

Bibliografía

Physics, VOLUME 1, R. Resnick, D. Halliday, K. S. Krane, Fourth Edition, John Wiley & Sons, Inc. 1992

Chapter 1 Measurement

The physical Quantities, Standards, and Units
The International System of Units
The Standard of Time
The Standard of Length
The Standard of Mass
Precision and Significant Figures
Dimensional Analysis

Chapter 2 Motion in One Dimension

Particle Kinematics
Descriptions of Motion
Average Velocity
Accelerated Motion
Motion with Constant Acceleration
Freely Falling Bodies
Galileo and Fere Fall (Optional)
Measuring the Free-Fall Acceleration (Optional)

Chapter 3 Vectors

Vectors and Scalars
Adding Vectors: Graphical Method
Components fo Vectors
Adding Vectors: Component Method
Multiplication of Vectors
Vector Laws in Physics

Chapter 4 Motion in Two and Three Dimensions

Position, Velocity, and Acceleration
Motion with Constant Acceleration
Projectile Motion
Uniform Circular Motion
Velocity and Acceleration Vectors in Circular Motion (Optional)
Relative Motion

Chapter 5 Force and Newton's Laws

Classical Mechanics
Newton's First Law
Force
Mass
Newton's Second Law
Newton's Third Law
Units of Force
Weight and Mass
Measuring Forces
Applications of Newton's Laws
More Applications of Newton's Laws

Chapter 6 Partide Dynamics

Force Laws
Frictional Forces
The Dynamics of Uniform Circular Motion
Equations of Motion: Constant and Nonconstant Forces
Time-Dependent Forces: Analytical Methods
Time-Dependent Forces: Numerical Methods (Optional)
Drag Forces and the Motion of Projectiles
Noninertial Frames and Pseudoforces (Optional)
Limitations of Newton's Laws (Optional)

Chapter 7 Work and Energy

Work Done by a Constant Force
Work Done by a Variable Force: One-Dimensional Case
Work Done by a Variable Force: Two-Dimensional Case (Optional)
Kinetic Energy and the Work–Energy Theorem
Power
Reference Frames (Optional)
Kinetic Energy at High Speed (Optional)

Chapter 8 Conservation of Energy

Conservative Forces
Potential Energy
One-Dimensional Conservative Systems
One-Dimensional Conservative Systems: The Complete Solution
Two- and Three-Dimensional Conservative Systems (Optional)
Conservation of Energy in a System of Particles
Mass and Energy (Optional)
Quantization of Energy (Optional)

Chapter 9 Systems of Particles

Two-Particle Systems
Many-Particle Systems
Center of Mass of Solid Objects
Linear Momentum of a Particle
Linear Momentum of a System of Particles
Conservation of Linear Momentum
Work and Energy in a System of Particles (Optional)
Systems of Variable Mass (Optional)

Chapter 10 Collisions

What is a Collision?
Impulse and Momentum
Conservation of Momentum During Collisions
Collisions in One Dimension
Two-Dimensional Collisions
Center-of-Mass Reference Frame

Spontaneous Decay Processes (Optional)

Chapter 11 Rotational Kinematics

Rotational Motion
The Rotational Variables
Rotation with Constant Angular Acceleration
Rotational Quantities as Vectors
Relationships Between Linear and Angular Variables: Scalar Form
Relationships Between Linear and Angular Variables: Vector Form (Optional)

Chapter 12 Rotational Dynamics

Rotational Dynamics: An Overview
Kinetic Energy of Rotation and Rotational Inertia
Rotational Inertia of Solid Bodies
Torque Acting on a Particle
Rotational Dynamics of a Rigid Body
Combined Rotational and Translational Motion

Chapter 13 Angular Momentum

Angular Momentum of a Particle
Systems of Particles
Angular Momentum and Angular Velocity
Conservation of Angular Momentum
The Spinning Top
Quantization of Angular Momentum (Optional)
Rotational Dynamics: A Review

Chapter 14 Equilibrium of Rigid Bodies

Conditions of Equilibrium
Center of Gravity
Examples of Equilibrium
Stable, Unstable, and Neutral Equilibrium of Rigid Bodies in a Gravitational Field
Elasticity

Chapter 15 Oscillations

Oscillating Systems
The Simple Harmonic Oscillator
Simple Harmonic Motion
Energy Considerations in Simple Harmonic Motion
Applications of Simple Harmonic Motion
Simple Harmonic Motion and Uniform Circular Motion
Combinations of Harmonic Motions
damped Harmonic Motion (Optional)
Forced Oscillations and Resonance (Optional)

Chapter 16 Gravitation

Gravitation from the Ancients to Kepler
Newton and the Law of Universal Gravitation
The Gravitational Constant G
Gravity Near the Earth's Surface
Gravitational Effect of a Spherical Distribution of Matter (Optional)
Gravitational Potential Energy

The Gravitational Field an Potential (Optional)
The Motions of Planets and Satellites
Universal Gravitation
The General Theory of Relativity (Optional)

Chapter 17 Fluid Statics

Fluids and Solids
Pressure and Density
Variation of Pressure in a Fluid at Rest
Pascal's Principle and Archimedes' Principle
Measurement of Pressure
Surface Tension (Optional)

Chapter 18 Fluid Dynamics

General Concepts of Fluid Flow
Streamlines and the Equation of Continuity
Bernoulli's Equation
Applications of Bernoulli's Equation and the Eauqtion of Continuity
Fileds Flow (Optional)
Viscosity, Turbulence, and Chaotic Flow (Optional)

Chapter 19 Wave Motion

Mechanical Waves
Types of Waves
Traveling Waves
Wave Speed
The Wave Equation (Optional)
Power and Intensity in Wave Motion
The Principle of Superposition
Interference of Waves
Standing Waves
Resonance

Chapter 20 Sound Waves

The Speed of Sound
Traveling Longitudinal Waves
Power and Intensity of Sound Waves
Standing Longitudinal Waves
Vibrating Systems and Sources of Sound
Beats
The Doppler Effect

Chapter 21 The Special Theory of Relativity

Troubles with Classical Physics
The Postulates of Special Relativity
Consequences of Eintein's Postulates
The Lorentz Transformation
Measuring the Spece— Time Coordinates of an Event
The Transformation of Velocities
Consequences of the Lorentz Transformation
Relativistic Momentum
Relativistic Energy
The Common Sense of Special Relativity

Chapter 22 Temperature

Macroscopic and Microscopic Descriptions
 Temperature and Thermal Equilibrium
 Measuring Temperature
 The Ideal Gas Temperature Scale
 Thermal Expansion

Chapter 23 Kinetic Theory and the Ideal Gas

Macroscopic Properties of a Gas and the Ideal Gas Law
 The Ideal Gas: A Model
 Kinetic Calculation of the Pressure
 Kinetic Interpretation of the Temperature
 Work Done on an Ideal Gas
 The Internal Energy of an Ideal Gas
 Intermolecular Forces (Optional)
 The Van der Waals Equation of State (Optional)

Chapter 24 Statistical Mechanics

Statistical Distributions and Mean Values
 Mean Free Path
 The Distribution of Molecular Speeds
 The Distribution of Energies
 Brownian Motion
 Quantum Statistical Distributions (Optional)

Chapter 25 Heat and the First Law of Thermodynamics

Heat: Energy in Transit
 Heat Capacity and Specific Heat

Physics, VOLUME 2, R. Resnick, D. Halliday, K. S. Krane, Fourth Edition, John Wiley & Sons, Inc. 1992

Chapter 27 Electric Charge and Coulomb's Law

Electromagnetism – A Preview
 Electric Charge
 Conductors and Insulators
 Coulomb's Law
 Charge Is Quantized
 Charge Is Conserved

Chapter 28 The Electric Field

Fields
 The Electric Field E
 The Electric Field of Point Charges
 Lines of Force
 The Electric Fields of Continuous Charge Distribution
 A Point Charge in an Electric Field
 A Dipole in an Electric Field

Chapter 29 Gauss' Law

The Flux of a Vector Field
 The Flux of the Electric Field
 Gauss' Law
 A Charged Isolated Conductor

Heat Capacities of Solids
 Heat Capacities of an Ideal Gas
 The First Law of Thermodynamics
 Applications of the First Law
 The Transfer of Heat

Chapter 26 Entropy and the Second Law of Thermodynamics

Reversible and Irreversible Processes
 Heat Engines and the Second Law
 Refrigerators and the Second Law
 The Carnot Cycle
 The Thermodynamic Temperature Scale
 Entropy: Reversible Processes
 Entropy: Irreversible Processes
 Entropy and the Second Law
 Entropy and Probability

Appendices

- A The International System of Units (SI)
- B Some Fundamental Constants of Physics
- C Some Astronomical Data
- D Properties of the Elements
- E Periodic Table of the Elements
- F Elementary Particles
- G Conversion Factors
- H Mathematical Formulas
- I Computer Programs
- J Nobel Prizes in Physics

Application of the Gauss' Law
 Experimental Test of Gauss' Law and Coulomb's Law
 The Nuclear Model of the Atom (Optional)

Chapter 30 Electric Potential

Electrostatic and Gravitational Forces
 Electric Potential Energy
 Electric Potential
 Calculating the Potential From the Field
 Potential Due to a Point Charge
 Potential Due to a Collection of Point Charges
 The Electric Potential of Continuous Charge Distributions
 Equipotential Surfaces
 Calculating the Field From the Potential
 An Isolated Conductor
 The Electrostatic Accelerator (Optional)

Chapter 31 Capacitors and Dielectrics

Capacitance
 Calculating the Capacitance
 Capacitors in Series and Parallel
 Energy Stored in an Electric Field

Capacitors with Dielectric
 Dielectrics: An Atomic View
 Dielectrics and Gauss' Law

Chapter 32 Current and Resistance

Electric Current
 Current Density
 Resistance, Resistivity, and Conductivity
 Ohm's Law
 Ohm's Law: A Microscopic View
 Energy Transference in an Electric Circuit
 Semiconductors (Optional)
 Superconductors (Optional)

Chapter 32 DC Circuits

Electromotive Force
 Calculating the Current in a Single Loop
 Potential Difference
 Resistors in Series and Parallel
 Multiloop Circuits
 Measuring Instruments
 RC Circuits

Chapter 34 The Magnetic Field

The Magnetic Field B
 The Magnetic Force on a Moving Charge
 Circulating Charges
 The Hall Effect
 The Magnetic Force on a Current
 Torque on a Current Loop
 The Magnetic Dipole

Chapter 35 Ampère's Law

The Biot-Savart Law
 Applications of the Biot_Savart Law
 Lines of B
 Two Parallel Conductors
 Ampère's Law
 Solenoids and Toroids
 Electromagnetism and Frames of Reference (Optional)

Chapter 36 Faraday's Law of Induction

Faraday's Experiments
 Lenz' Law
 Motional emf
 Induced Electric Fields
 The Betatron
 Induction and Relative Motion (Optional)

Chapter 37 Magnetic Properties of the Matter

Gauss' Law for Magnetism
 Atomic and Nuclear Magnetism
 Magnetization
 Magnetic Materials
 The Magnetism of the Planets (Optional)

Chapter 38 Inductance

Inductance
 Calculating the Inductance
 LR Circuits
 Energy Storage in a Magnetic Field
 Electromagnetic Oscillations: Qualitative
 Electromagnetic Oscillations: Quantitative
 Damped and Forced Oscillations

Chapter 39 Alternating Current Circuits

Alternating Circuits
 Three Separate Elements
 The Single-Loop RLC Circuit
 Power in AC Circuits
 The Transformer (Optional)

Chapter 40 Maxwell Equations

The Basic Equations of Electromagnetism
 Induced Magnetic Fields and the Displacement Current
 Maxwell's Equations
 Maxwell's Equations and Cavity Oscillations (Optional)

Chapter 41 Electromagnetic Waves

The Electromagnetic Spectrum
 Generating an Electromagnetic Wave
 Traveling Waves and Maxwell's Equations
 Energy Transport and the Poynting Vector
 Momentum and Pressure of Radiation (Optional)

Chapter 42 The Nature and Propagation of Light

Visible Light
 The Speed of Light
 The Doppler Effect for Light
 Derivation of the Relativistic Doppler Effect (Optional)
 Consequences of the Relativistic Doppler Effect (Optional)

Chapter 43 Reflection and Refraction at Plane Surfaces

Geometrical Optics and Wave Optics
 Reflection and Refraction
 Deriving the Law of Reflection
 Image Formation by Plane Mirrors
 Deriving the Law of Refraction
 Total Internal Reflection

Chapter 44 Spherical Mirrors and Lenses

Spherical Mirrors
 Spherical Refracting Surfaces
 Thin Lenses
 Compound Optical Systems
 Optical Instruments

Chapter 45 Interference

Double-Slit Interference
 Coherence
 Intensity in Double-Slit Interference
 Interference from Thin Films

Optical Reversibility and Phase Changes on Reflection (Optional)
 Michelson's Interferometer
 Michelson's Interferometer and Light Propagation (Optional)

Chapter 46 Diffraction

Diffraction and the Wave Theory of Light
 Single-Slit Diffraction
 Intensity in Single-Slit Diffraction
 Diffraction at a Circular Aperture
 Double-Slit Interference and Diffraction Combined

Chapter 47 Gratings and Spectra

Multiple Slits
 Diffraction Gratings
 Dispersion and Resolving Power
 X-Ray Diffraction
 Holography (Optional)

Chapter 48 Polarization

Polarization
 Polarizing Sheets
 Polarization by Reflection
 Double Refraction
 Circular Polarization
 Scattering of Light
 To the Quantum Limit

Chapter 49 Light and Quantum Physics

Thermal Radiation
 Planck's Radiation Law
 The Quantization of Energy
 The Heat Capacity of Solids
 The Photoelectric Effect
 Einstein's Photon Theory
 The Compton Effect
 Line Spectra

Chapter 50 The Wave Nature of Matter

The Wave Behavior of Particles
 The De Broglie Wavelength
 Testing De Broglie's Hypothesis
 Waves, Wave Packets, and Particles
 Heisenberg's Uncertainty Relationships
 The Wave Function
 Trapped Particles and Probability Densities
 Barrier Tunneling
 The Correspondence Principle
 Waves and Particles

Chapter 51 The Structure of Atomic Hydrogen

The Bohr Theory
 The Hydrogen Atom and Schrödinger's Equation
 Angular Momentum
 The Stern-Gerlach Experiment
 The Spinning Electron

Counting the Hydrogen Atom States
 The Ground State of Hydrogen
 The Excited States of Hydrogen
 Details of Atomic Structure (Optional)

Chapter 52 Atomic Physics

The X-Ray Spectrum
 X Rays and the Numbering of the Elements
 Building Atoms
 The Periodic Table
 Lasers and Laser Light
 Einstein and the Laser
 How a Laser Works
 Molecular Structure

Chapter 53 Electrical Conduction in Solids

Conduction Electrons in a Metal
 Filling the Allowed States
 Electrical Conduction in Metals
 Bands and Gaps
 Conductors, Insulators, and Semiconductors
 Doped Semiconductors
 The *pn* Junction
 Optical Electronics
 The Transistor
 Superconductors

Chapter 54 Nuclear Physics

Discovering the Nucleus
 Some Nuclear Properties
 Radioactive Decay
 Alpha Decay
 Beta Decay
 Measuring ionizing Radiation
 Natural Radioactivity
 Nuclear Reactions
 Nuclear Models (Optional)

Chapter 55 Energy from the Nucleus

The Atom and the Nucleus
 Theory of Nuclear Fission
 Nuclear Reactors: The Basic Principles
 A Natural Reactor
 Thermonuclear Fusion: The Basic Process
 Thermonuclear Fusion in Stars
 Controlled Thermonuclear Fusion
 Magnetic Confinement
 Inertial Confinement

Chapter 56 Particle Physics and Cosmology

Particle Interactions
 Families of Particles
 Conservation Laws
 The Quark Model
 The Big Bang Model
 Nucleosynthesis

The Age of the Universe

Appendices

A The International System of Units (SI)
 B Some Fundamental Constants of Physics
 C Some Astronomical Data
 D Properties of the Elements
 E Periodic Table of the Elements

F Elementary Particles
 G Conversion Factors
 H Mathematical Formulas
 I Computer Programs
 J Nobel Prizes in Physics

Principios básicos de espectroscopía, Raymond Chang, Editorial AC, Madrid, España, McGraw-Hill, Inc. 1971

Capítulo 1 Principios básicos

Introducción
 Revisión de la mecánica cuántica
 Reglas de selección
 Transiciones espectroscópicas
 Fotometría de absorción
 Anchura de línea y resolución
 Relación señal-ruido
 Unidades
 Zonas del espectro
 Conclusión

Capítulo 2 Simetría molecular y teoría de grupos

Capítulo 3 Espectroscopía de resonancia magnética nuclear

Introducción
 Técnicas experimentales
 Teoría
 Aplicaciones

Capítulo 4 Espectroscopía de resonancia magnética nuclear cuadrupolar

Introducción
 Técnicas experimentales
 Teoría
 Aplicaciones

Capítulo 5 Espectroscopía Mössbauer

Introducción
 Técnicas experimentales
 Teoría
 Aplicaciones

Capítulo 6 Espectroscopía de resonancia de espín electrónico

Introducción
 Técnicas experimentales
 Teoría
 Aplicaciones

Capítulo 7 Espectroscopía de microondas

Introducción
 Técnicas experimentales
 Teoría

Aplicaciones

Capítulo 8 Espectroscopía infrarroja y Raman

Origen de las transiciones infrarrojas
 Técnicas experimentales de espectroscopía IR
 Aparición del espectro IR
 Origen de la espectroscopía Raman
 Técnicas experimentales de espectroscopía Raman
 Aparición del espectro Raman
 Teoría de grupos y modos normales de vibración de las moléculas poliatómicas
 Aplicaciones

