que hay un cambio en el momento dipolo durante la vibración v_a (OCO) y presenta absorción en el I R. Los cambios en los momentos de unión son iguales pero contrarios, la vibración v_s (OCO) es inactivo en el I R (6).

Esto también puede ser ilustrado con las tres vibraciones características que presenta este mismo compuesto, mostrado en el siguiente esquema. Fig. 4.

La fila A representa el promedio de las configuraciones de esta molécula lineal B y C son los dos extremos.

La molécula normal no tiene momento dipolo, las cargas están balanceadas.

Las vibraciones 1 y 3 nos muestran un cambio en el momento dipolo, asociado con el movimiento, la vibración 2 permanece en balance así que no hay cambio (4).

Así es que al haber cambio electromagnético o momento dipolo, la molécula absorberá energía producida por el rayo infrarrojo (12) (13).

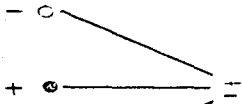
MOMENTOS DIPOLOS DE VARIAS MOLECULAS
(Unidades Debye)

Moléculas Inorgánicas μ		Moléculas Orgánicas μ	
H ₂ , Cl ₂ , Br ₂ , I ₂ , N ₂	0	CH ₄ , C ₂ H ₆ , C ₂ H ₄ , C ₂ H ₂	0
CO ₂ , CS ₂ , SnCl ₄ , SnI ₄	0	C Cl ₄ , C Br ₄	0
H Cl	1.03	C ₆ H ₆ , naftaleno, difenil	0
H Br	0.78	CH ₃ Cl	1.86
H I	0.38	CH ₃ Br	1.80
H ₂ O	1.84	C ₂ H ₅ Br	2.03
HCN	2.93	CH ₃ OH	1.70
N H ₃	1.46	CH ₃ NH ₂	1.24
SO ₂	1.63	CH ₃ COOH	1.74
N ₂ O	0.17	P-dicloro benzeno	0
CO	0.12	m-dicloro benzeno	1.72
PH ₃	0.55	o-dicloro benzeno	2.50
P Cl ₃	0.78	P-cloronitro benzeno	2.83
As Cl ₃	1.59	m-cloronitro benzeno	3.73
Ag ClO ₄	4.7	o-cloronitro benzeno	4.64

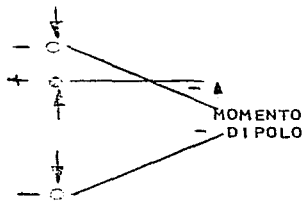
FIGURA # 4

VIB. 1

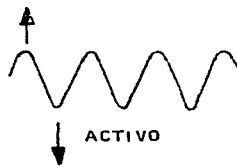
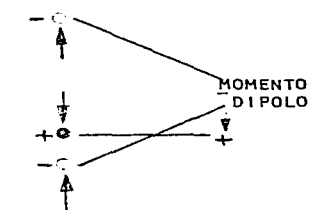
NORMAL



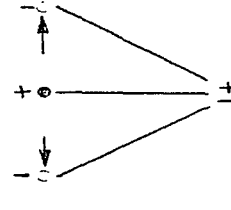
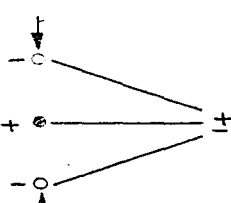
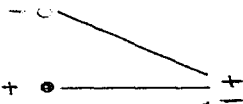
UN EXTREMO



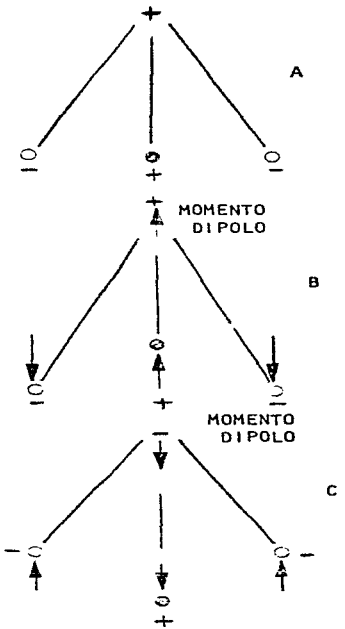
OTRO EXTREMO



VIB. 2



VIB. 3



CONSTANTE DE FUERZA.

El concepto de constante de fuerza es muy importante para el químico, porque su valor para una unión particular es - una medida de la fuerza de esa unión. La determinación aproximada de las constantes de fuerza para largas moléculas poliatómicas no es fácil obtenerlo pero se puede aproximar (18) (6).

Considerando la vibración de los átomos, la unión química se compara con un resorte conceptuando un oscilador armónico. El "esfuerzo" (o fuerza constante) del resorte se considera análogo al "esfuerzo" de la unión química (19).

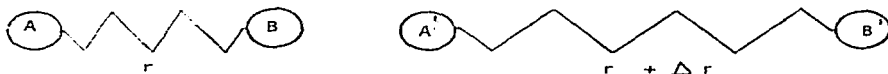


Fig. No. 5

En la figura No. 5 la posición de equilibrio es indicada. Si el desplazamiento de A y B es llevado a A' y B' estando presente la fuerza restauradora f que es proporcional al desplazamiento Δr :

$$f = K\Delta r \quad (1)$$

De esta manera se describe un movimiento armónico simple. En la ecuación que representa la Ley de Hooke K es la constante de fuerza de la unión química (20).

Representando en una gráfica la oscilación armónica de dos masas conectadas a un resorte, se observará que la energía potencial del sistema en función de la distancia r entre las masas, dará una parábola, la cual es simétrica debido a la distancia de equilibrio internuclear r_e (Ver fig. 6).

La constante de fuerza es medida por la curvatura del potencial de pozo. Este modelo clásico no es adecuado para una molécula, porque un sistema molecular no puede ocupar un estado de energía continuo, además que en las moléculas solamente ciertos niveles de energía vibracionales son permitidos ya que éstos están cuantizados (21).

La ecuación para los estados de energía vibracional permitidos en una molécula es:

$$E_v = hv(v + 1/2) \quad (2)$$

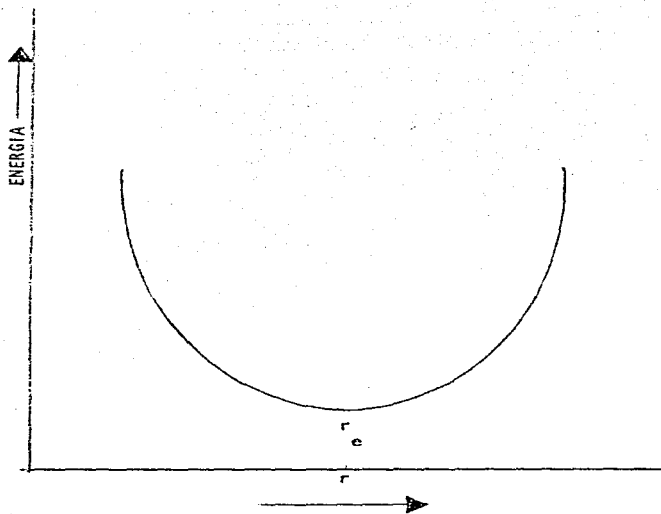
Donde:

v es un número entero $0, 1, 2, \dots$, que representa el número cuántico vibracional de varios estados.

E_v es la energía vibracional

h es la constante de Plank

FIGURA # 6



v es la frecuencia de vibración fundamental (ya sea -
la frecuencia para la transición del estado $v = 0$
a $v = 1$).

Estos estados son indicados por la curva de energía potencial de Morse para una molécula real. Ver fig. No. 7 .

En la curva representada en la Fig. No. 7 , podemos observar que no es una perfecta parábola. Los niveles de energía vibracionales no tienen la misma separación como implica la ecuación 2. Este tipo de desviación se debe a que la molécula sufre una oscilación Anarmónica además de la armónica; así es que la ecuación 1 no es obedecida estrictamente. Esta desviación de la oscilación armónica ocurre en todas las moléculas y se hace mayor en cuanto el número cuántico vibracional aumenta.

Las constantes de fuerza más grandes son las que indican las uniones químicas más fuertes como se ilustra en la Fig. - No. 8 , donde la energía de disociación de los halogenuros de hidrógeno se trazan en función de la constante de fuerza, obteniéndose una relación lineal. Este simple concepto del oscilador armónico alcanza varios resultados interesantes que son de inmediata aplicación práctica, para interpretación de espectros vibracionales.

Los cambios en la posición de una frecuencia vibracional se atribuye a cambios de la fuerza de unión que alcanza una - vibración particular (22) (23).

