

VI REUNION NACIONAL DE ESPECTROSCOPIA

PROGRAMA

**CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES
CIENTIFICAS**

2-7 octubre 1978

Serrano, 121.- Madrid (6)

Depósito legal M - 29296 - 1978

S.E.D.O., Serrano, 121, Madrid - 6



**75 ANIVERSARIO DE LA REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA
DE FISICA Y QUIMICA**

MADRID, 2-7 Octubre 1978

PROGRAMA

Grupo Español de Espectroscopia

GRUPO ESPAÑOL DE ESPECTROSCOPIA

Presidente:

D. Jesús Morcillo

Vicepresidentes:

D. Francisco Alvarez

D. José M^a Serratosa

Secretario:

D. Fernando R. Rico

Vocales:

D. Enrique Asensi

D. Antonio Hidalgo

D. José Manuel Orza

D. Miguel Roca

COMITE ORGANIZADOR DE LA VI REUNION NACIONAL DE ESPECTROSCOPIA

D. Francisco Alvarez

D. Enrique Asensi

D^a Juana Bellanato

D. José V. García-Ramos

D. Apolo Gómez-Morillas

D. Antonio Hidalgo

D. Jesús Morcillo

D. Ivan Recarte

D. Fernando R. Rico

D. Miguel Roca

D. José M. Serratosa

PROGRAMA GENERAL

Domingo, 1 de octubre

17.00 - 20.00 Recogida de la documentación. Instituto de Optica, Serrano, 121

Lunes, 2 de octubre

9.00 - 10.00 Recogida de la documentación. Instituto de Optica, Serrano, 121
10.00 Sesión conmemorativa del 75 Aniversario de la R.S.E.F.Q. Universidad.

16.00 - 16.45 Conferencia general
16.45 - 17.00 Descanso
17.00 - 17.30 Conferencia específica
17.30 - 19.00 Sesiones científicas
20.00 Recepción ofrecida por el C.S.I.C.

Martes, 3 de octubre

9.00 - 9.45 Conferencia general
9.45 - 10.00 Descanso
10.00 - 11.30 Sesiones científicas
11.30 - 11.45 Descanso
11.45 - 12.15 Conferencia específica
12.15 - 12.30 Descanso
12.30 - 13.30 Sesiones científicas
16.00 - 16.30 Conferencia específica
16.30 - 16.45 Descanso
16.45 - 18.00 Sesiones científicas
18.00 Asamblea del Grupo Español de Espectroscopía
22.00 Concierto

Miércoles, 4 de octubre

10.00 - 20.00 Excursión optativa para los participantes en la VI Reunión

Jueves, 5 de octubre

9.00 - 9.45 Conferencia general
9.45 - 10.00 Descanso
10.00 - 11.30 Sesiones científicas
11.30 - 11.45 Descanso
11.45 - 12.15 Conferencia específica
12.15 - 12.30 Descanso
12.30 - 13.30 Sesiones científicas
16.00 - 16.30 Conferencia específica
16.30 - 16.45 Descanso
16.45 - 18.00 Sesiones científicas
20.00 Recepción ofrecida por la Universidad Complutense o por el Exmo. Ayuntamiento de Madrid

Viernes, 6 de octubre

9.00 - 9.45 Conferencia general
9.45 - 10.00 Descanso
10.00 - 11.30 Sesiones científicas
11.30 - 11.45 Descanso
11.45 - 12.15 Conferencia específica
12.15 - 12.30 Descanso
12.30 - 13.30 Sesiones científicas
13.30 - 14.30 Mesas redondas
17.00 Junta general de la R.S.E.F.Q. y Clausura
21.30 Banquete oficial

Sábado, 7 de octubre

10.00 - 20.00 Excursión organizada por la R.S.E.F.Q.

PROGRAMA CIENTIFICO

Salas A y B: Serrano, 121

Sala C: Serrano, 113

LUNES, 2 OCTUBRE 1978

10,00 Sesión conmemorativa del 75 Aniversario de la R.S.E.F.Q.