Capítulo 9 Espectroscopía electrónica de los átomos

Introducción
 Técnicas experimentales
 Teoría
 Aplicaciones

Capítulo 10 Espectroscopía electrónica de moléculas diatómicas

Introducción
 Teoría

Capítulo 11 Espectroscopía electrónica de moléculas poliatómicas

Introducción
 Técnicas experimentales
 Teoría
 Aplicaciones

Capítulo 12 Fotoluminiscencia: fluorescencia y fosforescencia

Discusión general
 Técnicas experimentales
 Aplicaciones

Capítulo 13 Dispersión rotatoria óptica y dicroísmo circular

Teoría
 Técnicas experimentales
 Aplicaciones

Capítulo 14 Maseres y láseres

Discusión general
 Aplicaciones

Capítulo 15 Espectroscopia fotoelectrónica

Introducción
Técnicas experimentales
Teoría
Aplicaciones

Capítulo 16 Resumen

Apéndice 1 Matrices

Apéndice 2 Tablas de caracteres

Apéndice 3 Magnetón de Bohr y magnetón nuclear

Apéndice 4 Tabla de resonancia magnética nuclear

Apéndice 5 Tiempos de relajación

Apéndice 6 El factor g de Landé

Apéndice 7 La aproximación de Born-Oppenheimer

Espectroscopia molecular, Ira N. Levine, Editorial AC, Madrid, España, McGraw-Hill, Inc. 1980

Capítulo 1 Mecánica cuántica y estructura electrónica

Mecánica cuántica
Repaso de matemáticas
Unidades
Partícula en una caja
Oscilador Armónico
Momento angular orbital
Operadores de escalamiento para el momento angular orbital
Paridad
Método de vibraciones
Teoría de perturbaciones
Problema de fuerzas centrales
Problema de dos partículas
Rotor rígido de dos partículas
El átomo de hidrógeno
Spin
El principio de Pauli
Átomos polieletrónicos
Grupos puntuales de simetría
Estructura electrónica molecular
El método de Hartree-Fock
Métodos semiempíricos

Capítulo 2 Matrices

Matrices
Valores propios y vectores propios
Matrices y mecánica cuántica

Capítulo 3 Estados dependientes del tiempo y espectroscopia

Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo
Absorción y emisión de radiación
Reglas de selección
Espectroscopia
Formas y anchuras de las líneas
Láseres

Capítulo 4 Vibración y rotación de moléculas diatómicas

Movimiento nuclear en moléculas diatómicas

Anarmonicidad, interacción de vibración-rotación y distorsión centrifugas
Funciones de energía potencial para moléculas diatómicas
Reglas de selección para transiciones rotacionales y vibracionales
Espectros rotacionales de moléculas diatómicas
Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas
Paridad de las funciones de onda de moléculas diatómicas
Spin nuclear y el principio de Pauli
Modificaciones *orto* y *para* de las moléculas diatómicas homonucleares
El efecto Raman
Energías rotacionales de moléculas diatómicas no- Σ

Capítulo 5 Rotación de moléculas poliatómicas

Movimiento nuclear de moléculas poliatómicas
Mecánica clásica de un rotor rígido
El operador hamiltoniano rotacional
El trompo esférico
El trompo simétrico
El trompo asimétrico
Espectros de rotación pura de moléculas poliatómicas
Espectroscopia de microondas

Capítulo 6 Vibración de moléculas poliatómicas

Introducción
Mecánica clásica de la vibración
Simetría y vibraciones normales
Mecánica cuántica de la vibración
Reglas de selección para transiciones de vibración-rotación y de rotación pura
Espectroscopia infrarroja
Espectroscopia Raman
Niveles vibracionales degenerados y casi degenerados
Paridad de funciones de onda de moléculas poliatómicas
Spin nuclear y principio de Pauli

Capítulo 7 Espectroscopia electrónica

Espectroscopia electrónica

Espectros electrónicos de moléculas diatómicas
Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas
Espectroscopia fotoelectrónica

Capítulo 8 Espectroscopia de resonancia magnética

Resonancia magnética
Momentos magnéticos nucleares
Resonancia magnética nuclear
Desplazamiento químico de RMN
Desdoblamiento spin-spin de RMN
Espectros RMN de núcleos que no son protones
Origen del acoplamiento spin-spin RMN
Relajación de spin
RMN y procesos de velocidad
Momentos cuadrupolares nucleares

Resonancia de spin electrónico

Capítulo 9 Teoría de grupos

Grupos
Tablas de multiplicación
Transformaciones de coordenadas y matrices
Representaciones
Tablas de caracteres
Funciones base
Teoría de grupos y mecánica cuántica
Teoría de grupos y estructura electrónica
Teoría de grupos y vibraciones moleculares
Teoría de grupos y rotación molecular
Representación producto directo
Tablas de caracteres de algunos grupos puntuales

Wave Phenomena, Dudley H. Towne, Dover Publications, Inc. New York, 1967

Chapter 1 Transverse Waves on a String

Introduction
Derivation of the wave equation
Solution of the one-dimensional wave equation
Wave propagation velocity on a string
The most general solution to the one-dimensional wave equation
Kinematics associated with the waveform
Description of a sinusoidal progressive wave
Initial conditions applied to the case of a string of infinite length

Connective and radiative energy terms
Relative radiative intensities in reflection and transmission at a single interface
Intensity relations for progressive sinusoidal waves
Intensity in a superposition of + and - sinusoidal waves
Interference between superposed waves
Measurement of intensity in decibels
Energy definitions for transverse waves on a string
Energy relations for transverse waves on a string; isomorphisms
Boundary value problems for transverse waves on a string

Chapter 2 The Acoustic Plane Wave

Definition of the variables
Derivation of the wave equation
The velocity of sound
Simplified form of the equations for acoustic waves
Detailed description of a progressive sinusoidal wave
Nonlinear wave propagation in an ideal gas

Chapter 5 Experimental Aspects of Acoustics

Introduction
Divisions of the acoustic spectrum
The problem of reflection and scattering
Transducers
Absolute measurement of acoustic variables
Diffraction of light by an ultrasonic wave

Chapter 3 Boundary Value Problems

Reflection at a fixed end of transverse waves on a string
Reflection of acoustic waves at a rigid surface
Waves produced by the specified motion of a boundary surface
Reflection and transmission at an interface
Reflection of a sinusoidal wave; partial standing wave
Extreme mismatch of impedances; rigid and free surfaces
Reflection of a sinusoidal wave from a pair of interfaces
Reflection of a sinusoidal wave at a pair of interfaces, alternate method
Reflection and transmission of a sinusoidal wave by a thin plate

Chapter 6 The Electromagnetic Plane Wave

Maxwell's equations
A solution to Maxwell's equations for a special situation
Implications of the electromagnetic theory of light
Maxwell's relation
Dispersion theory
A linearly polarized transverse plane wave

Chapter 4 Energy in a Sound Wave; Isomorphisms

Energy density and energy flux for a plane sound wave
The law of conservation of energy
Separability of energy into + and - components

Chapter 7 Analytical Description of Polarized Electromagnetic Plane Waves

Introduction
More complete description of the linearly polarized sinusoidal plane wave
Reflection from a dielectric surface obtained by appeal to an isomorphism
Reflection from a perfect conductor; direct evidence of standing waves

Consideration of a more general sinusoidal plane wave
Types of polarization
Natural light
Energy relations for the general progressive plane wave
Reflection by a thin film

Chapter 8 The production and Detection of Linearly Polarized Light

Introduction
The recognition of linearly polarized light
The production of linearly polarized light by absorption
The experimntal evidence that light is a transverse wave
Polarization by reflection from a dielectric
Fresnel's formulas
Stokes' relations
Interpretation of Brewster's law in terms of the electron theory of matter
Double refraction in calcite
Huygens' wave surfaces for calcite
The Nicol prism
Double refraction in crystals other than calcite

Chapter 9 The Production and Detection of Elliptically Polarized Light

Introduction
Retardation plates
The manipulation of polarized light
Determining the polarization of a given beam
The Babinet compensator
Huygens' construction for plane waves in calcite

Chapter 10 Additional Optical Properties of Matter

Optical activity
The Faraday effect
Induced birefringence
Scattering (the Tyndall effect)
Absorption
Spectroscopic effects

Chapter 11 Interference Pattern from a Pair of Point Sources

Introduction
Sources close together compared with a wavelength; the dipole source
Various interference patterns for $d \sim \lambda$
Total power radiated from a pair of point sources
The phenomenon of beats
Interference patterns when $kd \gg 1$
Young's experiment
Some practical considerations in Young's experiment
Interference patterns obtained by the use of virtual sources
Reflection from a thin wedge
Broad sources and localized fringes in reflection from a thin film wedge
Nonuniform thin films
The Michelson interferometer
Experiments using the Michelson interferometer
The purity of a spectral line

Chapter 12 Continuous Distributions of Coherent Sources; the Fraunhofer Approximation

Introduction
Radiation pattern from coherent sources continuously distributed along a line segment
The Fraunhofer approximation
Study of the Fraunhofer pattern
Vibration curve for the Fraunhofer approximation
Diffraction by an extremely narrow slit
Diffraction by an extremely long slit
The Fraunhofer approximation applied to a rectangular distribution of coherent point sources
Diffraction by a rectangular aperture
Oblique incidence
Reflection of a plane wave from a rectangular surface
Fraunhofer diffraction by a circular aperture
Acoustic radiation from a circular piston
Limit of resolution of image forming instruments
Validity of the Huygens-Fresnel principle

Chaptes 13 Fresnel Diffraction

Introduction
Fresnel approximation for the radiation pattern of a linear distribution of coherent sources
The Fresnel integrals and the Cornu spiral
The Fresnel diffraction pattern of a single slit
Fresnel diffraction by a wide slit

Chapter 14 The Double Slit; Multiple-slit Arrays; Diffraction Gratings

Introduction
The double slit
Multiple-slit arrays
The diffraction grating

Chapter 15 Waves Confined to a Limited Region

Introduction
Transverse waves on a string segment with fixed ends
Sinusoidal solutions
Solutions of product form
Linear combination of normal-mode solutions
Determination of the coefficients in a normal-modes expansion
Independence of the energy contributions from different modes
Normal-modes expansion of a rectangular pulse
Energy spectrum of the rectangular pulse
A too literal interpretation of the normal-modes expansion
Normal-modes expansion of a sinusoidal wavetrain of limited extent
Forced motion of a string
Eigenfrequencies as a resonance frequencies of a string driven sinusoidally at one end
General solution for the string driven sinusoidally at one end
Steady-state solution for a uniformly distributed sinusoidal force on a string with fixed ends

Normal modes of a uniformly stretched rectangular membrane
Fourier integral analysis on a semi-infinite string
Fourier analysis over the whole x -axis

Chapter 16 Waves in a Dispersive Medium

Introduction
Superposition of two sinusoids
Surface waves on a liquid
General procedure for determining propagation in a dispersive medium
Group velocity of a nearly sinusoidal wave
The significance of group velocity in an optical context
The velocity of light in free space as a limiting value

Chapter 17 The Acoustic Waves Equation in Three Dimensions

Introduction
Exact hydrodynamical equations for an inviscid compressible fluid
Linearization of the Eulerian equations
Introduction of a velocity potential function
Spherically symmetric solutions
Boundary value problem: a pulsing sphere
The near zone of a diverging spherical wave

The point source
The acoustic dipole
Plane wave propagating in an arbitrary direction
Boundary value problem: reflection of obliquely incident plane waves
Inhomogeneous plane waves
Frustrated total reflection

Appendix I. The representation of sinusoidal functions by complex numbers
Appendix II. Frequently used trigonometric identities
Appendix III. The one-dimensional hydrodynamic equations in Eulerian form
Appendix IV. Table of acoustic parameters of gases and liquids
Appendix V. Physical situations isomorphic to the one-dimensional acoustic wave
Appendix VI. Unabbreviated form of Maxwell's equations
Appendix VII. Identities from vector analysis
Appendix VIII. Introduction to Bessel functions; diffraction by a circular aperture; normal modes of a circular membrane

Espectroscopía, A. Requena Rodríguez, J. Zúñiga Román, Pearson- Prentice Hall, Madrid, España, 2004

1 Cuantización de la materia

Postulados de la Mecánica Cuántica
Método de variaciones
Teoría de perturbaciones no degenerada
Teoría de perturbaciones degenerada
Resumen

2 Radiación electromagnética

Ondas electromagnéticas
Energía de una onda electromagnética
Fotones
Espectro de la radiación electromagnética
Radiación térmica
Efecto Doppler
Resumen

3 Interacción de la radiación con la materia

Probabilidad de transición
Absorción y emisión estimulada
Emisión espontánea
Reglas de selección
Resumen

4 Forma y anchura de las líneas espectrales

Coefficiente de absorción
Anchura natural
Ensanchamiento debido al efecto Doppler

Ensanchamiento por colisiones
Resumen

5 Láser

Amplificación de la radiación
La cavidad resonante
Modos de la cavidad
Inversión de población
Propiedades de la radiación láser
Resumen

6 Espectroscopia atómica

Espectro del átomo de hidrógeno
Estructura fina del átomo de hidrógeno
Átomos polielectrónicos
Acoplamiento espín-órbita en átomos polielectrónicos
Espectros atómicos
Efecto Zeeman
El láser de helio-neón
Resumen

7 Vibración y rotación de moléculas diatómicas

Separación de Born-Oppenheimer
Movimiento nuclear en moléculas diatómicas
Modelos del oscilador armónico y del rotor rígido
Correcciones de anarmonicidad y de distorsión centrífuga
Reglas de selección

Espectros de rotación pura
Espectros de vibración-rotación
Determinación de energías de disociación
Resumen

8 Espectroscopia rotacional de moléculas poliatómicas

Movimiento nuclear en moléculas poliatómicas
Mecánica clásica del rotor rígido
Operador hamiltoniano rotacional
Niveles de energía y funciones de onda rotacionales
Reglas de selección
Espectros rotacionales
Determinación estructural
Resumen

9 Espectroscopia vibracional de moléculas poliatómicas

Ecuaciones del movimiento vibracionales
Modos normales de vibración
Tratamiento cuántico de las vibraciones moleculares
Coordenadas vibracionales internas
Momento angular vibracional
Reglas de selección vibracionales
Espectros de vibración-rotación
Anarmonicidad
Resumen

10 Teoría de grupos aplicada a la simetría molecular

Elementos y operaciones de simetría
Grupos puntuales de simetría
Representación matricial de los grupos de simetría
Representaciones irreducibles
Tablas de caracteres
Reducción de las representaciones
Teoría de grupos y mecánica cuántica
Representación producto directo
Resumen

11 Simetría de las vibraciones moleculares

Simetría de las coordenadas normales
Simetría de las funciones de onda vibracionales
Reglas de selección
Coordenadas de simetría
Vibraciones de grupos
Resumen

12 Espectroscopia electrónica de moléculas diatómicas

Estados electrónicos de moléculas diatómicas
Reglas de selección
Estructura vibracional. Principio de Franck-Condon
Disociación y predissociación
Estructura rotacional fina
Resumen

13 Espectroscopia electrónica de moléculas poliatómicas

Estados electrónicos de moléculas poliatómicas
Reglas de selección electrónicas

Estructura vibracional y acoplamiento vibrónico
Espectros electrónicos: formaldehído y benceno
Grupos cromóforos
Desactivación de estados electrónicos excitados
Fluorescencia y fosforescencia
Resumen

14 Resonancia magnética nuclear

Interacción del espín nuclear con un campo magnético
Reglas de selección y población de los niveles
Desplazamiento químico
Acoplamiento espín-espín
Espectros RMN de primer orden
Mecanismos de acoplamiento espín-espín
Procesos de relajación
Resumen

15 Resonancia de espín electrónico

Interacción entre un electrón libre y un campo magnético externo
Interacción entre un electrón desapareado de una molécula y un campo magnético
Solución exacta para los niveles de energía
Cálculo perturbativo de los niveles de energía
Sistemas con varios núcleos
Estados tripletes
Técnicas de doble resonancia
Estructura electrónica del dador electrónico clorofila
Resumen

16 Resonancia cuadrupolar nuclear

Momento cuadrupolar nuclear
El operador Hamiltoniano cuadrupolar nuclear
Niveles de energía cuadrupolar nuclear
Transiciones espectrales de cuadrupolo nuclear
Efecto Zeeman en los espectros de RQN
Efecto cuadrupolar en los espectros de RMN
RQN y enlace químico
Otros efectos en el espectro de RQN
Resumen

17 Tratamiento avanzado de la interacción de la radiación con la materia

Análisis vectorial
Ecuaciones de Maxwell
Potenciales vector y escalar
La ecuación de ondas
Determinación de las ondas electromagnéticas
Hamiltoniano de un sistema de cargas en un campo electromagnético
La aproximación dipolar
Cuantización de la radiación electromagnética
Resumen

18 Perturbaciones dependientes del tiempo. Método diagramático

Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo

Aproximación de primer orden
Aproximación de segundo orden
Método diagramático
Absorción monofotónica en el método diagramático
Diagramas para campos o modos diferentes
Obtención de las amplitudes de transición a partir de los diagramas
Amplitud de transición para la absorción de dos fotones
Amplitud de transición para la absorción de n_f fotones
Resumen

