

CH-FC
LIC-Q
P419d

UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE QUIMICA

"DETERMINACION DE CONSTANTES ESPECTROSCOPICAS
VIBRACIONALES PARA LA MOLECULA DE UREA"



TRABAJO DE TESIS de RODOLFO
PEÑA CONTRERAS para optar al
grado de LICENCIADO EN CIEN-
CIAS CON MENCIÓN EN QUIMICA.

Director de Tesis:

Marcelo Campos Vallette

SANTIAGO , 1977

Este trabajo de Tesis se realizó en el grupo de ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL de la Facultad de Ciencias y fue posible gracias al financiamiento otorgado por el Departamento de Química.

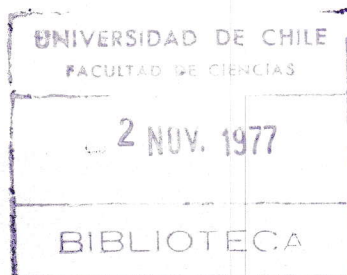
A mis padres:

Luis R. Peña y

Chita O. Contreras

I N D I C E

	Pág.
RESUMEN	i
I Introducción	1
II Fundamentos teóricos	
a) Métodos de cálculos de campos de fuerzas	2
b) Amplitudes medias de vibración	10
c) Constantes de coriolis	12
d) Defectos de inercia	15
e) Coeficientes de participación	18
III Cálculos y Resultados	19
IV Discusión	26
V Conclusiones	33
Tablas	34
Apéndice I	73
Apéndice II	77
Apéndice III	81
Bibliografía	



R E S U M E N

Sobre la base de las frecuencias fundamentales experimentales de los espectros IR de urea y urea-d₄ se ha calculado el campo de fuerza de urea para las vibraciones en el plano y fuera de él.

La determinación del conjunto de constantes se ha realizado a partir de la ecuación fundamental de la espectroscopía vibracional $GFL = L\Lambda$ a través de un método iterativo autoconsistente en la aproximación armónica, formulando el problema inverso.

El campo de fuerza encontrado ha permitido calcular los coeficientes de participación de urea y las formas de los modos normales de vibración, que junto con la distribución de la energía potencial, también determinada, han hecho posible la asignación de los espectros de nueve deuteroderivados.

Con las matrices de las formas de los modos normales de vibración, se ha calculado las amplitudes medias de vibración primarias y secundarias a 298°K y a 0°K para urea y los nueve derivados deuterados y las constantes de coriolis, para determinar posteriormente el defecto de inercia de urea, a partir de una formulación general desarrollada en la literatura.

Se discuten los resultados comparándolos con los datos experimentales de moléculas con grupos químicos análogos, cuando no existen para las ureas consideradas. Se demuestra finalmente la planaridad de la urea.

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

Este trabajo es el punto de partida del estudio de los espectros vibracionales y determinación de sus constantes espectroscópicas en las serie de compuestos: urea, tiourea, selenurea y de otras moléculas con grupos químicos análogos como acetamida y oxamida.

El objetivo de este trabajo es la determinación del campo de potencial completo de la urea y sobre la base de éste el posterior cálculo de magnitudes espectroscópicas tales como, coeficientes de participación, distribución de la energía potencial, defectos de inercia, constantes de coriolis, forma de los modos de vibración y amplitudes medias de vibración.

La elección de esta serie se debe fundamentalmente al gran interés biológico e industrial que presentan estos compuestos, en particular urea, que se forma en el cuerpo humano por descomposición de sustancias nitrogenadas del organismo. Se utiliza en la industria como abono y en la fabricación de plásticos, ya que al condensarse con formol forma resinas sintéticas.

Otra razón que justifica la elección de estas ureas simples, es la de correlacionar sus constantes espectroscópicas vibracionales y así poder transferirlas a otras moléculas que posean grupos químicos análogos.

II FUNDAMENTOS TEORICOS

II-1. METODOS DE CALCULOS DE CAMPO DE FUERZA. En la actualidad existen numerosos métodos para determinar el campo de potencial molecular, difieren en forma general, en el mayor o menor grado de simplificación de problemas, encontrándose por lo tanto, ciertas ventajas y desventajas unos respecto de los otros. El problema vibracional y en forma preferencial el cálculo de las constantes de fuerza de las moléculas ha sido abordado por los investigadores, utilizando la mecánica clásica del movimiento y los denominados métodos Mecano-Cuánticos. Estos últimos, han sido en cierta forma descartados, debido a la enorme complejidad matemática inherente al método mismo, sin considerar el gran número de aproximaciones necesarias para hacer el cálculo y al desconocimiento de las funciones de estado del sistema. En el mejor de los casos, se ha logrado obtener resultados razonables, en sistemas moleculares simples y en ningún caso, en sistemas poliatómicos grandes /1/.

Es por esto, que los métodos clásicos semiempíricos gozan de gran prestigio entre los investigadores en la determinación del campo de fuerza molecular. Se puede citar como ejemplos a

1. FUNCION POTENCIAL CUADRATICA, que por simplicidad no considera términos de mayor o menor orden; para moléculas no lineales se escribe como una forma cuadrática:

$$2V = \sum_{q, q' = 1}^{3N-L} F_{qq'} S_q S_{q'} \quad (1)$$

donde $F_{qq'}$ es la constante de fuerza y S_q y $S_{q'}$ son coordenadas internas. La dificultad que se encuentra con esta formulación es que se requiere más constantes de fuerza que frecuencias fundamentales.

2. CAMPO DE FUERZA CENTRAL (C.F.C.), puede ser escrito como:

$$V = \sum \frac{1}{2} k_{AB} \cdot \Delta R_{AB}^2 \quad (2)$$

donde ΔR_{AB} es el cambio de distancia entre los átomos A y B, k_{AB} es la constante de fuerza. La sumatoria es sobre todos los pares de átomos. Esta función de campo de fuerza requiere menos constantes de fuerzas que frecuencias fundamentales: pero da cuenta sólo de fuerzas entre átomos lineales fallando para vibraciones angulares y vibraciones fuera del plano, además no considera átomos no enlazados directamente.

3. CAMPO DE FUERZA DE VALENCIA (V.F.F.). Es otra aproximación que sólo considera fuerzas asociadas a enlaces valenciales. Esta expresión para la energía potencial es llamada campo de fuerza de valencia y se escribe como:

$$V = \sum \frac{1}{2} k \Delta R_A^2 + \sum \frac{1}{2} k_m \Delta \alpha_m^2 \quad (3)$$

donde k son constantes de fuerza; ΔR_A es el cambio de longitud de enlace α , desde la posición de equilibrio y $\Delta \alpha_m$ es el ángulo de distorsión m . La sumatoria es sobre todos los enlaces y ángulos. Las fuerzas entre átomos no enlazados no se considera, por lo tanto, el número de constantes de fuerzas obtenidas por este método es menor que las frecuencias fundamentales.

4. EL CAMPO DE FUERZAS VALENCIALES GENERALIZADO (G.V.F.F.). Es una extensión del campo de fuerza de valencia, se agregan términos cruzados, se puede escribir como sigue:

$$V = \sum \frac{1}{2} k_A \Delta R_A^2 + \sum \frac{1}{2} k_m \Delta \alpha_m^2 + \sum \frac{1}{2} k_{AB} \Delta R_A \Delta R_B + \sum \frac{1}{2} k_{mn} \Delta \alpha_m \Delta \alpha_n + \sum \frac{1}{2} k_{am} \Delta R_A \Delta \alpha_m \quad (4)$$

Esta función es de uso común, emplea constantes de fuerzas valenciales y de deformación de ángulos (bendings) e interacciones entre constantes de fuerzas. Excepto para moléculas simples, es muy difícil decidir cuál y cuántas constantes de interacción incluir, además éste método requiere más constantes de fuerza que frecuencias fundamentales.

5. UREY-BRADLEY. Cambios posteriores fueron introducidos por Urey-Bradley y Shimanouchi, resultando la función potencial Urey-Bradley, que básicamente es el campo de fuerzas valenciales generalizado, al cual se ha agregado algunos términos de repulsión, entre átomos no enlazados directamente, este potencial adicional se escribe:

$$V' = \frac{a}{R^n} \quad (5)$$

que es el potencial para los términos de repulsión entre átomos no enlazados que además introduce tensiones intramoleculares en lugar de términos de interacción. Requiere menos constantes de fuerza que G.V.F.F. y se puede utilizar con moléculas grandes. Sin embargo tiene dificultad para estimar fuerzas entre átomos no enlazados y fuerzas intramoleculares /2/.

Por último, el método empleado en el presente trabajo, se conoce como:

6. METODO ITERATIVO AUTOCONSISTENTE DE KOPTEV et al. /3/. Consiste en resolver la ecuación fundamental de la espectroscopía vibracional en forma iterativa. /4/

$$GFL = L\Lambda \quad (6)$$

en que

G es la matriz de Energía Cinética.

F es la matriz de Constantes de Fuerza.

L es la matriz de los modos normales de vibración y

Λ es una matriz diagonal que contiene las frecuencias experimentales.

La ecuación anterior se resuelve para dos isótopos de la molécula en cuestión.

El problema vibracional es abordado aquí en forma inversa, esto es, a partir de datos experimentales (frecuencias de vibración) se obtiene el campo de fuerza de la molécula. Por la naturaleza del cálculo, se hace necesario realizar un estudio teórico en el cual se utiliza la teoría de grupo.

CALCULO DE LAS FRECUENCIAS FUNDAMENTALES

• Por análisis de difracción de neutrones se ha establecido que la molécula de urea es plana y pertenece al grupo puntual C_{2v} . /4/.

Una molécula no lineal de N átomos posee $3N-6$ grados de libertad vibracional, de los cuales $2N-3$ corresponden a movimientos en el plano y $N-3$ fuera del plano molecular. Por lo tanto, la urea con 8 átomos posee 13 vibraciones planas y 5 fuera del plano.

Utilizando teoría de grupo se encuentra que la molécula de urea tiene la siguiente representación vibracional:

$$T_{\text{vib}} = 7A_1 + 6B_1 + 3B_2 + 2A_2 \quad (7)$$

de aquí, $7A_1 + 6B_1$, corresponden a los 13 movimientos vibracionales en el plano y $2A_2 + 3B_2$ son los movimientos fuera del plano molecular. El conjunto de coordenadas internas que describe esta representación y que se utilizan en el cálculo de todas las constantes espectroscópicas queda descrito en la figura I para las planas y en la figura II para las coordenadas internas fuera del plano.

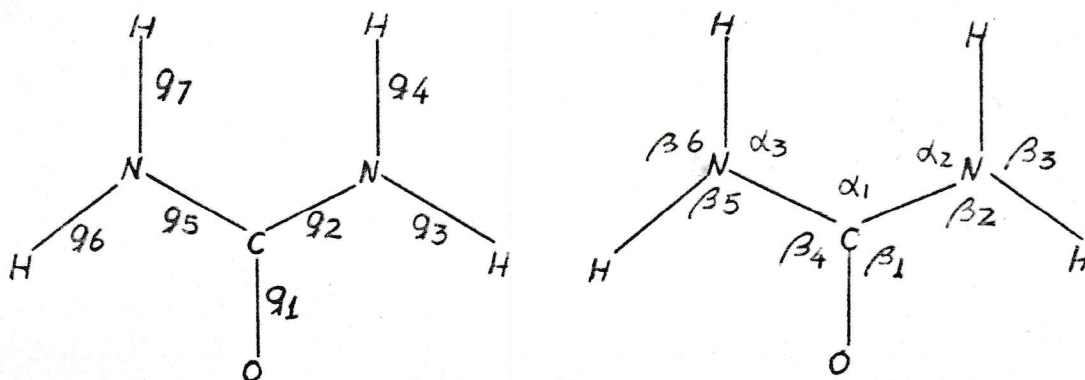


Fig. I

Conjunto de coordenadas internas y planas donde "q" da cuenta de la variación de la longitud de enlace, α y β de las variaciones de ángulos.

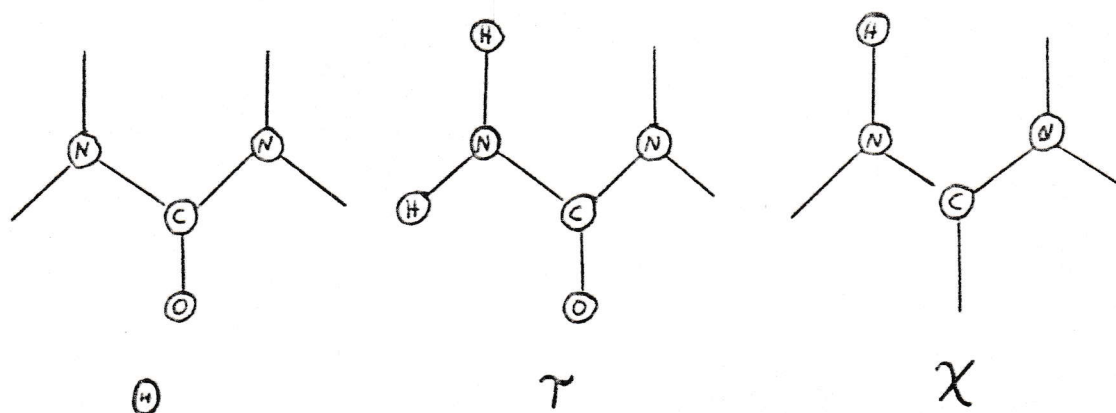


Fig. II

Los átomos encerrados en círculos salen del plano molecular.

La molécula de urea tiene 7 coordenadas de variación de longitud de enlace (Stretching) y 9 variaciones de ángulos (Bendings), de los cuales se escogen las 13 coordenadas internas para las vibraciones en el plano. Las escogidas son: 7 stretching (q) y 6 Bendings) (β). Las deformaciones de ángulos α_1 , α_2 y α_3 se consideran redundantes. Para los movimientos fuera del plano se tiene: una coordenada θ , dos coordenadas τ y dos coordenadas χ .

Por la simetría de la molécula el problema vibracional puede enfrentarse en forma separada para los movimientos vibracionales planos respecto de los movimientos fuera del plano. Esto es, las especies de simetría $7A_1 + 6B_1$ forman un bloque de cálculo y las especies $3B_2 + 2A_2$ otro.

Las frecuencias experimentales se asignan sobre la base de las formas de las bandas y a corrimientos debido a intercambio isotópico.

El método iterativo autoconsistente, anteriormente mencionado, requiere para iniciar el cálculo del campo de fuerza de la molécula, una buena asignación de las frecuencias experimentales para dos isótopos de ésta, una matriz "Fo" de constantes de fuerza de aproximación cero y la matriz "G" de energía cinética. Existen muchas formas de estimar la matriz "Fo" que inicia el cálculo, se puede mencionar a:

- i) Transferir constantes de fuerza de moléculas estudiadas con anterioridad que posean grupos químicos análogos y
- ii) Hacer la aproximación

$$F_{o_{ii}} = \frac{\lambda_i}{G_{ii}} \quad (8)$$

donde λ_i es el elemento diagonal i de la matriz Λ que contiene las frecuencias. ω_i se calcula usando la relación siguiente:

$\lambda_i = 0,589145 \times 10^{-6} \omega_i^2$ en que ω_i es la frecuencia de vibración en cm^{-1} . y " G_{ii} " es el elemento diagonal de la matriz de energía cinética.

Los elementos de la matriz "G" se determinan, empleando el conjunto de coordenadas internas descritas anteriormente y fórmulas explícitas desarrolladas en la literatura. Estos elementos dependen sólo de parámetros geométricos de la molécula y masas atómicas /5/. Las fórmulas se encuentran en el Apéndice I de este trabajo.

Teniendo la matriz Fo, la matriz "G" y las frecuencias experimentales de urea y urea deuterada se puede comenzar el proceso iterativo, obteniéndose al final de éste las matrices F_{N1} y

F_N^2 que son las constantes de fuerza del enésimo paso para urea y urea- d_4 y las frecuencias vibracionales calculadas que es el criterio de convergencia del método.

Como el método opera en la aproximación armónica se tiene que $FN_1 = FN_2$ y la matriz de constantes de fuerza final es el promedio aritmético de estas dos matrices.

En forma simultánea a la obtención del campo de fuerza y las frecuencias fundamentales se obtiene además, la matriz de vectores propios "L" que se denomina "Matriz de la forma de los modos de vibración".

Esta matriz L se utiliza en el cálculo de la "distribución de energía potencial" (D.E.P.) a través de una expresión descrita en la literatura /6/.

$$D.E.P. = F_{ij} L_{ia} L_{ja} / \lambda a \quad (9)$$

Por lo general, la distribución de la energía potencial de una molécula se informa en porcentaje y es utilizada en la asignación teórica de las frecuencias vibracionales calculadas, junto a la matriz "L" de las formas de los modos normales de vibración. El criterio usado en la asignación de las frecuencias es el siguiente:

Las filas de las matrices L y D.E.P. indican las frecuencias de vibración ordenadas de mayor a menor y las columnas las coordenadas internas que representan los modos normales de vibración.

La observación directa de los valores de la matriz de distribución de la energía potencial indica el mayor o menor aporte del potencial de una cierta coordenada a una determinada frecuencia. Esta operación se hace de igual manera y en forma simultánea con la matriz "L". Es necesario aclarar que, ninguna de las asignaciones es determinante en forma separada, sólo en conjunto dan una buena pauta para proponer una asignación de las frecuencias vibracionales.

La fidelidad del potencial encontrado usando el método autoconsistente de Koptev, ha sido comprobada en numerosos trabajos, /7-9/. En el presente trabajo se verifica también, al utilizar la matriz "L" en la determinación de otras magnitudes espectroscópicas, tales como: amplitudes medias de vibración y constantes de coriolis, que a su vez se pueden comparar con aquellos valores que se obtengan experimentalmente.

II-2. AMPLITUDES MEDIAS DE VIBRACION

Las amplitudes medias de vibración pueden determinarse experimentalmente a partir de estudios de difracción de electrones. La determinación teórica es justificable en la medida que los valores resultantes sean comparables con aquellos obtenidos del experimento.

Para una molécula de N átomos existen $N(N-1)/2$ distancias interatómicas, de las cuales, N-1 corresponden a átomos directamente enlazados. Las amplitudes medias de vibración, calculadas para estas N-1 distancias, se denominan "amplitudes medias de vibración principales".

Las restantes distancias (átomos no enlazados directamente) originan las llamadas amplitudes medias secundarias de vibración.

El cálculo teórico de las amplitudes principales y secundarias se basa fundamentalmente en resolver la ecuación matricial siguiente:

$$\Sigma = T L A \tilde{L} \tilde{T} \quad (10)$$

que es la matriz sigma de Cyvin /10/. Esta matriz Σ , se llama Matriz de las amplitudes cuadráticas medias de vibración donde T es una matriz de transformación, que convierte variaciones de ángulos en variaciones de distancias.

L es la matriz de las formas de los modos normales de vibración y

A es una matriz diagonal, cuyos elementos δ_i están dados por la relación:

$$\delta_i = \frac{16,85748}{w_j} \cotg h \frac{0,71939}{T} w_j$$

en que w_j es la frecuencia de la vibración en cm^{-1} y T es la temperatura en grados Kelvin.

Los elementos de la matriz de transformación T se encuentran a partir de fórmulas dadas por Morino y Kuchitsu /11/. Desarrolladas en forma explícita por M. Campos y C. Tellez /12/. Estas fórmulas que sólo contienen parámetros geométricos están desarrolladas en el Apéndice II de este trabajo.

En el cálculo de las amplitudes medias principales de la matriz T de transformación es unitaria, por lo que la ecuación

se transforma en:

$$\Sigma = L A \tilde{L} \quad (11)$$

Las amplitudes medias de vibración se obtienen finalmente al extraer la raíz cuadrada de los elementos diagonales de la matriz Σ .

El cálculo de las amplitudes medias de vibración, tiene sentido sólo para los movimientos vibratoriales que ocurren en el plano de la molécula.

II-3. CONSTANTES DE CORIOLIS

Teller mostró que el momento angular de vibraciones degeneradas pueden interactuar con el momento angular de rotación, afectando los niveles de energía rotacional de la molécula. /13/.

El momento angular vibracional es $\zeta_{ih}/2\pi$, donde ζ_i es la constante zeta característica de la vibración i , y está restringida al rango -1 a $+1$.

El sentido físico del signo menos, es que el momento angular de vibración produce un aumento de la velocidad angular de rotación. El signo positivo indica que la velocidad angular de rotación es menor que si el momento angular de vibración no interactuara con el momento angular de rotación.

De las interacciones vibración-rotación, la de coriolis es la más importante y los valores obtenidos en forma teórica pue-

den ser comparados con los valores que se obtenga experimentalmente /14/.

La determinación teórica de las constantes de coriolis puede hacerse a partir de la ecuación matricial propuesta por Meal y Polo /15/.

$$\zeta^{\alpha} = L^{-1} C^{\alpha} L^{-1} \quad (12)$$

donde α puede ser X, Y o Z, L es la matriz de los modos normales de vibración y C^{α} es la matriz de los elementos de coriolis que se determinan a partir de:

$$C_{ij}^{\alpha} = \sum_{k=1}^n \mu^k ([s_{iK}, s_{jK}], c^{\alpha})^* \quad (13)$$

aquí μ_K es el recíproco de la masa del átomo K y s_{iK} es el vector de Wilson, que transforma coordenadas de desplazamiento cartesiano en coordenadas valenciales para el átomo K.

La matriz C^{α} de elementos de coriolis se obtiene al desarrollar fórmulas explícitas propuestas por R. Aroca y Yu. N. Panchenco /16/ para interacciones entre las coordenadas planas y fuera del plano. Para las interacciones planas-planas se usan fórmulas desarrolladas por Ponomariov /17/.

El cálculo de las constantes de coriolis debe realizarse en coordenadas de simetría. Las matrices C^{α} de elementos de coriolis deben ser diagonalizadas en bloques, de acuerdo a la simetría de las vibraciones.

La razón por la cual se calcula en coordenadas de simetría es que, según la regla de Jahn /18/; "Los valores de las cons-

* Ref. /16/.



tantes de coriolis no son nulos sólo para aquellas especies cuyo producto directo contenga al menos una rotación ya sea R_X , R_Y , o R_Z .

La reducción por simetría, se hace a través de una matriz de transformación U, tal, que se cumpla la siguiente relación:

$$R = US \quad (14)$$

donde R - coordenadas internas y
S - coordenadas de simetría.