FIGURA # 7

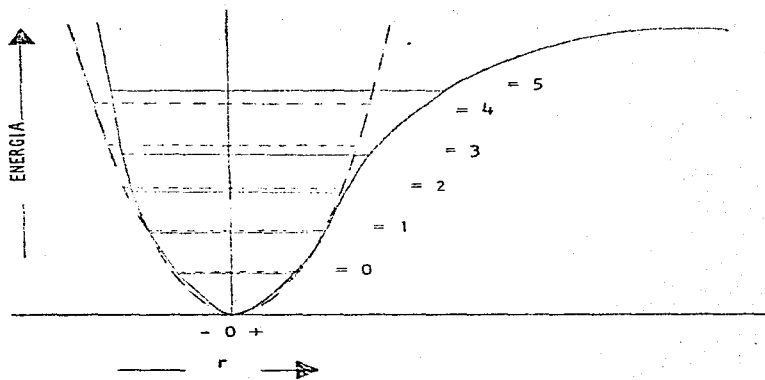
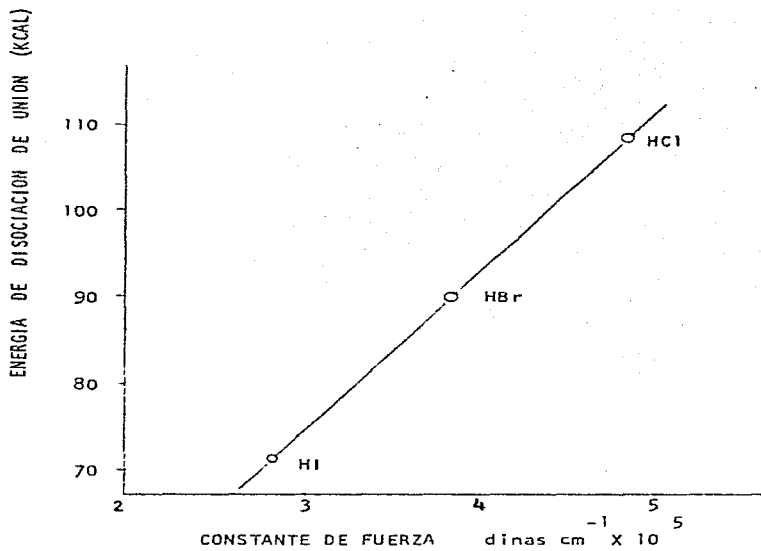


FIGURA # 8



Variaciones a número de onda más bajos indican debilidad en la unión (constantes de fuerza más pequeñas) y hacia número de onda más grandes indican una fuerza de unión mayor.

Para obtener el valor de K partimos de la expresión, para la frecuencia de una vibración armónica simple, la cual está dada por la mecánica clásica y cuya fórmula es: (10) (24)

$$\nu = 1/2\pi (K/\mu_m)^{1/2}$$

combinando la ecuación anterior con:

$$\lambda\nu = c$$

tenemos $1/\lambda = 1/2\pi c (K/\mu_m)^{1/2} = \bar{\nu}$

por lo que:

$$K = \bar{\nu}^2 (2\pi c)^2 \mu_m$$

VALORES DE CONSTANTES DE FUERZA DE ALGUNAS
MOLECULAS

MOLECULAS	CONSTANTES DE FUERZA
	DINAS/CM
HF	9.7×10^5
HCl	4.8×10^5
HBr	4.1×10^5

MOLECULAS

CONSTANTES DE FUERZA

DINAS/CM

HI

 3.2×10^5

CO

 18.2×10^5

NO

 15.3×10^5

ENERGIA DE MOLECULAS Y GRADOS DE LIBERTAD

Considerando la teoría cuántica, la energía que poseen átomos y moléculas es cuantizada; presentando solamente ciertos valores discretos, estas energías permitidas son llamadas niveles energéticos atómicos o moleculares.

Un cuanto de energía es absorbido cuando un átomo o molécula es excitado de un nivel de energía bajo a otro más alto, y de esta forma es como obtenemos un espectro de absorción.

La energía de un átomo o molécula está descrita en términos de su energía translacional, rotacional, vibracional y electrónica y para cada uno de estos tipos de energía existen sus respectivos niveles.

Las moléculas poliatómicas pueden presentar más de una vibración fundamental en la banda de absorción, el número de estas bandas fundamentales es relacionado a los grados de libertad de una molécula.

El número de grados de libertad es igual a la suma de coordenadas necesarias para localizar todos los átomos de las moléculas en el espacio.

Los átomos tienen tres grados de libertad, los cuales son translacionales.

Cuando los átomos se combinan para formar moléculas, - los grados de libertad no se pierden, eso es el número total de - grados de libertad de la molécula, está dado por $3n$ donde n es el número de átomos en la molécula. Los $3n$ grados de libertad de la molécula tendrán grados de libertad rotacionales, vibracionales y traslacionales.

Los grados de libertad rotacionales resultan de la rotación de una molécula sobre su eje a través del centro de gravedad. Estas rotaciones resultan en un grado de libertad solamente, si la posición de los átomos en el espacio cambia durante la rotación. Todos los átomos de libertad no considerados traslacionales y rotacionales son grados de libertad vibracionales

$$3n \text{ grados de libertad} = \text{traslacional} + \text{rotacional} + \\ + \text{vibracional}$$

Para moléculas lineales tenemos $3n-5$ grados de libertad vibracionales, para moléculas no lineales $3n-6$ grados de libertad vibracionales.

Así la banda de absorción en el I R será absorbida para cada grado de libertad vibracional.

ENERGIA DEBIDA AL MOVIMIENTO TRANSLACIONAL.

Ya que cualquier partícula en movimiento tiene energía cinética como un resultado de su movimiento a través del espacio, esto es conocido como energía translacional. El promedio translacional de la energía cinética de una simple molécula para cada una de las direcciones X, Y y Z se encuentra que es igual a $1/2 KT$, donde K es la constante de Boltzman, T la temperatura sobre escala absoluta. La constante K tiene un valor de 1.38×10^{-16} erg/grado.

La energía cinética translacional de una molécula es $3/2KT$; sin embargo, en estudios espectroscópicos además tratamos con la energía de una molécula por mol. Sobre estas bases podemos introducir el número de Avogadro y reportar la energía cinética por mol:

$$N (1/2 KT) = 1/2 RT \text{ en una dirección o}$$

$$N (3/2 KT) = 3/2 RT \text{ en el espacio}$$

la constante R está relacionada con K por medio de la siguiente expresión:

$$R = NK$$

Los grados de libertad que presenta son tres y cada uno contribuye en la energía cinética de la molécula (15).

ENERGIA DEBIDA AL MOVIMIENTO ROTACIONAL.

Quando la molécula gira sobre un eje a través de su centro de gravedad, se dice que posee energía rotacional. El movimiento puede ocurrir sobre los tres ejes y pasar a través del centro de gravedad de la molécula, siendo éstos perpendiculares entre sí; así decimos que se tienen tres grados de libertad rotacionales.

La rotación de una molécula diatómica alrededor de los ejes X, Y y Z se observan en la Fig. No. 9; podemos notar que - la rotación sobre Y y Z se obtienen cambiando la posición de los átomos y sobre X no.

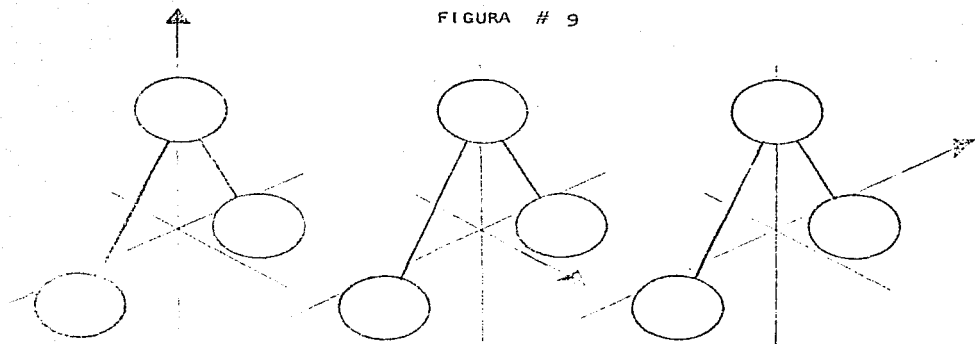
La experiencia con el movimiento de translación molecular nos permite esperar un promedio de energía cinética rotacional de $1/2$ de KT para los dos o tres grados de libertad rotacional.

ENERGIA DEBIDA AL MOVIMIENTO VIBRACIONAL.