19 Espectroscopia multifotónica

Procesos multifotónicos
Tratamiento teórico de los procesos multifotónicos
Absorción bifotónica de un único haz
Absorción bifotónica para excitación con un doble haz
Espectroscopia de absorción multifotónica
Espectrometría de masas de ionización multifotónica
Espectroscopia Hiper Raman
Resumen

20 Espectroscopia Raman

Consideraciones generales
La dispersión Raman como proceso concertado
Tratamiento mecánico-cuántico del efecto Raman
Polarizabilidad
Reglas de selección
Intensidad de las líneas Raman
Instrumentación y aplicaciones
Espectroscopia Raman resonante
Espectroscopia Raman estimulada
Espectroscopia Raman inversa
Susceptibilidad no lineal
Excitación coherente de moléculas
Espectroscopia de dispersión Raman anti-Stokes coherente (CARS)
Espectroscopia CARS multiplex bidimensional
frecuencia-tiempo de picosegundo
Espectroscopia Raman de superficie enriquecida (SERS)
Espectroscopia Raman diferencial circular
Dispersión Raman resonante resuelta en el tiempo (TR^3)
Resumen

Óptica, E. Hetch, A. Zajac, Fondo Educativo Interamericano, S. A., USA, 1977

1 Una breve historia

Prefacio
En el comienzo
Del siglo diecisiete
El siglo diecinueve
Óptica del siglo veinte

2 La matemática del movimiento ondulatorio

Ondas unidimensionales
Ondas armónicas

21 Transiciones no radiativas

Teoría de Herzberg-Teller
Acoplamiento vibrónico en la aproximación de Born-Oppenheimer
Teoría de Bixon-Jortner de la desactivación no radiativa
Evolución temporal de la desactivación no radiativa
Criterios de relevancia del decaimiento no radiativo
Conversión interna ultra-rápida en el ADN
Resumen

22 Fotodisociación

Tipos de fotodisociación
Sección eficaz de absorción
Espectro de absorción para transiciones ligado \rightarrow ligado
Transiciones ligado \rightarrow continuo. Fotodisociación
Fotodisociación a partir del espectro de absorción
Espectroscopia de emisión de moléculas en proceso de disociación
Resumen

23 Otros métodos y técnicas espectroscópicas

Espectroscopia de excitación
Espectroscopia de ionización
Espectroscopia termoóptica
Espectroscopia fotoacústica
Espectroscopia optogalvánica
Resonancia magnética con láser
Rotación magnetoóptica
Espectroscopia Stark láser
Espectroscopia de saturación
Espectroscopia de doble resonancia (MODR, OODR)
Fluorescencia atómica inducida por láser
Fluorescencia molecular inducida por láser
Espectroscopia de jet y haces moleculares supersónicos
Resumen

Apéndice A. Matrices y mecánica cuántica

Apéndice B. Tablas de caracteres

Apéndice C. Tablas de productos directos

Apéndice D. Constantes físicas y factores de conversión

Apéndice E. Relaciones matemáticas

Fase y velocidad de fase
La representación compleja
Ondas planas
La ecuación diferencial de onda tridimensional
Ondas esféricas
Ondas cilíndricas
Ondas escalares y vectoriales

3 Teoría electromagnética, fotones y luz

Leyes básicas de la teoría electromagnética

- Ondas electromagnéticas
- Medios no conductores
- Energía y momento
- Radiación
- 4 La propagación de la luz**
- Introducción
- Las leyes de reflexión y refracción
- El tratamiento electromagnético
- Aspectos familiares de la interacción de la luz y la materia
- El tratamiento de Stokes de la reflexión y la refracción
- Los fotones y las leyes de reflexión y refracción
- 5 Óptica geométrica-teoría paraxial**
- Notas introductorias
- Lentes
- Diafragmas
- Especios
- Prismas
- Óptica de fibras
- Sistemas ópticos
- 6 Más sobre óptica geométrica**
- Lentes gruesas y sistemas de lentes
- Trazo analítico de rayos
- Aberraciones
- 7 La superposición de ondas**
- Suma de ondas de la misma frecuencia*
- El método algebraico
- El método complejo
- Suma de fasores
- Ondas estacionarias
- Suma de ondas de diferente frecuencia*
- Pulsos
- Velocidad de grupo
- Ondas periódicas anarmónicas - Análisis de Fourier
- Ondas no periódicas-Integrales de Fourier
- Pulsos y paquetes de ondas
- Anchos de banda ópticos
- 8 Polarización**
- La naturaleza de la luz polarizada
- Polarizadores
- Dicroísmo
- Birrefringencia
- Esparcimiento y polarización
- Polarización por reflexión
- Retardadores
- Polarizadores circulares
- Polarización de luz policromática
- Actividad óptica

- Efectos ópticos inducidos - Moduladores ópticos
- Una descripción matemática de la polarización
- 9 Interferencia**
- Consideraciones generales
- Condiciones para la interferencia
- Interferómetros de división de frente de onda
- Interferómetros de división de amplitud
- Películas dieléctricas - Interferencia de dos haces
- Tipos y localización de las franjas de interferencia
- Interferencia con haces múltiples
- El interferómetro de Fabry-Perot
- Aplicaciones de películas simples y múltiples
- Aplicaciones de la interferometría
- El interferómetro rotatorio de Sagnac
- 10 Difracción**
- Consideraciones preliminares
- Difracción de Fraunhofer
- Difracción de Fresnel
- Teoría escalar de la difracción de Kirchhoff
- Ondas de difracción en bordes
- 11 Óptica de Fourier**
- Introducción
- Transformada de Fourier
- Aplicaciones ópticas
- 12 Bases de la teoría de la coherencia**
- Introducción
- Visibilidad
- La función de coherencia mutua y el grado de coherencia
- Interferometría estelar y coherencia
- 13 Algunos aspectos de la naturaleza cuántica de la luz**
- Campos cuánticos
- Radiación del cuerpo negro - Hipótesis cuántica de Planck
- El efecto fotoeléctrico - El concepto del fotón de Einstein
- Partículas y ondas
- Probabilidad y óptica de ondas
- Fermat, Feynman y los fotones
- Absorción, emisión y esparcimiento
- 14 Diversos tópicos de óptica contemporánea**
- Formación de imágenes - Distribución espacial de información óptica
- Láseres y luz de láser
- Holografía
- Óptica no lineal
- Apéndice 1:** Teoría electromagnética
- Apéndice 2:** La teoría de difracción de Kirchhoff

Principles of Magnetic Resonance Imaging, A signal Processing Perspective, Zhi-Pei Liang & Paul C. Lauterbur, SPIE Optical Engineering Press, New York, 2000

- 1 Introduction**
- What is MRI?
- A System Perspective
 - The Main Magnet
 - The Gradient System
 - The RF System
- A signal Processing Perspective
- Organization of the Book
- 2 Mathematical Fundamentals**
- Vectors
- Basic Concepts of Matrix Algebra
- Some Commonly Used Functions
 - Unit Step Function
 - Signum Function
 - Rectangular Window Function
 - Triangle Window Function
 - Hamming Window Function
 - Gaussian Function
 - Dirac Delta Function
 - Kronecker Delta Function
 - Comb Function
 - Sinc Function
 - Dirichlet Function
 - Bessel Functions
- Convolution
- The Fourier Transform
 - Definition
 - Properties
 - Examples
- The Radon Transform
 - Two-Dimensional Radon Transform
 - Higher-Dimensional Transforms
 - Partial Radon Transforms
 - Basic Properties
 - Sinogram
 - The Projection-Slice Theorem
- 3 Signal Generation and Detection**
- Magnetized Nuclear Spin Systems
 - Nuclear Magnetic Moments
 - Bulk Magnetization
 - More on the Larmor Frequency
- RF Excitations
 - Resonance Condition
 - Characteristic of an RF Pulse
 - Rotating Frame of Reference
 - The Bloch Equation
 - On-Resonance Excitations
 - Off-Resonance Excitations
 - Frequency Selectivity of an RF PULSE
- Free Precession and Relaxation
- Signal Detection
 - Basic Detection Principles
- Signal Expressions
- 4 Signal Characteristics**
- Basic Assumptions
- Free Induction Decays
- RF Echoes
 - Two-Pulse Echo
 - Three-Pulse Echoes
 - Extended Phase Graphs
 - The CPMG
 - Echo Train
- Gradient Echoes
- Gradient Fields
- Formation of Gradient Echoes
- 5 Signal Localization**
- Slice Selection
 - Slice Equation
 - Slice-Selective Gradients
 - Slice-Selective RF PULSES
 - Some Practical Considerations
- Spatial Information Encoding
 - Frequency Encoding
 - Phase Encoding
 - A k -Space Interpretation
- Basic Imaging Methods
 - One-Dimensional Imaging
 - Two-Dimensional Imaging
 - Three-Dimensional Imaging
- Sampling of k -Space
 - The Sampling Theorem
 - Sampling Requirements of k -Space Signals
- 6 Image Reconstruction**
- General Issues of Image Reconstruction
- Reconstruction from Fourier Transform Samples
 - Problem Formulation
 - Basic Theory
 - Computational Algorithms
- Reconstruction from Radon Transform Samples
 - Problem Formulation
 - The Inverse Radon Transform
 - Backprojection
 - Practical Reconstruction Algorithms
- Appendix
- 7 Image Contrast**
- Introduction
- Saturation—Recovery Sequence
- Inversion—Recovery Sequence
- Basic Spin-Echo Imaging
- Basic Gradient-Echo Imaging
- Discussion

8 Image Resolution, Noise, and Artifacts

- Resolution Limitations
 - Point Spread Functions
 - PSF of Fourier Reconstructions
 - PSF of Backprojection Reconstructions
- Image Noise
 - Basic Concepts of Random Signals
 - Noise Characteristics in the Data Domain
 - Noise in Direct FFT Reconstruction
 - Noise in Zero-Padded FFT Reconstruction
 - Noise in Filtered Backprojection Reconstruction
- Image Artifacts
 - Gibbs Ringing Artifact
 - Aliasing Artifacts
 - Chemical Shift Artifact
 - Motion Artifacts
 - Artifacts Due to Corrupted Data

9 Fast-Scan Imaging

- Fast Spin-Echo Imaging
 - Basic Concept
 - Practical Issues
- Fast Gradient-Echo Imaging
 - Spoiled Steady-State Imaging
 - Steady-State Imaging
- Echo-Planar Imaging
 - Zigzag Trajectory
 - Rectilinear Trajectory
 - Spiral Trajectory
 - Discussion
- Burst Imaging

Análisis de Fourier, Hwei P. Hsu, Addison Wesley Longman de México, S. A: de C. V., 1998

1 Series de Fourier

- Funciones periódicas
- Serie de Fourier
- Propiedades del seno y del coseno: funciones ortogonales
- Evaluación de los coeficientes de Fourier
- Aproximación mediante una serie finita de Fourier
- Las condiciones de Dirichlet
- Diferenciación e integración de las series de Fourier
- Problemas suplementarios

2 Análisis de formas de ondas periódicas

- Simetría de la forma de onda
 - Funciones pares e impares
 - Simetría de media onda
 - Simetría de cuarto de onda
 - Simetría escondida
- Coefficientes de Fourier de ondas simétricas
- Expansión en serie de Fourier de una función de un intervalo finito

10 Constrained Reconstruction

- Half-Fourier Reconstruction
 - Phase Estimation
 - Phase-Constrained Reconstruction
 - Discussion
- Extrapolation-Based Reconstruction
 - Bandlimited Extrapolation
 - Maximum Entropy Reconstruction
 - Discussion
- Parametric Reconstruction Methods
 - The Autoregressive Moving Average Model
 - The Generalized Series Model
- Appendix
 - The Direct Least-Squares Method
 - SVD-Based Methods

A Mathematical Formulas

- Sums
- Power Series
- Complex Numbers
- Trigonometric Identities
- Short Tables of Convolutions
- A Short Table of Fourier Transforms

B Glossary

C Abbreviations

D Mathematical Symbols

E Physical Constants

- Expansiones de medio intervalo
- La función impulso
 - Derivadas de las función δ
- Serie de Fourier de las derivadas de funciones periódicas continuas
- Evaluación de los coeficientes de Fourier por diferenciación
- Problemas suplementarios

3 Espectros de frecuencia discreta

- Introducción
- Forma compleja de las series de Fourier
- Ortogonalidad de funciones complejas
- Espectros de frecuencia compleja
- Evaluación de los coeficientes complejos de Fourier por medio de la función δ
- Contenido de potencia de una función periódica. Teorema de Parseval
- Problemas suplementarios

4 Integral de Fourier y espectros continuos

- Introducción
- De la serie de Fourier a la integral de Fourier
- Transformadas de Fourier
- Transformadas seno y coseno de Fourier
- Interpretación de las transformadas de Fourier
- Propiedades de las transformadas de Fourier
- Convolución
- Teorema de Parseval y espectro de energía
- Funciones de correlación
- Problemas suplementarios

5 Transformada de Fourier de funciones especiales

- Introducción
- La transformada de Fourier de una función impulso
- La transformada de Fourier de una constante
- La transformada de Fourier del escalón unitario
- La transformada de Fourier de una función periódica
- La transformada de Fourier de funciones generalizadas
- Problemas suplementarios

6 Aplicaciones a sistemas lineales

- Sistemas lineales
- Funciones operacionales del sistema
- Respuesta a funciones exponenciales de entrada — funciones propias y funciones del sistema
- Respuestas sinusoidales en estado estacionario
- Aplicaciones a circuitos eléctricos
 - Cálculo de potencia en estado estacionario
- Aplicaciones a sistemas mecánicos
- Respuesta de un sistema lineal a un impulso unitario — función del sistema
 - Función del sistema
 - Sistema Causal
- Respuesta de un sistema lineal a un escalón unitario — integral de superposición
- Transmisión sin distorsión
- Filtros ideales
- Problemas suplementarios

7 Aplicaciones en teoría de comunicaciones

- Teoría de muestreo
- Modulación de amplitud
- Modulación angular
- Modulación de pulsos

The Physics of Atoms and Quanta, Introduction to Experiments and Theory, Herman Haken and Hans Christoph Wolf, Third Edition, Springer-Verlag New York Berlin Heidelberg, 1993

1 Introduction

- Classical Physics and Quantum Mechanics
- Short Historical Review

- Funciones de correlación promedio
- Identificación de señales mediante correlación
- Espectros de potencia promedio: señales al azar
- Relaciones entre la entrada y la salida: cálculo del ruido
- Problemas suplementarios

8 Aplicaciones a problemas de valor en la frontera

- Separación de variables y series de Fourier
- Vibración
- Conducción de calor
- Teoría de potenciales
- Problemas suplementarios

9 Aplicaciones misceláneas de la transformada de Fourier

- La transformada de Fourier en difracción y formación de imágenes
 - Transformada bidimensional de Fourier
 - Transformada tridimensional de Fourier
- La transformada de Fourier en teoría de probabilidades
 - Función de distribución de probabilidad y función de densidad de probabilidad
 - Esperanza y momentos
 - Función característica
- El principio de incertidumbre en el análisis de Fourier
- Fórmula de la suma de Poisson
- Causalidad y transformada de Hilbert
- Evaluación de algunas integrales
- Problemas suplementarios

A Convergencia de la serie de Fourier y el fenómeno de Gibbs

- Convergencia de la serie de Fourier
- El fenómeno de Gibbs

B Relación entre las transformadas de Fourier y Laplace

- Definiciones y propiedades básicas de la transformada de Laplace
- Relación entre las transformadas de Fourier y Laplace

C Tres formas de las series de Fourier

D Resumen de las condiciones de simetría

E Propiedades de la Transformada de Fourier

F Lista de símbolos

2 The Mass and Size of the Atom

- What is an Atom?
- Determination of the Mass
- Methods for Determining Avogadro's Number

- Electrolysis
- The Gas Constant and Boltzmann's Constant
- X-Ray Diffraction in Crystals
- Determination Using Radioactive Decay
- Determination of the Size of the Atom
- Application of the Kinetic Theory of Gases
- The Interaction Cross Section
- Experimental Determination of the Interaction Cross Sections
- Determining the Atomic Size from the Covolume
- Atomic Sizes from X-Ray Diffraction Measurements on Crystals
- Can Individual Atoms Be Seen?
- 3 Isotopes**
- The Periodic System of the Elements
- Mass Spectroscopy
 - Parabola Method
 - Improved Mass Spectrometers
 - Results of Mass Spectrometry
 - Modern Applications of the Mass Spectrometer
 - Isotope Separation
- 4 The Nucleus of the Atom**
- Passage of Electrons Through Matter
- Passage of Alpha Particles Through Matter (Rutherford Scattering)
 - Some Properties of Alpha Particles
 - Scattering of Alpha Particles by a Foil
 - Derivation of the Rutherford Scattering Formula
 - Experimental Results
 - What is Mean by Nuclear Radius?
- 5 The Photon**
- Wave Character of Light
- Thermal Radiation
 - Spectral Distribution of Black Body Radiation
 - Planck's Radiation Formula
 - Einstein's Derivation of Planck's Formula
- The Photoelectric Effect
 - The Compton Effect
 - Experiments
 - Derivation of the Compton Shift
- 6 The Electron**
- Production of Free Electrons
- Size of the Electron
- The Charge of the Electron
- The Specific Charge e/m of the Electron
- Wave Character of the Electrons and Other Particles
- Interferometry with Atoms
- 7 Some Basic Properties of Matter Waves**
- Wave Packets
- Probabilistic Interpretation
- The Heisenberg Uncertainty Relation
- The Energy-Time Uncertainty Relation

