

Máster Interuniversitario en Química Aplicada

DATOS DE LA ASIGNATURA

Fundamental

Especialidad

Denominación: Espectroscopía vibracional y electrónica para la caracterización de materiales

Código:

Plan de Estudios: Master Interuniversitario en Química Aplicada

Créditos ECTS: 4

Cuatrimestre: 2º

Horas de trabajo presencial:

Horas de trabajo no presencial:

Idioma en que se imparte:

Plataforma virtual:

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Profundizar en los conocimientos sobre Espectroscopía vibracional y electrónica para poder caracterizar y entender la estructura atómico-molecular de los materiales.

Utilizar las técnicas espectroscópicas en la caracterización de moléculas en interfaces, de sistemas biológicos, contaminantes orgánicos, polímeros clásicos y conductores, semiconductores orgánicos y otras macromoléculas y especies químicas de interés biológico y/o tecnológico.

CONTENIDOS

- Fundamentos de las Espectroscopías Ópticas (UV-visible, IR y Raman).
- Técnicas Avanzadas en Espectroscopía Raman. Espectroscopías Raman intensificadas en superficie. Técnicas Microscópicas de Raman. Espectroscopía Raman No lineal: CARS.
- Espectroscopía en Superficie: Mecanismo de excitación de adsorbatos en superficies. Métodos experimentales. Vibraciones moleculares de moléculas adsorbidas. Reglas de selección en las diferentes espectroscopías vibracionales. Modelos y mecanismos en SERS.
- Espectroscopías Quiro-Ópticas: dicroísmo circular electrónico, dicroísmo circular vibracional y actividad óptica Raman.
- Métodos espectroscópicos en polímeros conductores y materiales moleculares.
- Aplicación de métodos teóricos en el estudio de materiales poliméricos.
- Métodos electroquímicos en la caracterización de los materiales poliméricos
- Métodos generales de cálculo en espectroscopía vibracional y electrónica. Análisis vibracional mediante métodos cuánticos. Modelización de estados electrónicos excitados de moléculas y de las transiciones espectrales. Aplicación al estudio espectroscópico de sistemas de gran tamaño.
- Espectroscopía de emisión y absorción multifotónicas. Técnicas de superresolución. Métodos generales de cálculo: cálculos teóricos y experimentales de la Cross-Section en procesos bifotónicos.

OBSERVACIONES

Las competencias específicas de esta materia son:

CEM1: Planificar y desarrollar proyectos y experimentos así como relacionar entre si distintas especialidades científicas (carácter interdisciplinar).

CEM2: Desarrollar la capacidad de transportar conceptos específicos de un área a otros ámbitos científicos-tecnológicos.

COMPETENCIAS

Competencias Básicas y Generales:

Código	Competencia
CG1	Que los estudiantes sean capaces de participar en equipos multidisciplinares encargados del diseño y desarrollo de proyectos científicos y/o profesionales.
CG4	Que los estudiantes conozcan la necesidad de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance científico, tecnológico, social o cultural dentro de una sociedad basada en el conocimiento.
CG5	Que los estudiantes sepan interpretar los resultados experimentales a la luz de las teorías aceptadas y emitir hipótesis conforme al método científico y defenderlas de forma argumentada.
CB7	Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
CB9	Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

Competencias Transversales:

Código	Competencia
CT1	Que el estudiante conozca la necesidad de completar su formación científica en idiomas e informática mediante la realización de actividades complementarias
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.