La matriz C^α se reduce en bloques mediante la relación:

$$C^\alpha_{(S)} = \tilde{U} C^\alpha_{(R)} U \quad (15)$$

Una de las formas de comprobación que tienen los resultados que se obtengan en el cálculo de las constantes de coriolis es la llamada Regla de la suma de Nemes. /19/. Esto es:

$$\sum_{ij} (\zeta_{ij})^2 = 1$$

II-4. DEFECTOS DE INERCIA

El problema rotacional en moléculas poliatómicas, puede resolverse utilizando la mecánica clásica de un rotor rígido. Basándose fundamentalmente en la aproximación, de suponer, los movimientos vibracionales, mucho más rápidos que los movimientos rotacionales de la molécula y que los núcleos se consideren masas puntuales. /20/.

Según este esquema los momentos de inercia de la molécula están dados por:

$$I_{\alpha} = \sum_{i=1}^n m_i r_i^2 \quad (16)$$

donde r_i , es la distancia perpendicular desde la partícula de masa i , al eje α . Claramente I_{α} depende de la forma de escoger el eje α .

Una molécula poliatómica que está rotando, se considera como un elipsoide de inercia que tiene tres ejes principales de inercia perpendiculares entre sí a , b y c . Los momentos de inercia de la molécula medidos a lo largo de estos ejes principales se denominan I_a , I_b e I_c y se tiene que $I_c \geq I_b \geq I_a$.

Los elementos de simetría de las moléculas ayudan a encontrar los ejes principales y a clasificarlos según sea el caso en:

- a) Trompo esférico si $I_a = I_b = I_c$
- b) Trompo simétrico si $I_a = I_b \neq I_c$ ó
 $I_a \neq I_b = I_c$
- c) Trompo asimétrico si $I_a \neq I_b \neq I_c$

En forma análoga a una molécula diatómica se tiene para una molécula poliatómica que

$$I_a = h/8\pi^2 A; \quad I_b = h/8\pi^2 B; \quad I_c = h/8\pi^2 C \quad (17)$$

donde A, B y C son las constantes rotacionales en los ejes principales. Además se tiene que $A \gg B \gg C$.

Para una molécula plana un eje principal debe ser perpendicular al plano molecular y claramente debe ser el eje de mayor momento de inercia.

Para una molécula no plana, se tiene en el equilibrio que

$$I_c^e - I_a^e - I_b^e = 0$$

Para una molécula plana:

$$I_c^e - I_a^e - I_b^e = 0 \quad (18)$$

Los momentos de inercia respectivos I^e_c , I^e_b , I^e_a pueden determinarse de los espectros de microondas a partir de las constantes rotacionales en los ejes principales.

Lo que realmente ocurre, para una molécula plana es que

$$I_c - I_a - I_b > 0$$

a la cantidad de la izquierda de la desigualdad se le conoce como "Defecto de Inercia" de la molécula, producido por la interacción rotación-vibración. Se tiene entonces que:

$$\Delta = I_c - I_b - I_a \quad (19)$$

El defecto de inercia debido a la interacción rotación-vibración puede calcularse usando una expresión general des-

desarrollada por Yeyapandian y Savary Raj /21/.

$$\begin{aligned} \Delta_{\circ \text{vib}} = & \frac{h}{2\pi^2 c} \left\{ \sum_s \sum_{s'} (\zeta_{ss'}^x)^2 \left[\frac{1}{\nu_s} + \frac{1}{\nu_{s'}} - \frac{1}{\nu_s + \nu_{s'}} \right] \right\} \\ & - \frac{h}{2\pi^2 c} \left\{ \sum_s \sum_t [(\zeta_{st}^y)^2 + (\zeta_{st}^z)^2] \left[\frac{1}{\nu_s} - \frac{1}{\nu_s + \nu_t} \right] \right\} \\ & + \frac{1}{2} \sum \frac{1}{\nu_t} \end{aligned} \tag{20}$$

en que S y S' se refieren a las vibraciones planas y t a las vibraciones fuera del plano y $\zeta_{SS'}$ y ζ_{St} son las constantes de coriolis de interacción planar planas y planas - no planas respectivamente.

$$\Delta_{\circ \text{total}} = \Delta_{\circ \text{vib}} + \Delta_{\circ \text{cent}} + \Delta_{\circ \text{elec}} \tag{21}$$

en que $\Delta_{\circ \text{vib}}$ es el producido por la interacción vibración-rotación, $\Delta_{\circ \text{cent}}$ es el aporte al defecto de inercia debido a la distorsión centrífuga y $\Delta_{\circ \text{elec}}$ es la contribución electrónica al defecto de inercia total.

La experiencia ha mostrado que $\Delta_{\circ \text{cent}}$ y $\Delta_{\circ \text{elec}}$ son muy pequeños comparados con $\Delta_{\circ \text{vib}}$ por lo que su cálculo aparece innecesario /22/.

II-5. COEFICIENTES DE PARTICIPACION

La matriz F de constantes de fuerzas es expresada en un sistema de coordenadas dependientes entre sí, de tal forma que el cambio en uno de sus términos, lleva consigo la modificación de otras interacciones entre átomos enlazados y no enlazados, en la posición inmediata.

La transferibilidad de estas constantes específicas a sistemas químicos con grupos análogos es inexacta, a no ser, que las moléculas sean idénticas o esos grupos sean de la misma clase. /24/.

El problema de usar un conjunto de constantes de fuerzas conocido para una cierta molécula, en el cálculo de frecuencias y formas de los modos de vibración, para otra molécula que sea similar, es que estas constantes de fuerza son combinaciones lineales complicadas en el caso de tener gran cantidad de coordenadas involucradas en el cálculo.

La necesidad de disponer de un sistema que no contenga esta gruesa aproximación llevó a Tatievskii a formular los COEFICIENTES DE PARTICIPACION, que corresponden a la matriz de constantes de fuerza invertida (F^{-1}), que queda representada en coordenadas independientes entre sí /23/.

Así la transferibilidad de constantes de fuerza a través de los coeficientes de participación se hace más exacta.

III CALCULOS Y RESULTADOS

FRECUENCIAS FUNDAMENTALES Y CAMPO DE FUERZA

El registro de los espectros I.R. de urea y urea-d₄ y la asignación de sus bandas fundamentales entre 4000 y 400 cm⁻¹ ha sido realizado por D. Hádzi et al. /25/. En el presente trabajo se ha confirmado esta asignación experimental para las frecuencias vibracionales en el plano. Las frecuencias correspondientes a los movimientos vibracionales experimentales fuera del plano molecular se han comparado con los valores registrados por Y. Saito et al. /26/. De los cinco modos normales de vibración no planos predichos en el cálculo teórico de las frecuencias, sólo tres son activos en I.R. Por lo tanto los valores utilizados en el cálculo del campo de fuerza de urea correspondientes a estos dos movimientos inactivos en I.R. son estimados. El conjunto de frecuencias observadas experimentalmente se dan en forma comparativa con las calculadas en el presente trabajo en la Tabla I.

La matriz F₀ (constantes de fuerza de aproximación cero) se determinó a partir de las frecuencias y los elementos diagonales de la matriz de energía cinética "G", como se indicó anteriormente. (8).

Los valores obtenidos para esta matriz, que inician el proceso iterativo, se pueden leer de la Tabla II.

La matriz "G" de energía cinética se construyó utilizando las expresiones descritas en el Apéndice I. Para cada elemento

se utiliza la fórmula adecuada según sea el tipo de interacción. Los parámetros utilizados en la construcción de esta matriz, se dan a continuación en la Tabla III. En la Tabla IV y Tabla V se puede leer los valores de los elementos de las matrices "G" obtenidas, para los movimientos planos y fuera del plano respectivamente para urea y urea-d₄.

Con las matrices "G" de energía cinética, la matriz F₀ de constantes de fuerza y las frecuencias experimentales de los dos isótopos, se puede iniciar el proceso iterativo.

Después de 17 pasos para las vibraciones en el plano y 20 pasos para los movimientos fuera del plano, se obtiene finalmente las frecuencias de los modos normales de vibración planos y no planos y los respectivos campos de fuerza. El campo de fuerza obtenido finalmente es el promedio aritmético de los campos de fuerza de urea y urea deuterada.

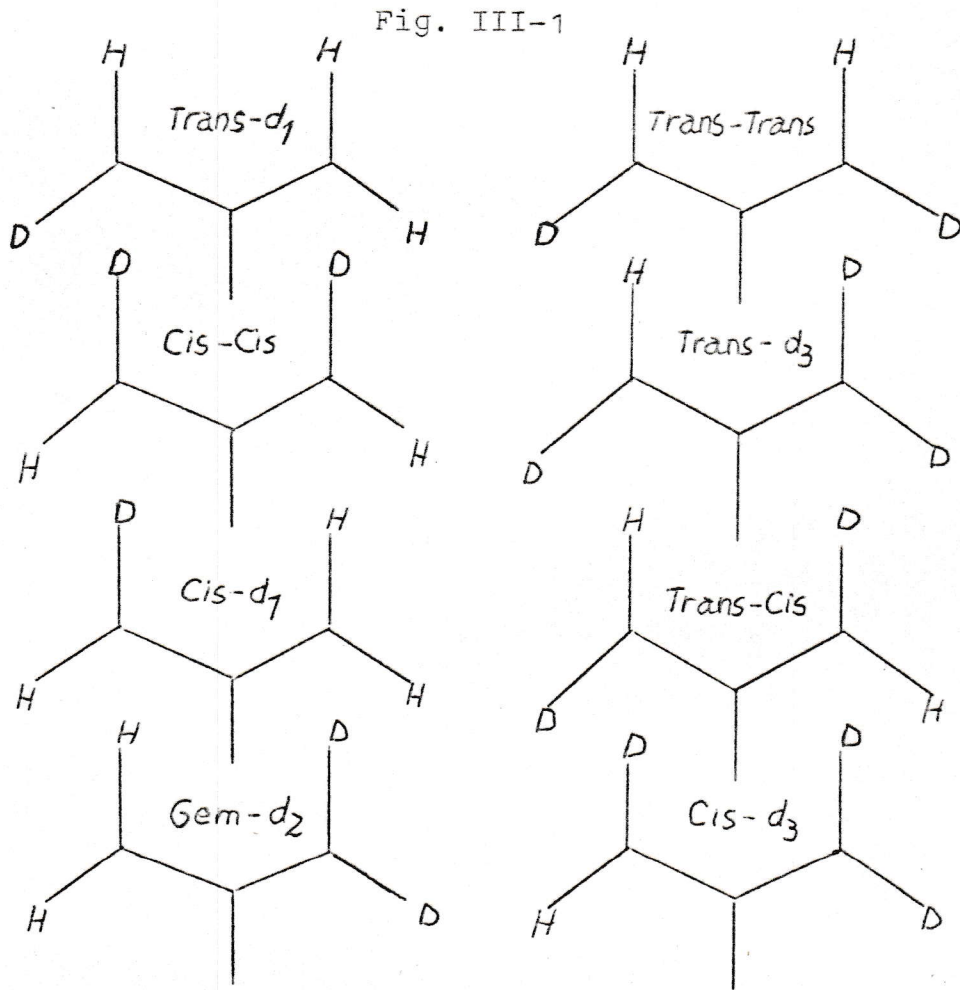
Las Tablas VI y VII muestran las constantes de fuerza para las vibraciones en el plano y fuera del plano respectivamente.

En forma simultánea a la obtención de la matriz F final, se ha generado la matriz "L" de las formas de los modos normales de vibración.

Las matrices "L" de urea se dan en la Tabla VIII para las vibraciones fuera del plano y en la Tabla IX para las vibraciones en el plano de la molécula.

Con la matriz de constantes de fuerza obtenida para la molécula de urea y las matrices de energía cinética correspondientes, se calcula las frecuencias vibracionales y las matrices de las formas de los modos normales de vibración para ocho deuteroderivados de urea, usando la ecuación fundamental de la espectroscopía

vibracional (6) , para los movimientos en el plano molecular. Las frecuencias experimentales, de la serie de compuestos mostrados en la siguiente figura, son las observadas por Y. Saito et al. /26/. Los resultados se ven en forma comparativa en la Tabla X.



Se ha mantenido la nomenclatura usada por Y. Saito et al. /26/.

Se obtiene además, las respectivas matrices "L" de las formas de las vibraciones para cada una de las moléculas. Estas matrices son utilizadas, junto con las frecuencias vibracionales, en el cálculo de las matrices de distribución de la energía potencial, usando la relación descrita anteriormente (9).

Es posible asignar las frecuencias fundamentales, para urea y sus isótopos deuterados, con las matrices "L" y las matrices de distribución de la energía potencial como se describiera en la sección previa. Las matrices "L" de las formas de las vibraciones, para los isótopos de ureas parcialmente deuteradas se pueden ver de la Tabla XI-1 a la XI-8 y se utilizarán en el cálculo de las amplitudes medias de vibración.

AMPLITUDES MEDIAS DE VIBRACION. El cálculo de las amplitudes medias de vibración, se hace a través de la relación matricial de Cyvin /10/. (Sección II-2).

$$\sum = TL\tilde{A}\tilde{T}$$

La matriz diagonal A, cuyos elementos contienen las frecuencias experimentales de vibración y la dependencia de las amplitudes con la temperatura, se calcularon usando la expresión:

$$\delta_i = \frac{16,85748}{w_i} \cotg h \frac{971939}{T} w_i$$

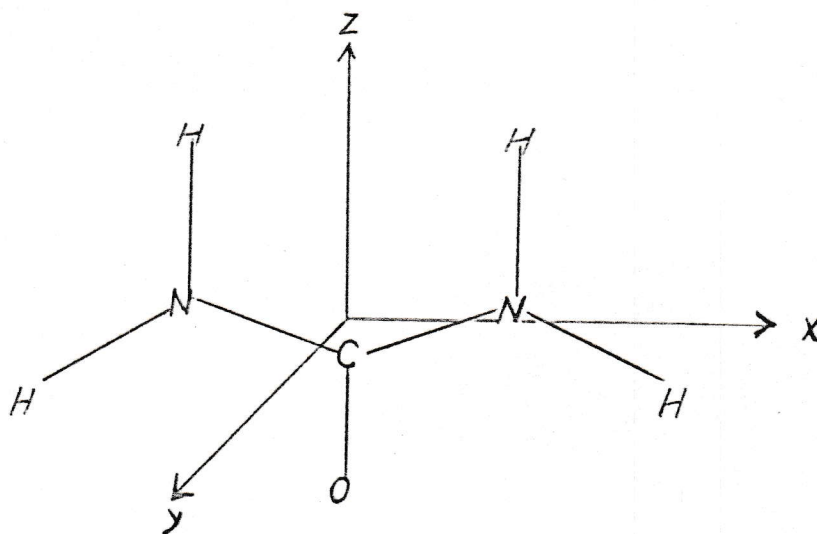
Para las moléculas de urea y urea-d₄ se usó las frecuencias experimentales presentadas por Hâdzi que se dan en la Tabla (I) /25/. Para las ureas parcialmente deuteradas las frecuencias da-

CONSTANTES DE CORIOLIS. Para urea, se calculó las constantes de Coriolis ζ^α , a través de la formulación descrita anteriormente

$$\zeta^\alpha = L^{-1} C L^{-1}$$

La matriz de elementos de coriolis C^α se determinó a partir de fórmulas explícitas desarrolladas en el Apéndice II.

El sistema de coordenadas escogido, es determinante, en el resultado de las matrices C^α . En este trabajo se utilizó, el que se muestra en la siguiente figura:



Las tablas XV, XVI y XVII muestran los valores obtenidos para C^x , C^y y C^z respectivamente.

Según la regla de Jahn /18/. Los valores no nulos para las interacciones de Coriolis son para urea los siguientes, según nomenclatura de Mulliken /27/.

das por Saito que previamente fueron comparadas con las obtenidas en el presente trabajo. /26/.

En las Tablas XII-1 hasta XII-5 se pueden leer los valores obtenidos para las matrices A a 0° y 298°K para urea y sus derivados deuterados.

La matriz T de transformación que se utiliza en el cálculo de las amplitudes medias primarias es unitaria. Para las amplitudes secundarias, sus elementos se calcularon a partir de una formulación propuesta por Morino y Kuchitsu. /11/. Desarrolladas posteriormente en forma explícita por M. Campos /12/. Los parámetros utilizados en éste cálculo, son solamente parámetros geométricos, no considera las masas atómicas, por lo que una matriz T es necesaria para el cálculo de las amplitudes medias de vibración secundarias de urea y derivados deuterados. Las fórmulas se pueden ver en el Apéndice II y la matriz T obtenida en la Tabla XIII.

Las matrices "L" de la forma de los modos normales de vibración, utilizadas en el cálculo de las amplitudes, son las obtenidas en el cálculo de las frecuencias fundamentales de cada molécula.

Las amplitudes medias de vibración, tanto primarias como secundarias, son las raíces cuadradas de los elementos diagonales de las matrices Σ obtenidas. Los resultados de las amplitudes medias de vibración primarias y secundarias para urea e isótopos deuterados pueden verse en las Tablas XIV-1 hasta XIV-5.

$$\zeta^x; A_1 \times B_1$$

$$\zeta^y; A_1 \times A_2 \text{ y } B_2 \times B_1$$

$$\zeta^z; A_1 \times B_2 \text{ y } B_1 \times A_2$$

Los resultados obtenidos, en el cálculo de las constantes de Coriolis se pueden ver en la Tabla XVIII, XIX y XX para ζ^x , ζ^y y ζ^z respectivamente.

DEFECTOS DE INERCIA. El defecto de inercia para la molécula de urea, se determinó a partir de la relación propuesta por Yeyapandian y Savari Raj /21/. y es el siguiente:

$$\Delta_0 = 0,009 \text{ UMA } \text{Å}^2$$

COEFICIENTES DE PARTICIPACION. Con el fin de transferir las constantes de fuerza, se determinaron los coeficientes de participación que corresponden a la matriz F de constantes de fuerza invertida.

Esto es $C = F^{-1}$ y se da en la Tabla XXI.

IV DISCUSION

Los espectros I.R. de urea, tiourea, selenurea y sus derivados isotópicos H^2 y N^{15} fueron registrados por D. Hádzi et al. /25/. El análisis de coordenadas normales para las 13 vibraciones en el plano fue realizado usando la ecuación matricial de Wilson y el método Urey Bradly para la determinación del campo de fuerzas /4/.

El campo de fuerzas encontrado reproduce bien los corrimientos de frecuencias experimentales de los isótopos pesados. Sin embargo, existen diferencias fundamentales en cuanto a la asignación de las frecuencias entre el trabajo de Hádzi y el presente, las que pueden ser explicadas considerando las diferencias entre los métodos empleados en la determinación del campo de fuerzas de la molécula. El método Urey Bradley no considera constantes de fuerza de átomos no enlazados directamente. El campo de fuerza encontrado incide en forma determinante en el cálculo de la distribución de energía potencial, responsable directa de la asignación de las frecuencias vibracionales.

En su trabajo, Hádzi asigna la frecuencia de 1687 cm^{-1} al "stretching" $C=O$, con un 41% de la distribución de la energía potencial. /25/. En el presente trabajo, en la Tabla I se puede leer que la frecuencia correspondiente al "stretching" del carbonilo está en 1630 cm^{-1} , con una distribución de la energía potencial de un 72%. Este resultado puede ser comparado con los valores propuestos por Y. Saito et al. /26/. Ellos asignan la frecuencia de 1615

cm^{-1} al "stretching" C=O, sobre la base de corrimientos de bandas por efecto de deuteraciones sucesivas. Una evidencia en favor de la presente asignación, es que con la deuteración la frecuencia correspondiente al "stretching" C=O no debe alterarse mayormente, lo que se comprueba con la asignación hecha para las moléculas de ureas parcialmente deuteradas (ver Tabla X). Hâdzi en su trabajo, propone que el "stretching" C=O de urea está en 1687 cm^{-1} y el de urea deuterada en 1621 cm^{-1} .

Otra diferencia que se encuentra con la asignación propuesta por Hâdzi /25/, es que mientras se asigna la frecuencia de 560 cm^{-1} al movimiento bending NCN, en el presente trabajo se propone el bending OCN. Esta diferencia no existe como tal, si se considera que según el estudio teórico realizado previo al cálculo de las frecuencias fundamentales, se tiene que escoger un conjunto de coordenadas internas que sean representativas de las vibraciones de la molécula; esto es, siete especies de simetría A_1 y seis de simetría B_1 . Para que esto último se cumpla, la coordenada interna que representa la vibración NCN es considerada redundante, es decir, debe estar determinada por dos coordenadas vecinas, vale decir las coordenadas OCN.

En el presente trabajo, se calculan las frecuencias fundamentales en el plano, de ocho isótopos parcialmente deuterados de urea. Las frecuencias experimentales empleadas en la comparación de los resultados obtenidos son las observadas por Y. Saito et al. /26/. Y. Saito informa un conjunto de frecuencias observadas en muestras de urea con agua deuterada, en las cuales se varía la concentración de D_2O . Estas frecuencias corresponden a mezclas de isótopos

ya sea del tipo urea-d₁, urea-d₂ o urea d₃.

Por lo que es necesario comparar los valores calculados de cada isótopo con todas las frecuencias observadas, de manera que las diferencias entre los valores observados y calculados sea pequeña.

La Tabla X muestra estas pequeñas diferencias entre los valores observados experimentalmente y los calculados en el presente trabajo.

Esto permite suponer que el campo de fuerza encontrado, empleando el método iterativo autoconsistente es bueno.

El conjunto de frecuencias calculadas para los isótopos parcialmente deuterados permite establecer una correlación con siderando el grado de menor a mayor deuteración en la serie de moléculas derivadas de urea.

Los isótopos deuteroderivados de urea que pertenecen al grupo puntual C₂V (trans-trans y cis-cis) presentan 7 vibraciones del tipo A₁ y seis del tipo B₁, las matrices de las formas de los modos normales de vibración de estas dos moléculas, así lo indican, comprobando el estudio teórico hecho antes del cálculo de las frecuencias fundamentales.

Las frecuencias que deben permanecer inalteradas a la deuteración, no cambian en toda la serie de moléculas de ureas deuteradas, confirmando la asignación hecha en este trabajo, para urea y urea-d₄. En general las frecuencias correspondientes a los "stretching" C=O y C-N no cambian con la deuteración.

Las frecuencias vibracionales que deben cambiar con la deu teración lo hacen en forma paulatina, de acuerdo al grado de deu

teración de la molécula, la Tabla X muestra los resultados obtenidos para esta serie de moléculas.

En general, se observa que la frecuencia correspondiente al stretching N-H disminuye, si se aumenta la deuteración en otras zonas de la molécula.

Las vibraciones bendings H-N-H, H-N-D y D-N-D están siempre comprendidas entre los valores de urea d_4 y urea- d_4 respectivamente.

