

GUÍA DOCENTE

DENOMINACIÓN DE LA ASIGNATURA

Denominación: **FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA**

Código: 100529

Plan de estudios: **GRADO DE FÍSICA**

Curso: 4

Denominación del módulo al que pertenece: OPTATIVO

Materia: OPTATIVA 4

Carácter: OPTATIVA

Duración: SEGUNDO CUATRIMESTRE

Créditos ECTS: 6.0

Horas de trabajo presencial: 60

Porcentaje de presencialidad: 40.0%

Horas de trabajo no presencial: 90

Plataforma virtual: <http://moodle.uco.es/moodlemap/>

DATOS DEL PROFESORADO

Nombre: RODRIGUEZ AMARO, RAFAEL (Coordinador)

Departamento: QUÍMICA FÍSICA Y TERMODINÁMICA APLICADA

Área: QUÍMICA FÍSICA

Ubicación del despacho: Rabanales, C3, segunda planta

E-Mail: qf1roamr@uco.es

Teléfono: 957218617

Nombre: SÁNCHEZ OBRERO, GUADALUPE

Departamento: QUÍMICA FÍSICA Y TERMODINÁMICA APLICADA

Área: QUÍMICA FÍSICA

Ubicación del despacho: Rabanales, C3, segunda planta

E-Mail: q72saobg@uco.es

Teléfono: 957218647

REQUISITOS Y RECOMENDACIONES

Requisitos previos establecidos en el plan de estudios

Ninguno

Recomendaciones

Ninguna especificada

COMPETENCIAS

CB1	Capacidad de análisis y síntesis.
CB3	Comunicación oral y/o escrita.
CB5	Resolución de problemas.
CB6	Trabajo en equipo.
CB7	Razonamiento crítico.
CB8	Aprendizaje autónomo.
CE1	Conocimiento y comprensión de los fenómenos y de las teorías físicas más importantes.
CE4	Capacidad de medida, interpretación y diseño de experiencias en el laboratorio o en el entorno.

GUÍA DOCENTE

OBJETIVOS

Se pretende que el estudiante conozca los fundamentos de la espectroscopia molecular y las aplicaciones de los métodos experimentales en el estudio de la estructura molecular, para la obtención de parámetros moleculares de interés en el área de Química-Física.

CONTENIDOS

1. Contenidos teóricos

- 1.- ESPECTROSCOPIA Y MECANICA CUANTICA. Introducción. Modelo atómico y soluciones de la Mecánica Cuántica. Aproximación de Born-Oppenheimer y Espectroscopía. Modelo Molecular. Rotor Rígido y Oscilador Armónico.
- 2.-INTERACCIÓN DE LA RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA CON LA MATERIA. Introducción. Absorción y emisión de radiación. Anchura de banda espectral. Métodos experimentales.
- 3.- ESPECTROSCOPIA ROTACIONAL. Introducción. Clasificación de las moléculas por su simetría. Espectros Rotacionales. Moléculas diatómicas y poliatómicas lineales. Distorsión centrífuga. Rotor Simétrico. Efecto Stark. Rotor Asimétrico. Rotor Esférico. Espectroscopía Raman. Rotacional. Rotación y Spin Nuclear.
- 4.- ESPECTROSCOPIA DE VIBRACIÓN. Introducción. Moléculas diatómicas. Espectros IR y Raman. Anarmonicidad. Espectroscopía de Vibración-Rotación. Moléculas poliatómicas. Aplicaciones de la espectroscopía de vibración.
- 5.-SIMETRÍA MOLECULAR Y ESPECTROSCOPIA ELECTRÓNICA. Simetría molecular. Elementos de Simetría: Generación.Grupos puntuales de simetría.Tablas de Caracteres. Grupos no degenerados y degenerados. Moléculas Diatómicas. Orbitales Moleculares. Configuración Electrónica y Clasificación de los Estados Electrónicos. Reglas de Selección. Estados Electrónicos Fundamental y Excitado. Curva de Energía Potencial. Estructura vibracional de los espectros electrónicos. Principio de Franck-Condon. Fluorescencia y Fosforescencia.
- 6.- OTRAS ESPECTROSCOPIAS. ESPECTROSCOPIAS DE RESONANCIA. ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER. ESPECTROSCOPIA AUGER. ESPECTROSCOPIAS FOTOELECTRÓNICAS.

2. Contenidos prácticos

Se proponen como posibles, para documentar y/o realizar, las siguientes prácticas de laboratorio:

Práctica 1. Ley de Lambert-Beer.

Práctica 2. Espectros IR de moléculas diatómicas presentes en el aire. Determinación de parámetros moleculares.