- Some Consequences of the Uncertainty Relations for Bound States
- 8 Bohr's Model of the Hydrogen Atom**
- Basic Principles of Spectroscopy
- The Optical Spectrum of the Hydrogen Atom
- Bohr's Postulates
- Some Quantitative Conclusions
- Motion of the Nucleus
- Spectra of Hydrogen-like Atoms
- Muonic Atoms
- Excitation of Quantum Jumps by Collisions
- Sommerfeld's Extension of the Bohr Model and the Experimental Justification of a Second Quantum Number
- Lifting of Orbital Degeneracy by the Relativistic Mass Change
- Limits of the Bohr-Sommerfeld Theory
 - The Correspondence Principle
- Rydberg Atoms
- 9 The Mathematical Framework of Quantum Theory**
- The Particle in a Box
- The Schrödinger Equation
- The Conceptual Basis of Quantum Theory
 - Observation, Values of Measurements and Operators
 - Momentum Measurement and Momentum Probability
 - Average Values and Expectation Values
 - Equations for Determining the Wavefunction
 - Simultaneous Observability and Commutation Relations
- The Quantum Mechanical Oscillator
- 10 Quantum Mechanics of the Hydrogen Atom**
- Motion in a Central Field
- Angular Momentum Eigenfunctions
- The Radial Wavefunctions in a Central Field
- The Radial Wavefunction of Hydrogen
- 11 Lifting of the Orbital Degeneracy in the Spectra of Alkali Atoms**
- Shell Structure
- Screening
- The Term Diagram
- Inner Shells
- 12 Orbital and Spin Magnetism. Fine Structure**
- Introduction and Overview
- Magnetic Moment of the Orbital Motion
- Precession and Orientation in a Magnetic Field
- Spin and Magnetic Moment of the Electron
- Determination of the Gyromagnetic Ratio by Einstein-de Haas Method
- Detection of Directional Quantisation by Stern and Gerlach
- Fine Structure and Spin-Orbit Coupling: Overview
- Calculation of Spin-Orbit Splitting in the Bohr Model
- Level Scheme of the Alkali Atoms
- Fine Structure in the Hydrogen Atom
- The Lamb Shift

- 13 Atoms in a Magnetic Field: Experiments and Their Semiclassical Description**
- Directional Quantisation in a Magnetic Field
- Electron Spin Resonance
- The Zeeman Effect
 - Experiments
 - Explanation of the Zeeman Effect from the Standpoint of Classical Electron Theory
 - Description of the Ordinary Zeeman Effect by the Vector Model
 - The Anomalous Zeeman Effect
 - Magnetic Moments with Spin-Orbit Coupling
 - The Paschen-Back Effect
 - Double Resonance and Optical Pumping
- 14 Atoms in a Magnetic Field: Quantum Mechanical Treatment**
- Quantum Theory of the Ordinary Zeeman Effect
- Quantum Theoretical Treatment of the Electron and Proton Spins
 - Spin as Angular Momentum
 - Spin Operators, Spin Matrices and Spin Wavefunctions
 - The Schrödinger Equation of a Spin in a Magnetic Field
 - Description of Spin Precession by Expectation Values
- Quantum Mechanical Treatment of the Anomalous Zeeman Effect with Spin-Orbit Coupling
- Quantum Theory of a Spin in Mutually Perpendicular Magnetic Fields, One Constant and One Time Dependent
- The Bloch Equations
- The Relativistic Theory of the Electron. The Dirac Equation
- 15 Atoms in an Electric Field**
- Observations of the Stark Effect
- Quantum Theory of the Linear and Quadratic Stark Effects
 - The Hamiltonian
 - The Quadratic Stark Effect. Perturbation Theory Without Degeneracy
 - The Linear Stark effect. Perturbation Theory in the Presence of Degeneracy
- The Interaction of a Two-Level Atom with a Coherent Radiation Field
- Spin- and Photon Echoes
- A Glance at Quantum Electrodynamics
 - Field Quantization
 - Mass Renormalization and Lamb Shift
- 16 General Laws of Optical Transitions**
- Symmetries and Selection Rules
 - Optical Matrix Elements
 - Examples of the Symmetry Behaviour of Wavefunctions
 - Selection Rules
 - Selection Rules and Multipole Radiation
- Linewidths and Lineshapes
- 17 Many-Electron Atoms**
- The Spectrum of the Helium Atom
- Electron Repulsion and the Pauli Principle
- Angular Momentum Coupling

- Coupling Mechanism
 - LS Coupling (Russell-Saunders Coupling)
 - jj Coupling
- Magnetic Moments of Many-Electron Atoms
- Multiple Excitations
- 18 X-Ray Spectra, Internal Shells**
- Introduction Remarks
- X-Radiation from Outer Shells
- X-Ray Bremsstrahlung Spectra
- Emission Line Spectra: Characteristic Radiation
- Fine Structure of the X-Ray Spectra
- Absorption Spectra
- The Auger Effect
- Photoelectron Spectroscopy (XPS), ESCA
- 19 Structure of the Periodic System, Ground States of the Elements**
- Periodic System and Shell Structure
- Ground States of Atoms
- Excited States and Complete Term Scheme
- The Many-Electron Problem. Hartree-Fock Method
 - The Two-Electron Problem
 - Many Electrons Without Mutual Interactions
 - Coulomb Interaction of Electrons. Hartree and Hartree-Fock Methods
- 20 Nuclear Spin, Hyperfine Structure**
- Influence of the Atomic Nucleus on Atomic Spectra
- Spins and Magnetic Moments of Atomic Nuclei
- The Hyperfine Interaction
- Hyperfine Structure in the Ground States of the Hydrogen and Sodium Atoms
- Hyperfine Structure in an External Magnetic Field, Electron Spin Resonance
- Direct Measurements of Nuclear Spins and Magnetic Moments, Nuclear Magnetic Resonance
- Applications of Nuclear Magnetic Resonance
- The Nuclear Electric Quadrupole Moment
- Problems
- 21 The Laser**
- Some Basic Concepts for the Laser
- Rate Equations and Lasing Conditions
- Amplitude and Phase of Laser Light
- 22 Modern Methods of Optical Spectroscopy**
- Classical Methods
- Quantum Beats
- Doppler-free Saturation Spectroscopy
- Doppler-free Two-Photon Absorption
- Level-Crossing Spectroscopy and the Hanle Effect
- Laser Cooling of Atoms
- 23 Fundamentals of the Quantum Theory of Chemical Bonding**
- Introductory Remarks

The Hydrogen-Molecule Ion H_2^+
 The Tunnel Effect
 The Hydrogen Molecule H_2
 Covalent-Ionic Resonance
 The Hund-Mulliken-Bloch Theory of Bonding in Hydrogen
 Hybridation
 The π Electrons of Benzene, C_6H_6

Appendix

A. The Dirac Delta Function and the Normalisation of the Wavefunction of a Free Particle in Unbounded Space
 B. Some Properties of the Hamiltonian Operator, Its Eigenfunctions and Its Eigenvalues
 C. Derivation of Heisenberg's Uncertainty Relation

Mecánica, movimiento ondulatorio y calor, Francis W. Sears, Aguilar, S. A., 1965

Cap. 1 Composición y descomposición de vectores

Unidades y patrones
 Fuerza
 Representación gráfica de las fuerzas. Vectores
 Adición vectorial. Resultante de un conjunto de fuerzas
 Resultante de fuerzas paralelas del mismo sentido y de sentido opuesto
 Componentes de un vector
 Composición de fuerzas mediante sus componentes rectangulares
 Diferencia vectorial
 Algunas observaciones sobre los problemas

Cap. 2 Estática

Introducción
 Equilibrio. Primera ley de Newton
 Discusión de la primera ley del movimiento de Newton
 Equilibrios estable, inestable e indiferente
 Tercera ley del movimiento de Newton
 Ejemplos de equilibrio
 Rozamiento

Cap. 3 Momento de una fuerza. Par

Momento de una fuerza
 Producto vectorial. Vector momento
 Segunda condición de equilibrio
 Resultante de un sistema de fuerzas paralelas
 Centro de gravedad
 Pares

Cap. 4 Movimiento rectilíneo

Movimiento
 Velocidad media
 Velocidad instantánea
 Aceleración media e instantánea
 Cálculo de la velocidad y de la abscisa por integración
 Movimiento rectilíneo uniformemente acelerado
 Caída libre de los cuerpos
 Velocidad y aceleración relativas

Cap. 5 Segunda ley de Newton

Introducción
 Segunda ley del movimiento de Newton. Masa
 Fuerza
 Sistemas de unidades

Unidades y dimensiones
 Masa y peso
 Métodos de medida de masas
 Centro de masa
 Aplicaciones de la segunda ley de Newton
 Fuerzas de D'Alambert

Cap. 6 Movimiento plano

Movimiento plano
 Velocidades media e instantánea
 Aceleraciones media e instantánea
 Componentes de la aceleración
 Movimiento de un proyectil
 Movimiento circular
 Fuerza centrípeta
 Movimiento en una circunferencia vertical

Cap. 7 Trabajo y energía

Teorema de la energía cinética para una partícula
 Trabajo
 Producto escalar
 Energía cinética
 Energía potencial gravitatoria de una partícula
 Energía potencial elástica de una partícula
 Principio de conservación de la energía mecánica de una partícula
 Teorema de la energía para un sistema de partículas
 Energía cinética de un sistema de partículas
 Potencia
 Potencia y velocidad

Cap. 8 Impulsión y cantidad de movimiento

Impulsión
 Impulsión y cantidad de movimiento
 Cantidad de movimiento de un sistema de partículas
 Conservación de la cantidad de movimiento
 Choques elástico e inelástico
 Retroceso
 Fundamentos de la propulsión de cohetes
 Segunda ley de Newton
 Masa y energía

Cap. 9 Rotación de un cuerpo rígido alrededor de un eje fijo

Introducción
 Velocidad angular

Aceleración angular
 Rotación con aceleración angular constante
 Relaciones entre velocidades y aceleraciones angulares y lineales
 Aceleración de Coriolis
 Momento y aceleración angular. Momento de inercia
 Cálculo de momentos de inercia
 Energía cinética, trabajo y potencia

Cap. 10 Momento cinético

Introducción
 Momento cinético axial
 Rotación de un cuerpo rígido alrededor de un eje fijo
 Movimiento plano de un cuerpo rígido
 Centro de percusión
 Momento cinético respecto a un punto fijo
 Trompo y giróscopo

Cap. 11 Elasticidad

Introducción
 Esfuerzo
 Esfuerzo plano
 Ejemplos de esfuerzo plano
 Presión hidrostática
 Deformación unitaria
 Módulos de elasticidad
 Energía potencial elástica interna
 Relaciones entre las constantes elásticas
 Torsión
 Resorte helicoidal

Cap. 12 Movimiento armónico

Introducción
 Fuerzas recuperadoras elásticas
 Definiciones
 Ecuaciones del movimiento armónico simple
 Movimiento de un cuerpo suspendido de un resorte helicoidal
 Péndulo simple
 Figuras de Lissajous
 Movimiento armónico amortiguado
 Movimiento armónico forzado. Resonancia
 Movimiento armónico de rotación
 Péndulo físico

Cap. 13 Gravitación

Introducción
 Leyes de Kepler
 Ley de Newton de la gravitación
 Atracción gravitatoria de una esfera
 Balanza de Cavendish
 Masa de la Tierra
 Masas inerte y gravitatoria
 Variaciones de g
 Energía potencial gravitatoria
 Energía y órbitas
 El campo gravitatorio

Cap. 14 Hidrostática y tensión superficial

Introducción
 Variación de la presión con la altura
 Paradoja hidrostática
 Manómetros
 Principio de Arquímedes
 Fuerzas contra un dique
 Tensión superficial
 Tensión superficial y energía de superficie
 Diferencia de presión entre ambas caras de una lámina líquida
 Superficies mínimas
 Ángulo de contacto
 Capilaridad

Cap. 15 Hidrodinámica y viscosidad

Introducción
 Ecuación de continuidad
 Ecuación de Bernoulli
 Aplicaciones de la ecuación de Bernoulli
 Flujo en un conducto curvo
 Viscosidad
 Ley de Poiseuille
 Ley de Stokes
 Sustentación dinámica
 Número de Reynolds

Cap. 16 Propagación de ondas

Introducción
 Ecuación de propagación de una onda
 Velocidad de propagación de las ondas en una cuerda tensa
 Ondas longitudinales en una varilla
 Ondas planas en un fluido
 Transmisión de energía por un movimiento ondulatorio
 Ondas en un canal
 Series de Fourier
 Velocidad de grupo y velocidad de fase

Cap. 17 Reflexión. Ondas estacionarias

Introducción
 Reflexión y transmisión en un empalme
 Reflexión en el extremo fijo de una cuerda tensa
 Condiciones de contorno para que no haya reflexión
 Formas normales y frecuencias propias de una cuerda tensa
 Vibraciones amortiguadas y vibraciones forzadas de una cuerda. Resonancia
 Reflexión de ondas de compresión en un tubo
 Vibraciones de varillas y placas

Cap. 18 Ondas sonoras

Introducción
 Intensidad y nivel de intensidad
 Sonoridad y tono
 Ondas tridimensionales
 Interferencia de ondas esféricas
 Radiación desde un pistón. Difracción
 Eficiencia radiante de un manantial sonoro

Pulsaciones
Composición de sonidos
Efecto Doppler

Cap. 19 Temperatura y calor

Introducción
Temperatura
Escala de temperatura Celsius y Fahrenheit
Escala absoluta de temperaturas del termómetro de gas
Coeficiente de dilatación
Esfuerzos de origen térmico
El calor es una forma de la energía
Unidades de calor. Equivalente mecánico del calor
Calor específico
Método de las mezclas

Cap. 20 Propagación del calor

Conducción
Flujo calorífico a través de una pared compuesta
Flujo calorífico radial en una esfera o un cilindro
Convección
Radiación
Radiador integral o cuerpo negro
Ley de Planck
Ley de desplazamiento de Wien y ley de Stefan
Transmisión del calor por radiación
Ley del enfriamiento de Newton

Cap. 21 Gases, líquidos y sólidos

Ecuaciones de estado
Gas perfecto
Superficie *P-V-T* para un gas perfecto
Calores de transformación
Humedad
Cámara de niebla de Wilson y cámara de burbujas

Cap. 22 Termodinámica

Introducción
Primer principio de la termodinámica

Trabajo realizado en un cambio de volumen
Energía interna de un gas
Calores específicos de un gas perfecto
Procesos adiabáticos
Módulos de compresibilidad isotérmico y adiabático
Motores térmicos y máquinas frigoríficas
Ciclo de refrigeración
Segundo principio de la termodinámica
Ciclo de Carnot
Escala absoluta Kelvin de temperaturas
Ecuación de Clausius-Clapeyron
Entropía
Principio del aumento de entropía

Cap. 23 Teoría cinética de los gases

Introducción
Número de Avogadro
Ecuación de estado de un gas perfecto
Calor específico de un gas
Principio de equipartición de la energía
Distribución de las velocidades moleculares
Recorrido libre medio
Viscosidad de un gas
Ecuaciones de estado de Clausius y de van der Waals

Logaritmos decimales**Logaritmos neperianos****Tablas trigonométricas naturales****Funciones exponenciales****Fórmulas de derivación e integración y datos astronómicos****Sistema periódico****Tabla de factores de conversión**

Resonancia
Fórmulas estructurales
Fórmulas moleculares y fórmulas empíricas
Ácidos y bases de Arrhenius
Ácidos y bases de Brønsted-Lowry
Ácidos y bases de Lewis

Capítulo 2 Estructura y propiedades de las moléculas orgánicas

Propiedades ondulatorias de los electrones en los orbitales
Orbitales moleculares
Enlaces pi
Hibridación y geometría molecular

Química orgánica, L. G. Wade, Jr, Quinta Edición, Pearson Educación, S. A., 2004**Capítulo 1 Introducción y revisión**

Los orígenes de la química orgánica
Principios de la estructura atómica
La formación del enlace: la regla del octeto
Estructuras de Lewis
Enlace múltiple
Resumen: Modelos de enlace más frecuente (sin carga)
La electronegatividad y la polaridad de enlace
Cargas formales
Estructuras iónicas
Resumen: Modelos de enlace más frecuente en los compuestos e iones orgánicos

Representación de moléculas tridimensionales
Reglas generales de la hibridación y de la geometría
Rotación de enlaces
Isomería
Polaridad de enlaces y moléculas
Atracciones y repulsiones intermoleculares
Efecto de la polaridad en la solubilidad
Hidrocarburos
Compuestos orgánicos oxigenados
Compuestos orgánicos nitrogenados

Capítulo 3 Estructura y estereoquímica de los alcanos

Clasificación de los hidrocarburos (revisión)
Fórmulas moleculares de los alcanos
Nomenclatura de los alcanos
Resumen: Reglas de la nomenclatura de los alcanos
Propiedades físicas de los alcanos
Aplicaciones y fuentes de los alcanos
Reacciones de los alcanos
Estructura y conformaciones de los alcanos
Conformaciones del butano
Conformaciones de los alcanos de cadena larga
Cicloalcanos
Isomería *cis-trans* en cicloalcanos
Estabilidad de los cicloalcanos: tensión del anillo
Conformaciones del ciclohexano
Estrategias para resolver problemas: Representaciones de las conformaciones de silla
Conformaciones de ciclohexanos monosustituidos
Conformaciones de ciclohexanos disustituidos
Estrategias para resolver problemas: Reconocimiento de isómeros *cis* y *trans*
Moléculas bicíclicas