El caso más sobresaliente es el isótopo gem- d_2 que posee un grupo HNH y un grupo DND. Las frecuencias calculadas para am los movimientos son muy similares a los de urea d_4 y urea d_4 , lo que comprueba la asignación propuesta.

Para las vibraciones correspondientes a los bending C-N-H y C-N-D, se observa que la simetría de la molécula parcialmente deuterada, influye en gran forma en los corrimientos de algunos movimientos vibracionales en los cuales no debería sentirse la deuteración. Esto dificulta una posible correlación de la serie, para este tipo de movimiento vibracional.

Los movimientos vibracionales fuera del plano de la molécula fueron calculados para urea y urea d_4 . Los resultados obtenidos en el presente trabajo pueden ser comparados con los observados por Y. Saito et al. /26/.

La frecuencia de vibración en 785 cm^{-1} para urea y 776 cm^{-1} para urea d_4 corresponde al movimiento fuera del plano del grupo carbonilo ($\theta\text{ C} = \text{O}$), pues no se afecta con la deuteración. Existe diferencia en la asignación del movimiento torsional del grupo NH_2 del presente trabajo respecto de la asignación propuesta

por Saito /26/. La diferencia de asignación entre los dos trabajos se debe a que Y. Saito asigna las frecuencias sobre la base de corrimientos debido a la deuteración, en el presente trabajo se hace en forma teórica, usando las matrices de distribución de la energía potencial y las matrices de las formas de los modos normales de vibración.

En ambos casos existen dificultades inherentes al método. Para la parte experimental se tiene que dos de los cinco modos normales de vibración son inactivos en I.R. por lo tanto deben ser registrados los espectros Raman de las moléculas (no hay informes en la literatura). En la parte teórica, se tiene la dificultad de mezclas de modos normales de vibración, que se traduce en valores similares para dos movimientos diferentes, esto es, Torsionales NH_2 y "wagging NH_2 " haciéndose difícil la asignación.

El campo de fuerza encontrado para la urea, reproduce perfectamente las frecuencias fundamentales medidas experimentalmente de urea y derivados deuterados. Por otra parte, el método iterativo autoconsistente de Koptev permite encontrar el campo de fuerza completo, vale decir, constantes de fuerzas para átomos enlazados y no enlazados directamente. /3/. Cualquier diferencia de las constantes de fuerza dadas en el presente trabajo con las entregadas en la literatura, se debe fundamentalmente a la calidad de los métodos empleados en su determinación. La ventaja de usar el método autoconsistente es la de obtener la matriz "L" de la forma de los modos normales de vibración que se utiliza en el cálculo de otras magnitudes espectroscópicas tales como, las amplitudes medias de vibración, las constantes de coriolis que

permiten a su vez la determinación del efecto de inercia de la urea. La comparación de los resultados teóricos con valores que se obtengan experimentalmente de éstas constantes espectroscópicas, dará cuenta o no de la bondad del método de cálculo propuesto.

Las amplitudes medias de vibración primarias, para todas las moléculas de la serie de ureas parcialmente deuteradas son prácticamente insensibles a cambios en la temperatura, las Tablas XIV comprueban esta afirmación. Los resultados obtenidos se pueden ver en las Tablas XIV de este trabajo y pueden compararse con valores dados en la literatura /28/ y /29/. Por ejemplo, la amplitud media de vibración del grupo carbonilo ($C=O$) para la urea en el presente trabajo es de $0,039 \text{ \AA}$, lo que está de acuerdo con el valor $0,039 \text{ \AA}$ que informa Puranik /28/. Estos valores pueden ser comparados con el valor entregado por J. Bates et al. en la determinación de las amplitudes medias de vibración de $CO(CN)_2$ /29/. Es de $0,038$ para esa molécula, razón para pensar que el valor calculado en el presente trabajo para la amplitud de vibración del grupo carbonilo es correcta. Algo similar ocurre con la amplitud del enlace C-N, Puranik en su trabajo determina que la amplitud del enlace C-N es de $0,044 \text{ \AA}$ que está de acuerdo con $0,043 \text{ \AA}$ determinado en el presente trabajo.

La amplitud media de vibración del enlace N-H para la urea determinada en este trabajo, debe ser comparado con la amplitud media de vibración calculada para la molécula de pirrol, pues no existen datos en la literatura con los cuales comparar estos resultados. Para urea es $0,073 \text{ \AA}$ y para pirrol $0,071 \text{ \AA}$ /30/. Lo mismo ocurre con el enlace N-D, la amplitud de la vibración para urea

es de 0,062 Å y para pirrol es de 0,061 Å. Ambos resultados son comparables, la desviación es pequeña si se considera los diferentes entornos atómicos del enlace N-H, N-D, en las dos moléculas.

Las amplitudes medias secundarias obtenidas en el presente trabajo no pueden compararse con valores dados en la literatura, no existen, luego, sólo es posible establecer una correlación con los valores obtenidos para cada una de las moléculas de Ureas parcialmente deuteradas.

En general, se observa que las amplitudes de vibración de distancias interatómicas, entre átomos no enlazados directamente, que no cambian en la serie, son aquellas distancias que no considera átomos de hidrógeno. Esto es, la distancia N-N y N-O. El resto de las distancias, si cambian con la deuteración. En general, se observa una disminución de la amplitud de vibración en aquellas distancias que involucran átomos de hidrógeno.

A diferencia de las amplitudes medias primarias, las secundarias, aumentan con la temperatura en la misma forma que aumentan las distancias entre átomos no enlazados directamente.

No han sido publicados valores teóricos ni experimentales de constantes de coriolis para la molécula de urea, con los cuales comparar los resultados obtenidos en el presente trabajo. Solo el cumplimiento de la regla de Nemes y el uso de estas constantes en el cálculo de los defectos de inercia de la molécula, permite suponer que los resultados de las constantes de coriolis obtenidos son correctos. /19/.

El defecto de inercia determinado con las constantes de coriolis (ver Tablas XVIII, XIX y XX) de urea y las frecuencias experimentales, es pequeño y positivo justificando la planaridad de la molécula.

V CONCLUSIONES

El campo de fuerza encontrado mediante el método iterativo autoconsistente , parece interpretar bien los espectros vibracionales de la urea e isótopos deuterados.

La validez de las constantes de fuerza obtenidas fue comprobada , al ser utilizadas a través de la matriz de la forma de los modos normales de vibración en el cálculo de otras magnitudes espectroscópicas tales como, amplitudes medias de vibración, constantes de coriolis y defecto de inercia.

Los resultados obtenidos en el presente trabajo estan de acuerdo con los valores presentados en la literatura. Además , se puede correlacionar de buena forma los valores de estas constantes, para todas las moléculas de la serie de ureas parcialmente deuteradas.

Los coeficientes de participación de la urea , pueden ser transferidos como matriz de constantes de fuerza de primera aproximación, en el estudio vibracional de tiourea, selenurea, acetamida y oxamida, con el fin de completar el estudio de los espectros vibracionales de esta serie de compuestos.

TABLA I FRECUENCIAS EXP. Y CALC. DE UREA Y UREA D₄ (en cm⁻¹)

UREA				UREA D ₄			
Obs.	ν_{25} /Calc.	Asig.	% D.E.P.	Obs.	ν_{25} /Calc.	Asig.	% D.E.P.
ν_1	3449	3462 ^(*)	B ₁ δ AS N-H	2591	2581 ^(*)	A ₁ ν S ND	98
ν_2	3449	3461	A ₁ δ S N-H	2591	2580	B ₁ δ AS N-D	98
ν_3	3347	3349	A ₁ δ S N-H	2437	2435	B ₁ δ AS N-D	95
ν_4	3347	3349	B ₁ δ AS N-H	2437	2434	A ₁ δ S N-D	95
ν_5	1687	1683	A ₁ δ S HNH	1621	1621	A ₁ δ S C=O	72
ν_6	1632	1629	A ₁ δ S C=O	1485	1487	B ₁ δ AS C-N	71
ν_7	1606	1603	B ₁ ν AS HNH	1249	1252	A ₁ ν S DND	52
ν_8	1467	1464	B ₁ δ AS C-N	1157	1159	B ₁ ν AS DND	42
ν_9	1157	1152	A ₁ ν S CNH	1002	1004	A ₁ δ S C-N	60
ν_{10}	1157	1149	B ₁ ν AS CNH	888	885	A ₁ ν S CND	30
ν_{11}	1005	1004	A ₁ δ S C-N	853	864	B ₁ ν AS CND	52
ν_{12}	574	569	A ₁ ν S OCN	508	516	B ₁ ν AS OCN	93
ν_{13}	560	551	B ₁ ν AS OCN	474	477	A ₁ ν S OCN	67
ν_{14}	785	780	B ₂ C=O θ	776	777	B ₂ θ C=O	94
ν_{15}	719	709	B ₂ NH ₂ torsión	517	517	B ₂ ν ND ₂	69
ν_{16}	719	708	A ₂ NH ₂ Wagging	510	511	A ₂ ν ND ₂	68
ν_{17}	555	546	A ₂ WNH ₂ torsión	420	419	A ₂ WND ₂	100
ν_{18}	500	491	B ₂ WNH ₂ Wagging	375	372	B ₂ WND ₂	77

(*) $\chi^2 = 1,04$

(*) $\chi^2 = 0,54$

TABLA II MATRIZ F_o UREA

Coordenadas internas interactuantes	F _o ii
q ₁ q ₁	10.500 $\frac{\text{mdin}}{\text{A}}$
q ₂ q ₂ = q ₅ q ₅	6.000 "
q ₃ q ₃ = q ₆ q ₆	6.730 "
q ₄ q ₄ = q ₇ q ₇	6.220 "
$\beta_1\beta_1 = \beta_4\beta_4$	0.310 mdin A
$\beta_2\beta_2 = \beta_5\beta_5$	1.380 "
$\beta_3\beta_3 = \beta_6\beta_6$	1.150 "
e e =	0.694 "
$\tilde{\tau}_1\tilde{\tau}_1 = \tilde{\tau}_2\tilde{\tau}_2$	0.442 "
$\chi_1\chi_1 = \chi_2\chi_2$	0.097 "

TABLA III PARAMETROS GEOMETRICOS DE UREA

Enlace	Distancia (Å)
C=O	1.243
C-N	1.351
N-H	1.000
Angulo	Angulos (°)
O-C-N	121.5
H-N-H	120.0
N-C-N	117.0

TABLA IV MATRIZ DE ENERGIA CINETICA DE UREA Y UREA D₄ (VIB. PLANAS)

	Q1	Q2	Q5	Q3	Q6	Q4	Q7	B1	B4	B2	B5	B3	B6
Q1	0,1458	-0,0435	-0,0435	0,0	0,0	0,0	0,0	-0,0525	-0,0525	0,0525	0,0525	0,0	0,0
Q2		0,1546	-0,0378	-0,0357	0,0	-0,0357	0,0	-0,0571	0,1120	-0,0618	-0,0549	0,1237	0,0
Q5			0,1546	0,0	-0,0357	0,0	-0,0357	0,1120	-0,0571	-0,0549	-0,0618	0,0	0,1237
Q3				*1,0635	0,0	-0,0357	0,0	0,0458	0,0	-0,0458	0,0	-0,0618	0,0
Q6					*1,0635	0,0	-0,0357	0,0	0,0458	0,0	-0,0458	0,0	-0,0618
Q4						*1,0635	0,0	-0,0458	0,0	0,1076	0,0	-0,0618	0,0
Q7							*1,0635	0,0	-0,0458	0,0	0,1076	0,0	0,0618
B1								0,2309	-0,1254	-0,1371	0,0052	0,0	0,0
B4								0,2309	0,0052	-0,1371	0,0	0,0	0,0
B2										*1,2011	0,0207	-1,0992*	0,0
B5											*1,2011	0,0	-1,0992*
B3												**2,1984	0,0
B6													**2,1984

Q5679 Q5679 Q5679 Q5679

Q7055 Q7055 -Q6036 -Q6036

1,2072 1,2072

TABLA V MATRIZ DE ENERGIA CINETICA VIB. NO PLANAS

	θ	τ_1	τ_2	χ_1	χ_2
θ	0,5228	-0,0060	0,0060	-0,1254	0,1254
τ_1		0,6875 (0,3576)*	-0,0115	-0,0373	-0,6328 (-0,3024)
τ_2			0,6875 (0,3576)	-0,6328 -0,3024	-0,0373
χ_1				1,5264 (0,8656)	0,0921
χ_2					1,5264 0,8656

* En paréntesis valores de "G" de urea deuterada.

TABLA VII MATRIZ F FINAL VIB. NO PLANAS

	θ_1	τ_1	τ_2	χ_1	χ_2
θ_1	0,6941	- 0,0201	0,0201	0,0280	-0,0280
τ_1		0,5071	-0,0208	0,0088	0,1395
τ_2			0,5071	0,1395	0,0088
χ_1				0,1876	0,0234
χ_2					0,1876

TABLA VIII MATRIZ DE LA FORMA DE LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION FUERA DEL PLANO (L) PARA UREA

	θ_1	τ_1	τ_2	χ_1	χ_2
ν_{14}	0,7214	-0,0378	0,0378	-0,2277	0,2277
ν_{15}	-0,03730	-0,5896	0,5893	-0,5173	0,5178
ν_{16}	0,0000	-0,5158	0,5161	0,8296	0,8297
ν_{17}	0,0	0,2679	0,2679	0,3473	0,3474
ν_{18}	-0,0310	0,0253	-0,0253	-0,6304	0,6304

TABLA IX MATRIZ "L" DE LAS FORMAS DE LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION
 EN EL PLANO DE UREA

	q ₁	q ₂	q ₃	q ₄	q ₅	q ₆	q ₇	β ₁	β ₄	β ₂	β ₅	β ₃	β ₆
∪ ₁	q ₀	q0013	-q0013	q5181	-q5181	-q5288	q5288	q0492	-q0492	-q1131	q1131	q0397	-q0397
∪ ₂	q0050	-q0052	-q0052	-q5222	-q5222	q5247	q5247	-q0489	-q0489	q1124	q1124	-q0431	-q0431
∪ ₃	q0083	-q0455	-q0455	q5085	q5085	q5016	q5016	-q0052	-q0052	q0864	q0864	-q1404	-q1404
∪ ₄	-q ₀	-q0457	q0457	q5125	-q5125	q4891	-q4981	q0041	-q0041	q0746	-q0746	-q1350	q1350
∪ ₅	q0034	q0496	q0496	q0155	q0155	q0650	q0650	q0188	q0188	-q6567	-q6567	q9884	q9884
∪ ₆	-q3706	q1515	q1515	q0045	q0045	q0213	q0213	q1549	q1544	-q1871	-q1871	-q0280	-q0280
∪ ₇	q ₀	-q1629	q1629	-q0182	q0182	-q0595	q0595	q0855	-q0855	q5514	-q5514	-q9308	q9308
∪ ₈	q ₀	q2562	-q2562	q0095	-q0095	-q0177	q0177	-q2964	q2964	q4004	-q4004	-q3194	q3194
∪ ₉	-q0010	q1029	q1029	q0104	q0104	-q0012	-q0012	-q0557	-q0557	q3038	q3038	q2837	q2837
∪ ₁₀	q ₀	-q0417	q0417	q0115	-q0115	-q0107	q0107	-q0308	q0308	q3231	-q3221	q3323	-q3323
∪ ₁₁	q0909	q1425	q1425	q0002	q0002	q0095	q0095	q0621	q0621	-q1680	-q1680	-q1304	-q1304
∪ ₁₂	q0043	q0040	q0040	q0029	q0029	-q0013	-q0013	-q1378	-q1378	-q0630	-q0630	-q0495	-q0495
∪ ₁₃	q ₀	-q0147	q0147	-q0001	q0005	-q0021	q0021	-q2821	-q2821	-q0555	q0555	q0223	-q0223

TABLA X FRECUENCIAS CALCULADAS DE ISOTOPOS PARCIALMENTE DEUTERADOS (en cm^{-1})

Obs. ^(*)	Urea cis d ₁		Urea trans d ₁		Urea Gem d ₂		Urea trans trans	
	Calc. ^(*)	Asig.	Obs. *	Calc. Asig.	Obs. *	Calc. ^(*)	Obs. *	Calc. Asig.
1	3485	3462 A' δ N-H	3485	3462 A' δ N-H	3485	3462 A' δ N-H	3422	3407 B ₁ δ AS N-H
2	3420	3409 A' δ N-H	3420	3407 A' δ N-H	3358	3349 A' δ N-H	3422	3406 A ₁ δ S N-H
3	3352	3349 A' δ N-H	3352	3349 A' δ N-H	2595	2581 A' δ N-D	2516	2497 A ₁ δ S N-D
4	2514	2523 A' δ N-D	2514	2497 A' δ N-D	2438	2435 A' δ N-D	2516	2496 B ₁ δ AS N-D
5	1660	1656 A' β HNH	1660	1642 A' β HNH	1650	1641 A' β HNH	1620	1629 A ₁ δ S C=O.
6	1610	1625 A' δ C=O	1610	1629 A' δ C=O	1620	1625 A' δ C=O	1540	1512 B ₁ δ AS C-N
7	1540	1546 A' β DNH	1480	1504 A' δ CN	1485	1484 A' δ C-N	1390	1408 A ₁ β S HND
8	1466	1460 A' δ C-N	1393	1336 A' β DNH	1216	1212 A' β DND	1345	1293 B ₁ β AS HND
9	1155	1151 A' β CNH	1155	1150 A' β CNH	1140	1129 A' β CNH	1057	1058 B ₁ β AS CND
10	1060	1043 A' δ C-N	1060	1037 A' β CND	998	1013 A' δ C-N	998	1019 A ₁ β S CND
11	922	885 A' β HNC	1002	1003 A' δ CN	886	879 A' β CND	998	999 A ₁ β S DCN
12	555	550 A' β OCN	555	560 A' β OCN	550	546 A' β OCN	550	536 A ₁ β S OCN
13	532	528 A' β OCN	532	527 A' β DCN	520	507 A' β OCN	520	520 B ₁ β AS OCN

(A) Rep: 126/
(A) v2 120

$\chi^2 = 3,9$

$\chi^2 = 4,08$

$\chi^2 = 4,12$

Continuación de la TABLA X

Urea cis cis		Urea trans cis		Urea trans d ₃		Urea cis d ₃		
Obs. *	Calc. (**)	Obs. *	Calc. Asig.	Obs. *	Calc. Asig.	Obs. *	Calc. Asig.	
3422	3409 A ₁ δ S	N-H	3422	3409 A' δ N-H	3421	3407 A' δ NH	3421	3409 A' δ N-H
3422	3403 B δ AS	N-H	3422	3407 A' δ N-H	2596	2581 A' δ N-D	2596	2581 A' δ N-D
2516	2523 B δ AS	N-D	2516	2523 A' δ N-D	2518	2497 A' δ N-D	2518	2523 A' δ N-D
2516	2522 A ₁ δ S	N-D	2516	2497 A' δ N-D	2437	2435 A' δ N-D	2437	2435 A' δ N-D
1620	1623 A ₁ δ S	C=O	1620	1625 A' δ C=O	1605	1625 A' δ C=O	1605	1622 A' δ C=O
1560	1587 A ₁ β S	HND	1560	1556 A' β DNH	1480	1502 A' δ C-N	1540	1553 A' β DNH
1540	1530 B δ AS	HND	1485	1504 A' δ C-N	1405	1365 A' β DNH	1480	1483 A' δ C-N
1465	1457 B δ AS	C-N	1345	1335 A' β HND	1212	1186 A' β DND	1212	1206 A' β DND
1086	1083 A ₁ δ S	C-N	1057	1042 A' δ C-N	1055	1038 A' β CND	1055	1039 A' δ C-N
886	889 A ₁ β S	HNC	998	1037 A' β CNH	1000	1003 A' δ C-N	945	887 A' β CNH
886	875 B δ AS	OCN	886	882 A' β CND	888	877 A' β CND	888	868 A' β CND
550	544 B δ AS	OCN	550	533 A' β OCN	520	520 A' β OCN	525	532 A' β OCN
520	499 A ₁ β S	OCN	520	514 A' β OCN	-	503 A' β OCN	-	486 A' β OCN

(*) Ref /26/

(**) $\chi^2 = 1,81$

$p < 0,005$

$\chi^2 = 3,31$

$p < 0,01$

$\chi^2 = 3,63$

$p < 0,01$

$\chi^2 = 5,05$

$p < 0,05$

TABLA XI-1 MATRIZ "L" DE LAS FORMAS DE LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION PARA

EL ISOTOPO CIS-CIS (EN EL PLANO)

	q ₁	q ₂	q ₅	q ₃	q ₆	q ₄	q ₇	β ₁	β ₄	β ₂	β ₅	β ₃	β ₆
ν ₁	q0014	-q0252	-q0252	q7272	q7290	-q0521	-q0522	q0340	q0341	-q0317	-q0318	-q0513	-q0514
ν ₂	q0	-q0285	q0284	q7288	-q7288	-q7271	-q0526	q0400	-q0399	-q0389	q0389	-q0485	q0484
ν ₃	-q0002	-q0572	q0583	q0367	-q0374	q5168	-q5261	-q0366	q0377	q2182	-q2225	-q2067	q2105
ν ₄	q0217	-q0599	-q0589	q0360	q0354	q5247	q5154	-q0571	-q0564	q2419	q2380	-q2178	q2141
ν ₅	-q3591	q1532	q1532	q0089	q0089	q0583	q0583	q1490	q1490	-q2118	-q3218	q1994	q1993
ν ₆	q0996	q0002	q0001	q0115	q0115	q0839	q0839	q0839	-q0190	-q0190	-q6337	-q6338	q8026
ν ₇	q0	-q2149	q2148	-q0112	-q0112	-q0873	q0873	q1546	q4733	-q4734	-q4734	-q6994	q6995
ν ₈	q0	-q2121	q2121	-q0073	-q0073	q0390	-q0390	q2700	-q2700	-q5349	q5348	q4345	q4345
ν ₉	q0541	q1610	q1610	q0098	q0098	q0120	q0120	-q0315	-q0315	q1063	q1063	q2173	q2172
ν ₁₀	-q0565	-q0695	-q0695	q0048	q0048	-q0125	-q0125	-q1133	-q1134	q1749	q1750	q2494	q1495
ν ₁₁	q0	q0268	-q0268	-q0090	-q0090	q0075	-q0075	q0342	-q0342	-q1640	q1640	-q3569	q3569
ν ₁₂	q0	-q0144	q0144	-q0004	-q0004	-q0047	q0047	-q2779	-q2779	-q0556	q0556	q0100	-q0100
ν ₁₃	q0081	q0064	q0069	q0015	q0015	-q0026	-q0026	-q1092	-q1092	-q0719	-q0719	-q0933	-q0933