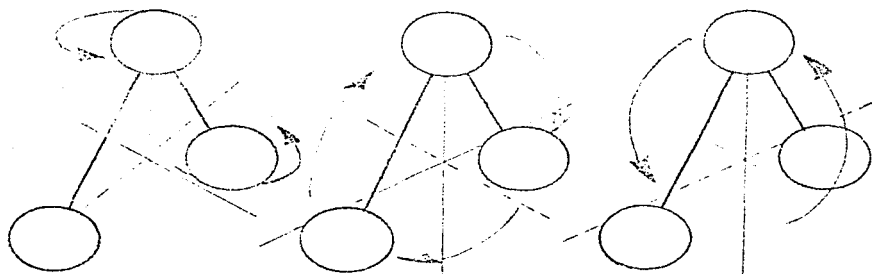
La tercera forma por el cual una molécula contiene energía se debe a las vibraciones que pueda presentar. La molécula no es una estructura rígida (7), sino muy flexible y tal sistema vibra, - presentando una energía vibracional.

Los grados de libertad vibracionales que presenta una - molécula lineal están dados por la expresión $3n-5$, donde n es el número de átomos que tiene la molécula; en el caso de que la molécula no sea lineal se tiene la siguiente expresión $3n-6$. (6). Fig. 9.

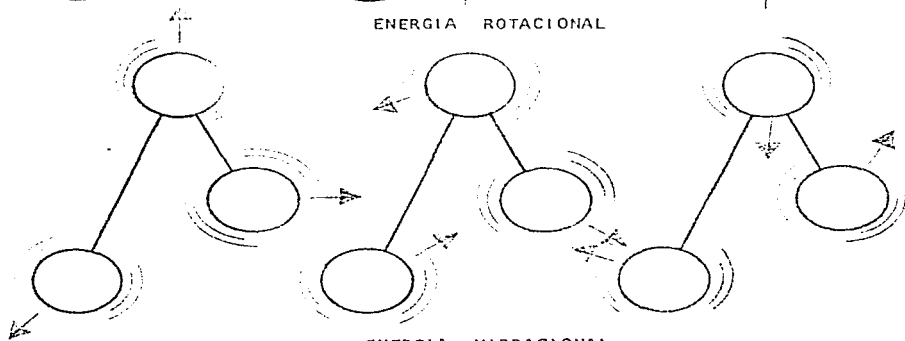
FIGURA # 9



ENERGIA TRANSLACIONAL



ENERGIA ROTACIONAL



ENERGIA VIBRACIONAL

ENERGIA DEBIDA A LOS ELECTRONES DE LA MOLECULA.

El resultado de los cambios producidos por los electrones nos dan la energía electrónica. Esta energía que presentan las moléculas, se debe a un incremento en las energía cinéticas y potencial de uno de los electrones de la molécula, no se acostumbra asignar un número de grados de libertad a la energía electrónica debido a que su masa puede ser despreciada en comparación a la de su núcleo, no importándonos así su posición.

Estrictamente podría, por supuesto, ser tres veces el número de electrones. En la práctica es bastante conocido que una molécula cambie algunas veces a un estado de energía más alta, como resultado de que uno de sus electrones adquirió energía.

Así la energía total será igual a la suma de las energías estudiadas (17).

$$E_t = E_E + E_V + E_R + E_T$$

Los diferentes niveles de energía son cuantizados y solamente transiciones de energía electrónica, vibracional y rotacional son posibles. La energía translacional es muy pequeña, se puede ignorar y es presentada como un continuo en la gráfica.

La separación de las energías electrónica, vibracional y rotacional es permitida únicamente porque la separación entre los niveles de energía electrónica es mucho más grande que la separación

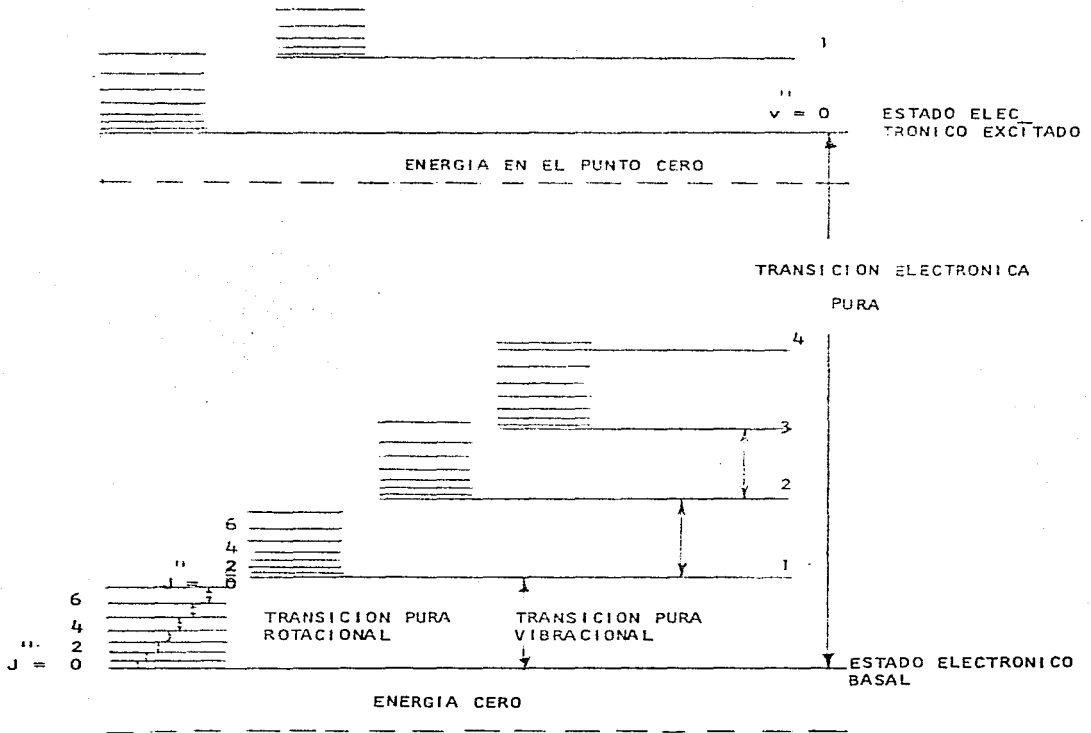
entre los niveles vibracionales, los cuales son sin embargo, más grandes en separación entre los niveles rotacionales. Este acercamiento cualitativo nos permite hacer un diagrama de niveles de energía.

En la ilustración podemos ver que una serie de niveles vibracionales están asociados con cada nivel electrónico y que una serie de niveles rotacionales están asociados con cada nivel vibracional. Fig. No. 10.

Transiciones entre niveles electrónicos dan un espectro que se observa entre las regiones del visible y ultra violeta y se conoce como espectro electrónico, transiciones entre niveles vibracionales, en el mismo estado electrónico dan absorción en la región del I R.

Estas transiciones vibracionales del espectro son generalmente acompañadas por transiciones rotacionales y el espectro resultante es conocido como espectro de vibración-rotación. El espectro de rotación normalmente ocurre a bajas frecuencias en el infra-rojo lejano (abajo de 500 cm^{-1}). La división del espectro en tres regiones diferentes es algunas veces arbitrario, porque el espectro rotacional puede ser observado en la región del I R si la transición a los estados más altos se involucra y las transiciones electrónicas pueden aparecer en la región del cercano I R si los niveles electrónicos están cercanos. Consideraciones de mecánica cuántica nos muestran que no todas las transiciones entre niveles cuánticos son posibles; ciertas reglas han sido

FIGURA # 10



establecidas para determinar si una transición es permitida o no. Estas relaciones de reglas y la aplicación de la teoría de grupos nos llevan a una interpretación adecuada de movimientos vibracionales de moléculas poliatómicas (18).

VIBRACIONES DE MOLECULAS POLIATOMICAS

Los modelos diatómicos discutidos anteriormente, pueden ser considerados simples, pero en el momento de adicionar un tercer átomo habrá más vibraciones. Como se ve en la Fig. 11 y 12 - que representan las vibraciones para moléculas lineales y no lineales con tres átomos. Sin embargo, estas moléculas poliatómicas tienen vibraciones que pueden ser consideradas como simples analogías de modelos mecánicos.

La posición de cualquier átomo en el espacio puede ser representada por tres coordenadas. Así, si consideramos una molécula poliatómica conteniendo n átomos, un máximo de $3n$ coordenadas se requieren para describir todos los movimientos que el átomo puede presentar. Tres de estas coordenadas son usadas para describir el movimiento del centro de gravedad de la molécula, y $3n-3$ coordenadas para describir las vibraciones. En el caso de una molécula diatómica, dos coordenadas se usan para describir el movimiento de rotación, como se vió, una molécula diatómica tendrá $3n-5$ vibraciones; con estos datos observados se vió que en forma similar el movimiento rotacional en una molécula triatómica lineal se describe por dos coordenadas y $3n - 5$ formas de vibración que en este caso serían cuatro los posibles (25).

