

XIV REUNION NACIONAL DE ESPECTROSCOPIA

PROGRAMA



*Baeza (Jaén)
18-23 Septiembre 1994*

XIV REUNION NACIONAL DE ESPECTROSCOPIA

PROGRAMA

Baeza (Jaén)
18-23 Septiembre 1994

Grupo Español
de Espectroscopia



Edita:

Grupo Español de Espectroscopía
SOCIEDAD ESPAÑOLA DE OPTICA
Serrano, 121
28006 MADRID

Colabora:



INSTITUTO DE OPTICA
"DAZA DE VALDES"
Serrano, 121 - MADRID

GRUPO ESPAÑOL DE ESPECTROSCOPIA

Presidente:

Juana Bellanato Fontecha

Vicepresidentes:

Rafael Escribano Torres

Alfredo Sanz Medel

Secretario:

Concepción Domingo Maroto

Vocales:

Pedro Carmona Hernández

Angel Luis Esteban Elum

Miguel de la Guardia Cirugeda

Antonio Pardo Martínez

Concepción Pérez Conde

Alberto Quejido Cabezas

**COMITE ORGANIZADOR DE LA XIV REUNION
NACIONAL DE ESPECTROSCOPIA**

Presidente:

Juana Bellanato Fontecha

Secretario:

Concepción Domingo Maroto

Vocales:

Marta Bruix Bayés

Carmen Cámara Rica

Pedro Carmona Hernández

Rafael Escribano Torres

Angel Esteban Elum

M^a Victoria García Pérez

José Vicente García Ramos

Miguel de la Guardia Cirugeda

Antonio Pardo Martínez

Concepción Pérez Conde

Alberto Quejido Cabezas

Alfredo Sanz Medel

COMITE LOCAL

Presidente:

Fernando Márquez López

Vocales:

Manuel Fernández Gómez

M^a Paz Fernández de Liencres de la Torre

Juan Jesús López González

Manuel Melguizo Guijarro

Antonio Molina Díaz

Miguel Moreno Carretero

M^a Isabel Pascual Reguera

José Antonio Ruiz López

Francisco Tudela Salvador

ORGANISMOS PATROCINADORES

- Ministerio de Educación y Ciencia
- Consejo Superior de Investigaciones Científicas
- Universidad de Jaén
- Junta de Andalucía
- Universidad Internacional de Andalucía
- Diputación de Jaén
- Excmo. Ayuntamiento de Jaén
- Excmo. Ayuntamiento de Baeza
- Instituto de Optica (CSIC)

EMPRESAS COLABORADORAS

- Baird Europe B.V.
- Bruker Española, S.A.
- Carburos Metálicos
- EG&G Instruments España
- Fisons Instruments España
- Iberlaser, S.A.
- Lasing, S.A.
- Caja Sur

INFORMACION GENERAL

El Grupo Español de Espectroscopía, con la colaboración del Departamento de Química Física y Química Analítica de la Facultad de Ciencias Experimentales de la Universidad de Jaén, organiza la **XIV Reunión Nacional de Espectroscopía**, que tendrá lugar en Baeza (Jaén) del 18 al 23 de Septiembre de 1994.

LUGAR DE LA REUNION

La Reunión tendrá lugar en la sede de Baeza de la

Universidad Internacional de Andalucía
Pza. Santa María, s/n. 23440 Baeza (Jaén)
Tfno: 953-742775/742875; Fax: 953-742975

SECRETARIA DE LA REUNION

Durante los días de la Reunión, la Secretaría estará abierta en la Universidad Internacional de Andalucía en Baeza durante las horas de trabajo programadas. El domingo, día 18 de Septiembre, el horario de Secretaría será de 18.00 a 20.30 horas.

CUOTAS DE INSCRIPCION

Los participantes que en su día no hubieran realizado el pago de la cuota de inscripción, deberán hacerlo en la Secretaría de la Reunión en Baeza. Las cuotas de inscripción a pagar en Baeza son:

- Miembros de la SEDO, de la R.S.E. de Física o de la R.S.E. de Química 27.600 Pts.
- No miembros 36.000 Pts.
- Estudiantes de tercer ciclo
 - Miembros de la SEDO, de la R.S.E. de Física o de la R.S.E. de Química 12.000 Pts.
 - No miembros 15.600 Pts.
- Acompañantes 12.000 Pts.

Las cuotas de inscripción incluyen la asistencia a los actos científicos y sociales, la documentación y la asistencia a la Cena Oficial de la Reunión.

