



#### DATOS DE LA ASIGNATURA

**Denominación:** TÉCNICAS AVANZADAS EN ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

**Código:** 102338

**Plan de estudios:** MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA

**Curso:** 1

**Créditos ECTS:** 3

**Horas de trabajo presencial:** 30

**Porcentaje de presencialidad:** 40%

**Horas de trabajo no presencial:** 45

**Plataforma virtual:** <http://www3.uco.es/>

#### DATOS DEL PROFESORADO

##### Profesorado responsable de la asignatura

**Nombre:** PINEDA RODRIGUEZ, MARIA TERESA

**Centro:** INSTITUTO DE ESTUDIOS DE POSTGRADO

**Departamento:** QUÍMICA FÍSICA Y TERMODINÁMICA APLICADA

**Área:** QUÍMICA FÍSICA

**Ubicación del despacho:** Ed. Marie Curie, 2ª Planta, Campus de Rabanales

**e-Mail:** [qf1pirot@uco.es](mailto:qf1pirot@uco.es)

**Teléfono:** [tpineda@uco.es](mailto:tpineda@uco.es)

**URL web:** <http://www.uco.es/organiza/departamentos/quimica-fisica/quimica-fisica/>

##### Otro profesorado que imparte la asignatura

**Nombre:** CAMACHO DELGADO, LUIS

**Centro:** INSTITUTO DE ESTUDIOS DE POSTGRADO

**Departamento:** QUÍMICA FÍSICA Y TERMODINÁMICA APLICADA

**Área:** QUÍMICA FÍSICA

**Ubicación del despacho:** Ed. Marie Curie, 2ª Planta, Campus de Rabanales

**e-Mail:** [qf1cadel@uco.es](mailto:qf1cadel@uco.es)

**Teléfono:** 957218617

**URL web:** <http://www.uco.es/organiza/departamentos/quimica-fisica/quimica-fisica/>

#### DATOS ESPECÍFICOS DE LA ASIGNATURA

##### REQUISITOS Y RECOMENDACIONES

##### Requisitos previos establecidos en el plan de estudios

Ninguno

##### Recomendaciones

Ninguna especificada

#### OBJETIVOS

Se pretende profundizar en los principios de la Espectroscopia Molecular: En particular en las espectroscopias de vibración, de emisión y las diferentes espectroscopias con luz polarizada, así como en ciertos aspectos teóricos de la espectroscopia RMN. Asimismo, se pretende aplicar los métodos experimentales de estudio de la estructura molecular.

## COMPETENCIAS

CB6	Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
CB10	Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
CB5	#N/A
CT2	Que el estudiante sepa utilizar herramientas de información y comunicación que permitan plantear y resolver problemas nuevos dentro de contextos relacionados con su área de estudio.
CE4	Seleccionar la instrumentación química y recursos informáticos adecuados para el estudio a realizar y aplicar sus conocimientos para utilizarla de manera correcta.
CE5	Planificar y desarrollar proyectos y experimentos, así como relacionar entre sí distintas especialidades científicas (carácter interdisciplinar).
CE7	Adquirir la experiencia investigadora para aplicarla en labores propias de su profesión en el ámbito de la I+D+i.

## CONTENIDOS

### 1. Contenidos teóricos

1) LECCIÓN: ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL CON TRANSFORMADA DE FOURIER. Introducción. La transformada de Fourier. Interferometría. Espectroscopia vibracional con transformada de Fourier. Espectroscopia IR de reflexión interna. Espectroscopia IR de reflexión externa. Otras técnicas FTIR. Espectroscopia FT-Raman.

2) ESPECTROSCOPIAS DE EMISION DE RADIACION. Introducción. Fluorescencia: Procesos bimoleculares competitivos. Reacciones en estado excitado. Transferencia de energía. Efecto del disolvente. Polarización y anisotropía. Tiempos de vida en el estado excitado. Fosforescencia. Aplicaciones.