Capítulo 4 El estudio de las reacciones químicas

Introducción
Cloración del metano
Reacción radicalaria en cadena
Mecanismo clave: Halogenación radicalaria
Constantes de equilibrio y energía libre
Entalpía y entropía
Energías de disociación de enlace
Variación de entalpía en la reacción de cloración
Cinética y ecuación de velocidad
Energía de activación e influencia de la temperatura en la velocidad de reacción
Estados de transición
Velocidades en reacciones de varias etapas
Influencia de la temperatura en la reacción de halogenación
Halogenación de alcanos superiores
El postulado de Hammond
Estrategias para resolver problemas: Propuesta de un mecanismo de reacción
Inhibidores radicalarios
Intermedios reactivos
Resumen: Intermedios reactivos

Capítulo 5 Estereoquímica

Introducción
Quiralidad
Nomenclatura (*R*) y (*S*) de átomos de carbono asimétricos
Actividad óptica
Discriminación biológica de los enantiómeros
Mezclas racémicas
Exceso enantiomérico y pureza óptica
Quiralidad de sistemas conformacionalmente móviles
Compuestos quirales sin átomos asimétricos
Proyecciones de Fischer
Resumen: Las proyecciones de Fischer y su uso
Diastereómeros o diastereoisómeros
Resumen: Tipos de isómeros
Estereoquímica de las moléculas con dos o más carbonos asimétricos
Compuestos *meso*
Configuración absoluta y relativa
Propiedades físicas de los diastereómeros
Resolución de enantiómeros

Capítulo 6 Haluros de alquilo: sustitución nucleofílica y eliminación

Introducción
Nomenclatura de haluros de alquilo
Aplicaciones y usos de los haluros de alquilo
Estructura de los haluros de alquilo
Propiedades físicas de los haluros de alquilo
Preparación de los haluros de alquilo
Resumen: Métodos de preparación de los haluros de alquilo
Reacciones de los haluros de alquilo: sustitución y eliminación
Sustitución nucleofílica bimolecular: la reacción S_N2
Mecanismo clave: La reacción S_N2
Generalidades sobre la reacción S_N2
Resumen: Reacciones S_N2 de haluros de alquilo
Factores que condicionan las reacciones S_N2 : fuerza de los nucleófilos
Resumen: Tendencias en la nucleofilia
Reactividad del sustrato en las reacciones S_N2
Estereoquímica de la reacción S_N2
Sustitución nucleofílica unimolecular: la reacción S_N1
Mecanismo clave: La reacción S_N1
Estereoquímica de la reacción S_N1
Reordenamientos en las reacciones S_N1
Comparación de las reacciones S_N1 y S_N2
Resumen: Sustituciones nucleofílicas
Eliminación unimolecular: la reacción E1
Mecanismo clave: La reacción E1
Resumen: Reacciones medidas por carbocationes
Eliminación bimolecular: la reacción E2
Mecanismo clave: La reacción E2
Orientación en las reacciones de eliminación: la regla de Saytzeff
Estereoquímica de la reacción E2
Comparación de los mecanismos de eliminación E1 y E2
Resumen: reacciones de eliminación

Estrategias para resolver problemas: Predicción de los productos resultantes de las sustituciones y eliminaciones
Resumen: Reacciones de los haluros de alquilo

Capítulo 7 Estructura y síntesis de alquenos

Introducción
Descripción de los orbitales del doble enlace en los alquenos
Elementos de insaturación
Nomenclatura de los alquenos
nomenclatura de los isómeros *cis-trans*
resumen: reglas para nombrar los alquenos
importancia comercial de los alquenos
estabilidad de los alquenos
propiedades físicas de los alquenos
síntesis de alquenos mediante eliminación de haluros de alquilo
síntesis de alquenos mediante deshidratación de alcoholes
mecanismo clave deshidratación del alcohol catalizador por ácidos
métodos industriales de síntesis de alquenos a alta temperatura
estrategias para resolver problemas: propuesta de mecanismo de reacción
resumen: método de síntesis de alquenos

Capítulo 8 Reacción de alquenos

Reactividad del doble enlace carbono-carbono
adición electrofílica a alquenos
mecanismo clave: admisión electrofílica a alquenos
admisión de haluros de hidrógeno a alquenos
hidratación mediante oximercuriación-desmercuriación
Alcoximercuriación-desmercuriación
Hidrocarbocación de alquenos
Hidrogenación catalítica de alquenos
adición de carbenos a alquenos
adición de halógenos a alquenos
formación de halohidrinas
Epoxidación de alquenos
apertura de epóxidos catalizada por ácidos
Hidroxilación de alquenos en *sin*
ruptura oxidativa de alquenos
polimerización de alquenos
estrategias para resolver problemas: síntesis orgánica
resumen: reacciones de alquenos

Capítulo 9 Alquinos

introducción
nomenclatura de alquinos
propiedades físicas de los alquinos
importancia comercial de los alquinos
estructura electrónica de los alquinos
acidez de los alquinos
síntesis de alquinos a partir de acetiluros
síntesis de alquinos mediante reacciones de eliminación
resumen: síntesis alquinos
reacciones de adición a alquinos
reacciones de oxidación de alquinos
estrategias para resolver problemas: síntesis en varias etapas

resumen: reacciones de alquinos

Capítulo 10 Estructura y síntesis de alcoholes

introducción
estructura y clasificación de los alcoholes
nomenclatura de los alcoholes y fenoles
propiedades físicas de los alcoholes
importancia comercial de los alcoholes
acidez de los alcoholes y fenoles
síntesis de alcoholes: introducción y revisión
resumen: síntesis previas de alcoholes
reactivos órganometálicos utilizados para la síntesis de alcoholes
adición de reactivos órganometálicos a compuestos carbonílicos
mecanismo clave: reacciones de Grignard
resumen: reacciones de Grignard
reacciones secundarias de compuestos órganometálicos:
reducción de haluros de alquilo
reducción del grupo carbonilo: síntesis de alcoholes primarios y secundarios
resumen: reacciones de LiAlH_4 y NaBH_4
resumen: síntesis de alcoholes
Tioles (mercaptanos)

Capítulo 11 Reacciones de alcoholes

estados de oxidación de los alcoholes y de los grupos funcionales relacionados
oxidación de alcoholes
métodos adicionales de oxidación de alcoholes
oxidación biológica de alcoholes
los alcoholes como nucleófilos y electrofilos: formación de tosيلات
resumen: reacciones $\text{S}_{\text{N}}2$ de tosيلات
reducción de alcoholes
reacciones de alcoholes con haluros de hidrógeno
reacciones de alcoholes con haluros de fósforo
fracciones de alcoholes con cloruro de tionilo
reacciones de deshidratación de alcoholes
estrategias para resolver problemas: propuesta de mecanismos de reacción
sesiones características de los dioles
Esterificación de alcoholes
Ésteres de ácidos inorgánicos
reacciones de los alcóxidos
mecanismo clave: síntesis de Williamson de éteres
estrategia para resolver problemas: síntesis en varias etapas
resumen: reacciones de alcoholes

Capítulo 12 Espectroscopia de infrarrojo y espectrometría de masas

introducción
el espectro electromagnético
la región del infrarrojo
vibraciones moleculares
vibraciones activas e inactivas en el IR

registro del espectro infrarrojo
espectroscopia infrarroja de los hidrocarburos
absorciones características de los alcoholes y las aminas
absorciones características de los compuestos carbonílicos
absorciones características de los enlaces C—N
breve resumen de las frecuencias de tensión en el IR
análisis e interpretación de los espectros de IR (problemas resueltos)
introducción a la espectrometría de masas
determinación de la fórmula molecular mediante espectrometría de masas
modelos de fragmentación en espectrometría de masas
resumen: modelos comunes de fragmentación demás

Capítulo 13 Espectroscopia de resonancia magnética nuclear

introducción
teoría de resonancia magnética nuclear
apantallamiento magnético por parte de los electrones
el espectrómetro de RMN
el desplazamiento químico
el número de señales
el área de los picos
desdoblamiento espín-espín
estrategias para resolver problemas: representación de un espectro de RMN
acoplamientos complejos
protones no equivalentes según la esteoquímica
dependencia de la variable tiempo en espectroscopia de RMN
estrategias para resolver problemas: interpretación de un espectro de RMN de protón
espectroscopia de RMN de carbono-13
interpretación de un espectro de RMN de carbono
imágenes mediante resonancia magnética nuclear
estrategias para resolver problemas: problemas de espectroscopia

Capítulo 14 Éteres, epóxidos y sulfuros

introducción
propiedades físicas de los éteres
nomenclatura de los éteres
espectroscopia de los éteres
la síntesis de Williamson de éteres
síntesis de éteres mediante alcoximercuriación-desmercuriación
síntesis industrial: deshidratación bimolecular de alcoholes
resumen: síntesis de éteres
ruptura de éteres con HBr y HI
Autooxidación de éteres
resumen: reacciones de éteres sulfuros (tioéteres)
síntesis de epóxidos
resumen: síntesis de epóxidos
apertura de epóxidos catalizada por ácidos
apertura del epóxidos catalizada por bases
orientación en la apertura de epóxidos

reacciones de epóxidos con reactivos de Grignard y compuestos organolíticos
resinas epoxi: el advenimiento de los pegamentos modernos
resumen: reacciones de epóxidos

Capítulo 15 Sistemas conjugados, simetría orbital y espectroscopia ultravioleta

introducción
estabilidad de los dienos
los sistemas conjugados según la teoría de orbitales moleculares
los cationes alílicos
adición 1,2 y 1,4 a dienos conjugados
control cinético frente a control termodinámico en la adición de HBr a 1,3-butadieno
radicales alílicos
los orbitales moleculares del sistema alílico
configuraciones electrónicas del radical, del catión y el anión alilo
reacciones de sustitución $\text{S}_{\text{N}}2$ de haluros de alilo y de tosيلات
la reacción de Diels-Alder
mecanismo clave: la reacción de Diels-Alder
la reacción de Diels-Alder como ejemplo de una reacción pericíclica
espectroscopia de absorción ultravioleta

Capítulo 16 Compuestos aromáticos

introducción: el descubrimiento del benceno
estructura y propiedades del benceno
los orbitales moleculares del benceno
el ciclobutadieno según la teoría de orbitales moleculares
compuestos aromáticos, antiaromáticos y no aromáticos
la regla de Hückel
derivación de la regla de Hückel de la teoría de orbitales moleculares
iones aromáticos
compuestos aromáticos heterocíclicos
hidrocarburos aromáticos polinucleares
Alótropos aromáticos del carbono
compuestos heterocíclicos fusionados
nomenclatura de los derivados del benceno
propiedades físicas del benceno y de sus derivados
espectrometría de los compuestos aromáticos

Capítulo 17 Reacciones de compuestos aromáticos

sustitución electrofílica aromática
mecanismo clave: sustitución electrofílica aromática
Halogenación del benceno
Nitración del benceno
Sulfonación del benceno
Nitración del tolueno: efecto de la sustitución con grupos alquilo
sustituyentes activadores *orto* y *para*-orientadores
resumen: activadores *orto* y *para*-orientadores
sustituyentes desactivadores *meta*-orientadores
resumen: desactivadores *meta*-orientadores

sustituyentes halogenados: desactivadores, pero *orto*, *para*-orientadores
 resumen: efectos orientadores de los sustituyentes
 efecto de múltiples sustituyentes sobre la sustitución electrofílica a romántica
 Alquilación de Friedel-Crafts
 Acilación de Friedel-Crafts
 resumen: comparación de la alquilación y acilación de Friedel-Crafts
 sustitución nucleofílica romántica
 reacciones de adición de los derivados del benceno
 reacciones de las cadenas laterales en los derivados del benceno
 reacciones de los fenoles
 resumen: reacciones de los compuestos aromáticos

Capítulo 18 Cetonas y aldehídos

compuestos carbonílicos
 estructura del grupo carbonilo
 nomenclatura de cetonas y aldehídos
 propiedades físicas de cetonas y aldehídos
 espectroscopia de cetonas y aldehídos
 importancia industrial de cetonas y aldehídos
 revisión de la síntesis de cetonas y aldehídos
 síntesis de cetonas y aldehídica partir de 1,3-ditianos
 síntesis de cetonas a partir de ácidos carboxílicos
 síntesis de cetonas a partir de nitrilos
 síntesis de aldehídos y cetona a partir de cloruros desde ácido
 resumen: síntesis de cetonas y aldehídos
 relación de cetonas y aldehídos: adición nucleofílica
 mecanismo clave: adiciones nucleofílicas a grupos carbonilo
 la reacción de Wittig
 hidratación de cetonas y aldehídos
 formación de cianohidríns
 formación de iminas
 mecanismo clave: formación de iminas
 conversaciones con hidroxilamina e hidrazinas
 resumen: condensación de aminas con cetonas y aldehídos
 formación de acetales
 mecanismo clave: formación de acetales
 estrategias para resolver problemas: propuesta de mecanismos de reacción
 el uso de acetales como grupos protectores
 oxidación de aldehídos
 otras reducciones de cetonas y aldehídos
 resumen: reacciones de cetonas y aldehídos

Capítulo 19 Aminas

introducción
 nomenclatura de las aminas
 estructura de las aminas
 propiedades físicas de las aminas
 Basicidad de las aminas
 efectos sobre la basicidad de las aminas
 sales de amonio
 sales de amonio y catalizadores de transferencia de fase
 espectroscopia de las aminas

reacciones de las aminas con cetonas y aldehídos (revisión)
 sustitución aromática en arilaminas y piridina (revisión)
 Alquilación de aminas con haluros de alquilo
 Acilación de aminas con cloruros de ácido
 formación de sulfonamidas
 Aminas como grupos salientes la eliminación de Hofmann
 Oxidación de aminas. La eliminación de Cope
 reacciones de aminas con ácido nítrico
 reacciones de las sales de diazonio aromáticas
 resumen: reacciones de las aminas
 síntesis de aminas

Capítulo 20 Ácidos carboxílicos

introducción nomenclatura de los ácidos carboxílicos
 estructura y propiedades físicas de los ácidos carboxílicos
 acidez de los ácidos carboxílicos
 sales de ácidos carboxílicos
 fuentes comerciales de los ácidos carboxílicos
 espectroscopia de los ácidos carboxílicos
 síntesis de los ácidos carboxílicos
 resumen: síntesis de los ácidos carboxílicos y sus derivados.
 reacciones de los ácidos carboxílicos y sus derivados.
 sustitución nucleofílica en el grupo acilo
 condensación de los ácidos con los alcoholes puntos la esterificación de Fischer
 mecanismo clave: esterificación de Fischer
 síntesis y aplicaciones de los cloruros de ácido
 Esterificación con diazometano
 condensación de ácidos con aminas: síntesis directa de amidas
 reducción de los ácidos carboxílicos
 alquilación de los ácidos carboxílicos para obtener cetonas
 resumen: reacción de los ácidos carboxílicos

Capítulo 21 Derivados de los ácidos carboxílicos

introducción
 estructura y nomenclatura de los derivados de ácido carboxílico
 propiedades físicas de los derivados de ácidos carboxílicos
 espectroscopia de los derivados de ácidos carboxílicos
 interconversión entre los derivados de ácidos mediante sustitución nucleofílica en el grupo acilo
 mecanismo clave: mecanismo de adición-eliminación en la sustitución nucleofílica en el grupo acilo
 sustitución nucleofílica en el grupo acilo catalizada por ácidos
 estrategias para resolver problemas: propuestas de mecanismos de reacción
 hidrólisis de los derivados de los ácidos carboxílicos
 reducción de los derivados de ácidos carboxílicos
 reacciones de los derivados de ácidos carboxílicos con reactivos organometálicos
 resumen de la química de los cloruros de ácido
 resumen de la química de los anhídridos de ácido
 resumen de la química de los ésteres
 resumen de la química de las amidas
 resumen de la química de los nitrilos
 Tioésteres

Ésteres y amidas del ácido carbónico

Capítulo 22 Sustituciones en alfa, y condensaciones de enoles y de iones enolato

introducción
 Enoles e iones enolato
 Halogenación en alfa de cetonas
 Bromación en alfa de ácidos: la reacción de HVZ (Hell-Volhard-Zelinsky)
 Alquilaciones de iones enolato
 formación y alquilación de enaminas
 condensación aldólica de cetonas y aldehídos
 mecanismo clave: condensación aldólica catalizada por una base
 deshidratación de aldoles
 mecanismo clave: deshidratación de un aldol
 condensaciones aldólicas cruzadas
 estrategias para resolver problemas: propuesta de mecanismos de reacción
 Ciclaciones aldólicas
 diseño de síntesis utilizando condensaciones aldólicas
 la condensación de Claisen de ésteres
 mecanismo clave: condensación de Claisen
 Dila condensación de Claisen: un tipo de ciclación de Claisen
 Claccondensaciones de Claisen cruzadas
 síntesis empleando compuestos β -dicarbonílicos
 la síntesis malónica
 la síntesis acetilacética
 adiciones conjugadas: la reacción de Michael
 mecanismo clave: adiciones 1,2 y 1,4
 La anilación de Robinson
 estrategias para resolver problemas: propuesta de mecanismos de reacción
 resumen: adiciones y condensaciones de enolatos