AVISOS Y CORRESPONDENCIA

Los anuncios generales, modificaciones en el programa, etc. serán expuestos en un tablero situado en la Secretaría de la Reunión. Se ruega a los participantes que lo consulten periódicamente. Durante los días de la Reunión, la correspondencia relativa a la misma, incluidos los mensajes particulares, deberá dirigirse a la sede la Universidad Internacional de Andalucía en Baeza (ver "Lugar de la Reunión").

EXPOSICION DE INSTRUMENTOS

Durante los días de la Reunión, las empresas colaboradoras relacionadas con los temas de la misma expondrán algunos instrumentos y equipos, así como material informativo sobre las últimas novedades comerciales.

NORMAS PARA LA PRESENTACION DE LAS COMUNICACIONES

La distribución de las comunicaciones científicas y la duración de las mismas, incluida la discusión, será:

- Conferencias Generales (4)	45 minutos
- Conferencias Específicas (11)	30 minutos
- Comunicaciones Orales (14)	15 minutos

Se podrán utilizar transparencias y/o diapositivas. Estas últimas, de formato 5x5, deberán ser entregadas antes de cada Sesión al personal encargado de las mismas, numeradas e identificadas.

- PANELES

Los paneles deberán ser confeccionados incluyendo: título del trabajo, autores, centro de trabajo, dirección, texto de la comunicación, gráficas y cuanta información sea pertinente. La superficie total podrá ser de hasta 140 cm. de alto y 100 cm. de ancho. La colocación de los paneles se realizará por la mañana y permanecerán expuestos durante todo el día.

- MESAS REDONDAS

Lunes 19 de Septiembre, 17.30-18.30 horas:

"Espectroscopía y Medio Ambiente"

Martes 20 de Septiembre, 18.00-19.00 horas:

"Especiación"

Jueves 22 de Septiembre, 17.00-18.00 horas:

"Espectroscopía de Moléculas Biológicas"

EXCURSION

El miércoles día 21 de Septiembre está prevista una excursión a la Sierra de Cazorla, en autocar y con comida incluida. Los vales para la misma podrán adquirirse en la Secretaría hasta las 12.00 horas del lunes día 19.

CENA OFICIAL DE LA REUNION

La Cena, incluida en la cuota de inscripción, tendrá lugar el jueves 20 de Septiembre, a las 21.00 horas, en el Restaurante Valdevira, Baeza. **Se ruega confirmar la asistencia a la Cena antes de las 12.00 horas del lunes día 19.**

PROGRAMA GENERAL

DOMINGO, 18 de Septiembre

18.00 - 20.30	Entrega de la documentación en la sede de la Universidad Internacional de Andalucía en Baeza
20.00	Recepción de bienvenida.

LUNES, 19 de Septiembre

9.00 - 9.30	Sesión de Apertura
9.30 - 10.15	Conferencia General (Prof. C. Demuynck)
10.45 - 11.15	Conferencia Específica (F.R. Rico)
11.15 - 12.15	Comunicaciones Orales
12.15 - 13.30	Paneles
16.30 - 17.00	Conferencia Específica (J. Cernicharo)
17.00 - 17.30	Paneles
17.30 - 18.30	Mesa Redonda
20.00	Acto Social

MARTES, 20 de Septiembre

9.00 - 9.45	Conferencia General (Prof. A. Pastore)
9.45 - 10.15	Conferencia Específica (J. Jiménez-Barbero)
10.45 - 11.15	Conferencia Específica (J.L. Doménech)
11.15 - 12.15	Comunicaciones Orales
12.15 - 13.30	Paneles
16.30 - 17.00	Conferencia Específica (M. de la Guardia)
17.00 - 17.30	Conferencia Específica (N. Ferrer)
17.30 - 18.00	Paneles
18.00 - 19.00	Mesa Redonda
20.00	Acto Social

MIÉRCOLES, 21 de Septiembre

Excursión a la Sierra de Cazorla

JUEVES, 22 de Septiembre

9.00 - 9.45	Conferencia General (Prof. G. Smulevich)
9.45 - 10.15	Conferencia Específica (P. Gómez)
10.45 - 11.15	Conferencia Específica (M. Santos)
11.15 - 12.15	Comunicaciones Orales
12.15 - 14.00	Paneles
16.30 - 17.00	Conferencia Específica (J. Juan Camacho)
17.00 - 18.00	Mesa Redonda
18.00 - 19.00	Asamblea del Grupo Español de Espectroscopía
21.00	Cena Oficial de la Reunión

VIERNES, 23 de Septiembre

9.00 - 9.45	Conferencia General (Prof. J.M. Mermet)
9.45 - 10.15	Conferencia Específica (C. Pérez Conde)
10.45 - 11.15	Conferencia Específica (A. Ríos)
11.15 - 11.45	Comunicaciones Orales
11.45 - 13.00	Paneles
13.00 - 14.00	Conclusiones de la Reunión y Clausura