Práctica 3. Energía de formación de un enlace de hidrógeno por espectroscopia UV-visible.

OBJETIVOS DE DESARROLLO SOSTENIBLE RELACIONADOS CON LOS CONTENIDOS

Educación de calidad

Industria, innovación e infraestructura

METODOLOGÍA

Adaptaciones metodológicas para alumnado a tiempo parcial y estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales

Los alumnos a tiempo parcial se registrarán por las mismas normas que los alumnos a tiempo total.

El profesor se reunirá con los alumnos afectados por discapacidad y necesidades educativas especiales para

GUÍA DOCENTE

establecer las adaptaciones más adecuadas a cada caso particular, siguiendo las indicaciones del informe emitido por la Unidad de Educación Inclusiva.

Actividades presenciales

Actividad	Grupo completo	Grupo mediano	Total
Actividades de evaluación	3	-	3
Debates	17	-	17
Exposición grupal	6	-	6
Laboratorio	-	7	7
Seminario	-	20	20
Trabajos en grupo (cooperativo)	7	-	7
Total horas:	33	27	60

Actividades no presenciales

Actividad	Total
Búsqueda de información	40
Consultas bibliográficas	30
Ejercicios	10
Estudio	10
Total horas:	90

MATERIAL DE TRABAJO PARA EL ALUMNO

Dossier de documentación - - En la plataforma moodle de la asignatura

Resúmenes de los temas - - En la plataforma moodle de la asignatura

Aclaraciones

A los alumnos se les suministrará información sobre el contenido y desarrollo de la asignatura. Se les facilitará material para la búsqueda de información y bibliografía.

EVALUACIÓN

Competencias	Exposición oral	Informes/memorias de prácticas	Proyecto
CB1	X	X	X

GUÍA DOCENTE

Competencias	Exposición oral	Informes/memorias de prácticas	Proyecto
CB3	X	X	
CB5		X	
CB6	X		
CB7		X	X
CB8		X	
CE1	X	X	X
CE4		X	
Total (100%)	40%	20%	40%
Nota mínima (*)	0	0	0

(*)Nota mínima (sobre 10) necesaria para que el método de evaluación sea considerado en la calificación final de la asignatura. En todo caso, la calificación final para aprobar la asignatura debe ser igual o superior a 5,0.

Método de valoración de la asistencia:

La asistencia se valorará en cuanto comprende tanto la presencia del alumno en clase, como su participación activa en todas las tareas encomendadas. Supondrá hasta un 15% de la nota global, ya incluido en cada uno de los instrumentos de evaluación.

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación:

La evaluación comprende la asistencia, a incluir en los informes de prácticas, la realización de trabajos o proyecto, y su exposición (15% de la nota en cada caso). Todos los instrumentos son de evaluación continua y susceptibles de ser recuperados en las diferentes convocatorias oficiales, tanto ordinarias como extraordinarias, siempre que no se haya aprobado la asignatura en anteriores convocatorias.

La validez de las calificaciones obtenidas en cada instrumento de evaluación será la del curso académico en que se realizaron, incluida la convocatoria extraordinaria. Para la convocatoria extraordinaria de finalización de estudios la última de la que se tengan datos.

El Proyecto consiste en un trabajo individual sobre los principios básicos de la Espectroscopía, acorde a un guión predefinido, y la generación de un informe escrito del proyecto.

La exposición consiste en la elaboración de un trabajo acerca de una técnica espectroscópica específica y su exposición oral en clase.

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales:

Los alumnos a tiempo parcial se registrarán por las mismas normas que los alumnos a tiempo total.

Para los alumnos con necesidades educativas especiales se atenderá a lo que se haya concretado en la reunión inicial.

GUÍA DOCENTE

Aclaraciones sobre la evaluación de la convocatoria extraordinaria y convocatoria extraordinaria de finalización de estudios:

Se registrarán por las mismas normas que en las otras convocatorias.

Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor:

Podrán obtener Matrícula de Honor los alumnos con nota global superior a 9/10, con las limitaciones administrativas vigentes (se establecerán los criterios de acuerdo con el artículo 80 del Reglamento)

BIBLIOGRAFIA

1. Bibliografía básica

- I.N. Levine, Fisicoquímica 5ª Ed. (vol. 2), 2004-Physical Chemistry 6th Ed., 2008.
- P.W. Atkins, Química Física 8ª Ed., 2008 - Physical Chemistry 9th Ed. 2010.
- J. Bertran Rusca, J. Nuñez Delgado, Química Física (vols. 1-2), 2002.
- M. Gil Criado, J.L. Núñez Barriocanal, Ed. Garceta, 2018.
- A. Requena Rodríguez, J. Zuñiga Román, Espectroscopía: (vol.1) Fundamentos. García Maroto Eds., 2020.
- G.W. Castellan, Fisicoquímica 3ª Ed., 1998
- K.J. Laidler, J.H. Meiser, Fisicoquímica, Ed. CECSA, 1998- Physical Chemistry 4ed., 2002
- D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, 1997
- M. Diaz Peña y A. Roig Muntaner, Química Física, 2ª Ed. (2 Vols.), 1989