SALA C

16,00-16,45 Conferencia general
Presidente: A. Sanz Medel

G.F. Kirkbright. Imperial College. England.
"Optoacoustic Spectrometry for examination of solid and liquid samples".

SALA A

17,00-17,30 Conferencia específica
Presidentes: J.I. Fernández-Alonso
O. García-Riquelme

S. Slavin. Perkin-Elmer Corporation. Connecticut. U.S.A.
"Optimization of Atomic Absorption Methods for Rapid Sequential Multi-element Analysis".

17,30-19,00 Sesiones científicas. Espectroscopía de transiciones electrónicas.
Presidentes: J.I. Fernández-Alonso
O. García-Riquelme.

F. Gómez-Beltrán, L. Pueyo y M. Bermejo
"Crystal field parametrization of optical spectra of transition metal ions in crystal lattices in terms of single - ξ , Slater-type, wavefunctions. Applications to octahedral and pseudooctahedral clusters"

J. Bermúdez y E. Vila.
"Estudio para la aplicación de la absorciometría diferencial de rayos X en la discontinuidad de absorción a la determinación de uranio en disoluciones"

A. Costela, J.M. Figuera, M. Martín y L. Valle
"El laser de CH_3I . Influencia de los gases inertes y de la longitud de onda de fotólisis".

S. Terol
"Microdeterminación de peróxido de hidrógeno por quimioluminiscencia"

S. Terol, A. Martín y J.L.H. Neira
"Espectros de excitación, emisión y estimulación luminiscentes de sulfuros alcalino-térreos del tipo MS: Ce, Sm"

MARTES, 3 OCTUBRE 1978

SALA C

9,00- 9,45 **Conferencia general**
Presidente: *J. Bellanato*

P. Klaeboe. Universidad de Oslo. Noruega.
"High Pressure Vibrational Spectroscopy and Conformational Analysis"

SALA A

10,00-11,30 **Sesiones científicas. Espectroscopía de vibración-rotación**
Presidentes: *J. Morcillo*
Ma V. García Pérez

P. Carmona
"Espectros de vibración y estructura del ácido 2,6 - piridindicarboxílico"

J. Bellanato, F. Florencio, C. Avendaño, P. Ballesteros y M. Martínez
"Estudio por espectroscopía IR y difracción de rayos X de enlaces de hidrógeno fuertes en espirohidantoínas"

M. Gil, J. Morcillo y D. Escolar
"Espectros infrarrojos de oxo e hidroxipiridinas"

P.F. González-Díaz e I. Cifuentes
"Estudio por espectroscopía infrarroja de los enlaces O-H...O y O-H...X en compuestos del tipo $\text{Ca}_{10}(\text{YO}_4)_6 (\text{OH})_2$ y $\text{Ca}_{10}(\text{YO}_4)_6 (\text{OH})_{2-x}\text{X}$ "

M. Santos y P.F. González-Díaz
"Witloquita en cálculos"

G. Munuera, V. Rives-Arnáu y P. Malet
"Interacción de H_2 y CO con complejos de Rh (I) soportados: Estudio por infrarrojo"

SALA A

11,45-12,15 **Conferencia específica**
Presidentes: *D. Escolar*
S. Montero

R. Escribano. Instituto de Estructura de la Materia. C.S.I.C. Madrid
"Espectroscopía Laser-Stark"

12,30-13,30 **Sesiones científicas. Espectroscopía de vibración-rotación**
Presidentes: *D. Escolar*
S. Montero

J.V. García-Ramos y P. Carmona
"Adsorción de aminoácidos en fosfato cálcico apatítico. Estudio por espectroscopía infrarroja"

F. Bravo-Abad y J. Bellanato
"Aislamiento del complejo ácido dipicolínico-calcio de esporas bacterianas. Estudio por espectroscopía infrarroja"