TABLA XI-2 MATRIZ DE LAS FORMAS DE LOS MODOS DE VIBRACION PARA EL

ISOTOPO TRANS-TRANS (EN EL PLANO)

	q ₁	q ₂	q ₅	q ₃	q ₆	q ₄	q ₇	β ₁	β ₄	β ₂	β ₅	β ₃	β ₆
v ₁	q0	-q0298	q0294	-q0521	q0515	q7306	-q7230	-q0356	q0351	q1076	-q1065	-q0822	q0862
v ₂	q0092	-q0326	-q0329	-q0514	-q0520	q7226	q7302	-q0406	-q0409	q1120	q0135	-q0909	-q0918
v ₃	q0064	q0468	-q0474	q5267	q5316	q0347	q0351	q0394	q0400	-q0225	-q0224	-q1134	q1145
v ₄	q0	-q0581	q0577	q5307	-q5258	q0353	-q0350	q0608	-q0604	-q0317	q0315	-q1202	q1191
v ₅	q3706	-q1497	-q1497	q0083	-q0083	-q0208	-q0208	-q1557	-q1557	q1821	q1821	q0411	q0411
v ₆	q0	-q2862	q2862	-q0435	q0435	-q0289	q0289	q2498	-q2498	q0964	-q0964	-q4557	q4556
v ₇	-q0014	q0875	q0875	q0282	q0282	q0463	q0463	q0141	q0140	-q3641	-q3641	q8996	q8996
v ₈	q0	q0986	-q0986	-q0104	q0104	-q0291	q0291	-q1627	q1627	q3094	-q3094	q7873	q7873
v ₉	q0	-q0134	q0133	q0144	-q0144	-q0239	q0239	-q1313	q1313	q4664	-q4666	-q0107	q0108
v ₁₀	-q0433	-q0017	-q0017	q0159	q0159	-q0157	-q0157	-q0921	-q0921	q4195	q4194	q0644	q0644
v ₁₁	q0798	q1583	q1583	q0106	q0106	q0025	q0026	q0226	q0226	q0271	q0269	-q1195	-q1195
v ₁₂	q0040	q0222	q0022	q0056	q0056	q0004	q0004	-q1267	-q1267	-q0870	-q0869	-q0253	-q0253
v ₁₃	q0	-q0141	q0141	-q0004	-q0004	-q0001	q0001	-q2591	q2591	-q0853	q0853	q0442	-q0442

TABLA XI-3 MATRIZ "L" DE LAS FORMAS DE LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION PARA

EL ISOTOPO CIS-d₁ (EN EL PLANO)

	q ₁	q ₂	q ₅	q ₃	q ₆	q ₄	q ₇	β ₁	β ₄	β ₂	β ₅	β ₃	β ₆
v ₁	0p036	-q0046	-q0029	q7356	-0p010	q7450	-0p006	-q0693	q0002	q1595	-0p004	-q0585	-0p001
v ₂	q0011	q0018	-q0379	q0056	1,0295	q0065	-0p741	-0p042	q0523	0p059	-0p499	-q0015	-q0705
v ₃	q0059	-q0645	q0005	q7220	-q0087	q7069	q0004	-q0008	-q0068	q1138	q0081	-q1947	-q0029
v ₄	q0153	-0p013	-q0828	-q0011	0p515	-q0008	q7365	-q0138	-0p664	q0147	q3257	-q0113	-q03004
v ₅	-q0246	q1139	-0p057	q0221	q0058	q0850	q0536	q0026	q0548	-q8463	-q03908	1,2881	q4227
v ₆	-q3701	q1400	q1532	q0022	q0064	0p135	q0372	q1559	q1451	-q1082	-q1685	-q1595	q0158
v ₇	q0202	-q1764	q1867	-q0106	q0204	-q0272	q1188	q1195	-q1201	q1889	-q7435	-q3878	1p028
v ₈	0p067	q2339	-q2335	q0090	-0p080	-q0197	q0354	-q2840	q2850	q4099	-q5306	-q3355	q4184
v ₉	-q0016	q0614	q1087	q0151	0p026	-q0070	q0100	-q0329	-q0329	q4331	q0668	q4190	0p629
v ₁₀	q0728	q1633	q1247	-q0018	q0107	q0117	q0087	-0p048	-0p048	-q1874	q0793	-q1821	q2443
v ₁₁	-q0959	-q0369	-q0697	-q0013	0p095	-0p022	-q0144	-q1115	-q1115	q0354	q2390	-q0072	q0414
v ₁₂	0p023	-q0120	q0167	q0009	q0008	-q0024	q0035	q2211	q2211	-q0733	q0239	q0053	-q0519
v ₁₃	q0064	q0085	q0018	q0027	q0011	-q0005	-q0041	-q1040	-q2040	-q0374	-q0922	-q0462	-q0999

TABLA XI-4 MATRIZ "L" DE LAS FORMAS DE LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION
 PARA EL ISOTOPO TRANS-D₃ (EN EL PLANO)

	q ₁	q ₂	q ₅	q ₃	q ₆	q ₄	q ₇	β ₁	β ₄	β ₂	β ₅	β ₃	β ₆
v ₁	q0065	-q0022	-q0441	q0001	-q0732	-q0007	q0276	-q0038	-q0538	q0037	q1553	-q0013	-q1259
v ₂	-q0081	q0117	q0052	q5213	q0061	-q5726	q0003	q0989	q0015	-q2048	-q0036	q0592	q0052
v ₃	q0047	q0068	-q0743	-q0001	q7477	q0074	q0495	-q0155	q0708	q0094	-q0379	-q0017	-q1653
v ₄	q0145	-q1086	q0059	q5415	-q0042	q4793	-q0005	q0101	-q0224	q1229	q0123	-q2324	q0013
v ₅	q3713	-q1461	-q1524	-q0125	-q0083	-q0383	-q0215	-q1533	-q1539	q1788	q1860	-q0185	q0358
v ₆	-q0002	-q2695	q3026	-q0370	q0467	-q0353	q0347	q2620	-q2535	q0059	-q1383	-q2068	q5560
v ₇	q0071	q1577	-q0067	q0217	q0248	q0454	q0495	-q0967	q1161	-q2068	-q4448	q3921	1,0963
v ₈	q0290	q0075	q0885	q0122	q0012	q0717	-q0136	q1521	-q1229	-q6515	q1749	q8892	-q3616
v ₉	-q0447	-q0205	-q0467	-q0040	q0187	q0045	-q0276	q0291	-q1490	-q0380	q6919	-q0173	q0779
v ₁₀	q0538	q1391	q1456	q0193	q0144	-q0052	-q0013	-q0361	-q0063	q2449	q1404	-q0334	-q0885
v ₁₁	q0420	q0613	q0300	-q0174	q0005	q0160	-q0007	q1277	q0477	-q2687	q0046	-q3907	-q0128
v ₁₂	-q0018	-q0152	q0124	-q0618	-q0014	-q0016	q0	-q2077	q2839	-q0488	q1074	q0607	-q0341
v ₁₃	q0057	q0005	q0067	q0029	q0052	-q0016	q0002	-q1856	-q0285	-q1143	-q0493	-q0661	-q0342

TABLA XI-5 MATRIZ "L" DE LAS FORMAS DE LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION

PARA EL ISOTOPO GEM D₂ (EN EL PLANO)

	q ₁	q ₂	q ₅	q ₃	q ₆	q ₄	q ₇	β ₁	β ₄	β ₂	β ₅	β ₃	β ₆
v ₁	00036	-00029	-00046	-00001	-07356	-00006	07450	00002	-00693	00005	01595	-00011	-00586
v ₂	00059	00002	-00645	00004	07221	-00005	07069	-00062	-00008	00055	01138	-00014	-01947
v ₃	00081	-00116	-00057	-05213	-00002	05726	00003	-00990	-00009	02048	00024	-00592	-00053
v ₄	00145	-01085	00054	05415	-00001	04794	-00004	00100	-00220	01230	00137	-02324	-00015
v ₅	-00389	-00277	01408	-00039	00231	00061	00911	00629	-00003	-00765	-09033	00481	13716
v ₆	-03692	01496	01387	00130	00017	00377	00112	01478	01533	-01710	-00830	00125	-01911
v ₇	-00018	-02975	01776	-00407	00114	-00462	-00075	02800	-02954	00638	02902	-03039	-01557
v ₈	00232	00669	01025	00176	00088	00767	-00078	01087	-01140	-06093	02850	08738	00521
v ₉	-00249	00630	-00091	00014	00126	-00210	-00070	-00827	-00188	02986	03831	-03586	04494
v ₁₀	00680	01374	01508	00191	-00001	-00072	00113	-00519	00668	02439	-01400	-00365	-00899
v ₁₁	-00419	00585	-00280	00179	-00012	-00158	-00014	-01234	-00632	02712	00309	03898	-00060
v ₁₂	-00040	-00175	00087	-00027	00016	-00015	00024	-01552	03008	-00115	00808	00845	00063
v ₁₃	00050	-00038	00095	00023	00023	-00020	-00001	-02368	00509	-01248	-00152	-00478	-00466

TABLA XI-6 MATRIZ "L" DE LAS FORMAS DE LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION PARA

EL ISÓTOPO TRANS D_1 (EN EL PLANO)

	q_1	q_2	q_5	q_3	q_6	q_4	q_7	β_1	β_4	β_2	β_5	β_3	β_6
v_1	00035	-00046	-00026	-07356	00006	07450	-00097	-00693	00007	01595	-00007	-00586	-00027
v_2	00065	-00019	-00044	-00110	-00732	00026	10275	-00045	-00538	00050	01552	-00030	-01259
v_3	00059	-00645	-00001	07220	-00001	07069	00055	-00008	-00066	01138	00065	-01947	-00022
v_4	00045	00076	-00743	00002	07477	-00006	00495	-00148	00710	00089	-00380	00014	-01653
v_5	00056	01188	-00379	00223	-00013	00892	00064	-00143	00397	-08889	-00690	13805	01279
v_6	-03706	01545	01473	00048	00080	00220	00208	01525	01582	-01928	-01830	-00172	-00412
v_7	00029	02527	-03006	00129	-00481	-00038	-00378	-02700	01474	02247	01671	-00743	-06186
v_8	-00001	01535	-00359	00040	00218	-00078	00489	-01571	01570	02348	-04583	-01823	11087
v_9	-00010	00270	00953	00154	00010	-00094	00084	-00571	-00076	04411	-00809	04357	-00902
v_{10}	-00147	00422	00303	00004	00235	00046	-00260	00276	-01544	00251	06132	00690	00099
v_{11}	00896	01494	01487	00002	00058	00103	00057	00690	00378	-01656	-00780	-01208	-01365
v_{12}	00038	-00038	00109	00025	00055	-00022	00006	-02567	00192	-00807	-00369	-00323	-00443
v_{13}	00018	00126	-00122	00014	00022	00009	00000	01736	-02911	00211	-01171	-00431	00270

TABLA XI-7 MATRIZ "L" DE LA FORMA DE LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION PARA EL ISOTOPO TRANS-CIS (EN EL PLANO)

	q ₁	q ₂	q ₃	q ₄	q ₅	q ₆	q ₇	q ₈	q ₉	q ₁₀	q ₁₁	q ₁₂	q ₁₃	q ₁₄	q ₁₅	q ₁₆
v ₁	q0014	-q0380	-q0001	1j0279	-q0038	-q0740	q0578	q0520	-q0071	-q0497	q0117	-q0704	-q0050			
v ₂	q0064	q0000	-q0442	-q0580	-q0731	q0035	1j0259	-q0067	-q0535	q0067	q1548	q0025	-q1258			
v ₃	q0153	-q0827	-q0016	q0515	q0031	q7365	-q0001	-q0665	-q0134	q3256	q0114	-q3002	-q0087			
v ₄	q0044	q0079	-q0742	-q0001	q7477	-q0034	q0495	-q0145	q0710	q0082	-q0381	-q0012	-q1653			
v ₅	-q3703	q1533	q1489	q0072	q0082	q0442	q0216	q1494	q1568	-q2195	-q1884	q0738	-q0312			
v ₆	q0295	q1058	-q0560	q0181	q0003	q1323	q0054	-q0309	q0371	-q9183	-q0680	1j1467	q1735			
v ₇	q0012	-q2532	q2990	-q0125	q0481	-q0027	q0376	q2706	-q2490	-q2265	-q1647	q0591	q6201			
v ₈	-q0023	q1513	-q0320	q0044	q0216	-q0113	q0490	q1582	q1561	q1759	-q4586	-q1833	1j0010			
v ₉	q0729	q1236	q1630	q0105	q0016	q0085	q0129	-q0048	q0394	q0789	-q2052	q2402	-q1699			
v ₁₀	-q0038	q0623	q0560	q0023	q0240	q0088	-q0243	q0252	-q1495	q0346	q5881	q1123	-q0169			
v ₁₁	-q0456	-q0724	-q0390	q0094	-q0014	-q0150	q0006	-q1186	-q0548	q2391	-q0123	q4103	q0158			
v ₁₂	-q0026	q0102	-q0159	q0	-q0024	q0050	-q0003	q2942	-q2143	q0788	-q0550	q0253	q0483			
v ₁₃	q0058	q0098	-q0017	q0051	q0051	-q0014	q0002	-q0259	-q1938	-q0518	-q1052	-q1041	-q0064			

TABLA XI-8 MATRIZ "L" DE LAS FORMAS DE LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION PARA

EL ISOTOPO CIS D₃ (EN EL PLANO)

	q ₁	q ₂	q ₅	q ₃	q ₆	q ₄	q ₇	β ₁	β ₄	β ₂	β ₅	β ₃	β ₆
v ₁	q0010	q0023	-q0379	q0003	1,0296	q0001	-q0741	-q0041	q0523	q0030	-q0500	q0	-0,0705
v ₂	q0081	-q0116	-q0050	-q5213	-q0005	q5726	-q0058	-q0989	-q0005	q2047	-q0009	-q0591	0,0027
v ₃	q0154	-q0008	-q0829	-q0069	q0515	q0009	q7365	-q0145	-q0663	q0121	q3254	-q0018	-q3001
v ₄	q0146	-q1086	q0049	q5415	q0001	q4794	q0036	q0099	-q0224	q1231	q0157	-q2324	-q0032
v ₅	-q3695	q1436	q1580	q0122	q0077	q00390	q0496	q1547	q1469	-q1850	-q2530	q0263	q1155
v ₆	q0452	-q0864	q1169	-q0083	q0189	-q0079	q1302	q0500	-q0556	-q0333	-q8955	q0260	1,1425
v ₇	-q0092	-q2902	q2715	-q0402	00113	-00449	-00104	02789	-02938	00628	03588	-03046	-02011
v ₈	q0329	q0560	q1087	q0178	q0059	q0790	-q0044	q1200	-q1064	-q6508	q1627	q9316	-q0285
v ₉	q0455	q1496	q1277	q0186	q0086	-q0113	q0123	-q0852	q0174	q3103	q0762	-q1430	q2439
v ₁₀	-q0576	-q0634	-q0709	q0083	q0059	-q0102	-1,1132	-q1056	-q1164	q1490	q1946	q2177	q2917
v ₁₁	q0041	q0242	-q0255	-q0162	q0079	q0119	-q0070	q0669	-q0339	-q2290	q1392	-q3363	q3080
v ₁₂	-q0024	-q0168	q0108	-q0017	q0001	-q0020	q0048	-q2325	q2893	-q0605	q0731	q0530	q0140
v ₁₃	q0073	q0021	q0081	q0032	q0016	-q0015	-q0018	-q1587	-q0471	-q1040	-q0540	-q0619	-q0903

TABLA XII-1 MATRICES DIAGONALES A

UREA			UREA D ₄		
$\omega_{i \text{exp}}(\text{cm}^{-1})$	$d_{i 0^{\circ}\text{K}}$	$d_{i 298^{\circ}\text{K}}$	$\omega_{i \text{exp}}(\text{cm}^{-1})$	$d_{i 0^{\circ}\text{K}}$	$d_{i 298^{\circ}\text{K}}$
3449	0,0049	0,0049	2591	0,0065	0,0065
3449	0,0049	0,0049	2591	0,0065	0,0065
3347	0,0050	0,0050	2437	0,0069	0,0069
3347	0,0050	0,0050	2437	0,0069	0,0069
1687	0,0100	0,0100	1621	0,0104	0,0104
1632	0,0103	0,0103	1485	0,0114	0,0114
1606	0,0105	0,0105	1249	0,0135	0,0136
1467	0,0115	0,0115	1157	0,0146	0,0147
1157	0,0146	0,0147	1002	0,0168	0,0171
1,157	0,0146	0,0147	888	0,0190	0,0195
1,005	0,0168	0,0170	853	0,0198	0,0204
574	0,0294	0,0332	508	0,0332	0,0394
560	0,0301	0,0344	474	0,0356	0,0436

TABLA XII-2 MATRICES DIAGONALES A

UREA TRANS-D ₃			UREA CIS-D ₃		
$\omega_{i \text{exp}}(\text{cm}^{-1})$	$\int_{i0^\circ\text{K}}$	$\int_{i298^\circ\text{K}}$	$\omega_{i \text{exp}}(\text{cm}^{-1})$	$\int_{i0^\circ\text{K}}$	$\int_{i 298^\circ\text{K}}$
3421	0,0049	0,0049	3421	0,0049	0,0049
2596	0,0065	0,0065	2596	0,0065	0,0065
2518	0,0067	0,0067	2518	0,0067	0,0067
2437	0,0069	0,0069	2437	0,0069	0,0069
1605	0,0105	0,0105	1605	0,0105	0,0105
1480	0,0114	0,0118	1540	0,0110	0,0110
1405	0,0117	0,0118	1480	0,0114	0,0114
1212	0,0140	0,0141	1212	0,0139	0,0140
1055	0,0160	0,0162	1055	0,0160	0,0162
1000	0,0169	0,0171	945	0,0178	0,0182
888	0,0190	0,0195	888	0,0190	0,0195
525	0,0321	0,0377	525	0,0321	0,0376
503	0,0335	0,0400	486	0,0346	0,0418

TABLA XII-3 MATRICES DIAGONALES A

UREA GEM d ₂			UREA TRANS-CIS		
ω_i exp cm ⁻¹	d_i 0°K	d_i 298°K	ω_i exp cm ⁻¹	d_i 0°K	d_i 298°K
3485	0,0049	0,0049	3422	0,0049	0,0049
3358	0,0050	0,0050	3422	0,0050	0,0050
2595	0,0065	0,0065	2516	0,0067	0,0067
2438	0,0069	0,0069	2516	0,0069	0,0069
1650	0,0102	0,0102	1620	0,0104	0,00104
1620	0,0104	0,0104	1560	0,0108	0,00108
1485	0,0114	0,0114	1485	0,0114	0,0114
1216	0,00139	0,0139	1345	0,0125	0,0126
1140	0,0148	0,0149	1057	0,0160	0,0161
998	0,0169	0,0171	998	0,0169	0,0171
886	0,0190	0,0195	886	0,0190	0,0196
550	0,0307	0,0355	550	0,0307	0,0355
520	0,0324	0,0380	520	0,0324	0,0380

TABLA XII-4 MATRICES DIAGONALES A

UREA TRANS d_1			UREA CIS d_1		
ω_i exp (cm^{-1})	d_i 0°K	d_i 298°K	ω_i exp(cm^{-1})	d_i 0°K	d_i 298°K
3485	0,0048	0,0048	3485	0,0048	0,0048
3420	0,0049	0,0049	3420	0,0049	0,0049
3352	0,0050	0,0050	3352	0,0050	0,0050
2514	0,0067	0,0067	2514	0,0067	0,0067
1660	0,0101	0,0102	1660	0,0102	0,0102
1610	0,0105	0,0105	1610	0,0105	0,0105
1480	0,0114	0,0114	1540	0,0109	0,0110
1393	0,0121	0,0121	1466	0,0114	0,0114
1155	0,0146	0,0147	1155	0,0146	0,0147
1060	0,0159	0,0160	1060	0,0159	0,0160
1003	0,0168	0,0171	922	0,0183	0,0187
555	0,0304	0,0348	555	0,0304	0,0348
532	0,0317	0,0370	532	0,0317	0,0370

TABLA XII-5 MATRICES DIAGONALES A

UREA TRANS-TRANS			UREA CIS-CIS		
$\omega_i \text{ exp}(\text{cm}^{-1})$	$\delta_{i0^\circ\text{K}}$	$\delta_{i 298^\circ\text{K}}$	$\omega_i \text{ exp}(\text{cm}^{-1})$	$\delta_{i0^\circ\text{K}}$	$\delta_{i 298^\circ\text{K}}$
3422	0,0049	0,0049	3422	0,0048	0,0048
3422	0,0049	0,0049	3422	0,0049	0,0049
2516	0,0067	0,0067	2516	0,0067	0,0067
2516	0,0067	0,0067	2516	0,0069	0,0069
1620	0,0104	0,0104	1620	0,0104	0,0104
1540	0,0114	0,0114	1560	0,0108	0,0108
1390	0,0121	0,0122	1540	0,0109	0,0110
1345	0,0125	0,0126	1465	0,0115	0,0115
1057	0,0155	0,0157	1086	0,0155	0,0157
998	0,0159	0,0161	886	0,0183	0,0183
998	0,0169	0,0172	886	0,0190	0,0196
550	0,0307	0,0355	550	0,0307	0,0355
520	0,0324	0,0381	520	0,0324	0,0381

TABLA XIII MATRIZ DE ELEMENTOS DE TRANSFORMACIONES T

	q_1	q_2	q_5	q_3	q_6	q_4	q_7	β_1	β_4	β_2	β_5	β_3	β_6
d_1		q8226	q8526					-q7059	-q7059				
d_2			q9058		q8199						q5725		
d_3					q8660		q8660						q5000
d_4	q8609		q8836					q6325					
d_5		q9213	q7657		q9399		q5273	q5273		q3417			
d_6	q9342	q7923				q9246	q4434		q3810	q3810			
d_7		q5708	q9907				q3778	-11093	-11093		-q9259		-q9259
d_8	q5869		q9970					10065		q9020			
d_9		q8534	q8534	q8796	q8796		17056	-q2289		q4776			
d_{10}			q9058				q8199	-10678			-q5725		-q5725
d_{11}		q8526	q8526			-q0262	-q0262	17056	-q9997	-q9997	-q9997	-q9997	-q9997
d_{12}		q5509	q9937	q9982		q3999		-10678	q0589	q9165			q9165
d_{13}		q9058		q8199					q5725				