Capítulo 23 Carbohidratos y ácidos nucleicos

introducción
 clasificación de los hidratos de carbono
 monosacáridos
 Diastereómeros *eritro* y *treo*
 Epímeros
 estructura cíclica de los monosacáridos
 Anómeros de los monosacáridos. Mutarrotación
 reacciones de los monosacáridos: reacciones secundarias en medio básico
 reducción de los monosacáridos
 oxidación de los monosacáridos. Los azúcares reductores
 los azúcares no reductores: formación de glicósidos
 formación de éteres y ésteres
 reacciones con fenilhidrazina: formación de osazonas
 acortamiento de la cadena: degradación de Ruff
 alargamiento de la cadena: síntesis de Kiliani-Fischer
 resumen: reacciones de los azúcares
 la prueba de Fischer de la configuración de la glucosa
 determinación del tamaño del anillo. Escisión de azúcares con ácido peryódico

Disacáridos
 Polizacáridos
 Ácidos nucleicos: introducción
 Ribonucleósidos y ribonucleótidos
 La estructura del ácido ribonucleico
 La desoxirribosa en estructura del ácido desoxirribonucleico
 funciones adicionales de los nucleótidos

Capítulo 24 Aminoácidos, péptidos y proteínas

introducción
 estructura y estereoquímica de los α -aminoácidos
 propiedades ácido-base de los aminoácidos
 puntos isoeléctricos y electroforesis
 sintéticamente básicos
 resumen: síntesis de aminoácidos
 resolución de los aminoácidos
 reacciones de los aminoácidos
 estructura y nomenclatura de péptidos y proteínas
 determinación de la estructura de los péptidos
 síntesis de péptidos en solución
 síntesis de péptidos en fase sólida
 clasificación de las proteínas
 niveles de estructura de las proteínas
 desnaturalización de las proteínas

Capítulo 25 Lípidos

introducción
 Ceras
 Triglicéridos
 Saponificación de grasas y aceites. Jabones y detergentes
 fosfolípidos
 esteroides
 prostaglandinas
 Terpenos

Capítulo 26 Polímeros sintéticos

introducción
 polímeros de adición
 estereoquímica de los polímeros
 control estereoquímico de la polimerización. Catalizadores de Ziegler-Natta
 gomas naturales y sintéticas
 Copolímeros de dos o más monómeros
 condensación de polímeros
 estructura y propiedades de los polímeros

Apéndices

Posiciones de absorción de protones en RMN, en varios entornos estructurales
 constantes de acoplamiento espín-espín
 desplazamientos químicos de ^{13}C en los compuestos orgánicos
 grupos de frecuencias características en el infrarrojo
 absorciones en el infrarrojo características de los grupos funcionales
 las reglas de Woodward-Fieser para predecir los efectos del ultravioleta-visible

métodos y sugerencias para proponer mecanismos
sugerencias para desarrollar síntesis de varios pasos

Introduction to Quantum Mechanics, with applications to chemistry, Linus Pauling and E. Bright Wilson, Jr., Dover Publications, Inc., New York, 1985

Chapter I Survey of Classical Mechanics

Newton's Equations of Motion in the Lagrangian Form
The Three-dimensional Isotropic Harmonic Oscillator
Generalized Coordinates
The Invariance of the Equations of Motion in the Lagrangian Form
An Example: The Isotropic Harmonic Oscillator in Polar Coordinates
The Conservation of Angular Momentum
The Equations of Motion in the Hamiltonian Form
Generalized Momenta
The Hamiltonian Function and Equations
The Hamiltonian Function and the Energy
A General Example
The Emission and Absorption of Radiation
Summary of Chapter I

Chapter II The Old Quantum Theory

The Origin of the Old Quantum Theory
The Postulates of Bohr
The Wilson-Sommerfeld Rules of Quantization
Selection Rules. The Correspondence Principle
The Quantization of Simple Systems
The Harmonic Oscillator. Degenerate States
The Rigid Rotator
The Oscillating and Rotating Diatomic Molecule
The Particle in a Box
Diffraction by a Crystal Lattice
The Hydrogen Atom
Solution of the Equations of Motion
Application of the Quantum Rules. The Energy Levels
Description of the Orbits
Spatial Quantization
The Decline of the Old Quantum Theory

Chapter III The Schrödinger Wave Equation With the Harmonic Oscillator as an Example

The Schrödinger Wave Equation
The Wave Equation Including the Time
The Amplitude Equation
Wave Functions. Discrete and Continuous Sets of Characteristic Energy Values
The Complex Conjugate Wave Function $\Psi^*(x, t)$
The Physical Interpretation of the Wave Functions
 $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$ as a Probability Distribution Function
Stationary States
Further Physical Interpretation. Average Values of Dynamical Quantities
The Harmonic Oscillator in Wave Mechanics

valores de pK_a de compuestos representativos

Solution of the Wave Equation
The Wave Functions for the Harmonic Oscillator and their Physical Interpretation
Mathematical Properties of the Harmonic Oscillator Wave Functions

Chapter IV The Wave Equation for a System of Point Particles in Three Dimensions

The Wave Equation for a System of Point Particles
The Wave Equation Including the Time
The Amplitude Equation
The Complex Conjugate Wave Function $\Psi^*(x_1 \cdots z_N, t)$
The Physical Interpretation of the Wave Functions
The Free Particle
The Particle in a Box
The Three-dimensional Harmonic Oscillator in Cartesian Coordinates
Curvilinear Coordinates
The Three-dimensional Harmonic Oscillator in Cylindrical Coordinates

Chapter V The Hydrogen Atom

The Solution of the Wave Equation by the Polynomial Method and the Determination of the Energy Levels
The Separation of the Wave Equation. The Translational Motion
The Solution of the φ Equation
The Solution of the ϑ Equation
The Solution of the r Equation
The Energy Levels
Legendre Functions and Surface Harmonics
The Legendre Functions or Legendre Polynomials
The Associated Legendre Functions
The Laguerre Polynomials and Associated Laguerre Functions
The Laguerre Polynomials
The Associated Laguerre Polynomials and Functions
The Wave Functions for the Hydrogen Atom
Hydrogen-like Wave Functions
The Normal State of the Hydrogen Atom
Discussion of the Hydrogen-like Radial Wave Functions
Discussion of the Dependence of the Wave Functions on the Angles ϑ and ϕ

Chapter VI Perturbation Theory

Expansions in Series of Orthogonal Functions
First-order Perturbation Theory for a Non-degenerate Level
A simple Example: The Perturbed Harmonic Oscillator
An Example: The Normal Helium Atom
First-order Perturbation Theory for a Degenerate Level

An Example: Application of a Perturbation to a Hydrogen Atom
Second-order Perturbation Theory
An Example: The Stark Effect of the Plane Rotator

Chapter VII The Variation Method and other Approximate Methods

The variation method
The Variational Integral and its Properties
An Example: The Normal State of the Helium Atom
Application of the Variation Method to Other States
Linear variation Functions
A More General Variation Method
Other Approximate Methods
A Generalized Perturbation Theory
The Wentzel-Kramers-Brillouin Method
Numerical Integration
Approximation by the Use of Difference Equations
An Approximate Second-order Perturbation Treatment

Chapter VIII The Spinning Electron and the Pauli Exclusion Principle, with a Discussion of the Helium Atom

The Spinning Electron
The Helium atom. The Pauli Exclusion Principle
The configuration 1s²s and 1s2p
The Consideration of Electron Spin. The Pauli Exclusion Principle
The Accurate Treatment of the Normal Helium Atom
Excited States of the Helium Atom
The Polarizability of the Normal Helium Atom

Chapter IX Many-electron Atoms

Slater's Treatment of Complex Atoms
Exchange Degeneracy
Spatial Degeneracy
Factorization and Solution of the Secular Equation
Evaluation of Integrals
Empirical Evaluation of Integrals. Applications
Variation Treatments for Simple Atoms
The Lithium Atom and Three-electron Ions
Variation Treatments of Other Atoms
The Method of the Self-consistent Field
Principle of the Method
Relation of the Self-consistent Field Method to the Variation Principle
Results of the Self-consistent Field Method
Other Methods for Many-electron Atoms
Semi-empirical Sets of Screening Constants
The Thomas-Fermi Statistical Atom

Chapter X The Rotation and Vibration of Molecules

The Separation of Electronic and Nuclear Motion
The Rotation and Vibration of Diatomic Molecules
The Separation of Variables and Solution of the Angular Equations
The Nature of the Electronic Energy Function
A Simple Potential Function for Diatomic Molecules
A More Accurate Treatment. The Morse Function

The Rotation of Polyatomic Molecules
The Rotation of Symmetrical-top Molecules
The Rotation of Unsymmetrical-top Molecules
The Vibration of Polyatomic Molecules
Normal Coordinates in Classical Mechanics
Normal Coordinates in Quantum Mechanics
The Rotation of Molecules in Crystals

Chapter XI Perturbation Theory Involving the Time, the Emission and Absorption of Radiation, and the Resonance Phenomenon

The Treatment of a Time-dependent perturbation by the Model of Variation of Constants
A simple Example
The Emission and Absorption of Radiation
The Einstein Transition Probabilities
The Calculation of the Einstein Transition Probabilities by Perturbation Theory
Selection Rules and Intensities for the Harmonic Oscillator
Selection Rules and Intensities for Surface-harmonic Wave Functions
Selection Rules and Intensities for the Diatomic Molecule. The Franck-Condon Principle
Selection Rules and Intensities for the Hydrogen Atom
Even and Odd Electronic States and their Selection Rules
The Resonance Phenomenon
Resonance in Classical Mechanics
Resonance in Quantum Mechanics
A Further Discussion of Resonance

Chapter XII The Structure of Simple Molecules

The Hydrogen Molecule-ion
A Very Simple Discussion
Other Simple variation Treatments
The Separation and Solution of the Wave Equation
Excited States of the Hydrogen Molecule-ion
The Hydrogen Molecule
The Treatment of Heitler and London
Other Simple Variation Treatments
The Treatment of James and Coolidge
Comparison with Experiment
Excited States of the Hydrogen Molecule
Oscillation and Rotation of the Molecule. Ortho and Para Hydrogen
The Helium Molecule-ion He_2^+ and the Interaction of Two Normal Helium Atoms
The Helium Molecule-ion He_2^+
The Interaction of Two Normal Helium Atoms
The One-electron Bond, the Electron-pair Bond, and the Three-electron Bond

Chapter XIII The Structure of Complex Molecules

Slater's Treatment of Complex Molecules
Approximate Wave Functions for the System of Three Hydrogen Atoms
Factoring the Secular Equation
Reduction of Integrals
Limiting Cases for the Systems of Three Hydrogen Atoms

Generalization of the Method of Valence-bond Wave Functions
 Resonance among Two or More Valence-bond Structures
 The Meaning of Chemical Valence Formulas
 The Method of Molecular Orbitals

Chapter XIV Miscellaneous Applications of Quantum Mechanics
 Van der Waals Forces
 Van der Waals Forces for Hydrogen Atoms
 Van der Waals Forces for Helium
 The Estimation of Van der Waals Forces from Molecular Polarizabilities
 The Symmetry Properties of Molecular Wave Functions
 Even and Odd Electronic Wave Functions. Selection Rules
 The Nuclear Symmetry Character of the Electronic Wave Function
 Summary of Results Regarding Symmetrical Diatomic Molecules
 Statistical Quantum Mechanics. Systems in Thermodynamic Equilibrium
 The Fundamental Theorem of Statistical Quantum Mechanics
 A simple Application
 The Boltzmann Distribution Law
 Fermi-Dirac and Bose-Einstein Statistics
 The Rotational and Vibrational Energy of Molecules
 The Dielectric Constant of a Diatomic Dipole Gas

The Energy of Activation of Chemical Reactions

Chapter XV General Theory of Quantum Mechanics
 Matrix Mechanics
 Matrices and their Relation to Wave Functions. The Rules of Matrix Algebra
 Diagonal Matrices and Their Physical Interpretation
 The Properties of Angular Momentum
 The Uncertainty Principle
 Transformation Theory

Appendices
 Values of Physical Constants
 Proof that the Orbit of a Particle Moving in a Central Field Lies in a Plane
 Proof of Orthogonality of Wave Functions Corresponding to Different Energy Levels
 Orthogonal Curvilinear Coordinate Systems
 The Evaluation of the Mutual Electrostatic Energy of Two Spherically Symmetrical Distributions of Electricity with Exponential Density Functions
 Normalization of the Associated Legendre Functions
 Normalization of the Associated Laguerre Functions
 The Greek Alphabet

Química cuántica, Ira N. Levine, Pearson- Prentice Hall, Madrid, España, 2001

1 La ecuación de Schrödinger
 Química cuántica
 Antecedentes históricos de la mecánica cuántica
 El principio de incertidumbre
 La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo
 La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo
 Probabilidad
 Números complejos
 Unidades
 Resumen

2 La partícula en una caja
 Ecuaciones diferenciales
 La partícula en una caja unidimensional
 La partícula libre en una dimensión
 La partícula en un pozo rectangular
 Efecto túnel
 Resumen

3 Operadores
 Operadores
 Funciones propias y valores propios
 Operadores y Mecánica Cuántica
 La ecuación de Schrödinger tridimensional para un sistema de varias partículas
 La partícula en una caja tridimensional

Degeneración
 Valores medios
 Condiciones para que una función de onda sea aceptable
 Resumen

4 El oscilador armónico
 Resolución de ecuaciones diferenciales mediante desarrollos en serie de potencias
 El oscilador armónico unidimensional
 Vibración de moléculas
 Resolución numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo unidimensional
 Resumen

5 Momento angular
 Medida simultánea de varias propiedades
 Vectores
 Momento angular de un sistema de una partícula
 El método de los operadores escalera para el momento angular
 Resumen

6 El átomo de hidrógeno
 El problema de fuerzas centrales de una partícula
 Partículas no interaccionantes y separación de variables
 Reducción del problema de dos partículas a dos problemas de una partícula

El rotor rígido de dos partículas
 El átomo de hidrógeno
 Funciones de onda de estados enlazantes del átomo de hidrógeno
 Orbitales hidrogenoides
 El efecto Zeeman
 Resolución numérica de la ecuación de Schrödinger radial
 Resumen

7 Teoremas de la mecánica cuántica
 Introducción
 Operadores hermiticos
 Desarrollo en términos de funciones propias
 Funciones propias de operadores que conmutan
 Paridad
 Medida y superposición de estados
 Funciones propias de posición
 Postulados de la mecánica cuántica
 Matrices
 Resumen

8 El método de variaciones
 El teorema de variaciones
 Extensión del método de variaciones
 Determinantes
 Ecuaciones lineales simultáneas
 Funciones variacionales lineales
 Matrices, valores propios y vectores propios
 Resumen

9 Teoría de perturbaciones
 Introducción
 Teoría de perturbaciones no degenerada
 Tratamiento perturbativo del estado fundamental del átomo de helio
 Tratamientos de variaciones del estado fundamental del helio
 Teoría de perturbaciones para niveles de energía degenerados
 Simplificación de la ecuación secular
 Tratamiento perturbativo de los primeros estados excitados del helio
 Comparación de los métodos de variaciones y perturbaciones
 Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo
 Interacción de radiación con la materia
 Resumen

10 Espin electrónico y principio de Pauli
 Espin electrónico
 El espín y el átomo de hidrógeno
 El principio de Pauli
 El átomo de helio
 El principio de exclusión de Pauli
 Determinantes de Slater
 Tratamiento perturbativo del estado fundamental del litio
 Tratamientos variacionales del estado fundamental del litio
 Momento magnético de espín
 Operadores escalera para el espín electrónico

Resumen

11 Átomos polielectrónicos
 El método del campo autoconsistente de Hartree-Fock
 Orbitales y tabla periódica
 Correlación electrónica
 Suma de momentos angulares
 Momento angular en átomos polielectrónicos
 Interacción espín-órbita
 El Hamiltoniano atómico
 Las reglas de Condon-Slater
 Resumen

12 Simetría molecular
 Elementos y operaciones de simetría
 Grupos puntuales de simetría
 Resumen

13 Estructura electrónica de moléculas diatómicas
 La aproximación de Born-Oppenheimer
 Movimiento nuclear en moléculas diatómicas
 Unidades atómicas
 El ión de la molécula de hidrógeno
 Tratamientos aproximados del estado electrónico fundamental del H_2^+
 Orbitales moleculares para estados excitados del H_2^+
 Configuraciones OM de moléculas diatómicas homonucleares
 Términos electrónicos de moléculas diatómicas
 La molécula de hidrógeno
 Tratamiento del enlace valencia del H_2
 Comparación de las teorías OM y EV
 Funciones de onda OM y EV en moléculas diatómicas homonucleares
 Estados excitados del H_2
 Densidad de probabilidad electrónica
 Momentos dipolares
 El método Hartree-Fock para moléculas
 Funciones de onda SCF para moléculas diatómicas
 Tratamiento OM de moléculas diatómicas heteronucleares
 Tratamiento EV de moléculas diatómicas heteronucleares
 La aproximación del electrón de valencia
 Funciones de onda CI
 Resumen

14 Teoremas del virial y de Hellmann-Feynman
 Teorema del virial
 Teorema del virial y enlace químico
 Teorema de Hellmann-Feynman
 Teorema electrostático
 Resumen

15 Tratamientos *ab initio* y del funcional de la densidad de moléculas
 Métodos *ab initio*, del funcional de la densidad, semiempíricos, y de mecánica molecular
 Términos electrónicos de moléculas poliatómicas