J.A. Leal, P. Rupérez, B. Gómez-Miranda y J. Bellanato
"Aplicación de la espectroscopía infrarroja al estudio de polisacáridos fúngicos"

P. Carmona, J. Bellanato, A. Hidalgo, S. Martín-Aparicio y C. Sender
"Estudio por espectroscopía infrarroja del aceite de lúpulo"

SALA B

16,00-16,30 **Conferencia específica**
Presidentes: *Y.G. Smeyers*
S. Terol

R. Corbalán. Dpto. de Física Fundamental. Universidad Autónoma de Barcelona
"Correcciones radiativas en átomos originados por absorción y emisión estimulada"

16,45-18,00 **Sesiones científicas. Espectroscopía de transiciones electrónicas**
Presidentes: *Y.G. Smeyers*
S. Terol

E. Bernabeu y J.M. Alvarez
"Interacciones cesio-gas. Secciones eficaces de colisión"

E. Bernabeu y A. Cavero
"Señales de fluorescencia resonante en anticruzamientos múltiples de subniveles magnéticos hiperfinos"

E. Bernabeu y J. Pelayo
"Relajación de spin de vapores alcalinos en presencia de campos magnéticos elevados"

E. Bernabeu y J.C. Amaré
"Simulación numérica de la evolución longitudinal de spin en sistemas alcalino-gas bombeados ópticamente"

A. Pardo, J.M. López, F.R. Rico y J.I. Fernández Alonso
"Fluorescencia inducida por laser y doble resonancia óptica-óptica en moléculas diatómicas"

SALA A

16,45-18,00 **Sesiones científicas. Espectroscopía de vibración-rotación**
Presidentes: *J. Herranz*
E. Gallego

M^a P. Ríos, M. Fernández y J. Morcillo
"Algunas mejoras en el cálculo teórico de la intensidad en infrarrojo de la banda de tensión del grupo carbonilo"

M^a V. García Pérez, A. Hernanz y J. Morcillo
"Intensidades en infrarrojo de la banda de tensión C=O de fluor y cloroacetatos de etilo"

F.J. Olivares del Valle y A. Requena Rodríguez
"Tratamiento vibracional simplificado de la autoasociación de alcoholes"

Y.G. Smeyers y A. Hernández Laguna
"Determinación teórica del espectro de rotación interna del tolueno y fenol"

A. Requena, J.A. Losana, A. Fuster y A. Serna
"Algoritmo para la determinación de la función momento dipolar en moléculas diatómicas"

18,00 **Asamblea del Grupo Español de Espectroscopía**

JUEVES, 5 OCTUBRE 1978

SALA C

9,00- 9,45 **Conferencia general**
Presidente: *F. Alvarez*

P. W. J. M. Boumans. Philips Research Laboratories.
Holanda.

"Inductively coupled plasma-atomic Emission Spectroscopy: its present and future position in Analytical Chemistry"

SALA A

10,00-11,30 **Sesiones científicas**. Aplicaciones analíticas de la espectroscopía atómica
Presidentes: *E. Asensi*
A. Cabrera

V. Berenguer, J.L. Guiñón y M. de la Guardia
"Nuevas aplicaciones de la técnica de espectrometría de absorción atómica de emulsiones"

J. Aznárez, J.F. Cacho y C. Nerin
"Determinación de antimonio por espectrofotometría de absorción atómica, previa extracción de su bromo-complejo con trioctilamina en metil-isobutil-cetona"

M.C. Martínez Para, T.A. Masoud y E. Torija
"Determinación de cobre y hierro en verduras por absorción atómica"

J.L. Peral Fernández y J.M. González Estévez
"Análisis de cafés solubles por espectrofotometría de absorción atómica"

P. García Puertas, A.M. Taisir y A. García Sánchez
"Metales contaminantes en cervezas"

A. Sancho Muñoz
"Un sistema automático de absorción atómica multielemento"

SALA B

10,00-11,30 **Sesiones científicas**. Espectroscopía de transiciones electrónicas
Presidentes: *E. Bernabeu*
J. Campos