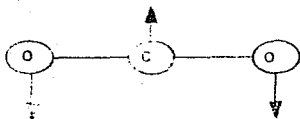
Para moléculas poliatómicas en general, se necesitan 3 coordenadas para definir el movimiento rotacional y se observan $3n - 6$ formas de vibración. De esto $n-1$ puede ser definido como vibraciones "Stretching" o longitudinales y $2n-5$ son vibraciones

FIGURA # 11



ν_1

R
1388 cm^{-1}



$\nu_2 a$

ν_2 d 1
667 cm^{-1}



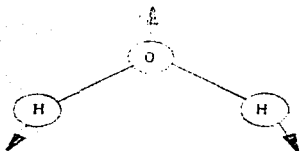
$\nu_2 b$



ν_3

1
2349 cm^{-1}

FIGURA # 12



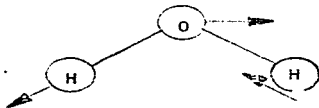
ν_1

ν SIM. I R
3651 cm^{-1}



ν_2

ν I R
1595 cm^{-1}



ν_3

ν SIM. I R
3756 cm^{-1}

"Bending" o de deformación. En las figs. 13 y 14 se ilustran varias formas vibracionales de moléculas de 3 y 4 átomos.

Para el caso de moléculas de 4 átomos se presentarán - formas piramidales, planares, no lineales y lineales, ver Fig. 15.

Para el caso de las moléculas piramidales tenemos la - molécula de NH_3 con sus respectivas frecuencias.

Para el caso de moléculas planares tenemos las formas vibracionales del BF_3 (Fig. No. 16).

Las moléculas del peróxido de hidrógeno nos muestran - las vibraciones de moléculas no lineales. En el caso de moléculas lineales tenemos el $\text{CH} = \text{CH}$. Fig. No. 17, y figura # 18.

Cuando están presentes 5 átomos y se tienen moléculas simétricas tetrahédricas, se pueden observar las siguientes vibraciones Fig. No. 19, y vibraciones de moléculas de 6 átomos planares, Fig. No. 20. Así para el caso de moléculas de 7, 8 o más átomos, la interpretación física de los movimientos vibracionales se hace más compleja.

Afortunadamente en la mayoría de los casos no es necesario identificar todas las vibraciones que pueden ocurrir en las - moléculas grandes, pues gracias al desarrollo del concepto de frecuencias de grupo, se ha logrado una contribución cualitativa muy importante para la espectroscopía de I R (26) (27).

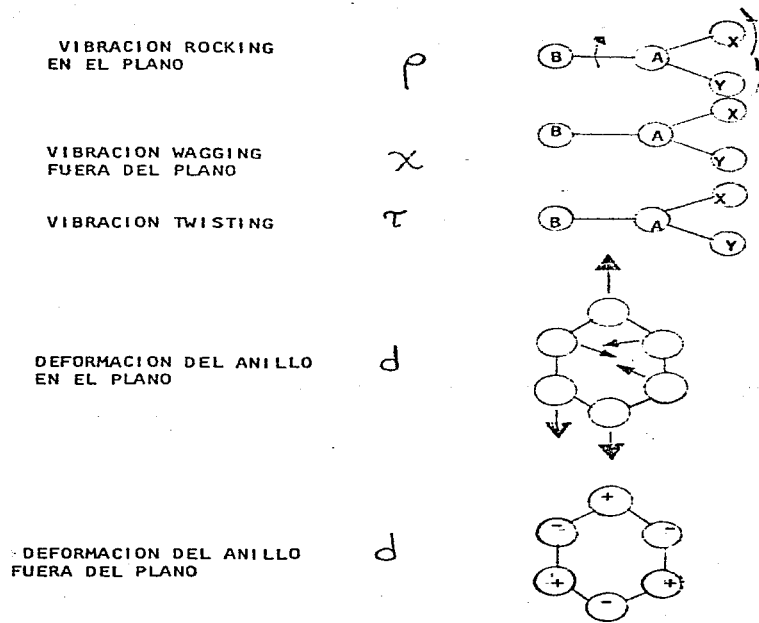


FIGURA # 14

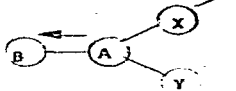
VIBRACION FUNDAMENTAL
STRETCHING

ν_{st}



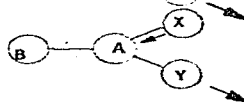
VIBRACION STRETCHING
SIMETRICA

ν_{sim}



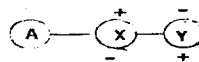
VIBRACION STRETCHING
ASIMETRICA

ν_{asim}



VIBRACION BENDING
EN EL PLANO

δ_b



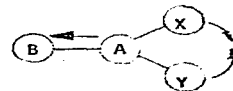
VIBRACION BENDING
FUERA DEL PLANO

γ_b



VIBRACION BENDING
SIMETRICA

b_{sim}



VIBRACION BENDING
ASIMETRICA

b_{asim}

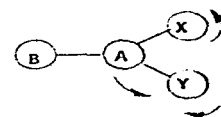
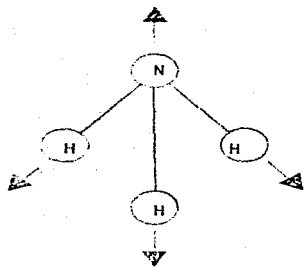
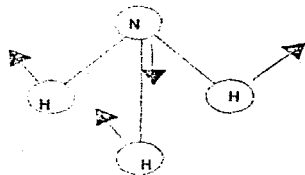


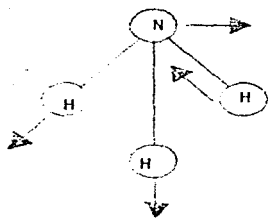
FIGURA # 15



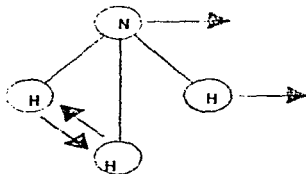
$$\nu_1 \quad \nu(N-H) \quad IR \quad -1 \\ 3336 \text{ cm}$$



$$\nu_2 \quad \nu(H-N-H) \quad IR \quad -1 \\ 948 \text{ cm}$$



$$\tilde{\nu}_3 \quad \nu_{asim}(N-H) \quad dIR \quad -1 \\ 3414 \text{ cm}$$



$$\nu_4 \quad \nu(H-N-H) \quad dIR \quad -1 \\ 1628 \text{ cm}$$

FIGURA # 16

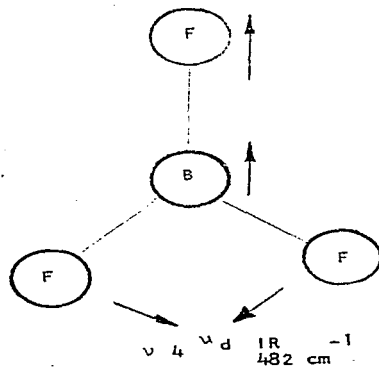
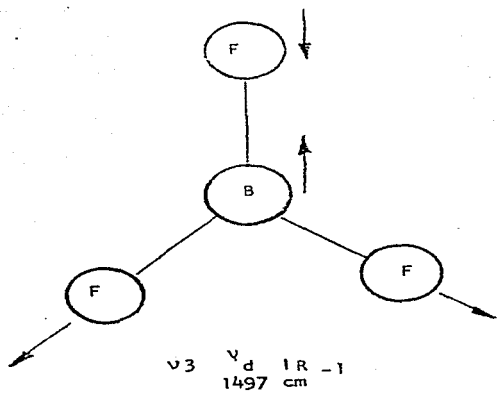
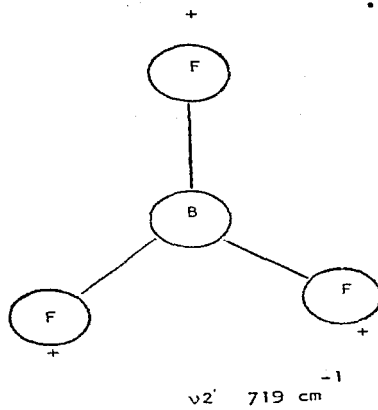
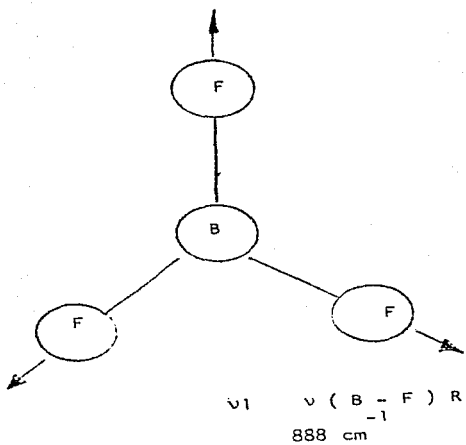
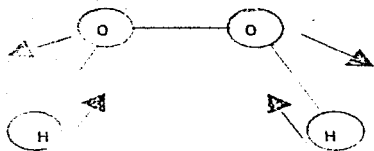
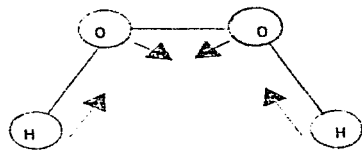