El tratamiento OM SCF de moléculas poliatómicas
 Funciones base
 Aceleración de los cálculos Hartree-Fock
 Tratamiento OM SCF del H_2O
 Análisis de población
 El potencial electrostático molecular y las cargas atómicas
 OM localizados
 Tratamiento OM SCF del metano, metano y etileno
 Geometría molecular
 Búsqueda conformacional
 Frecuencias de vibración molecular
 Propiedades termodinámicas
 Programas de química cuántica *ab initio*
 Realización de cálculos *ab initio*
 Interacción de configuraciones
 Teoría de perturbaciones de Moller-Plesset (MP)
 El método de clusters acoplados
 Teoría del funcional de la densidad
 Métodos compuestos para cálculos de energía
 Efectos del disolvente
 Efectos relativistas
 Tratamiento de enlace valencia de moléculas poliatómicas
 El método de enlace valencia generalizado

Reacciones químicas
16 Tratamientos semiempíricos y de mecánica molecular de moléculas
 Tratamientos OM semiempíricos de moléculas conjugadas planas
 El método OM del electrón libre
 El método OM Hückel
 El método de Pariser-Parr-Pople
 Métodos OM semiempíricos generales
 El método de mecánica molecular
 Tratamientos empíricos y semiempíricos de los efectos disolventes
 Reacciones químicas
17 Comparación de métodos
 Geometría molecular
 Cambios de energía
 Otras propiedades
 Enlace de hidrógeno
 Conclusión
 El futuro de la Química Cuántica

Introducción a los Principios de Mecánica, Walter Hauser, Unión Tipográfica Editorial Hispano Americana (UTEHA), México, 1969

Capítulo 1 Vectores
 Representación geométrica de un vector
 Suma y resta de vectores
 Representación algebraica de un vector
 Multiplicación vectorial
 Sistemas de coordenadas no ortogonales
 Representación matricial de los vectores
 Derivada de un vector con respecto a un escalar
 Rotación de un vector
 Representación de vectores planos por medio de números complejos
Capítulo 2 Cinemática de la partícula
 Velocidad y aceleración
 Velocidad y aceleración en coordenadas cilíndricas
 Velocidad y aceleración en coordenadas esféricas
 Vectores base para coordenadas generalizadas
 Velocidad y aceleración en coordenadas generalizadas
 Geometría diferencial de las coordenadas curvilíneas
 Movimiento sobre una curva determinada
Capítulo 3 Sistemas de coordenadas en movimiento
 Movimiento de traslación
 Movimiento de rotación
 Movimiento de traslación y rotación
 Transformación de coordenadas

Representación matricial de transformaciones de coordenadas ortogonales
Capítulo 4 Dinámica de las partículas: movimiento unidimensional
 Primera ley del movimiento de Newton
 Segunda ley del movimiento de Newton: conceptos de masa y fuerza
 Tercera ley de Newton sobre el movimiento
 Problemas unidimensionales
 Fuerza en función únicamente del tiempo
 Fuerza en función de la posición: conceptos de trabajo y energía
 Fuerza que es función sólo de la posición: movimiento limitado e ilimitado
 Equilibrio estable e inestable
 Movimiento a un lado y otro de un punto de equilibrio estable: el oscilador armónico simple
 Movimiento bajo la acción de una fuerza dependiente de la velocidad
 Oscilador armónico con amortiguamiento
 Oscilador armónico forzado: resonancia
 Movimiento a lo largo de una curva determinada
 Oscilador anarmónico
 Oscilador anarmónico forzado
Capítulo 5 Ecuaciones de movimiento de Lagrange
 Fuerzas generalizadas

Cantidades de movimiento generalizadas de una partícula
 Ecuaciones de movimiento generalizadas
 Movimiento restringido: restricciones holonómicas
Capítulo 6 Movimiento conservativo
 Fuerzas conservativas
 Energía potencial: conservación de la energía
 Condiciones necesarias y suficientes para que una fuerza sea conservadora
 Ecuaciones de Lagrange para fuerzas conservadoras: el lagrangiano
 Ejemplos de fuerzas conservativas: fuerzas centrales, eléctricas y magnéticas
 Movimiento en un campo eléctrico uniforme
 Movimiento en un campo magnético uniforme
 Movimiento en un campo eléctrico uniforme y magnético uniforme
 El oscilador isotrópico en un campo magnético
 Teorema de Larmor
 Continuación del teorema de Larmor
 Resonancia magnética
 Funciones de energía potencial dependientes de la velocidad: cantidades de movimiento generalizadas
 Conservación de la energía: función hamiltoniana
 Ecuaciones de movimiento de Hamilton
 Mecánica y óptica geométricas
 Óptica geométrica, mecánica y mecánica ondulatoria

Capítulo 7 Movimiento en un campo de fuerzas centrales
 Características generales del movimiento: solución formal
 Características generales de las órbitas
 Estabilidad de las órbitas circulares
 Ley de Newton para órbitas giratorias
 Movimiento en un campo de fuerzas inversamente proporcionales al cuadrado de la distancia
 Movimiento limitado: tercera ley de Kepler del movimiento planetario
 El teorema viral
 Movimiento ilimitado: dispersión
Capítulo 8 Dinámica de un sistema de partículas
 El sistema de dos partículas: centro de masa y masa reducida
 Energía cinética: conservación de la energía
 Colisión entre dos partículas
 Movimiento por cohete
 Cantidad de movimiento angular
 Dispersión: relaciones entre los ángulos de dispersión en los sistemas de coordenadas del centro de masa y del laboratorio (o sea de un observador)
 Dinámica de un sistema de N partículas: teoremas de conservación
 Ecuaciones de Lagrange para un sistema de dos partículas
 Las ecuaciones de Lagrange y los teoremas de conservación
 Ecuaciones de Lagrange para movimiento restringido de un sistema
 Aplicaciones de las ecuaciones de Lagrange

Capítulo 9 Movimiento de un cuerpo rígido
 Coordenadas generalizadas para el movimiento de cuerpos rígidos: ángulos de Euler
 Velocidad angular de un cuerpo rígido
 Relación entre la cantidad de movimiento angular y la velocidad angular de un cuerpo rígido: momentos y productos de inercia
 Energía cinética rotacional de un cuerpo rígido
 Teorema de los ejes paralelos
 Ecuaciones de movimiento para un cuerpo rígido
 Movimiento de un cuerpo rígido alrededor de un eje fijo de rotación
 Movimiento plano de un cuerpo rígido: eje instantáneo de rotación
 Movimiento plano de un cuerpo rígido: movimiento de rodadura
 Conservación de la energía en la rodadura
 Movimiento plano de un cuerpo rígido: rodadura y deslizamiento
 Equilibrio estático de cuerpos rígidos
 Equilibrio de un sistema de partículas: principio del trabajo virtual
 Choque de dos cuerpos rígidos
 Movimiento de un cuerpo rígido exento de momento rotacional
 Movimiento de un trompo simétrico bajo la acción de la gravedad

Capítulo 10 Elementos de la teoría de las transformaciones lineales
 Repaso de la representación matricial de los vectores tridimensionales
 Álgebra matricial
 Producto directo: operadores
 Espacios vectoriales lineales
 Vectores base de un espacio vectorial n -dimensional
 Transformaciones lineales
 Transformación de coordenadas
 Espacio vectorial complejo
 Valores propios y vectores propios de un operador: diagonalización de operadores normales
 Diagonalización simultánea de operadores normales de conmutación
Capítulo 11 Teoría de las oscilaciones pequeñas
 Condiciones para la estabilidad de una configuración de equilibrio de un sistema conservativo de partículas
 Ecuaciones de movimiento para desplazamientos pequeños a partir de la posición de equilibrio: movimiento no amortiguado
 Coordenadas normales
 Movimiento amortiguado
 Oscilaciones forzadas: fuerza excitadora sinusoidal
 Oscilación forzada: fuerzas de impulso, función tensorial de Green
 Teoría de las perturbaciones

Capítulo 12 Propagación de ondas a lo largo de una cuerda

Representación matemática de ondas planas, el principio de superposición, ecuaciones de onda
 Ecuación de onda de la cuerda vibrante
 Ondas armónicas
 Flujo de energía en una onda armónica
 Polarización
 Reflexión y transmisión de ondas armónicas
 Cuerda vibrante con los extremos fijos
 Movimiento general de una cuerda vibrante
 Vibración forzada de una cuerda: resonancia, función de Green
 Fuerza impulsora: función de Green

Capítulo 13 Teoría especial o restringida de la relatividad

La transformación de Lorentz
 Dilatación del tiempo y contracción de Lorentz-Fitzgerald
 Transformación de velocidades
 Velocidad y aceleración en cuatro dimensiones

Dinámica relativista, ecuaciones de movimiento relativistas, masa relativista, cantidad de movimiento lineal
 Fuerza tetradimensional, energía cinética relativista, cantidad de movimiento tetradimensional
 Propiedades de transformación del campo electromagnético
 Movimiento de una partícula cargada en un campo eléctrico uniforme
 Movimiento en un campo magnético uniforme
 Movimiento bajo la acción de campos eléctrico y magnético paralelos
 Coordenadas generalizadas, ecuación de movimiento de Lagrange
 Formulación lagrangiana covariante
 Movimiento de una partícula cargada en un campo de Coulomb
 Cantidad de movimiento angular
 Colisión de partículas: reacciones, energía de umbral

Teoría de grupos aplicada, para químicos, físicos e ingenieros, Allen Nussbaum, Editorial Reverté, S. A., España, 1974

Capítulo 1 Teoría de grupos: las matemáticas de la simetría

El concepto de simetría
 Grupos puntuales
 Clases de elementos conjugados y clases adjuntas
 Estudio de los grupos puntuales
 Simetría de traslación y grupos espaciales
 Grupos espaciales dispersioidicos
 Los grupos puntuales cristalográficos
 Los retículos de Bravais
 Grupos espaciales
 Teoría de grupos y grupos espaciales
 Consideraciones finales

Capítulo 2 Representaciones y vibraciones

Estudio del álgebra de matrices
 La representación de un grupo
 Representación reducibles e irreducibles
 Sistemas de caracteres
 El cálculo de las tablas de caracteres
 Introducción a las coordenadas normales
 El oscilador equilateral plano
 Operadores de proyección
 Operadores de proyección aplicados a la molécula equilateral
 Teoría de los operadores de proyección
 Coordenadas internas
 Coordenadas internas de simetría
 El tratamiento cualitativo de los modos normales
 Una extensión a un ejemplo complicado: la molécula de cloroformo

Capítulo 3 Espectros vibracionales de infrarrojo y Raman

La ecuación de Schrödinger

El oscilador cuántico
 La ecuación de Schrödinger y los dipolos
 Espectros vibracionales de infrarrojo
 Reglas de selección
 El efecto Raman

Capítulo 4 El enlace molecular

Introducción a la estructura de las moléculas
 La ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno
 Átomos multielectrónicos
 Orbitales atómicos
 Teoría de grupos y enlaces híbridos
 Orbitales moleculares y el método de CLOA
 La naturaleza de los orbitales enlazantes

Capítulo 5 Electrones en los cristales

Dispersión de Bragg-von Laue
 Bandas de energía en los sólidos
 Zonas de Brillouin en tres dimensiones
 Bandas de energía de electrones libres
 Soluciones aproximadas de la ecuación de Schrödinger
 La aproximación del electrón cuasi-libre
 El método de las ondas planas ortogonalizadas
 Un ejemplo bidimensional: el retículo cuadrado
 El enlace fuerte o método CLOA
 Un grupo espacial simórfico cúbico simple: bronce-beta
 Un grupo espacial no simórfico: teluro
 Estructura de bandas de energía en función del espaciado reticular
 La estructura exagonal compacta
 La estructura de bandas del silicio y germanio
 Spin y grupos dobles

Symmetry and Spectroscopy, an introduction to vibrational and Electronic Spectroscopy, Daniel C. Harris and Michael D. Bertolucci, Dover Publications Inc., New York, 1978.

0 Opening remarks

1 A chemist's view of group theory

Introduction
 Symmetry Operations and Molecules
 Groups
 Point Groups
 Classification of Molecules into Point Groups
 Matrix Representation of Symmetry Operations
 Characters and Character Tables
 Decomposition of Reducible Representations and the Direct Product

2 A skirmish with quantum mechanics

Introduction
 Light
 The Postulates of Quantum Mechanics
 Some Simple Illustrations from Quantum Mechanics

3 Vibrational spectroscopy

Introduction
 Infrared and Raman Spectra
 Diatomic Molecules
 Transitions between Stationary States
 The Normal Modes of Vibration of Polyatomic Molecules
 Selection Rules and Polarization
 Symmetry Coordinates and Normal Modes
 Stretching Mode Analysis
 Assignment of Real Spectra
 The Resonance Raman Effect
 Functional Group Analysis

4 Molecular orbital theory

Introduction
 Atoms
 Photoelectron Spectroscopy
 The LCAO Molecular Orbital Method
 Diatomic Molecules
 The Hückel Method
 Transition Metal Complexes

5 Electronic spectroscopy

Introduction
 Another Look at Molecular Vibrations
 Basic Notions
 Selection Rules
 The Electronic Spectra of Some Diatomic Molecules
 The Fate of Absorbed Energy
 Single Bonds, Double Bonds, and Lone Pairs
 Vibronic Analysis
 Transition Metal Complexes
 Concluding Remarks

Appendices

Character Tables
 Direct Products
 Overtones of degenerate vibrations
 The shapes of atomic orbitals
 Physical constants
 Energy conversions
 Answer to problems

The Nature of the Chemical Bond, Linus Pauling, Third Edition, New York, 1964

Chapter 1 Resonance and the Chemical Bond

The Development of the Theory of Valence
 Types of Chemical Bonds
 The Chemical Bond Defined
 The Ionic Bond and Other Electrostatic Bonds
 The Covalent Bond
 The Metallic Bond; Fractional Bonds
 The Concept of Resonance
 The Hydrogen Molecule-Ion and the One-Electron Bond
 The Normal Hydrogen Atom
 The Hydrogen Molecule-Ion
 The Virial Theorem
 The Hellman-Feynman Theorem
 The Conditions for the Formation of a One-Electron Bond
 The Hydrogen Molecule and the Electron-Pair Bond

Condon's Treatment of the Hydrogen Molecule
 The Heitler-London Treatment of the Hydrogen Molecule
 Partial Ionic Character and Deformation
 The Conditions for the Formation of an Electron-Pair Bond

Chapter 2 The Electronic Structure of Atoms and the Formal Rules for the Formation of Covalent Bonds

The Interpretation of Line Spectra
 Stationary States; The Bohr Frequency Principle
 Stationary States of the Hydrogen Atom
 The Electronic Structure of Alkali Atoms
 The Selection Rule for l
 The Spinning Electron and the Fine Structure of Spectral Lines
 The Electronic Structure of Atoms with Two or More Valence Electrons

The Pauli Exclusion Principle and the Periodic System of the Elements
 The Zeeman Effect and the Magnetic Properties of Atoms and Monoatomic Ions
 Hybrid Atomic States
 The Formal Rules for the Formation of Covalent Bonds

Chapter 3 The Partial Ionic Character of Covalent Bonds and the Relative Electronegativity of Atoms

The Transition from One Extreme Bond Type to Another
 Continuous Change in Bond Type
 Discontinuous Change in Bond Type
 Bond Type and Atomic Arrangement
 The Nature of the Bond in Diatomic Halogenide Molecules
 Bond Energies of Halogenide Molecules; The Energies of Normal Covalent Bonds
 The Postulate of the Geometric Mean
 Empirical Values of Single-Bond Energies
 The Electronegativity Scale of the Elements
 The Formulation of the Electronegativity Scale
 Heats of Formation of Compounds in Their Standard States;
 The Complete Electronegativity Scale
 Relation to Other Properties
 The Electronegativity of Atoms and the Partial Ionic Character of Bonds
 The Entalpy Change in Organic Rearrangement and the Electroegativity Scale
 The Correlation of Color and Bond Character

Chapter 4 The Directed Covalent Bond; Bond Strengths and Bond Angles

The Nature and Bond-forming Power of Atomic Orbitals
 Hybrid Bond Orbitals; The Tetrahedral Carbon Atom
 Derivation of Results about Tetrahedral Orbitals
 Quantum-mechanical Description of the Quadrivalent Carbon Atom
 The Effect of an Unshared Pair on Hybridization
 Contribution of Unshared Electron Pairs to the Electric Dipole Moments of Molecules
 Orbitals for incomplete *s-p* Shells
 Concentration of Bond Orbitals
 Electron Distribution in Completed Shells
 Restricted Rotation about Single Bonds
 Restricted Rotation about Single Bonds between Atoms with Unshared Electron Pairs
 Orbitals and Bond Angles for Multiple Bonds
 Partial Ionic Character of Multiple Bonds
 The Effect of Unshared Pairs on Bond Energies and Bond Lengths

Chapter 5 Complex bond orbitals; The magnetic criterion for bond type

Bonds Involving *d* Orbitals
 Octahedral Bond Orbitals
 Square Bond Orbitals
 The Magnetic Criterion for Bond Type
 The Magnetic Moments of Octahedral Complexes

The Magnetic Moments of Tetrahedral and Square Coordinated Complexes
 The Electronutrality Principle and the Stability of Octahedral Complexes
 Ligand Field Theory
 Other Configurations Involving *d* Orbitals
 Configurations for Atoms with Unshared Electron Pairs

Chapter 6 The resonance of molecules among several valence-bond structures

Resonance in Nitrous Oxide and Benzene
 Resonance Energy
 Values of Bond Energies for Multiple Bonds
 Ionic Resonance Energy and Partial Ionic cahacter of Multiple Bonds
 The Nitrogen-Nitrogen Triple Bond
 Empirical Values of Resonance Energies
 The Structure of Aromatic Molecules
 The Quantitative Treatment of Resonance in Aromatic Molecules
 The Orientation of Substituents in Aromatic Molecules
 The Effect of Resonance on the Electric Dipole Moments of Molecules
 The Structure and Stability of the Hidrogen Free Radicals
 The Nature of the Theory of Resonance

