

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.)		
Enrique López-Cantarero Vargas			Dpto. Química Física Edif.II de Química. 3ª Planta Correo electrónico:elopezcv@ugr.es Tlf. 244074		
			HORARIO DE TUTORÍAS		
			Diarias de 10h a 11h		
GRADO EN EL QUE SE IMPARTE			OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR		
Grado en QUÍMICA			Cumplimentar con el texto correspondiente, si procede		
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 interaccion entre la radiacion electromagnetica y la materia. Espectroscopias de absorcion, emision y de dispersion Raman. Espectroscopias de resonancia magnetica de espin. Aplicacion de las tecnicas espectroscopicas al estudio de sistemas de interes quimico-fisico.					
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

TEMARIO TEÓRICO:

- Tema 1. Simetría Molecular

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

- Tema 2. Introducción a la Espectroscopía Molecular

-Espectro electromagnético: tipos de espectroscopías. Interacción radiación-materia. Coeficientes de Einstein. Momentos de transición y reglas de selección. Teoría mecanocuántica de las transiciones espectrales. Intensidad de una transición espectral. Anchura de las líneas espectrales. Tipos de ensanchamiento. La aproximación de Böhr-Oppenheimer

- Tema 3. Espectroscopía de rotación

-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.

- Tema 4. Espectroscopía de vibración

-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.

- Tema 5. Espectroscopía Raman

-Efecto Raman: teorías clásica y cuántica. Polarizabilidad molecular. Espectros Raman de rotación pura. Espectros Raman de vibración-rotación. Polarización de las líneas Raman. Aplicaciones.

Tema 6. 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.

Tema 7. Espectroscopías de Resonancia Magnética

-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.

.....



ugr

Universidad
de Granada

TEMARIO PRÁCTICO: Seminarios/Talleres . Resolución de problemas numéricos . Aplicación de los conceptos desarrollados en las clases teóricas . Planteamiento y respuestas a cuestiones conceptuales en el marco de los conocimientos adquiridos en las clases teóricas.
BIBLIOGRAFÍA
BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL: -Berry, R.S., Rice, S.A., Ross, J. "Physical Chemistry" 2ª Ed., Oxford University Press, New York, 2000. -Hollas, J.M. "Modern Spectroscopy" 3ª Ed., John Wiley, 1996 -Atkins, P. y de Paula, J. "Química Física" Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008 -McHale, J.L., "Molecular Spectroscopy" , Prentice Hall, 1999 BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA: • Levine, I.N., "Espectroscopía Molecular" Ed. AC, 1980 • Kettle, S.F.A. "Symmetry and Structure" Ed. Wiley, 1985
ENLACES RECOMENDADOS
Cumplimentar con el texto correspondiente en cada caso.
METODOLOGÍA DOCENTE
• Clases magistrales • Seminarios de ejercicios y problemas. 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 dos exámenes parciales y un final. Cada uno de ellos constará de una parte teórica y otra de resolución de problemas numéricos. Ambas partes y para cada examen se aplicará una nota mínima de compensación entre ellas de 3,5 sobre 10. • En los criterios de evaluación se tendrá en cuenta la participación e implicación personal del alumno/a durante el desarrollo de la asignatura. • En la calificación final se tendrán en cuenta los trabajos académicos dirigidos que se lleven a cabo, bien individualmente ó en grupo.
INFORMACIÓN ADICIONAL
Cumplimentar con el texto correspondiente en cada caso.