F. Gómez Beltrán, A. Salas y A. Valero
"Método de resolución por ordenador de espectros electrónicos"

O. García-Riquelme
"Revisión y nuevos niveles energéticos del espectro Ni III"

S. Ortí y O. García-Riquelme
"Revisión y extensión del espectro Cr II"

L. Iglesias, O. García-Riquelme y F.R. Rico
"La configuración electrónica d^5d "

J. Suarez, J. Mazankine, F.R. Rico y S. Ortí
"Empleo de tiristores para controlar fuentes luminosas utilizadas en la obtención de espectros"

M.J. Otero
"Fosforescencia del metaborato de cinc activado con terbio. Evaluación de los parámetros E y s "

SALA A

11,45-12,15 **Conferencia específica**
Presidentes: *M. Roca*
J.L. Peral

A. Sanz Medel. Dpto. Química Analítica. Universidad Complutense. Madrid.
"Aplicaciones de los complejos de ligandos mixtos al análisis por espectrofotometría de absorción"

12,30-13,30 Sesiones científicas. Aplicaciones analíticas de la espectroscopía atómica

Presidentes: *M. Roca*
J.L. Peral

C. Alvarez Herrero y M.A. Palacios Corvillo
"Variaciones en el contenido metálico del cabello de individuos afectados de silicosis"

E. Asensi y A. Sampedro
"Análisis espectroquímico de impurezas en las aleaciones Cu-Ni resistentes a la corrosión"

M. Bonilla, C. Cámara y A. Sanz Medel
"Determinación espectrofotométrica de niobio en aceros y aleaciones: métodos de ataque"

A. Cabrera-Martín, J.S. Durand-Alegría y J.L. Peral-Fernández
"Estudio espectrofotométrico y espectrofluorimétrico de la reacción del ión Cu (II) con 2,2'-azodifenol"

SALA B

12,30-13,30 Sesiones científicas. RMN y otros métodos espectroscópicos

Presidentes: *F. Gómez Beltrán*
J. Santoro

F. Peral, E. Gallego y J. Morcillo
"Estudio por espectroscopía UV de la influencia del pH en la autoasociación de bases, nucleósidos y nucleótidos"

A. Torres, F. Castaño y J.M. Alvario
"Energy transfer from excited states of a charge-transfer complex"

F. Castaño e I. López Arbeloa
"Relajación molecular electrónica en sistemas en no-equilibrio"

M.N. Sánchez Rayo, E. Martínez, I. Uretxa y F. Castaño
"Fotoquímica y fotofísica del di-benzoil-etileno"

SALA A

16,00-16,30 Conferencia específica

Presidentes: *J. Aznárez*
C. Alvarez Herrero

J.L. Jiménez Seco. Sección de Análisis. C.E.N.I.M. Madrid
"La normalización analítica a nivel nacional e internacional"

16,45-17,45 Sesiones científicas. Aplicaciones analíticas de la espectroscopía atómica

Presidentes: *J. Aznárez*
C. Alvarez Herrero

R. Cela y J.A. Pérez-Bustamante
"Determinación de trazas de plomo en el aditivo alimentario carboximetilcelulosa sódica"

J.L. Jiménez, N.B. Aurelio y L. Rivoir
"Las ferroaleaciones y su análisis químico por espectrometría de fluorescencia de rayos X"

A. Alonso Fernández
"Detergentes: su análisis e incidencia en la contaminación y corrosión"

I. Cerqueira
"Detección de elementos ligeros por fluorescencia de rayos X"

SALA B

16,45-18,45 Sesiones científicas. Espectroscopía de transiciones electrónicas

Presidentes: *F.R. Rico*
L. Iglesias

Y.G. Smeyers y A.M. Bruceña
"Aplicación del modelo Hartree-Fock semi-proyectado a las moléculas de LiH y Li₂"

M. Ortiz y J. Campos

"Población y desexcitación de los niveles de $n=3,4,5$ y 6 del átomo de hidrógeno"