Competencias Específicas:

Código	Competencia
CE2	Seleccionar la instrumentación química y recursos informáticos adecuados para el estudio a realizar y aplicar sus conocimientos para utilizarla de manera correcta.
CE3	Adquirir la experiencia investigadora para aplicarla en labores propias de su profesión en el ámbito de la I+D+i.
CE4	Capacidad de aplicar y adaptar los modelos teóricos y las técnicas específicas, tanto a problemas abiertos en su línea de especialización como a problemas provenientes de otros ámbitos, ya sean científicos o técnicos.
CE9	Elaborar una memoria clara y concisa de los resultados de su trabajo y de las conclusiones obtenidas, así como exponer y defender públicamente el desarrollo, resultados y conclusiones de su trabajo.
CE13	Conocer las técnicas de caracterización estructural y su aplicabilidad a la caracterización de compuestos químicos.
CE14	Capacidad de correlacionar la estructura química con las propiedades de los compuestos químicos.

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Clases teóricas	20	100
Clases prácticas	6	100
Seminarios	4	100
Trabajo no presencial	70	0

METODOLOGÍAS DOCENTES

Actividades presenciales (dirigidas y/o supervisadas)
Actividades no presenciales

SISTEMAS DE EVALUACIÓN

Sistema de Evaluación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
Evaluación continua	25	75
Pruebas de respuesta corta	25	75

BIBLIOGRAFÍA

- 1.- A. Requena y J. Zúñiga. *Espectroscopía*. Pearson Educación S.A., Madrid, 2004.
- 2.- E. B. Wilson, J.C. Decius y P.C. Cross. *Molecular Vibrations*. Dover Publications, Inc., New York, 1980.
- 3.- R.J.H. Clark y R.E. Hester. *Spectroscopy of Surfaces*. John Wiley & Sons. New York, 1988.
- 4.- R.K. Chang y T. E. Furtak, *Surface Enhanced Raman Scattering*. Plenum Press. New York and London, 1982.
- 5.- J.T. Yates y T.E. Madey. *Vibrational Spectroscopy of molecules on surface*. Plenum Press. New York and London, 1987.
- 6.- K.W. Bush, M.A. Bush, *Chiral Analysis*, K.W. Bush, M.A. Bush (eds) Elsevier, 2006.
- 7.- N. Berova, K. Nakanishi, R.W. Woody *Circular Dichroism. Principles and Applications*, N. Berova, K. Nakanishi, R.W. Woody (eds) Wiley, 2000.
- 8.- S. F. Sun, *Physical Chemistry of Macromolecules. Basic Principles and Issues*, John Wiley & Sons, 1994.
- 9.- Gertl Strobl, *The Physics of Polymers: Concepts for Understanding their Structure and Behavior*, Tercera Edición, Springer, 2017.
- 10.- Sabine Ludwigs (ed.) *P3HT Revisited-From Molecular Scale to Solar Cell Devices* Springer, 2017.
- 11.- A.Jorio, M. Dresselhaus, R. Saito, G. F. Dresselhaus, *Raman Spectroscopy in Graphene Related Systems*, Wiley-VCH, 2011.



-
- 12.- Douglas E. Chandler, Robert W. Roberson, *Bioimaging. Current concepts in light and electron Microscopy*. Jones and Bartlett Publishers (ed.), 2009.
 - 13.- Nikolai V. Tkachenki, *Optical Spectroscopy. Methods and instrumentations*. Elsevier, 2006
 - 14.- Joseph R. Lacowicz, *Principles of Fluorescence Spectroscopy*. Springer, 2006.
 - 15.- M. Rumi, J. W. Perry, *Two-photon absorption: an overview of measurements and principles*. *Advances in Optics and Photonics*, 2010, 2(4), 451-518.
 - 16.- Z. Yang, A. Sharma, J. Qi, X. Peng, D. Yeop Lee, R. Hu, D. Lin, J. Qua, J. Seung Kim, Super-resolution fluorescent materials: an insight into design and bioimaging applications. *Chemical Society Reviews*, 2016, 45(17), 4651–4667.
 - 17.- Derek A. Long, *The Raman Effect: A Unified Treatment of the Theory of Raman Scattering by Molecules*. John Wiley & Sons, 2002.
 - 18.- N.J. Turro, *Modern Molecular Photochemistry*. University Science Books, 2010.