Chapter 7 Interatomic distances and their relation to the structure of molecules and crystals

Interatomic Distances in Normal Covalent Molecules: Covalent Radii
 The Correction for Electronegativity Difference
 Double-Bond and Triple-Bond Radii
 Interatomic Distances anf Force Constants of Bonds
 Interatomic Distances and Resonance
 Bond Lengths in Aromatic Hydrocarbons
 Bond Order and Bond Length; Change in Bond Length Caused by resonance between Two Equivalent tructures
 Single-Bond: Triple-Bond Resonance
 The Conditions for Equivalence or Nonequivalence Bonds
 Tetrahedral and Octahedral Covalent Radii
 Tetrahedral Radii
 Octahedral Radii
 Other Covalent Radii
 The Anomalous Manganese Radius
 Interatomic Distances for Fractional Bonds
 values of Single-Bond Metallic Radii
 Van der Waals and Nonbonded Radii of Atoms

Chapter 8 Types of resonance in molecules

The Structure of Simple Resonating Molecules
 Carbon Monoxide and Carbon Monosulfide
 Carbon Dioxide and Related Molecules
 The Cyanides and Isocyanides
 The Adjacent-Charge Rules and the Electronutrality Rule
 Cyanates and Thiocyanates
 The Nitro and Carboxyl Groups; Acid and Base Strengths
 The Structure af Amides and Peptides

The Carbonate, Nitrate, and Borate Ions and Related Molecules
 The Structure and Properties of the Chloroethylenes and Chlorobenzenes
 Resonance in Conjugated Systems
 Overcrowded Molecules
 Conjugated Systems Involving Triple Bonds
 Resonance in Heterocyclic Molecules
 Hyperconjugation

Chapter 9 The structure of molecules and complex ions involving bonds with partial double-bond character

The Structure of Silicon Tetrachloride and Related Molecules
 Silicon Tetrafluoride and Related Molecules
 The Fluorochloromethanes and Related Molecules; The Effect of Bond Type on Chemical Reactivity
 Partial Double-Bond Character of Bonds between the Heavier Nonmetal Atoms
 The Boron Halogenides
 The Oxides and Oxygen Acids of the Heavier Elements
 The Chlorate ion and Related Ions
 The Strengths of the Oxygen Acids
 Sulfuryl Fluoride and Related Molecules
 The Structure and Stability of Carbonyls and Other Covalent Complexes of the Transition Metals
 The Cyanide and Nitro Complexes of the Transition Elements

Chapter 10 The one-electron bond and the three-electron bond; electron-deficient substances

The One-Electron Bond
 The Three-Electron Bond
 The Conditions for Formation of a Stable Three-Electron Bond
 The Helium Molecule-Ion
 The Oxides of Nitrogen and Their Derivatives
 Nitric Oxide
 Dinitrogen Dioxide
 The Nitrosyl Halogenides
 Nitrosyl-Metal Complexes
 Nitrogen Dioxide
 Dinitrogen Tetroxide
 The Superoxide Ion and the Oxygen Molecule
 The Ozonide Ion
 Other Molecules Containing the Three-Electron Bond
 The Strucute of the Semiquinones and Related Substances
 Electron-deficient Substances
 The Structure of the Boranes
 Substances Containing Bridging Methyl Groups
 Carbonium Ions as Reaction Intermediates
 Complexes of Olefines and Silver Ion
 Ferrocene and Related Substances
 A Resonating-Bond Treatment of Ferrocene

Chapter 11 The metallic Bond

The Properties of Metals
 Metallic Valence
 The Metallic Orbital
 Interatomic Distances and Bond Numbers in metals

The Closest Packing of Spheres
 Cubic and Hexagonal Closest packing of Equivalent Spheres
 Closest-packed Structures Containing Nonequivalent Spheres
 The Atomic Arrangements in Crystals of Metallic Elements
 Closest-packed Structures
 Metal Structures Related to Closest-packed Structures
 The Cubic Body-centered Arrangement
 The Electronic Structure of the Transition Metals
 Metallic Radii and Hybrid Bond Orbitals
 Bond Lengths in Intermetallic Compounds
 Structures of Intermetallic Compounds Based on the Simple Elementary Structures
 Icosahedral Structures
 The γ -Alloys; Brillouin Polyhedra
 Electron Transfer in Intermetallic Compounds
 Compounds of Metals with Boron, Carbon, and Nitrogen
 Molecules and Crystals Containing Metal-Metal Bonds
 The Structures of Sulfide Minerals

Chapter 12 The hydrogen bond

The Nature of the Hydrogen Bond
 The Effect of the Hydrogen Bond on the Physical Properties of Substances
 Hydrogen Bonds Involving Fluorine Atoms
 Ice and Water; Clathrate Compounds
 Clathrate Compounds
 Water
 Alcohols and Related Substances
 Carboxylic Acids
 Symmetrical Hydrogen Bonds between Oxygen Atoms
 The Spectroscopic Study of the Hydrogen Bond
 Compounds Showing Strong Hydrogen-Bond Formation
 The Formation of Weak Intramolecular Hydrogen Bonds
 Factors Affecting Hydrogen-Bond Formation
 Hydrogen Bonds in Proteins
 Hydrogen Bonds in Nucleic Acids

Chapter 13 The Sizes of ions and the structure of ionic crystals

Interionic Forces and Crystal Energy
 The Born-Haber Thermochemical Cycle
 The Sizes of Ions: Univalent Radii and Crystal Radii
 The Alkali Halogenide Crystals
 Anion Contact and Double Repulsion
 The Cesium Chloride Arrangement
 A Detailed Discussion of the Effect of Relative Ionic Sizes on the Properties of the Alkali Halogenides
 Alkali Halogenide Gas Molecules
 The Structure of Other Simple Ionic Crystals
 The Alkaline-Earth Oxides, Sulfides, Selenides, and Tellurides
 Crystals with the Rutile and the Fluorite Structures; Interionic Distances for Substances of Unsymmetrical Valence Type
 The Effect of Ligancy on Interionic Distance
 The Effect of Radius Ratio in Determining the Relative Stability of Different Structures
 The Closest Packing of Large Ions in Ionic Crystals

The Principles Determining the Structure of Complex Ionic Crystals
 The Nature of the Coordinated Polyhedra
 The Number of Polyhedra with a Common Corner: The Electrostatic Valence Rule
 The Sharing of Polyhedron Corners, Edges, and Faces

Chapter 14 A summarizing discussion of resonance and its significance for chemistry

The Nature of Resonance
 The Relation between Resonance and Tautomerism
 The Reality of the Constituent Structures of a Resonating System
 The Future Development and Application of the Concept of Resonance

Appendices and Indices

I. Values of Physical Constants
 II. The Bohr Atom
 III. Hydrogenlike Orbitals
 IV. Russell-Saunders States of Atoms Allowed by the Pauli Exclusion Principle
 The Zeeman Effect
 The Paschen-Back Effect
 The Extreme Paschen-Back Effect

Group Theory and Chemistry, David M. Bishop, Dover Publications, Inc, New York, 1973

1. Symmetry

Introduction
 Symmetry and everyday life
 Symmetry and chemistry
 Historical sketch

2. Symmetry operations

Introduction
 The algebra of operators
 Symmetry operations
 The algebra of symmetry operations
 Dipole moments
 Optical activity Problems

3. Point groups

Introduction
 Definition of a group
 Some examples of groups
 Point groups
 Some properties of groups
 Classification of point groups
 Determination of molecular point groups
 The Rearrangement Theorem

4. Matrices

Introduction

Two Equivalent p Electrons
 The Landé g -Factor
 V. Resonance Energy
 VI. Wave Functions for Valence-Bond Structures
 VII. Molecular Spectroscopy
 Electronic Energy Curves; The Morse Function
 The Vibration and Rotation of Molecules
 Microwave Spectroscopy
 Electronic Molecular Spectra
 Raman Spectra
 VIII. The Boltzmann Distribution Law
 The Boltzmann Distribution Law in Classical Mechanics
 IX. Electric Polarizabilities and Electric Dipole Moments of Atoms, Ions, and Molecules
 Electric Polarization and Dielectric Constant
 Electronic Polarizability
 The Debye Equation for Dielectric Constant
 X. The Magnetic Properties of Substances
 Diamagnetism
 Paramagnetism
 Ferromagnetism
 Antiferromagnetism
 Ferrimagnetism
 XI. The Strengths of the Hydrohalogenic Acids
 XII. Bond Energy and Bond-Dissociation Energy

Definitions (matrices and determinants)
 Matrix algebra
 The matrix eigenvalue equation
 Similarity transformations
 Special matrices
 Method for determining the inverse of a matrix
 Theorems for eigenvectors
 Theorems for similarity transformations
 The diagonalization of a matrix or how to find the eigenvalue eigenvectors of a matrix
 Proof that $\det(A B) = \det(A)\det(B)$

5. Matrix representations

Introduction
 Symmetry operations on a position vector
 Matrix representations for \mathcal{O}_{2h} and \mathcal{O}_{3v}
 Matrix representations derived from base vectors
 Function space
 Transformation operators O_R
 A satisfactory set of transformation operators O_R
 A caution
 An example of determining O_R s and $D(R)$ s for the \mathcal{O}_{3v} point group using the d-orbital function space
 Determinants as representations
 Summary

Proof that, if $T = SR$ and $D(R)$, $D(S)$, and $D(T)$ are found by consideration of R , S , T on a position vector, then $D(T) = D(S)D(R)$

Proof that the matrices in eqn 5-4.2 form a representation
 Proof that the matrices derived from a position vector are the same as those derived from a single set of base vectors
 Proof that the operators O_R are (a) linear, (b) homomorphic with R
 Proof that the matrices derived from O_R form a representation of the point group
 Problems

6. Equivalent and reducible representations

Introduction
 Equivalent representations
 An example of equivalent representations
 Unitary representations
 Reducible representations
 Proof that the transformation operators O_J will produce a unitary representation if orthonormal basis functions are used
 The Schmidt orthogonalization process
 Proof that any representation is equivalent, through a similarity transformation, to a unitary representation

7. Irreducible representations and character tables

Introduction
 The Great Orthogonality Theorem
 Characters
 Number of times an irreducible representation occurs in a reducible one
 Criterion for irreducibility
 The reduction of a reducible representation
 Character tables and their construction
 Notation for irreducible representations
 An example of the determination of the irreducible representations to which certain functions belong
 The Great Orthogonality Theorem
 Proof that $\sum_{\mu} n_{\mu}^2 = g$
 Proof that the number of irreducible representations r equals the number of classes k
 Problems

8. Representations and quantum mechanics

Introduction
 The invariance of Hamiltonian operators under O_R
 Direct product representations within a group
 Vanishing integrals
 Proof of eqns 8-2.12 to 8-2.15
 Problems

9. Molecular vibrations

Introduction
 Normal coordinates
 The vibrational equation

The Γ° (or Γ^{30}) representation
 The reduction of Γ°
 The classification of normal coordinates
 Further examples of normal coordinate classification
 Normal coordinates for linear molecules
 Classification of the vibrational levels
 Infra-red spectra
 Raman spectra
 The infra-red and Raman spectra of CH_4 and CH_3D
 Combination and overtone levels and Fermi resonance
 Proof of eqns 9-2.17 and 9-2.18 A.9-2
 Proof that $D^{\circ}(R) = C^{-1}D^{\circ}(R)C$
 Symmetry properties of polarizability functions
 Problems

10. Molecular orbital theory

Introduction
 The Hartree-Fock approximation
 The LCAO MO approximation
 The π -electron approximation
 Hückel molecular orbital method
 Hückel molecular orbital method for benzene
 Hückel molecular orbital method for the trivinylmethyl radical
 Atomic units
 An alternative notation for the LCAO MO method
 Proof that the matrix elements of an operator H which commutes with all O_R of a group vanish between functions belonging to different irreducible representations
 Problems

11. Hybrid orbitals

Introduction
 Transformation properties of atomic orbitals
 Hybrid orbitals for σ -bonding systems
 Hybrid orbitals for π -bonding systems
 The mathematical form of hybrid orbitals
 Relationship between localized and non-localized molecular orbital
 Problems

12. Transition metal chemistry

LCAO MOs for octahedral compounds
 LCAO MOs for tetrahedral compounds
 LCAO MOs for sandwich compounds
 Crystal field splitting
 Order of orbital energy levels in crystal field theory
 Correlation diagrams
 Spectral properties
 Magnetic properties
 Ligand field theory
 Spectroscopic states and term symbols for many-electron atoms or ions
 Problems

Appendix I: Character tables

Introduction to Molecular Spectroscopy, G. M. Barrow, McGraw-Hill Book Company, Inc., Tokyo, Japan, 1962

Introduction

Classifications of Spectroscopy
Wavelength, Frequency, and Energy of Radiation

Chapter 1 Introduction to the Theoretical Treatment of Molecular Systems

The Recognition of Quantum Restrictions
The Bohr Theory of the Hydrogen Atom
The Wave Nature of Particles
The Time-independent Schrödinger Equation
The Particle-in-a-box Problem
Normalization of Wave Functions
Orthogonality
Symmetry Properties of Wave Functions
The Quantum-mechanical Average
The Boltzmann Distribution

Chapter 2 The vibrational Energies of a Diatomic Molecule

The Vibrations of a Single Particle (Classical)
The Vibrations of Two Particles Connected by a Spring (Classical)
The Potential-energy Function for a Chemical Bond
The Quantum-mechanical Solutions of the Harmonic Oscillator
Vibrational Absorption Spectra of Diatomic Molecules
The Anharmonicity of Molecular Vibrations

Chapter 3 The Rotational Energies of Linear Molecules

The Rotation of a Linear System (Classical)
The Rotation of a Linear System (Quantum Mechanical)
Rotational Energy-level Populations
Rotational Spectra of Rigid Linear Molecules
The Nonrigid Rotor

Chapter 4 The Absorption and Emission of Radiation

The Time-dependent Schrödinger Equation
Induced Quantum Transitions
The Interaction of Electromagnetic Radiation with a Molecular System
Comparison with Experimental Quantities
The Basis of Selection Rules
The Integrated Absorption Coefficient for a Transition of a Particle in a Box
Induced Emission and Induced Absorption
The Integrated Absorption Coefficient for a Vibrational Transition
The Intensities of Absorption Bands due to Electronic Transitions

Chapter 5 Rotational Spectra

Rotational Selection Rules for Linear Molecules
The Stark Effect in Molecular Rotation Spectra

Molecular Rotation—Nuclear-spin Coupling
The Positive and Negative Character of the Wave Functions of Linear Molecules
Symmetric-Antisymmetric Character and Statistical Weight of Homonuclear Linear Molecules
The Rotational Energy of Symmetric-top Molecules
Selection Rules and Spectra of Symmetric-top Molecules
Results from Analyses of Rotation Spectra of Symmetric-top Molecules
The Energy Levels of an Asymmetric-top Molecule
Selection Rules, Spectra, and Structure Results for Asymmetric-top Molecules

Chapter 6 The Vibrations of Polyatomic Molecules

The Number of Independent Vibrations of a Polyatomic Molecule
The Nature of Normal Vibrations and Normal Coordinates
Quantum-mechanical Treatment of the Vibrations of Polyatomic Molecules
The Symmetry Properties of Normal Coordinates

Chapter 7 Rotation-Vibration Spectra

Selection Rules and Transitions for the Rigid Rotor-Harmonic Oscillator Model
The Relative Intensities of the Components of a Rotation-Vibration Absorption Band
Coupling of Rotation and Vibration
Parallel Bands of Symmetric-top Molecules
Perpendicular Bands of Symmetric-top Molecules

Chapter 8 Molecular Symmetry and Group Theory

Symmetry Elements, Symmetry Operations, and Point Groups
Symmetry Operations on Molecular Motions
Symmetry Species and Character Tables
The Nature of a Group
The Symmetry Operations as a Group
Representations of a Group
Reducible and Irreducible Representations
The Irreducible Representations as Orthogonal Vectors
Characters of Representations
Classes
Analysis of a Reducible Representation
The Characters for the Reducible Representation of Molecular Motion
Number on Normal Modes of Various Symmetry Types
The Infrared Active Fundamentals
The Symmetry of Group Vibrations

Chapter 9 Calculation of Vibrational Frequencies and Normal Coordinates of Polyatomic Molecules

The Kinetic-energy Expressions for a Polyatomic Molecule
The Potential-energy Expression for a Polyatomic Molecule

Use of Lagrange's Equation in Molecular-vibration Problems
The Stretching Vibrations of a Linear Triatomic Molecule
Use of Symmetry in Vibrational Problems
Solution of Vibrational Problems in Internal Coordinates by the Method of Wilson
Formation of the G Matrix by a Vectorial Method
Use of Symmetry Coordinates in Wilson's Method

Chapter 10 The Electronic Spectra of Diatomic Molecules

The Vibrational Structure of Electronic Bands
Rotational Structure of Electronic Bands
Electronic States of Atoms
Electron Orbitals in Diatomic Molecules

Electronic States of Diatomic Molecules
Potential-energy Curves for Electronic States of Diatomic Molecules

Chapter 11 Electronic Spectra of Polyatomic Molecules

Electronic States of Localized Groups
Electronic Transitions and Absorption Bands
Conjugated Systems by the Free-electron Model
Electronic States and Transitions in Aromatic Systems
Electron Orbitals of Coordination Compounds
Electronic States of Coordination Compounds
Nonradiative Processes
Fluorescence