3) ESPECTROSCOPIA CON LUZ POLARIZADA. Espectroscopia molecular en medios organizados: Relación dicroica. Dicroísmo circular: UV-visible, IR y Raman. Dicroísmo circular magnético. Espectro-elipsometría de películas superficiales.

4) ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR. Desplazamiento químico. Acoplamientos. Ecuaciones de Bloch: Relajación, Echo de spin. Metodología experimental. Aplicaciones.

### 2. Contenidos prácticos

Práctica 1. Espectroscopia IR: estudios por espectroscopia IR de transmisión en líquidos.

Práctica 2. Espectroscopia IR: estudios por espectroscopia IR en las variantes ATR y Reflectancia.

Práctica 3. Espectroscopia de Fluorescencia: estudios de fenómenos de transferencia de energía.

## METODOLOGÍA

## Aclaraciones

La evaluación de los alumnos a tiempo parcial se realizará de acuerdo con la normativa del centro y considerando las características de cada caso.

### Actividades presenciales

Actividad	Total
Actividades de evaluación	3
Laboratorio	10
Lección magistral	12
Seminario	5
<b>Total horas:</b>	<b>30</b>

### Actividades no presenciales

Actividad	Total
Estudio	30
Trabajo de grupo	15
<b>Total horas:</b>	<b>45</b>

## MATERIAL DE TRABAJO PARA EL ALUMNADO

Cuaderno de Prácticas  
Manual de la asignatura

## EVALUACIÓN

Instrumentos	Porcentaje
Informes/memorias de prácticas	20%
Pruebas objetivas	40%
Trabajos y proyectos	40%

**Periodo de validez de las calificaciones parciales:** *curso 2013-14*

### Aclaraciones:

La evaluación de los alumnos a tiempo parcial se realizará de acuerdo con la normativa del centro y considerando las características de cada caso.

## BIBLIOGRAFÍA

### 1. Bibliografía básica:

1) J. Michael Hollas, *Modern Spectroscopy*, 4ª ed., John Wiley and Sons, 2004.

2) Banwell, C.N., "*Fundamentals of Molecular Spectroscopy*", 3ª Ed. McGraw Hill, N. York, 1983 (versión castellana: Ediciones del Castillo, Madrid 1977).

- 3) Levine I.N., "*Molecular Spectroscopy*", J. Wiley and Sons, N. York, 1975 (versión castellana: AC, Madrid 1980).
- 4) Griffiths, P.R.; Haseth, J.A. *Fourier Transform Infrared Spectrometry*, Wiley-Interscience Publ., New York, 1986.
- 5) *Fourier Transform Infrared Spectrometry in Colloid and Interface Science*; Scheuing, D.R. (Ed.); ACS Symposium Series 447; Washington, D.C., 1990.
- 6) Urban, M.W. *Vibrational Spectroscopy of Molecules and Macromolecules on Surfaces*; Wiley-Interscience Publ., New York, 1993.
- 7) Nishikida, K.; Nishio, E.; Hannah, R.W. *Selected Applications of Modern FT-IR Techniques*, Gordon and Breach Publ., Tokyo, 1995.
- 8) *Handbook of Vibrational Spectroscopy*, John Wiley & Sons Ltd, 2002.
- 9) J.R. Lakowicz, *Principles of Fluorescence Spectroscopy*, Plenum Press (1983).
- 10) I. Tinoco, *Physical Chemistry: Principles and Applications in Biological Sciences*, Prentice Hall (1995).
- 11) D.C. Harris. *Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy: A Physicochemical view*, Longman, 1987.
- 12) N. Friebolin. *Basic One and Two Dimensional NMR Spectroscopy*, VCH Pub., 1991.
- 13) J. Michl and E. W. Thulstrup. *Spectroscopy with Polarized Light*. Wiley-VCH, 1986, N.Y.
- 14) H. Fujiwara. *Spectroscopic Ellipsometry*. Wiley, Tokyo, 2007.

**2. Bibliografía complementaria:**

Ninguna.