PROGRAMA CIENTIFICO

LUNES, 19 de Septiembre

9.00 - 9.30 **Sesión de Apertura**

9.30 - 10.15 **Conferencia General**
Presidente: Rafael Escribano

CG1 C. Demuynck, Université des Sciences et Technologies de Lille (France)
"Millimeter wave spectroscopy of reactive species"

10.45 - 11.15 **Conferencia Específica**
Presidente: Manuel Fernández

CE1 F.R. Rico
"El Profesor Miguel A. Catalán"

11.15 - 12.15 **Comunicaciones Orales**

L1 M.M. Sanz, I. Tanarro, J. Santos, C. Domingo, D. Bermejo, C. Aroca
"Técnicas de doble modulación para Espectroscopía Infrarroja de radicales, iones moleculares y estados excitados de moléculas estables"

L2 J.F. Arenas, J.C. Otero, J. Soto
"Cálculo de propiedades espectroscópicas del TNM en estado de complejo activado"

L3 A. Rodero, M.C. Quintero, M.D. Calzada, A. Gamero, A. Sola
"Caracterización de la llama de plasma producida en Helio usando el nuevo excitador de microondas T.I.A. (Torch de inyección axial)"

L4 P. Martín, J.L.G. Santander, J. Campos
"Espectroscopía de ultravioleta de vacío de un plasma de aluminio producido por láser"

12.15 - 13.30 **Sesión de Paneles**

L5 G. Tejeda, B. Maté, J.M. Fernández-Sánchez, S. Montero
"Espectrómetro Raman monocanal/multicanal de muy altas prestaciones"

L6 B. Maté, G. Tejeda, S. Montero
"Caracterización de jets supersónicos mediante espectroscopía Raman"

- L7 C.L. Sigüenza, M. Santos, L. Díaz, P.F. González Díaz
"Estudio en tiempo real del fragmento CF_2 formado en la disociación multifotónica del CF_2Cl_2 inducida por dos longitudes de onda infrarrojas"
- L8 B. Hernández, J.M. Gavira, A. Hernanz, R. Navarro
"Espectros FT-IR y FT-Raman del 5'dAMP. Aplicación del método semiempírico PM3 para su asignación"
- L9 M.J. Martín-Delgado, M.I. Suero, A.L. Pérez-Rodríguez, A. Hernández-Laguna, V. Botella, R. Escribano
"Espectro vibracional teórico y de rotación interna de la pirazincarboxamida"
- L10 R. Mosteo, M.I. Suero, M.J. Martín Delgado, V. Botella, R. Escribano
"Determinación de campos de fuerza de compuestos orgánicos tribromados"
- L11 J.F. Arenas, A.S. Galvez, J.C. Otero, J. Soto
"Propiedades espectroscópicas del complejo activado metilazida-TS1"
- L12 J.F. Arenas, I. López Tocón, J.C. Otero, J.I. Marcos
"Espectro vibracional de trans-estilbeno"
- L13 M.V. García, M.I. Redondo, J.A.R. Cheda, M.J. Béjar
"Estudio vibracional de los cambios de fase en alcanos de Cu(II) y Pb(II)"
- L14 M. del Arco, M.V.G. Galiano, V. Rives, R. Trujillano
"Estudio por espectroscopía FT-IR de la estructura química de isopolivanadatos intercambiados en hidrotalcitas de Co-Cr"
- L15 J.M. López Fernández, A. Ríos, M. Valcárcel
"Determinación de aminas alifáticas totales mediante la integración de la extracción continua y la detección espectroscópica molecular"
- L16 R. Badía, M.E. Díaz García, A. Sanz-Medel
"Nueva fase sensora fosforescente a temperatura ambiente para oxígeno en mezclas gaseosas"
- L17 R. González-Pellicer, M. Llobat-Estelles, A.R. Maurí-Aucejo
"Curvas de contenido aparente: determinación de creatinina en plasma"
- L18 K.D. Khalaf, B.A. Hassan, A.E. Morales-Rubio, V. Carbonell, M. de la Guardia
"Un método limpio de análisis para la determinación de resorcinol"
- L19 Z. Bouhsain, B.A. Hassan, K.D. Khalaf, M. de la Guardia
"Determinación espectrofotométrica de resorcinol en medicamentos mediante reacción, en flujo, con p-aminofenol"