2. Bibliografía complementaria

- C.N. Bandwell, Fundamentos de espectroscopia molecular, 2ª Ed., 1977.
- J. Michael Hollas, Modern Spectroscopy 4th Ed., 2004.
- A. Requena, J. Zuñiga, Espectroscopia, 2004.
- W. Schmidt, Optical Spectroscopy in Chemistry (Wiley-VCH), 2005.
- I.N. Levine, Química Cuántica 5ª Ed., 2001. Quantum Chemistry 6th Ed., 2008.
- G. Aruldas, Molecular Structure and Spectroscopy 2ª Ed., 2008.
- W. Gordy, R.L. Cook, Microwave Molecular Spectra, 1974.
- N.B. Coulthup, L.M. Daly, S.E. Wiberley, Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy, 3th Ed., 1990.
- W.G. Richards, P.R. Scott, Structure and Spectra of Molecules, 1985.
- J.R. Lakowicz, Principles of Fluorescence Spectroscopy, 3th Ed., 1986.
- D. Rendel, Fluorescence and Phosphorescence Spectroscopy, 1987.
- H. Günter, NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts and Applications in Chem., 2nd Ed. 1995.
- R.J. Abraham, J. Fisher, P. Lofhuts, Introduction to NMR Spectroscopy, 1991.
- J.K.M. Sanders, B.K. Hunter, Modern NMR Spectroscopy, 1993.
- E.D. Becker, High Resolution NMR, 3th Ed., 2000.
- D.C. Harris, Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy: A Physicochemical View, 2nd Ed., 1987
- J.R. Bolton, J.E. Wertz, Electron Spin Resonance: Elementary Theory and applications, 1972.
- N.M. Atherton, Principles of Electron Spin Resonance, 1993.
- T.L. Barr, Modern ESCA: The Principles and Practice of X-Ray Photoelectron Spectroscopy, 1994
- J.W. Rabalais, Principles of Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy, 1977.
- D.P.E. Dickson, F.J. Berry (Eds.), Mossbauer Spectroscopy, 1986.
- N.N. Greenwood, T.C. Gibb, Mossbauer Spectroscopy, 1971.
- D. Neuhaus, M.P. Williamson, The Nuclear Overhauser Effect, 1989.

Problemas:

- P.W. Atkins, Students' Solutions Manual for Physical Chemistry, 8th Ed., 2006.
- I.N. Levine, Students Solutions Manual to Accompany Physical Chemistry, 8th Ed., 2008.
- J. Bertran Rusca, J. Nuñez Delgado, Problemas de Química Física, 2007.



GUÍA DOCENTE

CRITERIOS DE COORDINACIÓN

Criterios de evaluación comunes

Fecha de entrega de trabajos

Realización de actividades

CRONOGRAMA

Periodo	Actividades de evaluación	Debates	Exposición grupal	Laboratorio	Seminario	Trabajos en grupo (cooperativo)
1ª Semana	0,0	2,0	0,0	0,0	2,0	0,0
2ª Semana	0,0	3,0	0,0	0,0	1,0	0,0
3ª Semana	0,0	3,0	0,0	0,0	1,0	0,0
4ª Semana	0,0	1,0	0,0	0,0	3,0	0,0
5ª Semana	0,0	3,0	0,0	0,0	0,0	1,0
6ª Semana	0,0	1,0	0,0	0,0	3,0	0,0
7ª Semana	0,0	2,0	0,0	0,0	2,0	0,0
8ª Semana	0,0	0,0	0,0	0,0	3,0	1,0
9ª Semana	0,0	2,0	0,0	0,0	3,0	0,0
10ª Semana	0,0	0,0	3,0	0,0	2,0	0,0
11ª Semana	0,0	0,0	0,0	3,0	0,0	1,0
12ª Semana	0,0	0,0	0,0	3,0	0,0	1,0
13ª Semana	0,0	0,0	0,0	1,0	0,0	3,0
14ª Semana	0,0	0,0	3,0	0,0	0,0	0,0
15ª Semana	3,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Total horas:	3,0	17,0	6,0	7,0	20,0	7,0

Las estrategias metodológicas y el sistema de evaluación contempladas en esta Guía Docente serán adaptadas de acuerdo a las necesidades presentadas por estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales en los casos que se requieran.