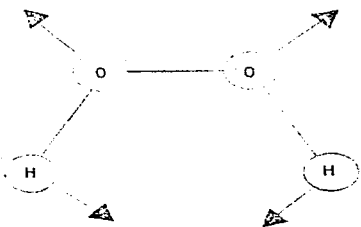
FIGURA # 17



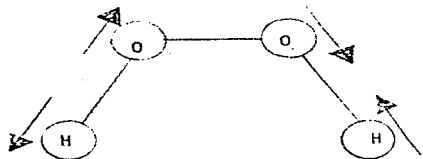
$$\nu_1 \nu_{\text{sim}} (\text{O} - \text{H}) \quad 3346 \text{ cm}^{-1}$$



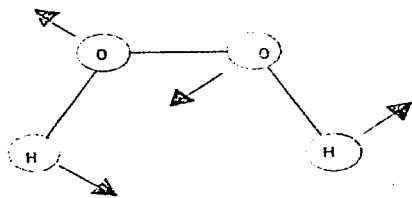
$$\nu_2 \nu (\text{O} - \text{O}) \quad \text{I R} \quad 880 \text{ cm}^{-1}$$



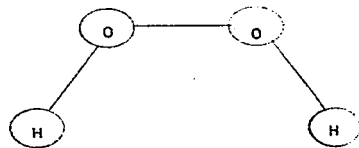
$$\nu_3 \nu_{\text{sim}} (\text{O} - \text{O} - \text{H}) \quad \text{R} \\ 1402 \text{ cm}^{-1}$$



$$\nu_4 \nu_{\text{asim}} (\text{O} - \text{H}) \quad \text{I} \\ 3610 \text{ cm}^{-1}$$

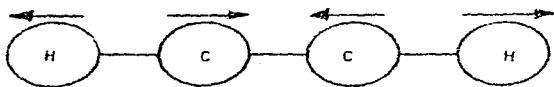


$$\nu_5 \nu_{\text{asim}} (\text{O} - \text{O} - \text{H}) \quad \text{I} \\ 1260 \text{ cm}^{-1}$$

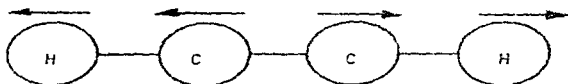


$$\nu_6 \nu (\text{O} - \text{H}) \quad \text{I} \\ 575 \text{ cm}^{-1}$$

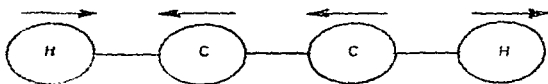
FIGURA # 18



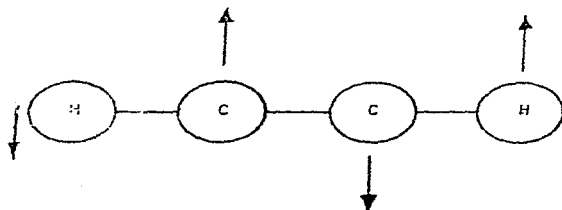
ν_1 SYM (C-H) R
3374 cm^{-1}



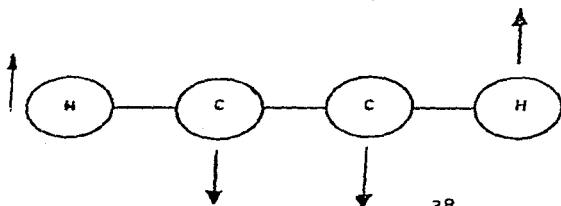
ν_2 (C C) R
1974 cm^{-1}



ν_3 ASYM (C-H), R, I
3287 cm^{-1}



ν_4 d(C-H), R
612 cm^{-1}



ν_5 d(C-H), I
729 cm^{-1}

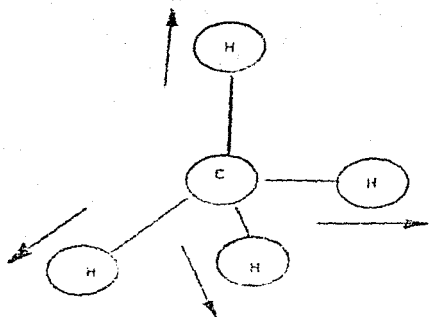
Este concepto de frecuencia de grupo nos permite entender que si tuviéramos una molécula $X - CH$ la vibración del grupo CH es independiente de los otros grupos que posee la molécula. - Así aunque la variación de la naturaleza de la unión que puede tener el grupo designado como X , así como también su peso, la frecuencia de vibración CH relativamente no es afectada.

Muchos otros pares de átomos o grupos de átomos tienen vibraciones cuyas frecuencias son esencialmente independientes de la constitución del resto de la molécula y estas frecuencias se conocen como frecuencia de grupo o frecuencias características.

En la década pasada, se hicieron varias tabulaciones de frecuencias características para proveer al químico analítico de una herramienta para la identificación de moléculas.

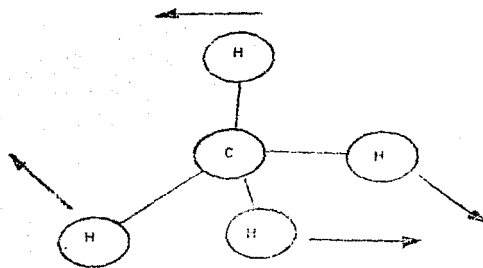
Esta técnica cualitativa contribuye considerablemente a un amplio desarrollo de la espectroscopía de I R (28) (29).

FIGURA # 19



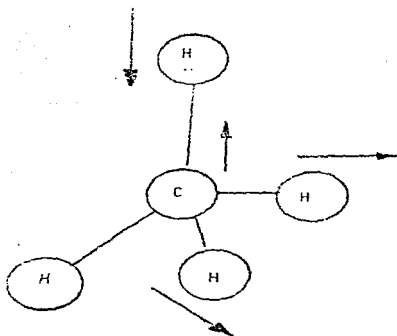
$$\nu_1 \nu(C-H)_{-1} R$$

2914 cm



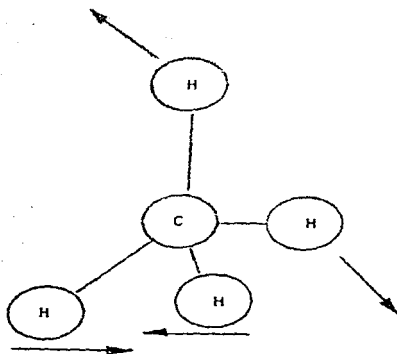
$$\nu_2 \nu(H-C-H)_{-1} R d(2)$$

1526 cm



$$\nu_3 \nu(C-H)_{-1} I R d(3)$$

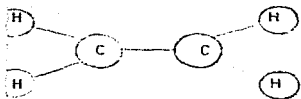
3020 cm



$$\nu_4 \nu(C-H)_{-1} I R d(3)$$

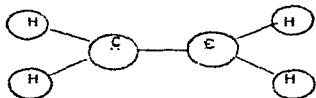
1306 cm

FIGURA # 20



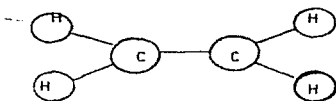
$$\nu_1 \nu(C-H)_{-1}^R$$

3119 cm



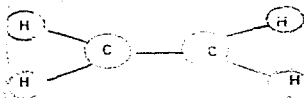
$$\nu_2 \nu(C-C)_{-1}^R$$

1623 cm



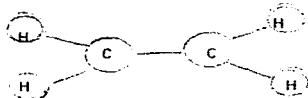
$$\nu_3 \nu(CH_2)_{-1}^R$$

1342 cm



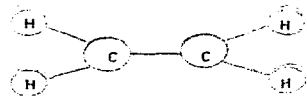
$$\nu_4 \nu(C-C)_{-1}$$

825 cm



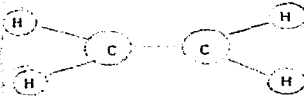
$$\nu_5 \nu(C-H)_{-1}$$

3272 cm



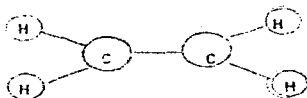
$$\nu_6 R_{-1}$$

1050 cm



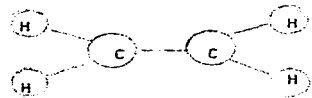
$$\nu_7 I_{-1}$$

949 cm



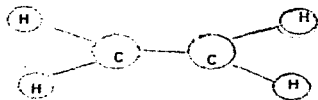
$$\nu_8 R_{-1}$$

943 cm



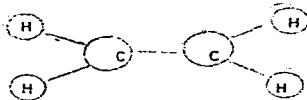
$$\nu_9 \nu(C-H)_{-1}$$

3105 cm



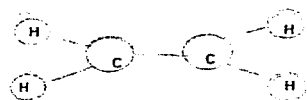
$$\nu_{10} I_1$$

995 cm



$$\nu_{11} \nu(C-H)_{-1}^I$$

2989 cm
41



$$\nu_{12} \nu(CH_2)_1^I$$

1443 cm

VARIACIONES DE LAS FRECUENCIAS DE GRUPO

La frecuencia vibracional de la unión A - B determina da primeramente por la elasticidad de la unión, medida por la constante de fuerza y por la masa de A y de B (6) (10).