- L20 A. Molina-Díaz, M.J. Ayora-Cañada, M.L. Fernández de Córdoba
"Determinación de trazas de berilio con cromoazurol S por espectrofotometría en fase sólida"
- L21 A. Molina-Díaz, I. Ortega-Carmona, M.I. Pascual-Reguera, M.L. Fernández de Córdoba
"Desarrollo de un método automático para la determinación espectrofotométrica de ácido ascórbico"
- L22 A. Molina-Díaz, P. Ortega-Barrales, M.L. Fernández de Córdoba
"Desarrollo de un método de determinación de ácido ascórbico a nivel de ng/ml mediante espectrofotometría en fase sólida"
- L23 A. Molina-Díaz, I. Ortega-Carmona, M.L. Fernández de Córdoba, M.I. Pascual-Reguera, N. Ramos-Martos
"Determinación espectrofotométrica automática de hierro usando ferrocina como reactivo"
- L24 A. Molina-Díaz, A. Ruiz-Medina, M.L. Fernández de Córdoba
"Aplicación de la espectrofotometría en fase sólida a la determinación de hierro a nivel de ng/ml"
- L25 N. Velasco García, R. Pereiro García, M.E. Díaz García
"Sensor fosforescente de oxígeno basado en eritrosina B inmovilizada: aspectos mecanísticos y analíticos"
- L26 M^a D. Galindo Riaño, L. Vidal Valderas, M^a P. Martínez Martínez, M. García Vargas
"Especiación de fosfato en sedimentos acuáticos"
- L27 C. Cerezo, M.J.F. Cigoña, F. Sánchez Ferrero, F. Blanco, J. Campos
"Probabilidades de transición de líneas $4d^95p - 4d^95s$ de AgII"
- L28 M. Ortiz, A.M. González, J. Campos
"Estudio espectroscópico del antimonio mediante plasmas generados por láser"
- L29 M.D. Calzada, A. Gamero, A. Sola, A. Rodero
"Separación del equilibrio termodinámico local (LTE) para un plasma MIP de Ar en columna a presión atmosférica"
- L30 M.P. Galache, A.L. Esteban
"Efecto del cristal líquido sobre la estructura molecular del S-trioxano obtenida a partir de su espectro de RMN en fase nemática"
- L31 C. Toiron, M. Bruix, M. Rico
"Estudios por RMN 2D de protón de la estructura del complejo del antibiótico A82846B con el tripéptido AC₂-LYS-D-ALA-D-ALA en disolución acuosa"

L32 M.L. Jimeno, M. Alajarín, P. Sánchez-Andrada, P. Molina, J. Elguero
"Estudio conformacional de carbodiimidas cíclicas por Espectroscopía de RMN"

L33 I. Valverde, D. Salvatierra, J. Sánchez-Ruíz, F. Sánchez-Ferrando, C. Jaime, A. Virgili
"¹H-NMR studies in β -cyclodextrin complexes: three dimensional structure of complexes and enantiodifferentiation"

L34 C. Díaz, C.G. Blanco, M.D. Guillén
"Aplicación de la RMN de protón al estudio de breas de alquitrán de carbón"

16.30 - 17.00 **Conferencia Específica**
Presidente: Fernando Márquez

CE2 J. Cernicharo
"Espectroscopía molecular en el medio interestelar"

17.00 - 17.30 **Paneles (cont.)**

17.30 - 18.30 **Mesa Redonda**
"Espectroscopía y Medio Ambiente"

MARTES, 20 de Septiembre

9.00 - 9.45

Conferencia General
Presidente: Marta Bruix

- CG2 A. Pastore, EMBL, Heidelberg (Alemania)
"Structure and stability of titin modules"

9.45 - 11.15

Conferencias Específicas
Presidente: Pedro Carmona

- CE3 J. Jiménez-Barbero
"Uso de experimentos de efecto nuclear Overhauser transferido en el estudio de la interacción entre proteínas y carbohidratos"
- CE4 J.L. Doménech
"Espectroscopía infrarroja de alta resolución con láseres sintonizables"

11.15 - 12.15

Comunicaciones Orales

- M1 P. Adell, C. Jaime, A. Port, M. de Moragas, A. Virgili
"Applications of GOESY (Gradient Enhanced Nuclear Overhauser Effect Spectroscopy) experiment"
- M2 M. Bruix, J. Jiménez-Barbero, P. Cronet, M. Rico
"Estructura en disolución por RMN de un dodecasacarido del antígeno común enterobacteriano aislado de *escherichia coli*"
- M3 R. Bermejo, E.M. Talavera, J.M. Alvarez B. Quintero
"Análisis espectroscópico de biliproteínas procedentes de *spirulina platensis*"
- M4 A. Molina-Díaz, M.I. Pascual-Reguera, M.L. Fernández de Córdova, N.Ramos-Martos, I. Ortega-Carmona, P. Ortega-Barrales
"La espectrofotometría en fase sólida: una técnica espectrofotométrica para análisis a nivel de ng/ml e incluso de sub-ng/ml"