TABLA XIV-1 AMPLITUDES PRIMARIAS Y SECUNDARIAS PARA
UREA Y UREA D₄ a 0°K y 298°K

UREA

Enlace	Amplitud Primaria (Å)			Amplitud Secundaria (Å)	
	0°K	298°K	distancia	0°K	298°K
C=O	0,03946	0,03949	d ₁	0,04883	0,05063
C-N	0,04292	0,04302	d ₂	0,09026	0,09040
C-N	0,04292	0,04302	d ₃	0,11756	0,11759
N-H	0,07262	0,07262	d ₄	0,05175	0,05365
N-H	0,07262	0,07262	d ₅	0,09585	0,09649
N-H	0,07289	0,07289	d ₆	0,09710	0,09789
N-H	0,07289	0,07289	d ₇	0,13087	0,13375
			d ₈	0,11848	0,12135
			d ₉	0,10750	0,10765
			d ₁₀	0,09935	0,09970
			d ₁₁	0,23940	0,24073
			d ₁₂	0,16166	0,16248

Continuación Tabla XIV-1

UREA - D₄

Enlace	Amplitud Primaria (Å)			Amplitud Secundaria (Å)	
	0°K	298°K	distancia	0°K	298°K
C=O	0,03950	0,03955	d ₁	0,049	0,053
C-N	0,04292	0,04305	d ₂	0,079	0,080
C-N	0,04292	0,04305	d ₃	0,099	0,099
N-H	0,06192	0,06192	d ₄	0,051	0,053
N-H	0,06192	0,06192	d ₅	0,087	0,087
N-H	0,06210	0,06210	d ₆	0,084	0,085
n-H	0,06210	0,06210	d ₇	0,110	0,110
			d ₈	0,102	0,108
			d ₉	0,091	0,092
			d ₁₀	0,084	0,085
			d ₁₁	0,026	0,229
			d ₁₂	0,146	0,149

TABLA XIV-2 AMPLITUDES PRIMARIAS Y SECUNDARIAS PARA UREA

CIS D₁ y UREA CIS-CIS

CIS D₁

Enlace	Amplitud Primaria (Å)		distancia	Amplitud Secundaria (Å)	
	0°K	298°K		0°K	298°K
C=O	0,03964	0,03968	d ₁	0,05100	0,05276
C-N	0,04310	0,04326	d ₂	0,10839	0,10859
C-N	0,04306	0,04323	d ₃	0,10839	0,10859
N-H	0,07245	0,07245	d ₄	0,08385	0,08896
N-H	0,07247	0,07247	d ₅	0,09599	0,00669
N-H	0,07273	0,07273	d ₆	0,10699	0,10958
N-H	0,06231	0,06231	d ₇	0,10974	0,11502
			d ₈	0,16141	0,16974
			d ₉	0,10782	0,10799
			d ₁₀	0,08342	0,08436
			d ₁₁	0,23411	0,23566
			d ₁₂	0,15256	0,15372

Continuación Tabla XIV-2

CIS-CIS

Enlace	Amplitud Primaria (Å)		distancia	Amplitud Secundaria (Å)	
	0°K	298°K		0°K	298°K
C=O	0,03954	0,03958	d ₁	0,05072	0,05239
C-N	0,04311	0,04329	d ₂	0,09231	0,09263
C-N	0,04311	0,04329	d ₃	0,10854	0,10875
N-H	0,07213	0,07213	d ₄	0,08376	0,08902
N-H	0,07213	0,07213	d ₅	0,09565	0,09631
N-H	0,06275	0,06275	d ₆	0,09786	0,10107
N-H	0,06275	0,06275	d ₇	0,10920	0,11416
			d ₈	0,16116	0,16966
			d ₉	0,10795	0,10814
			d ₁₀	0,09391	0,08485
			d ₁₁	0,22534	0,22722
			d ₁₂	0,15296	0,15421

TABLA XIV-3 AMPLITUDES PRIMARIAS Y SECUNDARIAS DE UREA
TRANS D₃ y UREA TRANS-TRANS

Enlace	TRANS D ₃					
	Amplitud primaria (Å)			Amplitud secundaria (Å)		
	0°K	298°K	distancia	0°K	298°K	
C=O	0,03973	0,03977	d ₁	0,05092	0,05288	
C-N	0,04317	0,04366	d ₂	0,07978	0,08052	
C-N	0,04340	0,04396	d ₃	0,10814	0,10840	
N-H	0,06188	0,06188	d ₄	0,08464	0,09035	
N-H	0,06174	0,06174	d ₅	0,08669	0,08765	
N-H	0,06205	0,06206	d ₆	0,09792	0,10151	
N-H	0,07267	0,07267	d ₇	0,12627	0,12992	
			d ₈	0,15184	0,16232	
			d ₉	0,09229	0,09258	
			d ₁₀	0,09674	0,09714	
			d ₁₁	0,23440	0,23619	
			d ₁₂	0,15772	0,15907	

Continuación Tabla XIV-3

TRANS - TRANS

Enlace	Amplitud Primaria (\AA)		distancia	Amplitud Secundaria (\AA)	
	0°K	298°K		0°K	298°K
C=O	0,03961	0,03965	d ₁	0,05070	0,05247
C-N	0,04337	0,04356	d ₂	0,07959	0,08018
C-N	0,04337	0,04356	d ₃	0,01098	0,01096
N-H	0,06174	0,06175	d ₄	0,08492	0,09064
N-H	0,06174	0,06175	d ₅	0,08649	0,08739
N-H	0,07270	0,07270	d ₆	0,10743	0,11044
N-H	0,07270	0,07270	d ₇	0,12617	0,12943
			d ₈	0,15218	0,16263
			d ₉	0,9190	0,09225
			d ₁₀	0,09668	0,09704
			d ₁₁	0,24189	0,24322
			d ₁₂	0,15782	0,15881

TABLA XIV-4 AMPLITUDES PRIMARIAS Y SECUNDARIAS PARA
UREA CIS-D₃ y UREA GEM d₂

CIS-d₃

Enlace	Amplitud Primaria (Å)			Amplitud Secundaria (Å)	
	0°K	298°K	distancia	0°K	298°K
C=O	0,03964	0,03968	d ₁	0,05078	0,05273
C-N	0,04311	0,04329	d ₂	0,09249	0,09283
C-N	0,04315	0,04333	d ₃	0,10854	0,10875
N-H	0,06187	0,06188	d ₄	0,08478	0,09042
N-H	0,07246	0,07246	d ₅	0,09588	0,09663
N-H	0,06206	0,06207	d ₆	0,09814	0,10169
N-H	0,06227	0,06227	d ₇	0,10958	0,11526
			d ₈	0,16313	0,17233
			d ₉	0,10231	0,10233
			d ₁₀	0,08330	0,08423
			d ₁₁	0,22316	0,22483
			d ₁₂	0,14698	0,14822

Continuación Tabla XIV-4

GEM D₂

Enlace	Amplitud Primaria (Å)			Amplitud Secundaria (Å)	
	0°K	298°K	distancia	0°K	298°K
C=O	0,03957	0,03962	d ₁	0,05187	0,05377
C-N	0,04319	0,04338	d ₂	0,09260	0,09291
C-N	0,04347	0,04369	d ₃	0,11738	0,11743
N-H	0,06193	0,06193	d ₄	0,08477	0,09017
N-H	0,07275	0,07275	d ₅	0,09604	0,09669
N-H	0,06213	0,06213	d ₆	0,09773	0,10103
N-H	0,07303	0,07303	d ₇	0,12804	0,13135
			d ₈	0,16203	0,17067
			d ₉	0,10265	0,10289
			d ₁₀	0,09798	0,09808
			d ₁₁	0,23518	0,23696
			d ₁₂	0,15915	0,16020

TABLA XIV-5 AMPLITUDES PRIMARIAS Y SECUNDARIAS PARA
UREA TRANS-CIS y UREA TRANS D₁

TRANS-CIS

Enlace	Amplitud Primaria (Å)			Amplitud Secundaria (Å)	
	0°K	298°K	distancia	0°K	298°K
C=O	0,03956	0,03960	d ₁	0,05101	0,05284
C-N	0,04325	0,04343	d ₂	0,08102	0,08167
C-N	0,04327	0,04345	d ₃	0,10969	0,10977
N-H	0,07247	0,07247	d ₄	0,08354	0,08875
N-H	0,06273	0,06274	d ₅	0,08735	0,08826
N-H	0,06228	0,06228	d ₆	0,09755	0,10072
N-H	0,07334	0,07334	d ₇	0,12759	0,13094
			d ₈	0,15028	0,15985
			d ₉	0,09929	0,09967
			d ₁₀	0,09786	0,09828
			d ₁₁	0,23645	0,23836
			d ₁₂	0,16471	0,16581

Continuación Tabla XIV-5

TRANS D₁

Enlace	Amplitud Primaria (Å)		Amplitud Secundaria (Å)	
	0°K	298°K	0°K	298°K
C=O	0,03973	0,03977	d ₁ 0,05112	0,05289
C-N	0,04325	0,04342	d ₂ 0,07959	0,08017
C-N	0,04340	0,04358	d ₃ 0,10838	0,10845
N-H	0,07245	0,07245	d ₄ 0,08444	0,08993
N-H	0,06179	0,06179	d ₅ 0,08676	0,08766
N-H	0,07272	0,07272	d ₆ 0,10730	0,11011
N-H	0,07268	0,07269	d ₇ 0,12688	0,13019
			d ₈ 0,15132	0,16138
			d ₉ 0,09816	0,09847
			d ₁₀ 0,24305	0,09722
			d ₁₁ 0,24305	0,24446
			d ₁₂ 0,16266	0,16362

TABLA XV MATRIZ C^X DE ELEMENTOS DE CORIOLIS INTERACCIONES PLANAS PARA UREA

	q1	q2	q5	q3	q6	q4	q7	β_1	β_4	β_2	β_5	β_3	β_6
q1	0,0	0,0710	-0,0710	0,0	0,0	0,0	0,0	-0,1495	0,1495	0,0322	-0,0322	0,0	0,0
q2	0,0	0,0742	0,0618	0,0	-0,0618	0,0	0,0	0,1495	-0,0070	-0,1502	-0,0280	0,0	0,0
q5	0,0	0,0	0,0	-0,0618	0,0	0,0618	0,0618	0,0070	-0,1495	0,0280	0,1502	0,0	0,0
q3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0618	0,0	-0,0264	0,0	1,0899	0,0	-1,0991	0,0
q6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	-0,0618	0,0	0,0264	0,0	-1,0899	0,0	1,0991
q4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	-0,0264	0,0	-0,0093	0,0	1,0991	0,0
q7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0264	0,0	0,0093	0,0	-1,0991
β_1								0,0	-0,1252	0,0878	0,0855	-0,0915	0,0
β_4								0,0	0,0	-0,0855	-0,0878	0,0	0,0915
β_2									0,0	-0,0406	0,1533	0,0	
β_5										0,0	0,0	-0,1533	
β_3											0,0	0,0	
β_6												0,0	0,0

Matriz C^X Cososimétrica ($C_{ij}^X = -C_{ji}^X$ y $C_{ii}^X = 0$)

TABLA XVI MATRIZ C^Y

* INTERACCIONES PLANAS-NO PLANAS

q ₁	q ₀	q ₀	q ₀	q ₀	q ₀
q ₂	q ₂₀₀₈	-q ₀₂₉₄	-q ₀₀₁₄	q ₀₁₇₉	q ₁₀₆₀
q ₅	-q ₂₀₀₈	-q ₀₀₁₄	-q ₀₂₉₄	q ₁₀₆₀	q ₀₁₇₉
q ₃	-q ₀₄₄₄	q ₀₂₈₅	q ₅₀₃₄	-1,0824	-q ₀₅₂₁
q ₆	q ₀₄₄₄	q ₅₀₃₄	q ₀₂₈₅	-q ₀₅₂₁	-1,0824
q ₄	q ₀₀₁₃	-q ₀₀₀₉	q ₀₁₅₀	q ₀₂₈₉	q ₀₀₁₆
q ₇	-q ₀₀₁₃	q ₀₁₅₀	-q ₀₀₀₉	q ₀₀₁₆	q ₀₂₈₉
β ₁	-q ₂₈₀₃	-q ₀₆₀₈	q ₀₁₉₀	q ₀₄₄₁	-q ₁₀₀₃
β ₄	q ₂₈₀₃	q ₀₁₉₀	-q ₀₆₀₈	-q ₁₀₀₃	q ₀₄₄₁
β ₂	-q ₁₀₄₄	q ₀₀₂₁	q ₂₇₄₁	-q ₅₈₂₁	q ₀₃₇₂
β ₅	q ₁₀₄₄	q ₂₇₄₁	q ₀₀₂₁	q ₀₃₇₂	-q ₅₈₂₁
β ₃	q ₂₄₆₁	-q ₀₄₇₈	-q ₉₂₈₃	q ₈₀₉₆	q ₀₈₇₆
β ₆	-q ₂₄₆₁	-q ₉₂₈₃	-q ₀₄₇₈	q ₀₈₇₆	q ₈₀₉₆

TABLA XVII MATRIZ C^Z

q ₁	-q ₂₃₅₂	-q ₀₂₄₇	q ₀₂₄₇	q ₀₆₅₀	-q ₀₆₅₀
q ₂	q ₁₂₃₀	-q ₀₁₈₀	q ₀₀₁₁	q ₀₁₁₀	q ₀₆₄₉
q ₅	q ₁₂₃₀	-q ₀₀₁₁	q ₀₁₈₀	-q ₀₆₄₉	-q ₀₁₁₀
q ₃	q ₀₂₄₁	-q ₀₁₅₅	-q ₂₇₃₃	q ₅₈₇₇	q ₀₂₈₃
q ₆	q ₀₂₄₁	q ₂₇₃₃	q ₀₁₅₅	-q ₀₂₈₃	-q ₅₈₇₇
q ₄	-q ₀₅₀₆	q ₀₃₂₄	-q ₅₇₂₆	-q ₀₈₆₀	-q ₀₅₉₃
q ₇	-q ₀₅₀₆	q ₅₇₂₆	-q ₀₃₂₄	q ₀₅₉₃	q ₀₈₆₀
β ₁	q ₁₄₈₆	q ₀₆₆₈	q ₀₀₁₃	q ₀₁₃₃	q ₀₇₈₄
β ₄	q ₁₄₈₆	-q ₀₀₁₃	-q ₀₆₆₈	-q ₀₇₈₄	-q ₀₁₃₃
β ₂	-q ₁₉₃₁	q ₀₅₀₂	q ₅₀₂₀	-1,0956	-q ₁₅₉₀
β ₅	-q ₁₉₃₁	-q ₅₀₂₀	-q ₀₅₀₂	q ₁₅₉₀	1,0956
β ₃	q ₀₄₅₈	-q ₀₁₁₉	-q ₅₂₀₅	1,0846	q ₀₅₃₇
β ₆	q ₀₄₅₈	q ₅₂₀₅	q ₀₁₁₉	-q ₀₅₃₇	-1,0846

Matriz C^Y COSOSIMETRICA

Matriz C^Z COSOSIMETRICA (C^Z_{ij} = C^Z_{ji})

TABLA XVIII MATRIZ CONSTANTES DE CORIOLIS

$\zeta^x B_1 \times A_1$

	A_1							
	\mathcal{J}_1	\mathcal{J}_2	\mathcal{J}_3	\mathcal{J}_4	\mathcal{J}_5	\mathcal{J}_6	\mathcal{J}_7	
B_1	\mathcal{J}_{10}	-0,0031	-0,1679	0,9356	-0,0176	0,2818	-0,1206	-0,0469
\mathcal{J}_{11}	-0,1545	-0,0064	0,2953	0,0998	-0,7666	0,3357	0,4233	
\mathcal{J}_{12}	-0,8928	0,2079	0,0147	0,2055	0,0234	0,0014	-0,3377	
\mathcal{J}_{13}	-0,2857	0,2884	-0,0092	-0,7000	0,1231	-0,2708	0,5119	
\mathcal{J}_{14}	0,3116	0,8708	0,1867	0,0403	-0,1737	-0,0878	-0,2499	
\mathcal{J}_{15}	0,0210	-0,2213	0,0385	-0,6634	-0,3320	0,1613	-0,6176	

MATRIZ DE CORIOLIS ζ^y

TABLEA XIX

$A_1 \times A_2$

$B_1 \times B_2$

	ψ_8	ψ_9		ψ_{16}	ψ_{17}	ψ_{18}
ψ_1	0,5548	0,2097	ψ_{10}	-0,0115	0,3711	0,4549
ψ_2	-0,6466	-0,1302	ψ_{11}	-0,0567	0,4753	0,4577
ψ_3	0,5933	-0,2543	ψ_{12}	-0,5910	0,4862	0,1685
ψ_4	-0,264	0,1188	ψ_{13}	0,7005	0,3103	0,1560
ψ_5	0,1583	-0,2910	ψ_{14}	-0,1347	-0,4776	0,5975
ψ_6	-0,0891	0,4475	ψ_{15}	0,4650	-0,3751	0,0828
ψ_7	-0,2203	0,9236				

TABLA XX MATRIZ DE CORIOLIS ζ^2

	$A_1 \times B_2$		$B_1 \times A_2$	
	ψ_{16}	ψ_{17}	ψ_{18}	ψ_{19}
ψ_1	-0,1025	-0,2155	0,6989	ψ_{10} 0,1778 0,7321
ψ_2	-0,922	-0,6604	0,2240	ψ_{11} 0,4533 -0,5497
ψ_3	0,0371	-0,6228	-0,4714	ψ_{12} -0,7401 -0,1040
ψ_4	0,9136	-0,1787	0,0838	ψ_{13} -0,3162 -0,0802
ψ_5	-0,0004	0,2507	0,1397	ψ_{14} -0,3907 -0,1156
ψ_6	0,1838	0,0317	-0,0687	ψ_{15} 0,1841 -0,2733
ψ_7	-0,3253	0,2160	-0,5547	

TABLA XXI MATRIZ DE COEFICIENTES DE PARTICIPACION (F^{-1}) DE UREA

	q ₁	q ₂	q ₅	q ₃	q ₆	q ₄	q ₇	β ₁	β ₄	β ₂	β ₅	β ₃	β ₆
q ₁	-q ₁ 018	-q ₀ 142	-q ₀ 138	-q ₀ 006	-q ₀ 008	-q ₀ 025	-q ₀ 024	-q ₀ 304	-q ₀ 301	q ₀ 163	q ₀ 163	-q ₀ 109	-q ₀ 143
q ₂	-q ₀ 142	q ₁ 369	-q ₀ 089	-q ₀ 008	-q ₀ 007	q ₀ 022	q ₀ 023	-q ₀ 245	q ₀ 649	-q ₀ 287	-q ₀ 507	q ₀ 522	q ₀ 134
q ₅	-q ₀ 138	-q ₀ 089	q ₁ 381	-q ₀ 005	-q ₀ 010	q ₀ 022	q ₀ 024	q ₀ 648	-q ₀ 238	-q ₀ 462	-q ₀ 340	q ₀ 184	q ₀ 462
q ₃	-q ₀ 006	-q ₀ 008	-q ₀ 005	q ₁ 563	-q ₀ 001	q ₀ 007	q ₀ 001	q ₀ 015	q ₀ 007	-q ₀ 9968	-q ₀ 041	q ₀ 104	-q ₀ 017
q ₆	-q ₀ 008	-q ₀ 007	-q ₀ 010	-q ₀ 001	q ₁ 563	q ₀ 001	q ₀ 007	q ₀ 006	q ₀ 013	-q ₀ 039	-q ₀ 065	-q ₀ 015	q ₀ 109
q ₄	-q ₀ 025	q ₀ 022	q ₀ 022	q ₀ 007	q ₀ 001	q ₁ 599	q ₀ 001	q ₀ 019	-q ₀ 004	-q ₀ 325	q ₀ 010	q ₀ 454	-q ₀ 011
q ₇	-q ₀ 024	q ₀ 023	q ₀ 024	q ₀ 001	q ₀ 007	q ₀ 001	q ₁ 599	-q ₀ 003	q ₀ 021	q ₀ 012	-q ₀ 332	-q ₀ 009	q ₀ 446
β ₁	-q ₀ 304	-q ₀ 245	q ₀ 648	q ₀ 015	q ₀ 006	q ₀ 019	-q ₀ 003	q ₆ 463	-q ₃ 951	-q ₀ 071	-q ₀ 325	-q ₀ 128	q ₀ 350
β ₄	-q ₀ 301	q ₀ 649	-q ₀ 238	q ₀ 007	q ₀ 013	-q ₀ 004	q ₀ 021	-q ₃ 951	q ₆ 472	-q ₀ 109	q ₀ 109	q ₀ 377	-q ₀ 178
β ₂	q ₀ 163	-q ₀ 287	-q ₀ 462	-q ₀ 068	-q ₀ 039	-q ₀ 325	q ₀ 012	q ₀ 071	-q ₀ 305	q ₉ 474	-q ₀ 120	-q ₀ 5410	q ₀ 871
β ₅	q ₀ 134	-q ₀ 507	-q ₀ 340	-q ₀ 41	-q ₀ 065	q ₀ 010	-q ₀ 332	-q ₀ 325	-q ₀ 109	-q ₀ 120	q ₉ 554	q ₀ 861	-q ₀ 5302
β ₃	-q ₀ 109	q ₀ 522	q ₀ 184	q ₀ 104	-q ₀ 015	q ₀ 454	-q ₀ 009	-q ₀ 128	q ₀ 377	-q ₀ 5310	q ₀ 861	1,5266	-q ₀ 674
β ₆	-q ₀ 143	q ₀ 134	q ₀ 462	-q ₀ 017	q ₀ 109	-q ₀ 011	q ₀ 446	q ₀ 350	-q ₀ 178	q ₀ 871	-q ₀ 5302	-q ₀ 674	1,5411