En una molécula compleja, esto se modifica, ya que hay otros factores que determinan la posición de la banda de absorción. Algunos de estos factores son debidos al medio externo del grupo - vibrante, y estos efectos son tales como cambios de fase o formas del cristal, la influencia de solventes, el caso de las uniones de hidrógeno, los cambios en la geometría molecular o en las masas de los grupos sustituyentes, así también como el acoplamiento mecánico entre una y otra vibración, los efectos estéricos y las influencias eléctricas de los grupos sustituyentes que están a lo largo - de la unión o algunas veces están atravezando el espacio intramole cular. Sin embargo, muchos de estos factores pueden ser minimizados en circunstancias favorables (30) (31) (32) y (33).

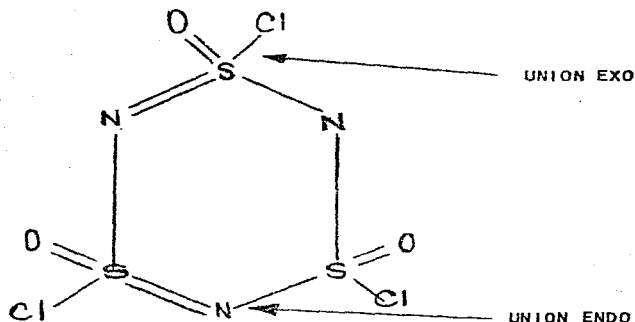
UNION NITROGENO - AZUFRE

Después de haber tratado teóricamente y en forma general algo sobre espectroscopía molecular, se procederá a explicar el motivo por el cual se hizo este trabajo.

El interés por contribuir en el avance espectroscópico del I R en la química inorgánica, fue la principal motivación; - con datos obtenidos en la literatura de frecuencias vibracionales de varios compuestos inorgánicos que presentan la unión N-S, se hizo el cálculo de la constante K.

Se presenta una tabla con los compuestos inorgánicos y sus respectivas frecuencias. Estos compuestos presentan tres tipos de vibraciones fundamentales: cuando son compuestos cíclicos aparece siempre una absorción cercana a 1075 cm^{-1} , otra absorción que presentan todos los compuestos en general que tienen esta unión es cercana a $1100 - 1200 \text{ cm}^{-1}$ y la otra cuando tienen uniones EXO y ENDO cercana a $710 - 785 \text{ cm}^{-1}$ (36) (37) (38) (39) (43), fig # 21.

FIGURA # 21



En esta misma tabla se presentan los desplazamientos que sufren las frecuencias, indicando con signo (+) el desplazamiento a longitudes de onda mayores y con signo (-) a número de onda menores. (34) (35.).

Se toma como base el compuesto nitruro de azufre N₄S₄ (40) para comparar los corrimientos de las frecuencias, debido a que éste posee exclusivamente uniones N-S.

Esta unión N-S fue la elegida para estudiarse, debido a la gran variedad e importancia que tienen los compuestos que presentan esta unión.

TABLA DE COMPUESTOS CON UNIONES N - S CON SUS RESPECTIVAS
FRECUENCIAS

VN-S ANILLO (cercano a 1075 cm ⁻¹)	VN-S COMPUESTOS EN GENERAL (cercano a 1100-1200 cm ⁻¹)	VN-S DEBIDA A UNIO- NES EXO Y ENDO (cercano a 710-785 cm ⁻¹)
S ₄ N ₄	930 cm ⁻¹ vs	700 cm ⁻¹ vs
S ₄ N ₃ Cl	998 vs	1163 cm ⁻¹ s
S ₄ N ₃ NO ₃	1025 s	1095 s
(CH ₃ N) ₃ S ₅	1065 s	1115 m
(CH ₃ NS) _x	1070 s	1120 vs
(CH ₃ NS) ₄	1070 s	1120 m
(NSO) ₃ Cl ₂ ·1e	1075 s	1109 s
(NSO) ₃ Cl · 2	1083 s	1100 s
(NSO) ₃ F(NH C ₈ H ₁₇) ₂	1075 s	1111 s
(NSOF) _n	1085 vs	1160 s
C ₁₂ H ₂₄ ⁰ ₆ N ₆ S ₃ MP-196°C	1075 s	1105 s
C ₁₂ H ₂₄ ⁰ ₆ N ₆ S ₃ MP-171°C	1075 s	1108 s
N ₃ S ₃ O ₃ F(C ₄ H ₈ ON) ₂	1080 m	1115 vs
N ₃ S ₃ O ₃ (Ø) ₃	1085 m	1120 vs
N ₃ S ₃ O ₃ F(Ø) ₂	1095 w	1135
(NSO) ₃ Cl(C ₆ H ₃ Cl ₂) ₂	1096 m	1139 s

VN-S ANILLO	VN-S COMPUSTION		VN-S DEBIDA A UNIQ	
	EN GENERAL		NES EXO Y ENDO	
(cercano a 1075 cm^{-1})	(cercano a 1150-1200 cm^{-1})		(cercano a 710-785 cm^{-1})	

$\text{N}_3\text{S}_3\text{O}_3\text{F}(\text{C}_5\text{H}_{10}\text{N})_2$	1060	s	1135	vs	725	s
$(\text{NSO})_3\text{Cl}(\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}_2)_2$	1083	m	1139	s	742	m
$(\text{NSO})_3\text{F}(\text{NET}_2)_2$	1085	m	1150	s	746	s
$\text{N}_3\text{S}_3\text{F}_3(\text{Ø})$	1030	w	1155	vs	745	s
$\text{N}_3\text{S}_3\text{O}_3\text{F}(\text{C}_4\text{H}_8\text{N})_2$	1080	m	1170	vs	740	s
$(\text{NSOF})_3$ cis	1070	w	1170	vs	770	s
$\alpha(\text{NSOCl})_3$			1107	s	730	w
$(\text{NSOF})_3$	1085	vs	1160	s	775	s

FRECUENCIAS DE LA UNIÓN N-S EN PRESENCIA DE UN ANILLO

	VANILLO		+	-
S_4N_4	930 cm^{-1}	vs	0	0
S_4N_3Cl	998	vs	68	
$S_4N_3NO_3$	1025	s	95	
$N_3S_3F_2(\emptyset)$	1030	w	100	
$N_3S_3O_3F(C_5H_{10}N)_2$	1060	s	130	
$(CH_3N)_3S_5$	1065	s	135	
$(NSOF)_3$ cis	1070	w	140	
$(CH_3NS)_X$	1070	s	140	
$(CH_3NS)_4$	1070	s	140	
$(NSO)_3Cl_2Me$	1075	s	145	
$(NSO)_3F(NHC_8H_{17})_2$	1075	s	145	
$C_{12}H_{24}O_6N_6S_3$ MP-196°C	1075	s	145	
$C_{12}H_{24}O_6N_6S_3$ MP-171°C	1075	s	145	
$N_3S_3O_3F(C_4H_8ON)_2$	1080	m	150	
$(NSO)_3Cl \emptyset_2$	1083	s	153	
$(NSO)_3Cl(C_6H_3Cl_2)_2$	1083	m	153	
$(NSOF)_n$	1085	vs	155	
$(NSOF)_3$	1085	vs	155	
$N_3S_3O_3(\emptyset)_3$	1085	m	155	
$(NSO)_3F(NEt_2)_2$	1085	m	155	
$N_3S_3O_3F(\emptyset)_2$	1095	w	165	