12.15 - 13.30

Sesión de Paneles

- M5 M.A. Muñoz, C. Carmona, P. Guardado, J. Hidalgo, M. Balón
"Estudio espectroscópico de las interacciones entre betacarbolinas y bases heteroaromáticas nitrogenadas"
- M6 D. Bermejo, R. Martínez, J. Santos
"Espectroscopía de doble resonancia Raman para el estudio de niveles vibracionales excitados"

- M7 L. Abad, D. Bermejo, R. Escribano, V.J. Herrero, J. Santos, I. Tanarro, G.D. Nivellini, L. Ramonat
"Espectros de pérdida Raman estimulada de etileno enfriado en chorro supersónico"
- M8 T. de los Arcos, C. Domingo, M.M. Sanz, I. Tanarro
"Espectroscopía infrarroja por Transformada de Fourier en el modo de barrido paso a paso"
- M9 T. de los Arcos, J.M. Castillo, C. Domingo, R. Escribano, M.A. Moreno, M. Gil, O. Puenteadura, M. Yela
"Espectros infrarrojo y ultravioleta del OClO: estudio en el laboratorio"
- M10 F. Márquez, M. Fernández, M.P. Fernández-Liencres, J.J. López, A. Navarro, J. Vázquez, J.C. Otero
"Espectros infrarrojo y Raman de la molécula de piridazina, revisados"
- M11 C. Rois, J.M. Orza
"Resonancia de Fermi en el CCl₄. El sobretono 2v₃ y bandas asociadas"
- M12 E. Muñoz, J.V. Ibarra
"Resolución de perfiles complejos en Espectroscopía FTIR de combustibles fósiles"
- M13 M. Baucells, N. Ferrer, P. Gómez, M. Roura
"Análisis cuantitativo de trifosfato y dodecilsulfonato en muestras de detergentes comerciales por IRTF"
- M14 L.M. Ballesteros, E.M. Talavera, B. Quintero, J.M. Alvarez
"Equilibrio mono-dianión de la fluoresceína en el estado excitado. Influencia de KCl al ajustar la fuerza iónica"
- M15 A. Cerdán-Vidal, M.D. San Martín Ciges, M. Llobat-Estellés, A.R. Maurí-Aucejo
"Resolución de muestras multicomponentes mediante el empleo de las curvas de contenido aparente: determinación de teofilina y cafeína en preparados farmacéuticos"
- M16 A. Cerdán-Vidal, A.R. Maurí-Aucejo, M. Llobat-Estellés, C. Pascual-Martí
"Identificación de anfetaminas a partir de datos espectrales"
- M17 M.E. Martínez, J.S. Durand, A. Cabrera, S. Vicente-Pérez
"Estudio de la foto-reacción del RBB con el ión Sn(II)"
- M18 M^a T. Vidal, S. Garrigues, M. de la Guardia
"Acoplamiento EFS-IR-TF: Aplicación a la determinación de cafeína en bebidas refrescantes"

- M19 E. López-Anreus, S. Garrigues, M. de la Guardia
"Control FIA-NIR del contenido de etanol en cloroformo"
- M20 J. Daghbouche, S. Garrigues, M. de la Guardia
"Análisis IR-TF de mezclas de carbaryl y naftol empleando derivadas"
- M21 J. Ramblas, S. Garrigues, M. Gallignani, M. de la Guardia
"Posibilidades de la espectrometría NIR para la resolución de mezclas de azúcares en disolución por medidas de transmisión"
- M22 Z. Bouhsain, B.A. Hassan, S. Garrigues, M. de la Guardia
"Análisis FIA-IR-TF de dimenhidrinato en productos farmacéuticos"
- M23 A.-S. Bouin, S. Muñoz Botella, B. del Castillo, M^a A. Martín
"Estudio espectrofluorimétrico de la interacción de derivados policíclicos de azaquinolizino con DNA"
- M24 S. Muñoz Botella, B. del Castillo, D.A. Lerner, M^a A. Martín
"Estudio espectrofotométrico UV-VIS y espectrofluorimétrico de retinoides en medios micelares"
- M25 C. Cámara, C. Pérez-Conde, A. Gutierrez, P. Fernández, C. Rico
"Determinación de teofilina"
- M26 J. Pedros, A. Campos, I. Porcar, A. Codoñer
"Estudio espectroscópico de la interacción entre quinina y membranas modelo"
- M27 E. Martínez, M.R. López, A. Ortiz de Zárate, A. Notario
"Tiempos de vida de estados excitados del BiCl, BiBr y BiI"
- M28 A. de la Cruz, M. Ortiz, J. Campos
"Fotoionización resonante de moléculas derivadas del tolueno"
- M29 A. Negrón, J. Vicente Alonso, A. Larena
"Compuestos de coordinación de etilenodiamidas C-sustituidas con níquel: correlación interpretativa de estructura, espectroscopía de absorción visible-ultravioleta e índices de refracción"
- M30 E.M. Talavera, J.M. Alvarez
"Análisis fluorimétrico de la hibridación de homopolinucleótidos sintéticos"
- M31 E. de Alba, F.J. Blanco, M.A. Jiménez, M. Rico, J.L. Nieto
"Estudio por RMN de péptidos modelo que forman estructura de tipo horquilla β en disolución acuosa"