APENDICE I

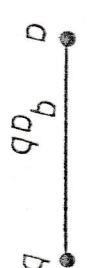
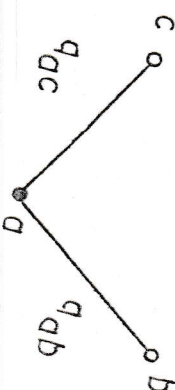
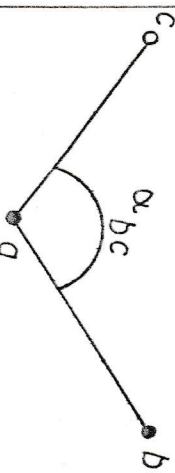
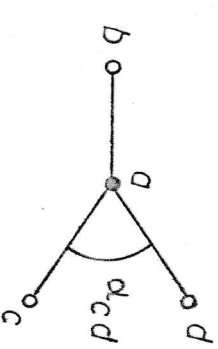
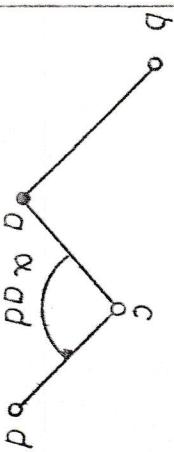
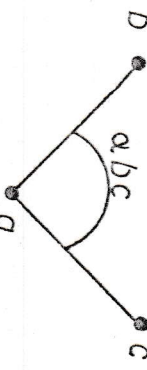
La determinación de los elementos de la matriz de Energía Cinética "G", se hace a través de las expresiones que se muestran a continuación. Usa sólo parámetros geométricos y masas atómicas. La nomenclatura empleada es la siguiente:

$$\epsilon_a = (\text{masa del átomo } a)^{-1}$$

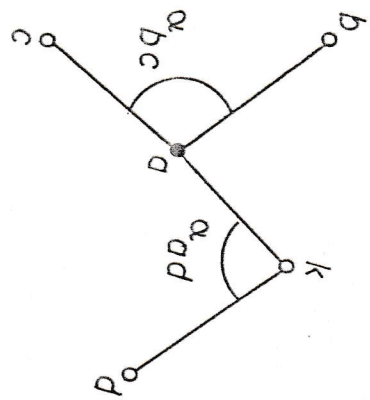
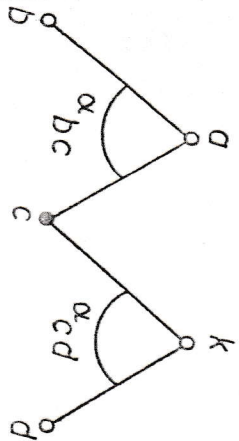
$$\sigma_{ab} = (\text{distancia del enlace } a-b)^{-1}$$

$$\psi_{cd}^{ab} = \text{ángulo formado por los enlaces } a-b \text{ y } c-d.$$

FORMULAS EXPLICITAS PARA DETERMINAR ELEMENTOS DE "G" (PLANOS)

Nº	Coord.	Figura	
1	q_{ab}, q_{ab}		$\epsilon_a + \epsilon_b$
2	q_{ab}, q_{ac}		$\epsilon_a \cos \rho_{bc}$
3	q_{ab}, β_{bc}		$-\epsilon_a \Gamma_{ac} \text{sen} \rho_{bc}$
4	q_{ab}, β_{cd}		$-\epsilon_a \frac{1}{\text{sen} \rho_{cd}} \left[\Gamma_{ac} (\cos \rho_{bd} - \cos \rho_{cd} \cos \rho_{bc}) + \Gamma_{ad} (\cos \rho_{bc} - \cos \rho_{cd} \cos \rho_{bd}) \right]$
5	q_{ab}, β_{ad}		$\epsilon_a \frac{\Gamma_{ac}}{\text{sen} \rho_{ad}} (\cos \rho_{cd} + \cos \rho_{ad} \cos \rho_{bc})$
6	β_{bc}, β_{bc}		$\epsilon_a (\Gamma_{ab}^2 + \Gamma_{ac}^2 - 2\Gamma_{ab} \Gamma_{ac} \cos \rho_{bc}) + \epsilon_b \Gamma_{ab}^2 + \epsilon_c \Gamma_{ac}^2$

N	Coord.	Figura	
7	β_{bc}, β_{bd}		$\frac{1}{\text{sen}^2_{bc} \text{sen}^2_{bd}} \left\{ \begin{aligned} & \left[\sigma_{ab} (\cos^2_{cd} - \cos^2_{bd} \cos^2_{bc}) \right] \left[\sigma_a (\epsilon + \epsilon) - \epsilon (\cos^2_{bc} \sigma_{ac} \right. \\ & \left. + \sigma_d \cos^2_{bd}) \right] + \epsilon \sigma_a \sigma_{ac} \sigma_d (1 - \cos^2_{bd} - \cos^2_{bc} + \cos^2_{bc} \cos^2_{bd} \cos^2_{cd}) \end{aligned} \right\}$
8	β_{bc}, β_{ad}		$-\frac{\sigma_{ab} (\cos^2_{bd} + \cos^2_{bc} \cos^2_{ad})}{\text{sen}^2_{bc} \text{sen}^2_{ad}} \left[\epsilon (\sigma_{ab} - \sigma_{ac} \cos) + \epsilon (\sigma_{ab} - \sigma_{bd} \cos^2_{ad}) \right]$
9	β_{bc}, β_{dk}		$\frac{\epsilon}{\sigma_{bc} \text{sen}^2_{kd}} \left[\begin{aligned} & \sigma_a \sigma_{dk} (\cos^2_{cd} - \cos^2_{kd} \cos^2_{ck} - \cos^2_{bc} \cos^2_{bd} + \\ & + \cos^2_{bc} \cos^2_{kd} \cos^2_{bk}) + \sigma_a \sigma_{ac} \sigma_{dk} (\cos^2_{bd} - \cos^2_{kd} \cos^2_{bk} - \cos^2_{bc} \cos^2_{cd} + \\ & + \cos^2_{bc} \cos^2_{kd} \cos^2_{ck}) + \sigma_{ab} \sigma_{ad} (\cos^2_{ck} - \cos^2_{kd} \cos^2_{cd} - \\ & - \cos^2_{bc} \cos^2_{bk} + \cos^2_{bc} \cos^2_{kd} \cos^2_{cd}) + \sigma_{ac} \sigma_{ad} (\cos^2_{bk} - \cos^2_{kd} \cos^2_{bd} - \\ & - \cos^2_{bc} \cos^2_{ck} + \cos^2_{bc} \cos^2_{kd} \cos^2_{cd}) \end{aligned} \right]$

A _i	Coord.	Figura
10	R _{bc} , R _{ad}	
11	R _{bc} , R _{cd}	

$$-\frac{\epsilon_a \sigma_{ak}}{\text{sen}^{\rho}_{bc} \text{sen}^{\rho}_{ad}} \left[\sigma_{ab} (\cos^{\psi}_{ac} + \cos^{\rho}_{ad} \cos^{\rho}_{kc} - \cos^{\rho}_{bc} \cos^{\psi}_{kd} - \right.$$

$$-\cos^{\rho}_{bc} \cos^{\rho}_{ad} \cos^{\rho}_{bk}) + \sigma_{ac} (\cos^{\psi}_{kd} + \cos^{\rho}_{ab} + \cos^{\rho}_{ad} \cos^{\rho}_{bk} -$$

$$\left. -\cos^{\rho}_{bc} \cos^{\psi}_{ac} - \cos^{\rho}_{bc} \cos^{\rho}_{ad} \cos^{\rho}_{ck}) \right]$$

$$\epsilon_c \sigma_{ac} \sigma_{kc} (\cos^{\psi}_{kd} - \cos^{\rho}_{cd} \cos^{\psi}_{kc} - \cos^{\rho}_{bc} \cos^{\psi}_{ac} +$$

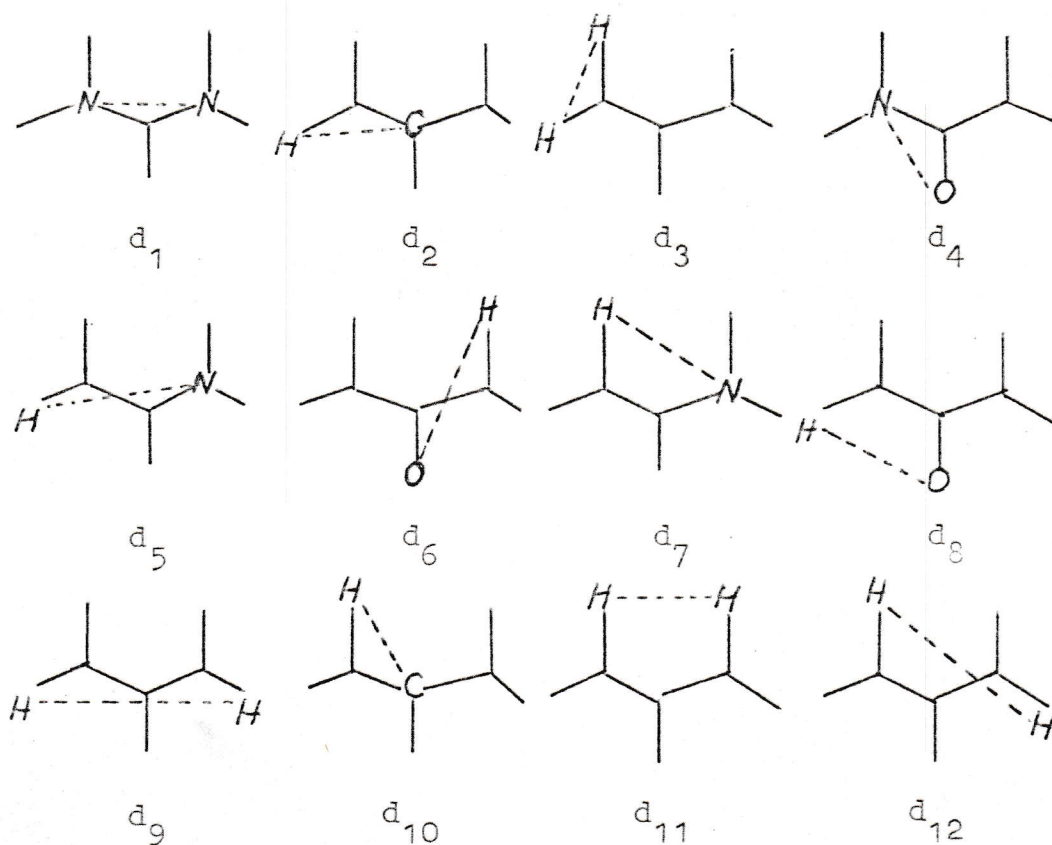
$$+\cos^{\rho}_{bc} \cos^{\rho}_{cd} \cos^{\rho}_{ak}) \frac{1}{\text{sen}^{\rho}_{bc} \text{sen}^{\rho}_{cd}}$$

APENDICE II

El cálculo de los elementos de la matriz de transformaciones T que se utiliza en la determinación teórica de las Amplitudes Medias de Vibración Secundarias, se realiza a través de una formulación propuesta por Morino y Kuchitsu.

Para realizar el cálculo de estos elementos es necesario, establecer las distancias interatómicas entre átomos no enlazados directamente.

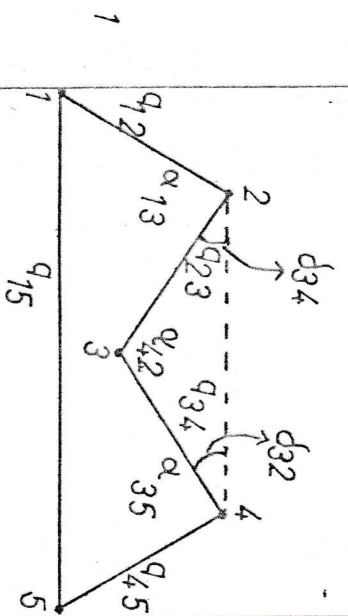
Para Urea, las distancias consideradas, se muestran en la siguiente figura:



FORMULAS EXPLICITAS PARA DETERMINAR LOS ELEMENTOS DE LA MATRIZ DE

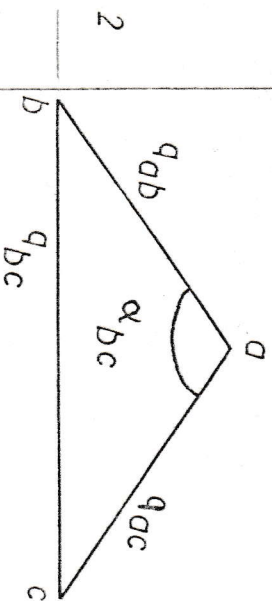
TRANSFORMACION T

Nº	Figura	
----	--------	--



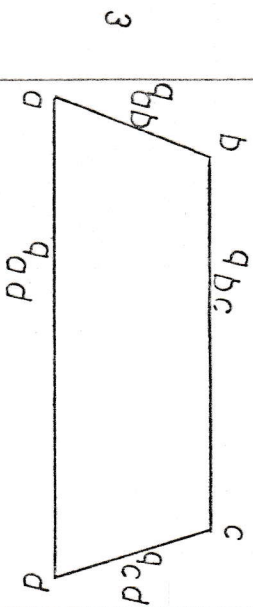
$$\begin{aligned}
 q_{15} &= d^{-1} \begin{Bmatrix} d & -d \cos \varphi \\ 12 & 23 \end{Bmatrix} + d \cos(\varphi - \varphi) - d \cos(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{12} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &+ d^{-1} \begin{Bmatrix} d & -d \cos \varphi \\ 23 & 12 \end{Bmatrix} - d \cos \varphi + d \cos(\varphi - \varphi) - d \cos(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{23} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &+ d^{-1} \begin{Bmatrix} d & -d \cos \varphi \\ 34 & 23 \end{Bmatrix} - d \cos \varphi + d \cos(\varphi - \varphi) - d \cos(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{34} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &+ d^{-1} \begin{Bmatrix} d & -d \cos \varphi \\ 45 & 34 \end{Bmatrix} + d \cos(\varphi - \varphi) - d \cos(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{45} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &+ d^{-1} \begin{Bmatrix} d & d \sin \varphi \\ 12 & 23 \end{Bmatrix} - d \sin(\varphi - \varphi) + d \sin(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{12} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &+ d^{-1} \begin{Bmatrix} d & d \sin \varphi \\ 23 & 12 \end{Bmatrix} + d \sin(\varphi - \varphi) - d \sin(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{23} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &\quad - d \begin{Bmatrix} d \sin(\varphi + \varphi) \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} \alpha_{42} + \\
 &+ d^{-1} \begin{Bmatrix} d & d \sin \varphi \\ 34 & 23 \end{Bmatrix} - d \sin(\varphi - \varphi) + d \sin(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{34} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &+ d^{-1} \begin{Bmatrix} d & d \sin \varphi \\ 45 & 34 \end{Bmatrix} + d \sin(\varphi - \varphi) - d \sin(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{45} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &\quad - d \begin{Bmatrix} d \sin(\varphi + \varphi) \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} \alpha_{13} + \\
 &+ d^{-1} \begin{Bmatrix} d & d \sin \varphi \\ 12 & 23 \end{Bmatrix} - d \sin(\varphi - \varphi) + d \sin(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{12} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &+ d^{-1} \begin{Bmatrix} d & d \sin \varphi \\ 23 & 12 \end{Bmatrix} + d \sin(\varphi - \varphi) - d \sin(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{23} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &\quad - d \begin{Bmatrix} d \sin(\varphi + \varphi) \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} \alpha_{35} + \\
 &+ d^{-1} \begin{Bmatrix} d & d \sin \varphi \\ 34 & 23 \end{Bmatrix} - d \sin(\varphi - \varphi) + d \sin(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{34} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &+ d^{-1} \begin{Bmatrix} d & d \sin \varphi \\ 45 & 34 \end{Bmatrix} + d \sin(\varphi - \varphi) - d \sin(\varphi + \varphi) \begin{Bmatrix} q_{45} + \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} q_{15} \\
 &\quad - d \begin{Bmatrix} d \sin(\varphi + \varphi) \\ 123 & 345 & 432 \end{Bmatrix} \alpha_{35}
 \end{aligned}$$

Nº Figura



$$q_{bc} = d^{-1} [d_{bc}^{-d} \cos \varphi_{bc}] q_{ab} + d^{-1} [d_{bc}^{-d} \cos \varphi_{bc}] q_{ac} +$$

$$+ d^{-1} [d_{bc}^{-d} \sin \varphi_{bc}] \alpha_{bc}$$



$$q_{da} = d^{-1} [d_{ab}^{-d} \cos \varphi_{ac} + d_{cd} \cos(\varphi_{ac} + \varphi_{bd})] q_{ab} +$$

$$+ d^{-1} [d_{bc}^{-d} \cos \varphi_{ac} - d_{cd} \cos \varphi_{bd}] q_{bc} +$$

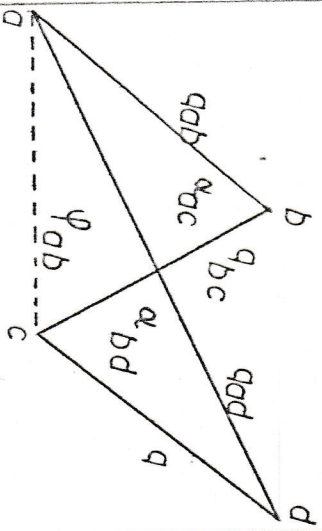
$$+ d^{-1} [d_{cd}^{-d} \cos \varphi_{bd} + d_{ab} \cos(\varphi_{ac} + \varphi_{bd})] q_{cd} +$$

$$+ d^{-1} [d_{bc}^{-d} \sin \varphi_{ac} - d_{ab} \sin(\varphi_{ac} + \varphi_{bd})] \alpha_{ac} +$$

$$+ d^{-1} [d_{bc}^{-d} \sin \varphi_{bd} - d_{ab} \sin(\varphi_{ac} + \varphi_{bd})] \alpha_{bd}$$

Nº

Figura



4

$$\begin{aligned}
 q_{ad} &= d_{ad}^{-1} [A] q_{cd} + \\
 &+ d_{ad}^{-1} [d_{ac}^{-1} BC + F (d_{ab}^{-1} d_{ac}^{-1} CD) / J] q_{ab} + \\
 &+ d_{ad}^{-1} [d_{ac}^{-1} EG - F (H + d_{ac}^{-1} DE) / J] q_{bc} + \\
 &+ d_{ad}^{-1} [d_{ac} F] q_{bd} + \\
 &+ d_{ad}^{-1} [d_{ac}^{-1} (d_{bc} BI - DF I / \text{sen} \varphi_{ab})] q_{ac}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A &= d_{cd}^{-1} d_{ac} \cos \phi & E &= d_{bc}^{-1} d_{ab} \cos \varphi_{ac} \\
 B &= d_{ac}^{-1} d_{cd} \cos \phi & F &= d_{cd} \text{sen} \phi \\
 C &= d_{ab}^{-1} d_{bc} \cos \varphi_{ac} & G &= d_{ac}^{-1} d_{cd} \cos \phi \\
 D &= d_{ac}^{-1} d_{bc} \cos \varphi_{ab} & H &= d_{bc}^{-1} d_{ac} \cos \varphi_{ab} \\
 & & I &= d_{ab} \text{sen} \varphi_{ac} \\
 \phi &= \varphi_{bd} + \varphi_{ab} & J &= d_{bc} \text{sen} \varphi_{ab}
 \end{aligned}$$

APENDICE III

La determinación de los elementos de las matrices de Coriolis C^α , se hace a través de expresiones explícitas desarrolladas en la literatura por R. Aroca y Y. Panchenco para las interacciones entre coordenadas planas (q, B) y coordenadas fuera del plano (θ, τ, χ). Para las interacciones entre las coordenadas del plano, se utilizan las expresiones desarrolladas por Ponomariov y Walsh.

A continuación se muestra estas fórmulas, que incluyen las siguientes generalizaciones:

$$\mu_a = (\text{masa del átomo } a)^{-1}$$

$$\rho_{ab} = (\text{distancia de enlace } a-b)^{-1}$$

$$\angle_{cd}^{ab} = \text{ángulo formado por los enlaces } a-b \text{ y } c-d.$$

$$(\mathcal{C}_{ab}, \mathcal{C}_\alpha) = \text{Es el seno del ángulo formado por el enlace } a-b \text{ y el eje.}$$

TABLA: FORMULAS EXPLICITAS PARA CIERTOS ELEMENTOS DE LA MATRIZ

DE CORIOLIS C^α

Fig de C^α	Formulas Explicitas
1 $C_{q\theta}^\alpha (1)$	$\frac{\mu_1^0 \rho_{41}}{\text{Sen}^{\rho_{342}} \rho} \left\{ \begin{array}{l} \text{Cos}^{\psi_{19}} \begin{matrix} 43 \\ 19 \end{matrix} (e_{42}, e_\alpha) - \text{Cos}^{\psi_{19}} \begin{matrix} 42 \\ 19 \end{matrix} (e_{43}, e_\alpha) \end{array} \right\}$
1 $C_{q\theta}^\alpha (2)$	$\frac{\mu_2^0 \rho_{42} \text{Sen}^{\rho_{143}}}{\text{Sen}^{2\rho} \rho} \left\{ \begin{array}{l} \text{Cos}^{\psi_{274}} \begin{matrix} 43 \\ 274 \end{matrix} (e_{43}, e_\alpha) + \text{Cos}^{\psi_{27}} \begin{matrix} 43 \\ 27 \end{matrix} (e_{42}, e_\alpha) \end{array} \right\}$
1 $C_{q\theta}^\alpha (3)$	$-\frac{\mu_3^0 \rho_{43} \text{Sen}^{\rho_{142}}}{\text{Sen}^{2\rho} \rho} \left\{ \begin{array}{l} \text{Cos}^{\psi_{42}} \begin{matrix} 35 \\ 42 \end{matrix} (e_{43}, e_\alpha) + \text{Cos}^{\psi_{435}} \begin{matrix} 42 \\ 435 \end{matrix} (e_{42}, e_\alpha) \end{array} \right\}$
1 $C_{q\theta}^\alpha (4)$	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mu_4^0 (\rho_{43} \text{Sen}^{\rho_{142}} + \rho_{42} \text{Sen}^{\rho_{143}})}{\text{Sen}^{2\rho} \rho} + \frac{(\mu_1 + \mu_4) \rho_{41}}{\text{Sen}^{\rho} \rho} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{Cos}^{\psi_{142}} \begin{matrix} 43 \\ 142 \end{matrix} (e_{43}, e_\alpha) - \text{Cos}^{\psi_{143}} \begin{matrix} 42 \\ 143 \end{matrix} (e_{42}, e_\alpha) \end{array} \right\}$

$$1 \quad \left. \begin{array}{l} C_{q_0 4}^\alpha (3) \\ R_0 \end{array} \right\} \left[\frac{(\mu_3 + \mu_4) \rho_{43} \text{Sen}^{\rho_{142}} + \mu_4 \rho_{42} \text{Sen}^{\rho_{143}} + \frac{\mu_4 \rho_{41}}{\text{Sen}^{\rho_{342}}}}{\text{Sen}^{\rho_{342}}} \right] \left\{ \left[\text{Cos}^{\rho_{342}} (e_{43}, e_{42}) - (e_{42}, e_{43}) \right] \right\}$$

$$1 \quad \left. \begin{array}{l} C_{q_0 4}^\alpha (2) \\ R_0 \end{array} \right\} \left[\frac{(\mu_2 + \mu_4) \rho_{42} \text{Sen}^{\rho_{143}} + \mu_4 \rho_{43} \text{Sen}^{\rho_{142}} + \frac{\mu_4 \rho_{41}}{\text{Sen}^{\rho_{342}}}}{\text{Sen}^{\rho_{342}}} \right] \left\{ \left[(e_{43}, e_{42}) - \text{Cos}^{\rho_{342}} (e_{42}, e_{43}) \right] \right\}$$

$$1 \quad \left. \begin{array}{l} C_{R_0}^\alpha (1) \\ R_0 \end{array} \right\} \left[\frac{\mu_1 \rho_{41} \rho_{41}}{\text{Sen}^{\rho_{342}} \text{Sen}^{\rho_{1910}}} \right] \left\{ \left[\left(\text{Cos}^{\rho_{43}} \rho_{10} - \text{Cos}^{\rho_{1910}} \text{Cos}^{\rho_{43}} \rho_{91} \right) (e_{42}, e_{42}) - \left(\text{Cos}^{\rho_{42}} \rho_{10} - \text{Cos}^{\rho_{1910}} \text{Cos}^{\rho_{42}} \rho_{91} \right) (e_{43}, e_{43}) \right] \right\}$$

$$1 \quad \left. \begin{array}{l} C_{R_0}^\alpha (3) \\ R_0 \end{array} \right\} \left[\frac{\mu_3 \rho_{43} \rho_{35} \text{Sen}^{\rho_{142}}}{\text{Sen}^{\rho_{342}} \text{Sen}^{\rho_{356}}} \right] \left\{ \left[\left(\text{Cos}^{\rho_{43}} \rho_{56} - \text{Cos}^{\rho_{356}} \text{Cos}^{\rho_{43}} \rho_{345} \right) (e_{42}, e_{42}) - \left(\text{Cos}^{\rho_{42}} \rho_{56} - \text{Cos}^{\rho_{356}} \text{Cos}^{\rho_{42}} \rho_{53} \right) (e_{43}, e_{43}) \right] \right\}$$

$$1 \quad \left. \begin{array}{l} C_{R_0}^\alpha (2) \\ R_0 \end{array} \right\} \left[\frac{\mu_2 \rho_{42} \rho_{72} \text{Sen}^{\rho_{143}}}{\text{Sen}^{\rho_{342}} \text{Sen}^{\rho_{278}}} \right] \left\{ \left[\left(\text{Cos}^{\rho_{78}} \rho_{43} - \text{Cos}^{\rho_{278}} \text{Cos}^{\rho_{72}} \rho_{43} \right) (e_{42}, e_{42}) - \left(\text{Cos}^{\rho_{78}} \rho_{42} - \text{Cos}^{\rho_{278}} \text{Cos}^{\rho_{72}} \rho_{42} \right) (e_{43}, e_{43}) \right] \right\}$$