FRECUENCIAS DE LA UNION N-S PRESENTADOS EN COMPUESTOS EN
GENERAL

	0		+	-
			0	0
S_4N_4				
$S_4N_3NO_3$	1095	cm^{-1} s	1095	cm^{-1}
$(NSO)_3Cl$ \emptyset_2	1100	s	1100	
$C_{12}H_{24}O_6N_6S_3$ MP-196°C	1105	s	1105	
$\alpha(NSOCl)_3$	1107	s	1107	
$C_{12}H_{24}O_6N_6S_3$ MP-171°C	1108	s	1108	
$(NSO)_3Cl_2Me$	1109	s	1109	
$(CH_3N)_3S_5$	1115	m	1115	
$N_3S_3O_3F(C_4H_8ON)$	1115	vs	1115	
$(CH_3NS)_X$	1120	v	1120	
$(CH_3NS)_4$	1120	m	1120	
$N_3S_3O_3(\emptyset)_3$	1120	vs	1120	
$N_3S_3O_3F\emptyset_2$	1135	vs	1135	
$N_3S_3O_3F(C_5H_{10}N)_2$	1135	vs	1135	
$(NSO)_3Cl(C_6H_3Cl_2)_2$	1139	s	1139	
$(NSO)_3F(NHC_8H_{17})_2$	1142	s	1142	
$(NSO)_3F(Net_2)_2$	1150	s	1150	
$N_3S_3F_2(\emptyset)$	1155	vs	1155	
$(NSOF)_n$	1160	s	1160	
$(NSOF)_3$	1160	s	1160	
S_4N_3Cl	1163	s	1163	
$N_3S_3O_3F(C_4H_8N)_2$	1170	s	1170	
$(NSOF)_3cis$	1170	vs	1170	

TABLA DE FRECUENCIAS DE LA UNIÓN N-S EN PRESENCIA DE UNIONES EXO Y ENDO

			+	-
$S_4N_3NO_3$	675 cm^{-1}	w		25
S_4N_3Cl	678	s		22
S_4N_4	700	vs		0
$(CH_3NS)_X$	715	s	15	
$C_{12}H_{24}O_6N_6S_3$ MP-171°C	715	s	15	
$(NSO)_3Cl_2Me$	719	s	19	
$C_{12}H_{24}O_6N_6S_3$ MP-196°C	723	s	23	
$N_3S_3O_3F(C_5H_{10}N)_2$	725	s	25	
$(NSO)_3F(NHC_8H_{17})_2$	730	s	30	
$N_3S_3O_3(\emptyset)_2$	730	s	30	
$\alpha(NSOCl)_3$	730	w	30	
$N_3S_3O_3F(C_4H_8N)_2$	740	s	40	
$(NSO)_3Cl(C_6H_3Cl_2)_2$	742	m	42	
$(NSO)_3Cl(\emptyset)_2$	743	s	43	
$N_3S_3F_2(\emptyset)$	745	s	45	
$(NSO)_3F(NEt_2)_2$	746	s	46	
$N_3S_3O_3F(C_4H_8ON)_2$	750	s	50	
$N_3S_3O_3(\emptyset)_3$	755	s	55	
$(NSOF)_3cis$	770	s	70	
$(NSOF)_n$	775	s	75	
$(NSOF)_3$	775	s	75	
$(CH_3NS)_4$	780	s	80	
$(CH_3N)_3S_5$	785	s	85	

CALCULO DE LA CONSTANTE K.

De la mecánica clásica tenemos (8):

$$K = v^2 (2\pi c)^2 \mu m \quad (3)$$

Obtención de la masa reducida de la unión N-S.

Siendo m_1 igual a la masa del nitrógeno y m_2 la masa del azufre

$$\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{(14.0067) (32.064)}{14.0067 + 32.064} = \frac{459}{46.0707} = 9.75 \text{ g}$$

masa reducida por molécula

$$\frac{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}}{\text{No. Avogadro}} = \frac{9.75}{6.023 \times 10^{23}} = 1.619 \times 10^{-23} \text{ g/mol}$$

cálculo de K para cada una de las frecuencias de la ecuación (3).

$$K_1 = \frac{(1075 \times 2 \times 3.14 \times 3 \times 10^{10})^2 \times 9.75}{6.023 \times 10^{23}} = 6.64 \times 10^5 \text{ dinas/cm}$$

$$K_2 = \frac{(1150 \times 2 \times 3.14 \times 3 \times 10^{10})^2 \times 9.75}{6.023 \times 10^{23}} = 7.6 \times 10^5 \text{ dinas/cm}$$

$$K_3 = \frac{(748 \times 2 \times 3.14 \times 3 \times 10^{10})^2 \times 9.75}{6.023 \times 10^{23}} = 3.22 \times 10^5 \text{ dinas/cm}$$

Habiendo obtenido las constantes de fuerza de las tres vibraciones, podemos calcular su frecuencia. La frecuencia se obtiene:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{M_m}}$$

frecuencia de compuestos cíclicos que presentan la unión N-S

$$\begin{aligned} \nu_1 &= \frac{1}{2 \times 3.14} \sqrt{\frac{6.64 \times 10^5}{1.619 \times 10^{23}}} = \frac{1}{2 \times 3.14} \sqrt{4.11 \times 10^{20}} = \\ &= \frac{2.28 \times 10^{14}}{6.283} = 3.23 \times 10^{13} \text{ ciclos/seg.} \end{aligned}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

$$\lambda_1 = \frac{3.0 \times 10^{10}}{3.23 \times 10^{13}} = 0.928 \times 10^{-3}$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$

$$\bar{\nu}_1 = \frac{1}{0.928 \times 10^{-3}} = 1078 \text{ cm}^{-1}$$

Frecuencia de compuestos en general que presentan las uniones N-S

$$\begin{aligned} \nu_2 &= \frac{1}{2 \times 3.14} \sqrt{\frac{7.6 \times 10^5}{1.69 \times 10^{23}}} = \frac{1}{2 \times 3.14} \sqrt{4.7 \times 10^{20}} = \frac{2.17 \times 10^{14}}{6.28} \\ &= 3.435 \times 10^{13} \text{ ciclos/seg} \end{aligned}$$

$$\lambda_2 = \frac{3.0 \times 10^{10}}{3.435 \times 10^{13}} = 0.87 \times 10^{-3}$$

$$\bar{\nu}_2 = \frac{1}{0.87 \times 10^{-3}} = 1150 \text{ cm}^{-1}$$

Frecuencia para compuestos que presentan uniones EXO y

ENDO.

$$\nu_3 = \frac{1}{2 \times 3.14} \sqrt{\frac{3.22 \times 10^5}{1.619 \times 10^{23}}} = \frac{1}{2 \times 3.14} \sqrt{1.99 \times 10^{28}} = \frac{1.41 \times 10^{14}}{6.28}$$

$$= 2.245 \times 10^{13} \text{ ciclos/seg.}$$

$$\lambda_3 = \frac{3.0 \times 10^{10}}{2.23 \times 10^{13}} = 1.337 \times 10^{-3}$$

$$= \frac{1}{1.337 \times 10^{-3}} = 748 \text{ cm}^{-1}$$

ESPECTROSCOPIA RAMAN.

La espectroscopía Raman es un complemento del I R. Por medio del efecto Raman se puede saber si el tipo de vibración que presenta la unión N-S es simétrica o asimétrica.

Debido a que no se contó con un aparato Raman para la realización de este trabajo, se prosigue a explicar en una forma general el efecto Raman y como se determinan si una vibración es simétrica o asimétrica.

En la actualidad los espectrómetros Raman tienen como fuente un arco de Hg (lámpara Toronto) o fuentes luminosas tipo Laser.

Un rayo laser es un rayo de luz monocromático en el que están en fase las vibraciones electromagnéticas de todos los fotones, es decir, las ondas son coherentes en el tiempo y en el espacio, por lo que se refuerzan y su tendencia a mantenerse colimadas es mayor que en la luz ordinaria.

El principio del Laser se basa en el hecho de que algunas sustancias tienen átomos que son susceptibles de excitarse, esta excitación puede ser a base de luz, ondas de radio u otro tipo de radiación electromagnética, que permite a los átomos radiar a una longitud de onda que le es característica cuando regresa en uno o varios pasos a su estado de menor excitación.

No todas las vibraciones moleculares son susceptibles de registrarse como efecto Raman. Lo que determina si una banda se observa como absorción en el I R o como emisión en el Raman, ambas cosas a la vez o ninguna de ellas, es la característica especial de la naturaleza eléctrica de esta vibración (41).

Cuando hay deformación de los enlaces y se ocasiona un momento dipolo, la vibración es activa en el I R. Así esta banda producida en el I R casi no se observaría en el Raman; pero sin embargo, la presencia de un momento dipolo inducido produce cambio en la polarizabilidad de la molécula, permitiendo que sea activa en el Raman. Por consiguiente el Raman y el I R se complementan en estudios de configuración molecular.