- M32 A. Pineda-Lucena, M.A. Jiménez, G. Giménez-Gallego, J. Santoro, M. Rico, J.L. Nieto
"Determinación por RMN de ^1H de la estructura en disolución del factor de crecimiento ácido y de su complejo con inositol hexasulfato"
- M33 R. Campos-Olivas, M. Bruix, M. Rico, J. Santoro
"Asignación del espectro de resonancia magnética nuclear de protón de la ribonucleasa α -sarcina"
- M34 J. Santoro, M. Bruix, M. Rico
"Experimentos de Espectroscopía de RMN con pulsos de gradiente de campo"
- M35 P. Sevilla, C. Civera, M. Pisabarro, A.R. Viguera, M. Cortijo, L. Serrano
"Estudio estructural de dominios SH3 por Resonancia Magnética Nuclear"
- 16.30 - 17.30 **Conferencias Específicas**
Presidente: Antonio Molina
- CE5 M. de la Guardia
"Métodos limpios de análisis"
- CE6 N. Ferrer
"Aplicaciones de la espectroscopía infrarroja por Transformada de Fourier al análisis de macro y micro muestras"
- 17.30 - 18.00 **Paneles (cont.)**
- 18.00 - 19.00 **Mesa Redonda**
"Especiación"

JUEVES, 22 de Septiembre

9.00 - 9.45

Conferencia General

Presidente: José Vicente García Ramos

- CG3 G. Smulevich, Dipartimento di Chimica, Firenze (Italia)
"Heme protein structure and dynamics via Resonance Raman Spectroscopy"

9.45 - 11.15

Conferencias Específicas

Presidente: M^a Victoria García

- CE7 P.C. Gómez
"Métodos *ab initio* en Espectroscopía Molecular"
- CE8 M. Santos
"Cuascontinuo vibracional en moléculas poliatómicas pequeñas"

11.15 - 12.15

Comunicaciones Orales

- J1 L.E. Camafeita, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos
"Espectroscopía SERS de guanina y sus derivados sobre coloides de oro"
- J2 J.M. Gavira, B. Hernández, R. Navarro, A. Hernanz
"Espectros de vibración y análisis de coordenadas normales de 5'-CMP por métodos semiempíricos"
- J3 J. Vázquez, M. Fernández, M.P. Fernández-Liencres, J.J. López, F. Márquez, A. Navarro, J.C. Otero
"Campo de fuerzas *ab-initio* escalado de las moléculas de piridazina-h₄, piridazina-d₄ y piridazina 3,6-d₂, revisado"
- J4 M.C. Pérez-Conde, A.M. Gutiérrez, C. Cámara, M.A. Quijano
"Determinación de ultra-trazas de selenio por generación de hidruros y espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo (HG-ICP-MS): comparación de resultados mediante inyección en flujo y continuo"

12.15 - 14.00

Sesión de Paneles

- J5 J.V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés
"Estudio del perfil de excitación de las bandas SERS de la 1,5-dimetil citosina sobre coloides de plata"
- J6 J.L. Castro, M.A. Montañez, J.C. Otero, J.I. Marcos
"Espectroscopía Raman de ácidos aminobutíricos en coloides de plata"