	$\left\{ \frac{\mu_4^2 C_{41}^2 (C_{43} \text{Sen}^{\psi_{42}} + C_{42} \text{Sen}^{\psi_{43}}) + (\mu_1 + \mu_4) \rho_{41}^2}{\text{Sen}^{\psi_{342}} \text{Sen}^{\psi_{419}}} \right\} \left\{ (\text{Cos}^{\psi_{19}^{42}} + \text{Cos}^{\psi_{419}} \text{Cos}^{\psi_{42}}) (e_{43}, e_{\alpha}) - \right.$ $\left. - (\text{Cos}^{\psi_{19}^{43}} + \text{Cos}^{\psi_{43}} \text{Cos}^{\psi_{19}}) (e_{42}, e_{\alpha}) \right\} + \left\{ \frac{\mu_1 \rho_{19}^2 C_{41}}{\text{Sen}^{\psi_{342}} \text{Sen}^{\psi_{419}}} \right\} \left\{ (\text{Cos}^{\psi_{43}} + \text{Cos}^{\psi_{419}} \text{Cos}^{\psi_{19}^{43}}) (e_{42}, e_{\alpha}) - \right.$ $\left. - (\text{Cos}^{\psi_{42}} + \text{Cos}^{\psi_{419}} \text{Cos}^{\psi_{19}^{42}}) (e_{43}, e_{\alpha}) \right\}$
1 $C_{\theta}^{\alpha} \left(\begin{matrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{matrix} \right)$	$\left\{ \frac{(\mu_4 + \mu_3) \rho_{43}^2 \text{Sen}^{\psi_{42}} + \mu_4 C_{43}^2 \text{Sen}^{\psi_{42}}}{\text{Sen}^{\psi_{342}} \text{Sen}^{\psi_{435}}} + \frac{\mu_4^2 C_{43}^2 C_{41}}{\text{Sen}^{\psi_{342}} \text{Sen}^{\psi_{435}}} \right\} (\text{Cos}^{\psi_{35}^{42}} + \text{Cos}^{\psi_{435}} \text{Cos}^{\psi_{342}}) (e_{43}, e_{\alpha}) +$ $\left\{ \frac{\mu_3 \rho_{342}^2 \text{Sen}^{\psi_{42}}}{\text{Sen}^{\psi_{342}} \text{Sen}^{\psi_{435}}} \right\} \left\{ (e_{42}, e_{\alpha}) \text{Sen}^{\psi_{435}} - (\text{Cos}^{\psi_{342}} + \text{Cos}^{\psi_{435}} \text{Cos}^{\psi_{42}}) (e_{43}, e_{\alpha}) \right\}$
1 $C_{\theta}^{\alpha} \left(\begin{matrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{matrix} \right)$	$\left\{ \frac{\mu_4 C_{43}^2 C_{42} \text{Sen}^{\psi_{42}} + (\mu_4 + \mu_2) \rho_{42}^2 \text{Sen}^{\psi_{43}}}{\text{Sen}^{\psi_{342}}} + \frac{\mu_4^2 C_{41}^2 C_{42}}{\text{Sen}^{\psi_{342}}} \right\} (e_{42}, e_{\alpha}) -$ $\left\{ \frac{\mu_4^2 C_{43}^2 C_{42} \text{Sen}^{\psi_{43}} + (\mu_4 + \mu_3) \rho_{43}^2 \text{Sen}^{\psi_{42}}}{\text{Sen}^{\psi_{342}}} + \frac{\mu_4^2 C_{41}^2 C_{43}}{\text{Sen}^{\psi_{342}}} \right\} (e_{43}, e_{\alpha})$

$$C_{R\theta}^{\alpha} \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$- \left\{ \frac{(\mu_4 + \mu_2) C_{4,2}^2 \text{Sen}^{\psi}_{1,4,3} + \mu_4 C_{4,3} C_{4,2} \text{Sen}^{\psi}_{1,4,2} + \frac{\mu_4 C_{4,1} C_{4,2}}{\text{Sen}^{\psi}_{3,4,2} \text{Sen}^{\psi}_{7,2,4}}}{\text{Sen}^{\psi}_{3,4,2} \text{Sen}^{\psi}_{7,2,4}} \right\} \left\{ (\text{Cos}^{\psi}_{27} + \text{Cos}^{\psi}_{7,2,4} \text{Cos}^{\psi}_{3,4,2}) (e_{4,2}, e_{\alpha}) \right\} +$$

$$+ \left\{ \frac{\mu_2 C_{4,2} C_{2,7} \text{Sen}^{\psi}_{1,4,3}}{\text{Sen}^{\psi}_{3,4,2} \text{Sen}^{\psi}_{7,2,4}} \right\} \left\{ (\text{Cos}^{\psi}_{7,2,4} \text{Cos}^{\psi}_{2,7} + \text{Cos}^{\psi}_{3,4,2}) (e_{4,2}, e_{\alpha}) - \text{Sen}^{\psi}_{7,2,4} (e_{4,3}, e_{\alpha}) \right\}$$

$$C_{R\theta}^{\alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\left\{ \frac{(\mu_2 + \mu_4) C_{4,2}^2 \text{Sen}^{\psi}_{1,4,3} + \mu_4 C_{4,2} C_{4,3} \text{Sen}^{\psi}_{1,4,2} + \frac{\mu_4 C_{4,1} C_{4,2}}{\text{Sen}^{\psi}_{3,4,2} \text{Sen}^{\psi}_{2,4,1}}}{\text{Sen}^{\psi}_{3,4,2} \text{Sen}^{\psi}_{2,4,1}} \right\} \left\{ (\text{Cos}^{\psi}_{3,4,1} - \text{Cos}^{\psi}_{2,4,1} \text{Cos}^{\psi}_{3,4,2}) (e_{4,2}, e_{\alpha}) - \right.$$

$$\left. - \left\{ \frac{\mu_4 C_{4,1} (C_{4,3} \text{Sen}^{\psi}_{1,4,2} + C_{4,2} \text{Sen}^{\psi}_{1,4,3}) + \frac{C_{4,1}^2 (\mu_1 + \mu_4)}{\text{Sen}^{\psi}_{3,4,2} \text{Sen}^{\psi}_{2,4,1}}}{\text{Sen}^{\psi}_{3,4,2} \text{Sen}^{\psi}_{2,4,1}} \right\} \left\{ \text{Sen}^{\psi}_{1,4,2} (e_{4,3}, e_{\alpha}) + (\text{Cos}^{\psi}_{2,4,1} \text{Cos}^{\psi}_{3,4,1} - \text{Cos}^{\psi}_{3,4,2} (e_{4,2}, e_{\alpha})) \right\} \right\}$$

$C_{\theta\theta}^{\alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$	$\left[\begin{aligned} & \left(\mu_4 + \mu_3 \right) \rho_{43}^2 \text{Sen}^{\rho}_{142} + \mu_4 \rho_{42} \rho_{43} \text{Sen}^{\rho}_{143} + \frac{\mu_4 \rho_{41} \rho_{43}}{\text{Sen}^{\rho}_{342} \text{Sen}^{\rho}_{143}} \left\{ \text{Cos}^{\rho}_{143} \text{Cos}^{\rho}_{342} - \text{Cos}^{\rho}_{142} \right\} (e_{43}, e_{\alpha}) + \\ & \frac{\mu_4 \rho_{41} (\rho_{43} \text{Sen}^{\rho}_{142} + \rho_{42} \text{Sen}^{\rho}_{143})}{\text{Sen}^{\rho}_{342} \text{Sen}^{\rho}_{143}} + \frac{(\mu_1 + \mu_4) \rho_{41}^2}{\text{Sen}^{\rho}_{342} \text{Sen}^{\rho}_{143}} \left\{ \left(\text{Cos}^{\rho}_{143} \text{Cos}^{\rho}_{142} - \text{Cos}^{\rho}_{342} \right) (e_{43}, e_{\alpha}) + \text{Sen}^{\rho}_{143} \text{Sen}^{\rho}_{42} (e_{42}, e_{\alpha}) \right\} \end{aligned} \right]$
$C_{\theta\theta}^{\alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\mu_1 \rho_{41} \rho_{19} \left([n, n'], e_{\alpha} \right)$
$C_{\theta\theta}^{\alpha} \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\frac{\mu_3 \rho_{43} \rho_{53} \text{Sen}^{\rho}_{142}}{\text{Sen}^{\rho}_{342}} \left([n, n'], e_{\alpha} \right)$
$C_{\theta\theta}^{\alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \end{pmatrix}$	$-\left[\frac{\mu_4 \rho_{41} (\rho_{43} \text{Sen}^{\rho}_{142} + \rho_{42} \text{Sen}^{\rho}_{143})}{\text{Sen}^{\rho}_{342}} + \frac{\mu_1 \rho_{41} (\rho_{15} \text{Sen}^{\rho}_{416} + \rho_{16} \text{Sen}^{\rho}_{415})}{\text{Sen}^{\rho}_{516}} + \rho_{41}^2 (\mu + \mu_4) \right] \left([n, n'], e_{\alpha} \right)$
$C_{\theta\theta}^{\alpha} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$	$-\left[\mu_4 \rho_{41} \rho_{43} + \frac{\mu_3 \rho_{43}^2 \text{Sen}^{\rho}_{142}}{\text{Sen}^{\rho}_{342}} + \frac{\mu_4 \rho_{43}^2 \text{Sen}^{\rho}_{142} + \mu_4 \rho_{43} \rho_{42} \text{Sen}^{\rho}_{143}}{\text{Sen}^{\rho}_{342}} + \frac{\mu_3 \rho_{43} \text{Sen}^{\rho}_{142} (\rho_{53} \text{Sen}^{\rho}_{436} + \rho_{63} \text{Sen}^{\rho}_{435})}{\text{Sen}^{\rho}_{342} \text{Sen}^{\rho}_{536}} \right] \left([n, n'], e_{\alpha} \right)$
$C_{\theta\theta}^{\alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$	0

$$C_{qX}^{\alpha} \binom{2}{2} \frac{\mu_2 \rho_{42}}{\text{Sen}_{342}^{2\rho}} \left\{ \text{Cos}_{27}^{\psi_{43}} (e_{42}, e_{\alpha}) + \text{Cos}_{724}^{\psi_{43}} (e_{43}, e_{\alpha}) \right\}$$

$$C_{qX}^{\alpha} \binom{4}{4} \frac{\mu_4 (\rho_{43} \text{Cos}_{342}^{\psi_{42}} - \rho_{42})}{\text{Sen}_{342}^{2\rho}} \left\{ \text{Cos}_{245}^{\psi_{43}} (e_{43}, e_{\alpha}) - \text{Cos}_{345}^{\psi_{42}} (e_{42}, e_{\alpha}) \right\} - \frac{\mu_4 \rho_{43} \text{Cos}_{134}^{\psi_{43}}}{\text{Sen}_{134}^{2\rho}} \left\{ \text{Cos}_{345}^{\psi_{31}} (e_{31}, e_{\alpha}) + \text{Cos}_{45}^{\psi_{31}} (e_{34}, e_{\alpha}) \right\}$$

$$C_{qX}^{\alpha} \binom{3}{4} \frac{\mu_4 \rho_{42} - (\mu_4 + \mu_3) \rho_{43} \text{Cos}_{342}^{\psi_{42}}}{\text{Sen}_{342}^{2\rho}} \left\{ (e_{42}, e_{\alpha}) - \text{Cos}_{342}^{\psi_{43}} (e_{43}, e_{\alpha}) \right\} + \frac{\mu_3 \rho_{31} - (\mu_4 + \mu_3) \rho_{43} \text{Cos}_{431}^{\psi_{43}}}{\text{Sen}_{431}^{2\rho}} \left\{ (e_{31}, e_{\alpha}) - \text{Cos}_{431}^{\psi_{34}} (e_{34}, e_{\alpha}) \right\}$$

$$C_{qX}^{\alpha} \binom{2}{4} \frac{\mu_4 \rho_{43} \text{Cos}_{342}^{\psi_{42}} - (\mu_4 + \mu_2) \rho_{42}}{\text{Sen}_{342}^{\rho}} \left\{ (e_{43}, e_{\alpha}) - \text{Cos}_{342}^{\psi_{42}} (e_{42}, e_{\alpha}) \right\} - \frac{\mu_4 \rho_{43} \text{Cos}_{431}^{\psi_{43}}}{\text{Sen}_{431}^{2\rho}} \left\{ \text{Cos}_{342}^{\psi_{31}} (e_{31}, e_{\alpha}) + \text{Cos}_{31}^{\psi_{42}} (e_{34}, e_{\alpha}) \right\}$$

$$C_{RX}^{\alpha} \binom{2}{2} \frac{\mu_2 \rho_{42} \rho_{72}}{\text{Sen}_{342}^{2\rho} \text{Sen}_{278}^{\rho}} \left\{ (\text{Cos}_{78}^{\psi_{42}} - \text{Cos}_{278}^{\psi_{42}} \text{Cos}_{724}^{\psi_{43}}) (e_{43}, e_{\alpha}) + (\text{Cos}_{278}^{\psi_{43}} \text{Cos}_{72}^{\psi_{43}} - \text{Cos}_{78}^{\psi_{43}}) (e_{42}, e_{\alpha}) \right\}$$

$$5 \quad C_{\theta X} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \quad \left\{ \begin{array}{l} \mu_3 \rho_{43} \cos^{\rho}_{342} (\rho_{43} \text{Sen}^{\rho}_{136} + \rho_{37} \text{Sen}^{\rho}_{436}) + \frac{\mu_3 \rho_{43} \rho_{36}}{\text{Sen}^{\rho}_{342}} - \frac{\mu_4 \rho_{43} \text{Sen}^{\rho}_{136} (\rho_{42} - \rho_{43} \cos^{\rho}_{342})}{\text{Sen}^{\rho}_{431} \text{Sen}^{\rho}_{342}} \end{array} \right\} [\eta, n]_{2, \alpha}$$

$$5 \quad C_{XX} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \quad 0$$

$$7 \quad C_{qT} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \frac{\mu_1 \rho_{37} \cos^{\rho}_{435}}{\text{Sen}^{\rho}_{135}} \left\{ \begin{array}{l} \cos^{\rho}_{317} (e_{35}, \alpha) + \cos^{\rho}_{1731} (e_{31}, \alpha) \end{array} \right\}$$

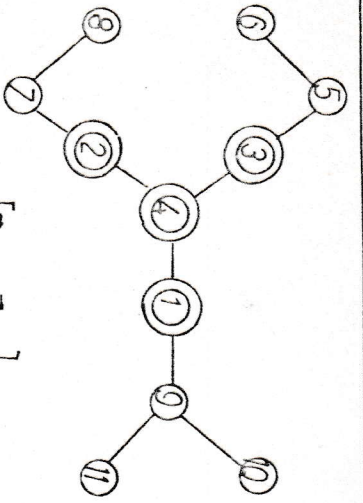
$$7 \quad C_{qT} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\mu_3 \rho_{35} \cos^{\rho}_{431} - (\mu_3 + \mu_1) \rho_{31} \cos^{\rho}_{435}}{\text{Sen}^{\rho}_{135}} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \cos^{\rho}_{135} (e_{31}, \alpha) - (e_{35}, \alpha) \end{array} \right\}$$

$$7 \quad C_{qT} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\mu_4 (\rho_{46} \cos^{\rho}_{342} - \rho_{42} \cos^{\rho}_{346})}{\text{Sen}^{\rho}_{642}} \left\{ \begin{array}{l} \cos^{\rho}_{346} (e_{42}, \alpha) - \cos^{\rho}_{342} (e_{46}, \alpha) \end{array} \right\} + \\ \frac{\mu_3 (\rho_{31} \cos^{\rho}_{435} - \rho_{35} \cos^{\rho}_{431})}{\text{Sen}^{\rho}_{135}} \left\{ \begin{array}{l} \cos^{\rho}_{431} (e_{35}, \alpha) - \cos^{\rho}_{435} (e_{31}, \alpha) \end{array} \right\} \end{array} \right\}$$

$$7 \quad C_{BT} \begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix} \quad \frac{\mu_1 \rho_{17} \rho_{31} \cos^{\rho}_{435}}{\text{Sen}^{\rho}_{135} \text{Sen}^{\rho}_{178}} \left\{ \begin{array}{l} (\cos^{\rho}_{78}{}^{35} - \cos^{\rho}_{178}{}^{35}) (e_{31}, \alpha) + (\cos^{\rho}_{178}{}^{35} - \cos^{\rho}_{317}{}^{35}) (e_{35}, \alpha) \end{array} \right\}$$

${}^7 C_{RT}^\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$	$\frac{\mu_3 \rho_{37}^2 \cos^2 \psi_{431} - (\mu_3 + \mu_1) \rho_{37}^2 \cos^2 \psi_{435}}{\text{Sen}^2 \psi_{135} \text{Sen} \psi_{317}} \left\{ (\cos \psi_{35}^{17} + \cos \psi_{317}^{135}) (e_{31}, e_\alpha) \right\} +$ $\frac{\mu_1 \rho_{31}^2 \cos^2 \psi_{435}}{\text{Sen}^2 \psi_{135} \text{Sen} \psi_{317}} \left\{ (\cos \psi_{135}^{35} + \cos \psi_{317}^{17}) (e_{31}, e_\alpha) - \text{Sen}^2 \psi_{317} (e_{35}, e_\alpha) \right\}$
${}^7 C_{RT}^\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$	$\frac{(\mu_3 + \mu_1) \rho_{37}^2 \cos^2 \psi_{435} - \mu_3 \rho_{35} \rho_{37} \cos^2 \psi_{134}}{\text{Sen}^2 \psi_{135} \text{Sen} \psi_{431}} \left\{ (\cos \psi_{435}^{35} - \cos \psi_{431}^{135}) (e_{31}, e_\alpha) \right\} -$ $\frac{\mu_3 \rho_{43} (\rho_{31} \cos \psi_{435} - \rho_{35} \cos \psi_{431})}{\text{Sen}^2 \psi_{135} \text{Sen} \psi_{431}} \left\{ (\cos \psi_{135}^{35} - \cos \psi_{431}^{135}) (e_{31}, e_\alpha) - \text{Sen}^2 \psi_{431} (e_{35}, e_\alpha) \right\} +$ $\frac{\mu_4 \rho_{43} (\rho_{42} \cos \psi_{346} - \rho_{46} \cos \psi_{342})}{\text{Sen}^2 \psi_{246} \text{Sen} \psi_{431}} \left\{ (\cos \psi_{31}^{42} + \cos \psi_{431}^{342}) (e_{46}, e) - (\cos \psi_{31}^{46} + \cos \psi_{431}^{346}) (e_{42}, e_\alpha) \right\}$
${}^7 C_{RT}^\alpha \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix}$	$-\frac{\mu_4 \rho_{42} \rho_{46} \cos^2 \psi_{346} + (\mu_4 + \mu_6) \rho_{46}^2 \cos^2 \psi_{342}}{\text{Sen} \psi_{246}} (e_{46}, e_\alpha) + \frac{(\mu_4 + \mu_2) \rho_{42}^2 \cos^2 \psi_{346} - \mu_4 \rho_{42} \rho_{46} \cos^2 \psi_{342}}{\text{Sen} \psi_{246}} (e_{42}, e_\alpha)$
${}^7 C_{OT}^\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$-\frac{\mu_1 \rho_{71} \rho_{31} \cos^2 \psi_{435}}{\text{Sen} \psi_{135}} ([n^1, n^2], e_\alpha)$

