

NOMBRE DE LA ASIGNATURA O UNIDAD DE APRENDIZAJE

ESPECTROSCOPÍA APLICADA

CICLO

OPTATIVA

CLAVE DE LA ASIGNATURA

OOF05

OBJETIVO(S) GENERAL(ES) DE LA ASIGNATURA

El objetivo de este curso es el de aplicar los fundamentos teóricos de las espectroscopias vibracionales (Raman e Infrarroja por transformada de Fourier), Fluorescencia y Electrónica a la interpretación de espectros experimentales, desarrollando en el estudiante, la habilidad para aplicar sistemáticamente métodos, criterios y procedimientos para obtener la mayor cantidad posible de información sobre un sistema de estudio, ya sea usando una técnica en particular o el conjunto de ellas. Además, el estudiante desarrollará la habilidad para interpretar espectros y tendrá una visión general de los alcances de cada espectroscopia, así como la información necesaria para localizar y utilizar eficazmente la información espectroscópica reunida en tablas, publicaciones periódicas especializadas, manuales, etc.

TEMAS Y SUBTEMAS

- 1. Principios Básicos.**
 - 1.1. Definición de Espectroscopía. Sesión 1
 - 1.2. Técnicas de Espectroscopía
 - 1.3. Naturaleza de la Luz. Sesión 2
 - 1.4. Ecuaciones de Maxwell.
 - 1.5. Interacción de la Luz con la Materia. Sesión 3
 - 1.6. Absorción, Transmisión, Reflexión, Dispersión y Polarización.
- 2. Espectroscopía Vibracional.**
 - 2.1 Modos de vibración. Sesión 4
 - 2.2 Energías vibracionales. Intervalo. Constante de fuerza.
 - 2.3 Reglas de selección. Intensidad y forma de las bandas. Sesión 5
 - 2.4 Manejo de muestras y técnicas experimentales.
 - 2.5 Criterios de isometría y coordinación. Sesión 6
 - 2.6 Frecuencias características.
 - 2.7 Bandas de hidrocarburos. Sesión 7
 - 2.8 Bandas de compuestos oxigenados.
 - 2.9 Bandas de compuestos halogenados.
 - 2.10 Bandas de compuestos con nitrógeno, fosforo y azufre. Sesión 8
 - 2.11 Bandas de compuestos adicionales.
- 3. Espectroscopía Infrarrojo.**
 - 3.1 Modos normales de vibración. Sesión 9
 - 3.2 Análisis de modos normales.
 - 3.3 Absorción y emisión de radiación. Sesión 10
 - 3.4 El espectro infrarrojo.
 - 3.5 Ancho de los picos, ensanchamiento natural, doppler y por presión.
 - 3.6 Espectrómetro infrarrojo por transformada de Fourier. Sesión 11
 - 3.7 Características adicionales de un espectrómetro.
 - 3.8 Técnicas de transmisión y reflectancia difusa. Sesión 12
- 4. Espectroscopía Raman.**
 - 4.1 Dispersión Elástica e Inelástica. Sesión 13
 - 4.2 Dispersión Raman.
 - 4.3 Líneas Stokes y anti-Stokes.
 - 4.4 Independencia de la luz incidente. Sesión 14
 - 4.5 Intensidad de las líneas Stokes y anti-Stokes.
 - 4.6 Teoría Clásica del Efecto Raman. Sesión 15
 - 4.7 Espectroscopía Raman por transformada de Fourier. Sesión 16
- 5. Espectroscopía de Fluorescencia.**
 - 5.1 Teoría de la Fluorescencia molecular. Sesión 17
 - 5.2 Instrumentación en Espectroscopía de Fluorescencia. Sesión 18
 - 5.3 Relación entre intensidad de fluorescencia y concentración. Sesión 19
 - 5.4 Aplicaciones de los métodos de fluorescencia. Sesión 20
- 6. Espectroscopía Electrónica.**
 - 6.1 Niveles electrónicos, orbitales moleculares transiciones electrónicas. Sesión 21

6.2 Tipos de espectroscopías electrónicas.	
6.3 Espectros electrónicos de los complejos de metales de transición.	Sesión 22
6.4 Transiciones electrónicas d-d, Diagramas de Tanabe-Sugano.	Sesión 23
6.5 Serie espectroquímica.	Sesión 24

Cuatro sesiones adicionales para aplicar 2 evaluaciones parciales (1 sesión cada una) y una final (dos sesiones).

ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE

- i) **Frente a docente:** Se cubre un total de 28 sesiones de una hora y media a la semana con la participación activa del estudiante, a través de preguntas, aportación de ejemplos y desarrollos algebraicos en clase.
- ii) **Independientes:** El estudiante realiza tareas diversas fuera del aula, como solución de problemas algebraicos y numéricos en lenguajes de programación de nivel alto, lectura y análisis de artículos de investigación y referencias bibliográficas.

CRITERIOS Y PROCEDIMIENTOS DE EVALUACION Y ACREDITACION

Dos evaluaciones parciales y una final. El promedio de las evaluaciones representan el 60% de la calificación. El 40% restante corresponde a la calificación promedio de las tareas resueltas durante el curso

BIBLIOGRAFÍA

1. J.M. Hollas, Modern Spectroscopy, Willey and Sons, 4th edition, 2004.
2. F Settle , Handbook of instrumental Techniques for analytical chemistry, Prentice Hall, 1997.
3. B.C. Smith, Fundamentals of Fourier Transform Infrared spectroscopy, CRC Press, 1996.
4. B. Schrader, Infrared and Raman Spectroscopy, VCH, Ney York, 1995.
5. R. Tolman, The principles of statistical mechanics, Dover, New York, 1980.