- J7 R. Escobar, P. Carmona, M. Molina, A. Lasagabaster
"Espectros infrarrojos y Raman de Uridin-nucleótidos"
- J8 P. Carmona, M. Molina, A. Lasagabaster
"Estructura conformacional del péptido GHRFf(1-29). Estudio por Espectroscopía IR y Raman"
- J9 M. de la Fuente, J.L. Montero, R. Navarro, A. Hernanz
"Efecto de los iones K^+ y Na^+ sobre la dinámica del grupo PO_3^{2-} del 5'-CMP en disolución acuosa"
- J10 M. de la Fuente, O. Cozar, L. David, A. Hernanz, R. Navarro, I. Bratu
"Interacciones del cromo(III) de los mononucleótidos 5'-GMP y 5'-CMP. Estudio por Espectroscopía RPE y FT-IR"
- J11 L.A. Montero, Y.G. Smeyers, R. González-Jonte, L.A. Díaz, J.R. Alvarez Idaboy
"Modelo teórico de la Espectroscopía del furano y el furfural"
- J12 A. Navarro, M. Fernández, M.P. Fernández-Liencres, J.J. López, F. Márquez, J.C. Otero, J. Vázquez
"Campo de fuerzas *ab initio* escalado para las moléculas de S-triazina y S-triazina-d3"
- J13 J.J. López, M. Fernández, M.P. Fernández-Liencres, F. Márquez, A. Navarro, J.C. Otero, J. Vázquez
"Campo de fuerzas *ab initio* escalado para la molécula de tricoloro-S-triazina"
- J14 M.P. Fernández-Liencres, M. Fernández, J.J. López, F. Márquez, A. Navarro, J.C. Otero, J. Vázquez
"Estudio de la transferibilidad entre los campos de fuerzas escalados de la S-triazina y sus derivados halogenados"
- J15 M. Fernández, M.P. Fernández-Liencres, J.J. López, F. Márquez, A. Navarro, J.C. Otero, J. Vázquez
"Campo de fuerzas *ab initio* escalado para la molécula de trifluoro-S-triazina"
- J16 J.A. Torresano, M. Santos, P.F. González-Díaz
"Procesos colisionales en la disociación multifotónica del CF_2HCl "
- J17 M. Santos, C.L. Sigüenza, S.A. Simeonov, P.F. González-Díaz
"Disociación del CF_2Cl_2 inducida por excitación dicromática birresonante"
- J18 L. Díaz, S.A. Simeonov, J.A. García-Dominguez, P.F. González Díaz
"Disociación multifotónica infrarroja del $C_2F_2Cl_2$ inducida por doble excitación resonante"

- J19 M^a I. Basadre Pampin, J.M. Varela Montecelo
"Optimización y puesta a punto de un método para el análisis de Fe, Mg, Cu y Ca en suero humano por ICP-AES"
- J20 F. Lunzer, R. Pereiro, N. Bordel, A. Sanz-Medel
"Desarrollo y caracterización de un plasma a baja presión 'Mip-surfatron' para la determinación en línea de elementos formadores de hidruros"
- J21 N. Bordel, R. Pereiro, F. Camuña, A. Sanz-Medel
"Determinación de mercurio por generación del vapor frío con detección por MIP-Emisión Atómica"
- J22 M. Fernández, N. Bordel, R. Pereiro, A. Sanz-Medel
"Sistema para el análisis directo de recubrimientos metálicos mediante fuente de excitación de descarga luminiscente y detector CCD"
- J23 E. Segovia, M.L. Fernández, M.R. Fernández, E. Blanco, A. Sanz-Medel
"Efecto de los medios organizados en la generación de especies volátiles de compuestos organometálicos de estaño"
- J24 J.L. Todoli, A. Canals, V. Hernandis
"Estudios fundamentales acerca de la introducción de disolventes orgánicos en ICP con el SBHPPN"
- J25 J. M^a Cano, J.L. Todoli, A. Canals, V. Hernandis
"Evaluación del nebulizador hidráulico de alta presión (HHPN) en ICP con disolventes orgánicos"
- J26 M. Fernández Díaz, A.J. Quejido
"Determinación de selenio total en aguas por Espectrometría de masas de impacto electrónico con dilución isotópica previa generación del hidruro"
- J27 A.M. González, M. Ortiz, J. Campos
"Determinación del contenido de azufre en aceros"
- J28 Y. Madrid, C. Cabrera, T. Pérez, C. Cámara
"Especiación de metilmercurio y Hg(II) utilizando levadura de panificación (*Saccharomyces cerevisiae*)"
- J29 F. Blanco, B. Bo-Mbaka, J. Campos
"Fuerzas de oscilador para líneas de Si II"
- J30 J.M.L. Poyato, J. Juan Camacho, A. Pardo
"Distribución de intensidades y tiempos de vida media para el sistema B--X del Na₂"
- J31 A. Polo, J.M.L. Poyato, J. Juan Camacho, A. Pardo
"Distribución de intensidades para los sistemas A--X y B--X del Te₂"

- J32 A. Pardo
 "Potenciales rotacionales efectivos para el estado $X^1\Sigma_g^+$ de la molécula de H_2 "
- J33 D. Escolar, M^a R. Haro, A. Saucedo, J. Ayudo, A. Jiménez, J.A. Alvarez
 "Acoplamiento vibrónico en las bandas prohibidas de absorción de la acetona. Estudio de la segunda derivada del espectro de absorción"
- 16.30 - 17.00 **Conferencia Específica**
 Presidente: Juan Jesús López
- CE9 J.J. Camacho, J.M.L. Poyato, A. Polo, A. Pardo
 "Análisis espectral y estudio de probabilidades de transición del sistema B-X del Na_2 "
- 17.00 - 18.00 **Mesa Redonda**
 "Espectroscopía de Moléculas Biológicas"
- 18.00 - 19.00 **Asamblea del Grupo Español de Espectroscopía**