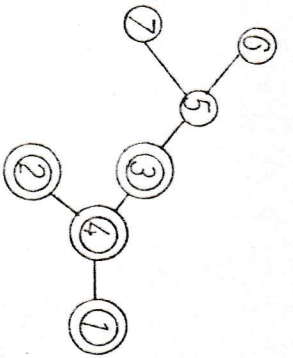
$7 \begin{matrix} C \\ \Theta T \end{matrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$	$\left\{ \begin{array}{l} \mu_1 \rho_{31} \cos^{\rho}_{4,35} \cos^{\rho}_{19} \text{Sen}^{\rho}_{317} + \rho_{17} \text{Sen}^{\rho}_{319} + \frac{(\mu_1 + \mu_3) \rho_{31}^2 \cos^{\rho}_{4,35} - \mu_3 \rho_{31} \rho_{35} \cos^{\rho}_{4,31}}{\text{Sen}^{\rho}_{135}} \\ \text{Sen}^{\rho}_{719} \quad \text{Sen}^{\rho}_{135} \quad \text{Sen}^{\rho}_{135} \end{array} \right\} ([n', n_2], e_{\alpha})$
$7 \begin{matrix} C \\ \Theta T \end{matrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix}$	$\frac{\mu_3 \rho_{43} (\rho_{31} \cos^{\rho}_{4,35} - \rho_{35} \cos^{\rho}_{4,31})}{\text{Sen}^{\rho}_{135}} ([n_1, n_2], e_{\alpha})$
$7 \begin{matrix} C \\ T T \end{matrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}$	0
$8 \begin{matrix} C \\ T T \end{matrix} \begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix}$	$\frac{\mu_1 \rho_{31} \rho_{16} \cos^{\rho}_{4,35} \cos^{\rho}_{768}}{\text{Sen}^{\rho}_{135} \text{Sen}^{\rho}_{167}} (n_2, n', e_{\alpha})$
$7 \begin{matrix} C \\ T T \end{matrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mu_1 \rho_{31} \rho_{19} \cos^{\rho}_{4,35} \cos^{\rho}_{317} + \mu_3 \rho_{31} \rho_{35} \cos^{\rho}_{4,31} \cos^{\rho}_{719} - \frac{(\mu_1 + \mu_3) \rho_{31}^2 \cos^{\rho}_{4,35} \cos^{\rho}_{719}}{\text{Sen}^{\rho}_{135} \text{Sen}^{\rho}_{319}}}{\text{Sen}^{\rho}_{135} \quad \text{Sen}^{\rho}_{319}} \end{array} \right\} ([n_2, n''], e_{\alpha})$
$9 \begin{matrix} C \\ T T \end{matrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix}$	0



$$\vec{n} = [\vec{e}_{911}, \vec{e}_{910}]$$

Fig:1

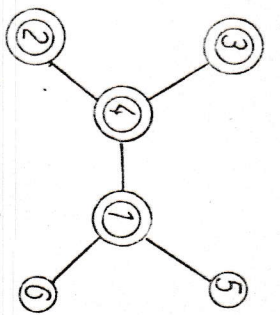
Sen Ψ_{10911}



$$\vec{n} = [\vec{e}_{56}, \vec{e}_{57}]$$

Fig:2

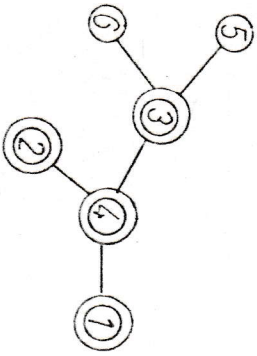
Sen Ψ_{657}



$$\vec{n} = [\vec{e}_{16}, \vec{e}_{15}]$$

Fig:3

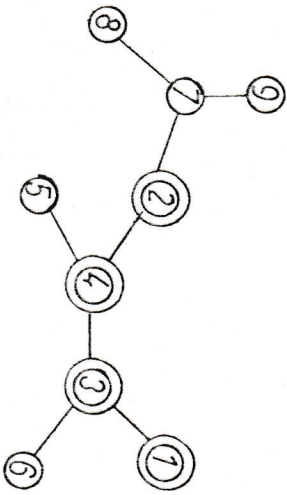
Sen Ψ_{615}



$$\vec{n} = [\vec{e}_{35}, \vec{e}_{36}]$$

Fig:4

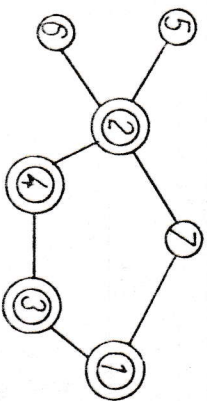
Sen Ψ_{536}



$$\vec{n} = [\vec{e}_{79}, \vec{e}_{78}]$$

Fig:5

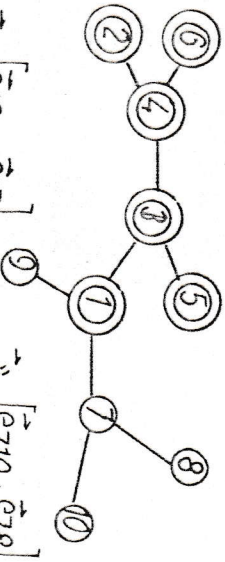
Sen Ψ_{879}



$$\vec{n} = [\vec{e}_{25}, \vec{e}_{26}]$$

Fig:6

Sen Ψ_{625}



$$\vec{n} = [\vec{e}_{19}, \vec{e}_{17}]$$

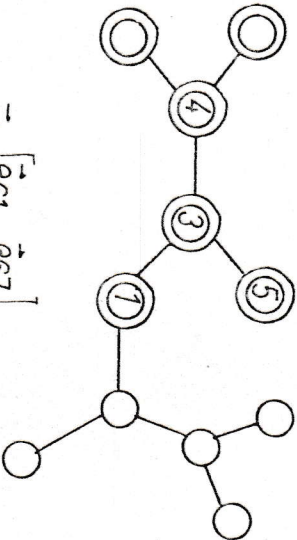
Sen Ψ_{917}

$$\vec{n} = [\vec{e}_{710}, \vec{e}_{78}]$$

Sen Ψ_{8710}

$$\vec{n} = [\vec{e}_{31}, \vec{e}_{31}]$$

Sen Ψ_{319}



$$\vec{n} = [\vec{e}_{61}, \vec{e}_{67}]$$

Fig:8

Sen Ψ_{167}

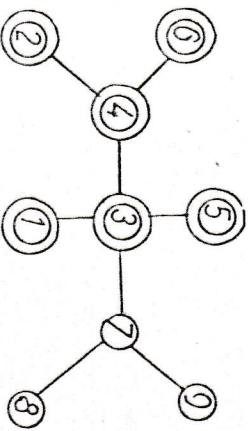


Fig:9

FORMULAS PARA EL CALCULO DE LA MATRIZ DE CORIOLIS C^{α}
EN EL PLANO

Fig de Matriz	Elemento	Formula
10	$C_{q_1, q}^{2\alpha}$	0
10	$C_{q, ab}^{1\alpha} (a)$	$\mu_a ([e_{ab}, e_{ac}], e_{\alpha})$
10	$C_{ab, ab}^{1\alpha} (a)$	$\frac{\mu_a \rho_{ac}}{\text{sen}^{\rho}_{ad}} \left\{ ([e_{ab}, e_{ad}], e_{\alpha}) - \cos^{\rho}_{ad} ([e_{ab}, e_{cd}], e_{\alpha}) \right\}$
10	$C_{q, ab}^{2\alpha} (b)$	$\frac{[(e_{ab}, e_{ac}), e_{\alpha}]}{\text{sen}^{\rho}_{bc}} \left[\mu_a \rho_{ac} \cos^{\rho}_{bc} - (\mu_a + \mu_b) \rho_{ab} \right]$
11	$C_{q, ad}^{1\alpha} (a)$	$\frac{\mu_a}{\text{sen}^{\rho}_{bc}} \left\{ ([e_{ad}, e_{ac}], e_{\alpha}) (\rho_{ac} \cos^{\rho}_{bc} - \rho_{ab}) + ([e_{ad}, e_{ab}], e_{\alpha}) (\rho_{ab} \cos^{\rho}_{bc} - \rho_{ac}) \right\}$

$10 \quad C_{n,n}^{3\alpha} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$	<p>0</p>
$11 \quad C_{bc, bd}^{2\alpha} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$	$\frac{(\mu a + \mu b) \rho_{ab}^2}{\text{sen}^\rho_{bc} \text{sen}^\rho_{bd}} \left\{ \left[[e_{ac}, e_{ad}], e_\alpha \right] - \cos^\rho_{bd} \left([e_{ac}, e_{ab}], e_\alpha \right) - \cos^\rho_{bc} \left([e_{ab}, e_{ad}], e_\alpha \right) \right\} +$ $+ \frac{\mu a \rho_{ab} \rho_{ad}}{\text{sen}^\rho_{bc} \text{sen}^\rho_{bd}} \left\{ \left[[e_{ac}, e_{ab}], e_\alpha \right] - \left[[e_{ac}, e_{ad}], e_\alpha \right] \cos^\rho_{bd} + \left[[e_{ab}, e_{ad}], e_\alpha \right] \cos^\rho_{bc} \cos^\rho_{bd} \right\} +$ $+ \frac{\mu a \rho_{ac} \rho_{ab}}{\text{sen}^\rho_{bc} \text{sen}^\rho_{bd}} \left\{ \left[[e_{ab}, e_{ad}], e_\alpha \right] - \left[[e_{ac}, e_{ad}], e_\alpha \right] \cos^\rho_{bc} + \left[[e_{ac}, e_{ab}], e_\alpha \right] \cos^\rho_{bc} \cos^\rho_{bd} \right\} +$ $\frac{\mu a \rho_{ac} \rho_{ad}}{\text{sen}^\rho_{bc} \text{sen}^\rho_{bd}} \left\{ \left[[e_{ac}, e_{ad}], e_\alpha \right] \cos^\rho_{bc} \cos^\rho_{bd} - \left[[e_{ab}, e_{ad}], e_\alpha \right] \cos^\rho_{bd} - \left[[e_{ac}, e_{ab}], e_\alpha \right] \cos^\rho_{bc} \right\}$
$10 \quad C_{bc, ab}^{2\alpha} \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix}$	$- \frac{\rho_{ac}}{\text{sen}^\rho_{bc} \text{sen}^\rho_{ad}} \left\{ \left[[e_{ab}, e_{cd}], e_\alpha \right] \left[\rho_{ac} (\mu + \mu) - \mu \rho_{ab} \cos^\rho_{bc} - \mu \rho_{cd} \cos^\rho_{bd} \right] + \left[[e_{ab}, e_{cd}], e_\alpha \right] \left[\mu \rho_{ab} \cos^\rho_{ad} \cos^\rho_{bc} + \mu \rho_{cd} \cos^\rho_{bd} (\mu + \mu) \right] + \left[[e_{ac}, e_{cd}], e_\alpha \right] \left[\mu \rho_{ab} \cos^\rho_{ad} \cos^\rho_{bc} \cos^\rho_{bd} - \rho_{ac} \cos^\rho_{bd} (\mu + \mu) \right] \right\}$
$10 \quad C_{ka, cd}^{1\alpha} \begin{pmatrix} a \end{pmatrix}$	$- \frac{\mu a \rho_{ab} \rho_{ac}}{\text{sen}^\rho_{ak} \text{sen}^\rho_{ad}} \left\{ \left[[e_{bk}, e_{cd}], e_\alpha \right] - \cos^\rho_{ad} \left([e_{bk}, e_{cd}], e_\alpha \right) - \cos^\rho_{ak} \left([e_{ba}, e_{cd}], e_\alpha \right) + \cos^\rho_{ak} \cos^\rho_{ad} \left([e_{ba}, e_{cd}], e_\alpha \right) \right\}$

12 $C_{bc, an}^{1\alpha} (a)$

$$\frac{\mu_a \rho_{ak}}{\text{sen}^{\rho_{bc}} \text{sen}^{\rho_{an}}} \left\{ ([e_{ac}, e_{kn}], e_{\alpha}) (\rho_{ac} \cos^{\rho_{bc}} - \rho_{ab}) + ([e_{ab}, e_{kn}], e_{\alpha}) (\rho_{ab} \cos^{\rho_{bc}} - \rho_{ac}) + ([e_{ac}, e_{ka}], e_{\alpha}) (\rho_{ab} \cos^{\rho_{an}} - \rho_{ac} \cos^{\rho_{bc}} \cos^{\rho_{an}}) + ([e_{ab}, e_{ka}], e_{\alpha}) \times (\rho_{ac} \cos^{\rho_{an}} - \rho_{ab} \cos^{\rho_{bc}} \cos^{\rho_{an}}) \right\}$$

12 $C_{bc, dk}^{1\alpha} (a)$

$$\frac{\mu_a}{\text{sen}^{\rho_{bc}} \text{sen}^{\rho_{dk}}} \left\{ ([e_{ac}, e_{dk}], e_{\alpha}) (\rho_{ab} \rho_{ad} - \rho_{ab} \rho_{dk} \cos^{\rho_{dk}} - \rho_{ac} \rho_{ad} \cos^{\rho_{bc}} + \rho_{ac} \rho_{dk} \cos^{\rho_{bc}} \cos^{\rho_{dk}}) + ([e_{ac}, e_{ad}], e_{\alpha}) (\rho_{ab} \rho_{dk} - \rho_{ab} \rho_{ad} \cos^{\rho_{dk}} - \rho_{ac} \rho_{dk} \cos^{\rho_{bc}} + \rho_{ac} \rho_{ad} \cos^{\rho_{bc}} \cos^{\rho_{dk}}) + ([e_{ab}, e_{dk}], e_{\alpha}) (\rho_{ac} \rho_{ad} - \rho_{ab} \rho_{ad} \cos^{\rho_{bc}} - \rho_{ac} \rho_{dk} \cos^{\rho_{bc}} + \rho_{ab} \rho_{dk} \cos^{\rho_{bc}} \cos^{\rho_{dk}}) + ([e_{ab}, e_{ad}], e_{\alpha}) (\rho_{ac} \rho_{dk} - \rho_{ac} \rho_{ad} \cos^{\rho_{dk}} - \rho_{ab} \rho_{dk} \cos^{\rho_{bc}} + \rho_{ab} \rho_{ad} \cos^{\rho_{bc}} \cos^{\rho_{dk}}) \right\}$$

Fig:10

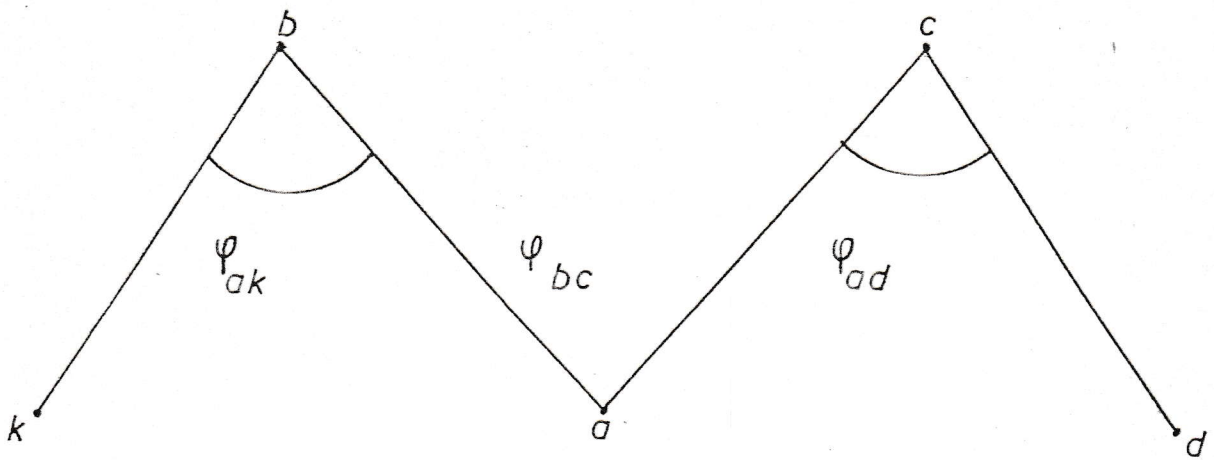


Fig:11

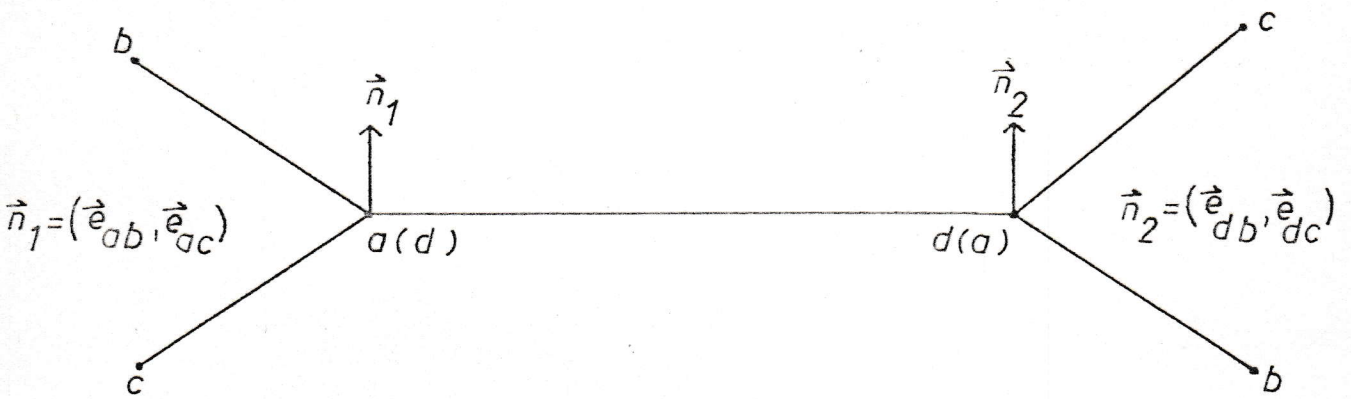
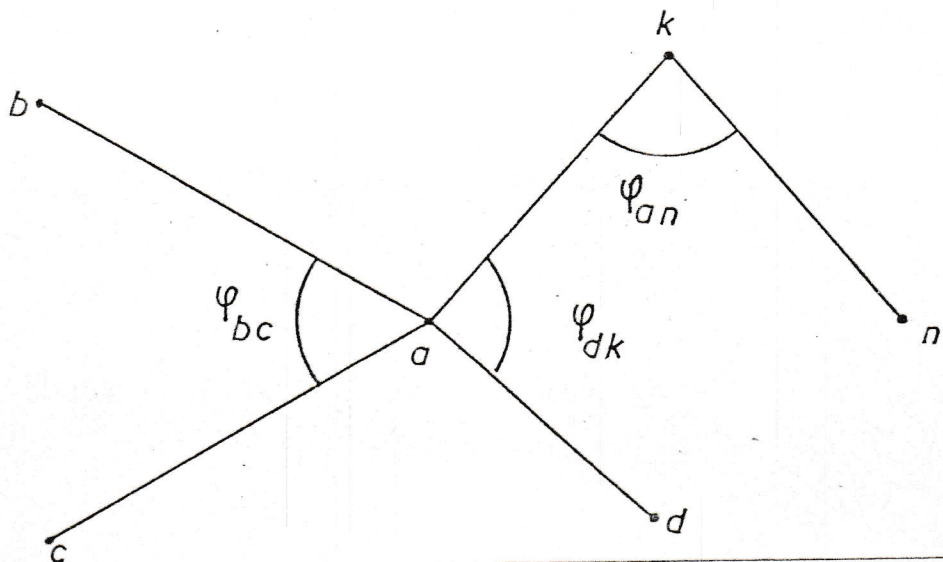


Fig:12



BIBLIOGRAFIA

- 1.- M. Campos: Tesis de Licenciatura, Universidad de Chile, (1974).
- 2.- J.R. Ferraro, J.S. Zimek: "Introductory Group Theory.", Plenum Press, N.Y. (1969).
- 3.- Yu.N. Panchenco, G.S. Koptev, N.F. Stepanov, V.M. Tatevskii: Opt.Spectr. (A. de C. URSS), 25 (1968) 623.
- 4.- E.B. Wilson, J.C. Decius, P.C. Cross: "Molecular Vibrations.", Mc Graw-Hill Book-Co. N.Y. (1955).
- 5.- L. Mayantz: "Theory and Calculation of Vibration of Molecules.", A. de C. URSS, Moscú (1960).
- 6.- A.J.P. Alix, A. Muller; J.Mol.Struct. 24 (1975) 229.
- 7.- C. Tellez, R. Aroca: J.Mol.Struct. 18 (1973) 59.
- 8.- R. Aroca, N. Mercau, D. Sherson: Rev. Latinoamericana Quím. 6 (1975) 112.
- 9.- A. Aizman: Tesis de Licenciatura, Universidad de Chile, (1974)
- 10.- S.J. Cyvin: "Molecular Structure and Vibrations.", Elsevier Publishing Co. Amsterdam (1972).
- 11.- Y. Morino, K. Kuchitsu, T. Shimanouchi: J.Chem.Phys. 20 (1952) 726.
- 12.- M. Campos, C. Tellez: Comunicación interna (1974).
- 13.- E. Teller: Hand-und Jahrbuch Chem. Physik 2 (1934) 125.
- 14.- R. Elst, A. Oskam: J.Mol.Spect. 40 (1971) 84.
- 15.- J. Hankins Meal, S.R. Polo: J.Chem.Phys. 24 (1956) 1126.
- 16.- R. Aroca, Yu.N. Panchenco, A.S.Makhnirov: Chem.Phys. 7 (1975) 457.

- 17.- Yu.I. Ponomarev: Opt.Spectr. 18 (1964) 87.
- 18.- H.A. Jahn: Proc.Roy.Soc. (London) 168 (1939) 469.
- 19.- L. Nemes: J.Mol.Spectrosc. 28 (1968) 59.
- 20.- I. Levine: "Quantum Chemistry II. Molecular Spectroscopy.", Allyn and Bacon, Boston (1970).
- 21.- S. Yeyapandian, G.A. Savari Raj: J.Mol.Struct. 8 (1971) 17.
- 22.- S. Yeyapandian, G.A. Savari Raj: J.Mol.Struct. 14 (1972) 17.
- 23.- V.M. Tatevskii: "Fundamentos de la Teoría Clásica de la Estructura Molecular.", Univ. Lomonosov, Moscú (1971).
- 24.- V.I. Barezin, E.P. Kroinov: Opt.Spectr. 19 (1964) 950.
- 25.- D. Hâdzi, J. Kidric: Spectrochim.Acta 32 A (1976) 693.
- 26.- Y. Saito, K. Machida, T. Uno: Spectrochim.Acta 27 A (1971) 991.
- 27.- A. Cotton: "Chemical Application of Group Theory.", Interscience Publishers, John Wiley sons, Inc.(1971).
- 28.- P.G. Puranik, L. Sidesmukh: Proc.India Acad.Sci. 67 A (1968) 99.
- 29.- J.B. Bates, W.H. Smith: Spectrochim. Acta 26 A (1970) 455.
- 30.- M. Campos: XII Congreso Lat. de Química QF 66 (1976) 23.