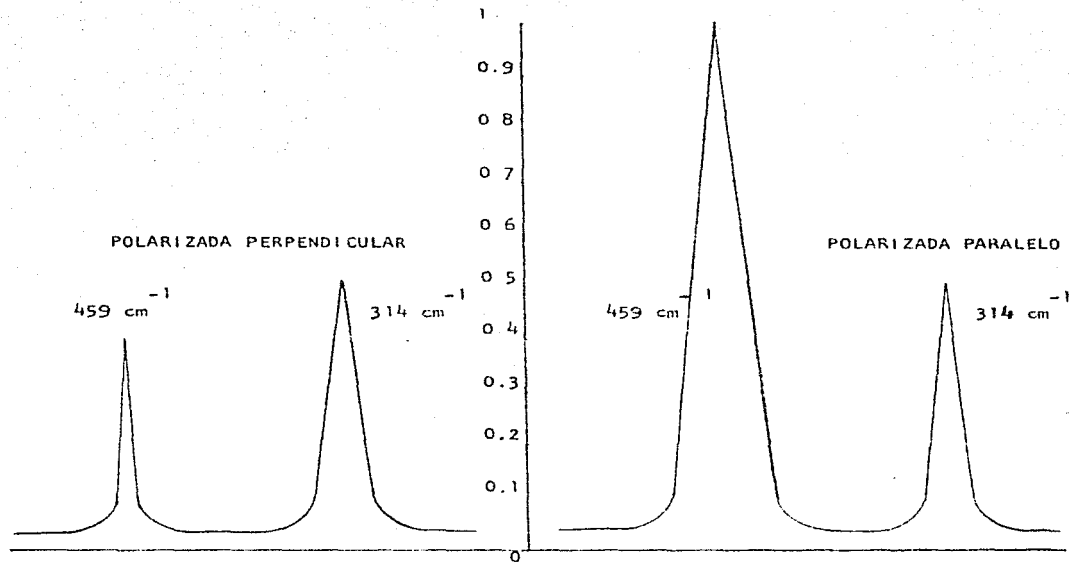
La radiación Raman siempre está polarizada y mediante el estudio de la polarización de las bandas de emisión del espectro Raman se puede tener información acerca de la simetría de la vibración molecular correspondiente (42).

VIBRACIONES SIMETRICAS Y ASIMETRICAS EN EL RAMAN.

El espectrómetro Raman, nos señala de que tipo de vibración se trata, ya sea simétrica o asimétrica. Como se dijo anteriormente, la presencia de un cambio en la polarizabilidad, conduce a una actividad en el Raman, dándonos una gráfica con la cual se observa la vibración producida.

La gráfica se obtiene al poner la placa de media onda del aparato Raman; cuando se pone en posición polarizada perpendicular, se observa un pico pequeño; indicando que se trata de una vibración simétrica, al girarla en posición polarizada en paralelo se observa un pico grande, indicándonos una vibración asimétrica.

Para poder aclarar este método, podemos hacer un símil con un rayo de luz, al hacerlo pasar por un vidrio polarizado. Si hacemos girar el vidrio polarizado, en cierta posición pasará o no pasará todo el rayo luminoso; así cuando obtenemos un pico grande podemos decir que pasa toda la luz, y si el pico es pequeño, poca luz pasó a través del vidrio polarizado, figura # 22.



BANDAS DEL ESPECTRO RAMAN VIBRACIONAL

CONCLUSIONES

La teoría presentada en este trabajo nos permitió introducirnos en la espectroscopía molecular para poder así conocer la constante de fuerza K para la unión N-S con los datos de las frecuencias fundamentales de los compuestos inorgánicos que presentan esta unión.

Se observó que son tres tipos de frecuencias fundamentales las que se presentan en estos compuestos; una de las frecuencias se presenta cuando son compuestos cíclicos, otra cuando presentan uniones EXO y ENDO y la tercera la presentan todos los compuestos con esta unión.

B I B L I O G R A F I A

1. W. HERSHEY
Phil. Trans. 90, 284, 437 (1800).
2. W.W. COBLENTZ
Bull. No. 35 Carnegie Inst. Publ. (1905)
Washington, D.C.
3. R.R. BRATTAIN, R.S. RASMUSSEN, AND A.M. CRAUATTI
J. App. Phys. 14, 418 (1943).
4. Instruction Manual
Perkin Elmer Infrared Equipment
Volumen 1.
5. IVAN SIMON
Radiación Infra-roja
Van Nostrand Momentum Books (1968)
6. RAYMOND T. BAILEY and ELLIS R. LIPPINCOTT
Journal of Molecular Structure
1, (1967).
7. JOHN R. DYER
Applications of Absorptions Spectroscopy of Organic Compounds
Hall Inc. (1965).
8. RICHARD T. WEIDNER, ROBERT L. SELLS
Elementary Classical Physics
Volumen 1 College Physics Series
Allyn and Bacon, Inc. Boston (1966).
9. MICHAEL L. HAIR, MARCEL DEKKER
Infrared Spectroscopy in Surface Chemistry
Inc. New York (1967).
10. HARRY B. GRAY
Electrones y Enlaces Químicos
Editorial Reverte, S.A. (1970)
11. GORDON M. BARROW
The Structure of Molecules
Benjamin Inc. (1964)
12. DANIELS F. and ALBERTY
Physical Chemistry
New York, John Wiley and Sons, Inc. (1962)
13. ROBERT W. MARKS
The New Physics and Chemistry Dictionary and Handbook
Bantam Science and Mathematics (1967).
14. WILSON E.B., DECOIS J.C.
Molecular Vibrations
McGraw-Hill, New York (1955)

15. CLIFFORD J. CRESWELL
Spectral Analysis of Organic Compounds.
An Introductory Programmed Text
Hamline University
St. Paul, Minnesota (1970)
16. GORDON M. BARROW
Molecular Spectroscopy
McGraw-Hill Book Co. (1962)
17. BRAND J.C.D. and SPEAKMAN J.L.
Molecular Structure
London (1960)
18. JOHNSON D.A.
Some Thermodynamics Aspects of Inorganic Chemistry
Cambridge at the University Press (1968)
19. DRAGO
Inorganic Physical Chemistry
Van Nostrand
Rainhold (1965)
20. KING W.
Spectroscopy and Molecular Structure
Holt Rinehart and Winstone, New York (1964)
21. FRAUSNITZ J.M.
Molecular Thermodynamics of Fluids, Phase Equilibria
Prentice Hall (1969)
22. EYRING H. WALTER
Quantum Chemistry
Wiley (1944)
23. HERZBERG G.
Molecular Spectra and Molecular Structure I. Spectra of
Diatomic Molecules
Van Nostrand (1950)
24. HILL
Introduction to Statistical Thermodynamics
Wesley Publishing Company
25. W. WEST
Chemical Application of Spectroscopy
Interscience (1956)
26. F.A. COTTON
Chemical Application of Group Theory
Wiley Interscience
New York (1963)
27. JAFFE and M. ORCPIN
Symmetry in Chemistry
Wiley (1965)

28. COTTON F.A.
Chemical Application of Group Theory
Interscience (1963)
29. HEINE V.
Group Theory in Quantum Mechanics
Pergamon London (1960).
30. BELLAMY and WILLIAMS
J. Chem. Soc. 4294 (1957)
31. BELLAMY
The Infrared Spectra of Complex Molecules
John Wiley (1958)
32. BARKER
J. Phys. Chem. 61, 450 (1957)
33. KIRKWOOD, cited by WEST and EDWARDS
J. Chem. Phys. 514 (1937)
34. E. LIPPINCOTT and M. TOBIN
J. Chem. Phys. 21, 1559 (1953)
35. SCOTT D. FINKEH
J. Am. Chem. Soc. 72, 2424 (1950)
36. RAYMOND T. BAILEY and ELLIS R. LIPPINCOTT
Spectrochimica Acta
20, 1327-1334 (1964)
37. BANISTER, A.J. y B. BELL
J. Chem. Soc. 1659 (1970)
38. VANDI T. MOELLER
Inorganic. Chem. Pág. 399 (1963)
39. MC.KENNEY, R.L. and N.R. FETTER
Journal of Inorganic Nuclear Chemistry
30, 2928 (1968)
40. SADTLER
High Resolution Spectra of Inorganics and Related Compounds
Sadtler Research Laboratories Inc.
Espectro y 830K
Inorganic Volume 3 (1967)
41. HIBBEN J.H.
The Raman Effect and Chemical Application
Reinhold, New York (1939)
42. ING. VELASCO LEONE, DANTE
Espectrometría Raman
Instituto Mexicano del Petróleo
Septiembre (1968)