VIERNES, 23 de Septiembre

9.00 - 9.45

Conferencia General

Presidente: Carmen Cámara

CG4

J.M. Mermet, Laboratoire des Sciences Analytiques, Université Claude Bernard - Lyon (Francia)

"Optimizing inductively coupled plasma emission and mass spectrometers for the determination of trace elements"

9.45 - 11.15

Conferencias Específicas

Presidente: Antonio Pardo

CE10

C. Pérez Conde

"Sensores ópticos aplicados a la monitorización de especies de interés en química clínica y medio ambiente"

CE11

A. Rios

"Sistemas automáticos de flujo con detección espectrofotométrica (molecular UV-V) para el control de parámetros medio ambientales"

11.15 - 11.45

Comunicaciones Orales

V1

I. Rico, J. Mora, A. Canals, V. Hernandis

"Estudio del comportamiento de nebulizador térmico en ICP con disolventes orgánicos"

V2

R. Pereiro, F. Camuña, N. Bordel, F. Lunzer, J.E. Sánchez-Uría, A. Sanz-Medel

"El resurgir de los plasmas inducidos de microondas como fuentes de excitación en análisis espectroquímico"

11.45 - 13.00

Sesión de Paneles

V3

M.C. Matías, A. Larena, J. Martínez Urreaga

"Espectroscopía FTIR en la determinación del grado de curado en materiales compuestos de matriz poliéster insaturado"

V4

J.A. García, M.J. Orza

"Análisis FTIR de los subproductos del corte con láser de materiales no metálicos"

V5

J. Marco, J.M. Orza

"Espectros vibracionales y estabilidad de complejos de enlace de hidrógeno en fase gaseosa"

V6

J.M. Pérez, R. Gómez, A. Rodes, J.M. Feliu, A. Aldaz

"Caracterización espectroscópica de CO adsorbido sobre multicapas de Pd y Rh irreversiblemente adsorbidas sobre Pt(110) y Pt(100)"

- V7 A. Bertoluzza, S. Cacciari, M.A. Morelli, A. Tinti, M. Vasina
"The calcium phosphate system and its biological and biomedical importance"
- V8 J.V. Ibarra, J.L. Miranda, M. Gracia
"Estudio por Espectroscopías FTIR y Mössbauer de la meteorización de carbones en parque"
- V9 J.V. Ibarra, C. Royo, A. Monzón, J. Santamaría
"Estudio por Espectroscopía FTIR de la formación de coque en catalizadores de óxido de cromo-alúmina"
- V10 R. Laruelo, R. Torralba, M.A. Palacios, M. Bonilla
"Preconcentración de telurio mediante extracción líquido-sólido y determinación mediante la técnica de generación de hidruros-absorción atómica"
- V11 M.G. Cobo-Fernández, M.A. Palacios, C. Cámara
"Preconcentración de selenio inorgánico y determinación en línea de TeMeSe, Se(IV) y Se(VI), por HPLC-horno microondas-generación de hidruros-espectroscopía de absorción atómica"
- V12 A. López-González, M. Gómez, M.A. Palacios, C. Cámara
"Preconcentración y determinación de seis especies de arsénico en aguas naturales por HPLC-HG-AA"
- V13 B. Fullana Barceló, F. Bosch Serrat, R. Marín Saez, A.R. Maurí Aucejo
"Determinación de cianuro en aguas mediante espectrofotometría de absorción atómica"
- V14 J. Sanz, J. Galbán, M. Ibáñez, F. Gallarta
"Determinación indirecta de carbonato mediante espectrometría de absorción atómica"
- V15 A.I. Olives Barba, B. del Castillo García, M.E. Torija Isasa
"Evolución estacional del contenido de cobre y cinc en las aguas del río Arlanzón (Burgos). Determinación por E.A.A."
- V16 E. Martín, A. Pardo, R. Weigand, J.M. Guerra
"Transferencia de carga intramolecular en derivados N-sustituidos de la 1,8-naftalimida (Dye-Laseres)"
- V17 D. Escolar, M^a R. Haro, A. Saucedo, J. Ayuso, A. Jiménez, J.A. Alvarez
"Cruzamiento de estados excitados de naftalimidias con la polaridad del disolvente mediante espectroscopía de absorción y emisión"
- V18 D. Escolar, M^a R. Haro, A. Saucedo, J. Ayuso, A. Jiménez, J.A. Alvarez
"Estudio de la estructura molecular en estado excitado de bencilos y alquilderivados mediante espectroscopía de emisión"