P. Thomas y J. Campos

"Vidas medias experimentales de algunos niveles s y p del sodio"

F. Arqueros y J. Campos

"Estudio de la desexcitación de los subniveles $V=1,2,3,4$ y 5 del estado $A^2\Pi$ del CO^+ "

C. Herrán y J. Campos

"Vidas medias de estados excitados del CO_2^+ "

P. Martín y J. Campos

"Comparación entre el valor experimental y los calculados para la vida media del nivel $3d(3/2)_2$ del Nel "

J.A. Cabrera y J. Campos

"Probabilidades de transición relativas en Xel "

V. Fonseca y J. Campos

"Determinación experimental de vidas medias y probabilidades de transición en el átomo de KrI "

VIERNES, 6 OCTUBRE 1978

SALA C

9,00- 9,45 Conferencia general

Presidente: **A. Hidalgo**

A. Novak. C.N.R.S. Francia

"Applications récentes de la Spectroscopie Infrarouge et Raman à l'étude des molécules et des cristaux"

SALA A

10,00-11,30 Sesiones científicas. RMN y otros métodos espectroscópicos

Presidentes: **M. Rico**

G. Munuera

J. Sanz y E. Ruiz-Hitzky

"Estudio por IR y RMN del agua interlamilar de la magadiita"

T. Carreño, J. Sanz y J.R. Gancedo

"Oxidación del Fe^{+2} octaédrico en una biotita aluminica"

F.J. Bermejo, J. García, E. Martínez y M. Rico

"Conformación molecular de los antibióticos puromicina, gougerotina, blasticidina S y amicitina"

J. Santoro, H.P. Juretschke y H. Rüterjans

"Estudio de ribonucleasa A por espectroscopía de RMN de carbono-13"

M.A. Rebolledo y J.J. Sanz

"Obtención de información espectroscópica de señales moduladas periódicamente, mediante estadística de fotones"

F. Gómez-Beltrán y A. Larena

"Efecto de la C-sustitución en la espectroscopía IR y VIS-UV de complejos Ni (etileno-diamina C-sustituida) $_2$ $|^{2+}$ "

SALA B

10,00-11,00 **Sesiones científicas. RMN y otros métodos espectroscópicos**

Presidentes: *J. Bermúdez*

A. Corróns

H. Alcalá, C. Lupiani y J. Sancho

"Un estudio Mössbauer de la cinética de reacción de complejos Fe (III) y 1,10-fenantrolina"

J. Tejada y J. Fontcuberta

"Fuentes Mössbauer intensas"

F. Mata y J.L. Alonso

"Espectro de microondas, parámetros rotacionales y estructura molecular del cloruro de propionilo"

A. Corróns y C. Carreras

"Escala espectrorradiométrica absoluta"

SALA A

11,45-12,15 **Conferencia específica**

Presidentes: *J.M. Serratosa*

P. Carmona

J. Sanz. Sección de físico-química mineral. Instituto de Edafología. C.S.I..C. Madrid.

"Resonancia Magnética Nuclear en sólidos no metálicos"

12,30-13,30 **Sesiones científicas. Espectroscopía de vibración-rotación**

Presidentes: *J.M. Serratosa*

P. Carmona

M.A. López Bote y S. Montero

"Cálculo de constantes de fuerza a partir de intensidades Raman en estado sólido"

F. Rull, A. Torres y J.A. de Saja

"Estudio por espectroscopía Raman del papel del agua de hidratación en sulfatos de lantánidos (III) monocristalinos"

J.M. Pastor y J.A. de Saja

"Análisis vibracional por espectroscopía Raman del polideceno cristalino"

J. Vicioso

"Ampliación de la gama de aplicaciones de la espectrofotometría de infrarrojo y ultravioleta visible mediante el empleo de microprocesador"

13,30-14,30 **Mesas redondas**

17,00

Junta General de la R.S.E.F.Q. y Clausura