

MÓDULO	MATERIA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	TIPO
Química Física	Química Física	3º	2º	6	Obligatoria
PROFESOR(ES)			DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.)		
Antonio Parody Morreale Mercedes Guzmán Casado Isabel Plaza del Pino			Dpto. Química Física Facultad de Ciencias, edificio III, planta Avda Fuentenueva s/n Tno: 958 243332 Correo electrónico: aparody@ugr.es		
			HORARIO DE TUTORÍAS		
			Jueves, 9-12, 17-20		
GRADO EN EL QUE SE IMPARTE			OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR		
Grado en QUÍMICA					
PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)					
Se recomienda haber superado las materias del módulo básico					
BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL GRADO)					
Simetría molecular. La interacción entre la radiación electromagnética y la materia. Espectroscopias de absorción, emisión y de dispersión Raman. Espectroscopias de resonancia magnética de espín. Aplicación de las técnicas espectroscópicas al estudio de sistemas de interés químico-físico.					
COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS					
Ver VERIFICA ANECA					
OBJETIVOS (EXPRESADOS COMO RESULTADOS ESPERABLES DE LA ENSEÑANZA)					
Objetivo General: En esta asignatura se pretende transmitir al alumno los conceptos fundamentales de Espectroscopía Molecular que un Graduado en Química necesita. Se introducirán los conceptos y las herramientas mecanocuánticas necesarias para estudiar de forma cuantitativa las moléculas, Para ello se abordará el estudio de los conceptos básicos de las espectroscopías moleculares más utilizadas y su aplicación					



práctica para la obtención de información molecular, determinación de estructuras, etc. Un objetivo general de vital importancia, es el de inculcar en el alumno una concepción cuantitativa de la Química. En este sentido es fundamental transmitir al alumno en papel que desempeña la Química Física en la Química, no sólo como conjunto de conceptos, teorías y herramientas experimentales, capaces de explicar los fenómenos que atañen a la Química, sino como motor de la ciencia y tecnología química.

TEMARIO DETALLADO DE LA ASIGNATURA

Tema 1. Introducción al estudio de la interacción de la radiación electromagnética con la materia. Espectro electromagnético. Descripción clásica de la absorción y difusión de la radiación electromagnética. Difusión Rayleigh y difusión Raman. Tipos de espectroscopías. Coeficientes de Einstein. Momentos de transición y reglas de selección. Teoría mecano cuántica de las transiciones espectrales. Intensidad de una transición espectral. Anchura de las líneas espectrales. Tipos de ensanchamiento. La aproximación de Börn-Oppenheimer.

Tema 2. Espectroscopía atómica.

Elementos esenciales de espectroscopía atómica. Ejemplos de espectroscopía atómica: láser de Helio Neón. Espectroscopía Auger y espectroscopía fotoelectrónica de Rayos X. Momento angular de espín y momento magnético. Estados de espín. Interacción de espín-campo magnético. Espectroscopía de RMN: desplazamiento químico y apantallamiento. Acoplamiento espín-espín. Fenómenos de relajación. Aplicaciones de la espectroscopía de RMN. Espectroscopía de RSE.

Tema 3. Simetría Molecular

Elementos de simetría. Grupos, representaciones y caracteres. Tabla de caracteres y sus aplicaciones.

Tema 4. Espectroscopía molecular: rotación, vibración .

Espectroscopía Raman. Espectroscopía de microondas y de infrarrojo lejano: espectros de rotación pura. Moléculas diatómicas. Modelos del rotor. Transiciones espectrales. Reglas de selección. Distribución de la intensidad de las transiciones. Moléculas poliatómicas. Clasificación y momentos de inercia. Efecto Stark. Aplicaciones. Zonas de la región infrarroja. Vibración de moléculas biatómicas. Modelos del oscilador. Espectros de vibración-rotación. Reglas de selección. Vibración de moléculas poliatómicas. Modos normales. Bandas fundamentales, sobretonos y bandas de combinación. Vibraciones paralelas y perpendiculares. Contorno de las bandas. Influencia del espín nuclear en la intensidad relativa de las líneas de rotación. Aplicaciones. Teoría cuántica de la espectroscopía Raman.

Tema 5. Espectroscopía electrónica

Estados electrónicos moleculares: transiciones electrónicas puras. Moléculas biatómicas. Estructura vibracional de una banda electrónica: principio de Frank-Condon. Moléculas poliatómicas: tipos de transiciones electrónicas. Fluorescencia y fosforescencia. Predisociación. Métodos experimentales. Aplicaciones.

Seminarios/Talleres

Resolución de problemas numéricos

Actividades computacionales relacionadas con diferentes conceptos expuestos en el curso teórico.

Prácticas de Laboratorio

Serie de Balmer: determinación de la constante de Rydberg.

Espectroscopía UV-visible de una serie de colorantes conjugados.

Determinación de la energía de disociación del yodo.

Experimentación básica en infrarrojo.

Espectro de rotación-vibración del HCl.



Experimentación básica en fluorescencia (desplazamiento de Stokes, energía 0-0, efecto espejo, “quenching”).
Experimentación básica en RMN.

BIBLIOGRAFÍA

Engel, T., Reid, P. “Química Física” Pearson, 2012
Banwell, C.N., McCash, E. “Fundamentals of Molecular Spectroscopy” McGraw Hill, 1994
Hollas, J.M. “Modern Spectroscopy” 4a edición, John Wiley, 2004

ENLACES RECOMENDADOS

METODOLOGÍA DOCENTE

Clases magistrales
Seminarios de resolución de problemas y actividades computacionales. Se llevarán a cabo durante todo el curso una vez terminado el tema correspondiente
Tutorías

EVALUACIÓN (INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN, CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y PORCENTAJE SOBRE LA CALIFICACIÓN FINAL, ETC.)

Se realizarán exámenes parciales (con recuperación) para las diferentes partes de la asignatura obteniéndose a partir de la evaluación de los mismos hasta un 60% de la calificación final. Para que pueda haber compensación entre los diferentes exámenes parciales es necesaria una nota mínima de 3,5 sobre 10. Un 10% de la calificación final se obtendrá de exámenes de corta duración realizados en clase.
La realización completa de las actividades de resolución de problemas numéricos y computacionales puntuará hasta un 15% de la calificación final.
La realización completa de las prácticas de laboratorio puntuará hasta un 15% de la puntuación final.
Tanto la convocatoria extraordinaria como una evaluación única final consistirán en un examen escrito de todos los contenidos impartidos a lo largo del curso.

INFORMACIÓN ADICIONAL

