12-13

GUÍA DE ESTUDIO DE LDI



ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

CÓDIGO 01095354

UNED

12-13

ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

CÓDIGO 01095354

ÍNDICE

OBJETIVOS
CONTENIDOS
EQUIPO DOCENTE
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

OBJETIVOS

El curso de Espectroscopía se presenta con el objeto de dar al alumno una visión general de esta materia.
La Espectroscopía es una rama de la Química Física que se ocupa del estudio de los **espectros**, es decir, del estudio del resultado de la interacción de la radiación con la materia. Este estudio es muy amplio y comprende desde los diversos métodos para la obtención de espectros, su medida y aplicaciones químicas, principalmente de tipo analítico, que constituyen lo que a veces se denomina Espectroquímica, hasta su interpretación teórica más profunda en relación con la estructura molecular de la materia.
Quizás el alumno llega a este curso conociendo alguna de las técnicas espectroscópicas de forma práctica. Trataremos aquí de ver la espectroscopía desde el punto de vista de sus fundamentos teóricos. Al terminar el estudio de este programa se considera que el alumno tiene una visión completa de la espectroscopía y de la información analítica y estructural que se puede obtener de los distintos espectros de una molécula.

CONTENIDOS

Los conocimientos previos recomendables serán unas nociones de **Química Cuántica** y de **Teoría de Grupos y Simetría**, si bien en el programa se incluyen unos temas que sirven de recordatorio de estas materias.
Se presenta a continuación el desarrollo del programa de esta asignatura. Como material básico de estudio han de utilizarse las **Unidades Didácticas de Espectroscopía**. Por ello, en cada uno de los temas se indica en qué Unidad Didáctica y tema se encontrará la información necesaria para su preparación.
Unidad Didáctica I: Espectroscopías de Rotación y Vibración
Tema 1. **Espectros Moleculares. Generalidades**
1. Niveles de energía. 2. Interacción radiación-materia. 3. Análisis de un espectro. 4. Parámetros característicos de un espectro. 5. Aplicaciones de la Espectroscopía Molecular.
Ref. bibliográfica (1) Tema XIX
Tema 2. **Espectros de rotación.**
1. Moléculas diatómicas. 1a. Niveles de energía. 1b. Espectros de absorción y espectros Raman. 1c. Efecto de la distorsión centrífuga. 2. Moléculas poliatómicas. 2a. Clasificación de las moléculas. 2b. Espectros de moléculas lineales y trompo-esféricas. 2c. Espectros de moléculas trompo-simétricas. 2d. Espectro de moléculas trompo-asimétricas
Ref. bibliográfica (1) Tema XX y XXI
Tema 3. **Aplicaciones y detalles de los espectros de rotación.**
1. Técnicas experimentales. 2. Determinación de la estructura molecular. 3. Efecto Stark. 4. Estructura hiperfina. 5. Espectro Raman de moléculas homonucleares
Ref. bibliográfica (1) Tema XXII
Tema 4. **Espectros de vibración: moléculas diatómicas**
1. Niveles de energía: modelo del oscilador armónico. 2. Espectro infrarrojo. 3. Espectro Raman. 4. Anarmonicidad de las vibraciones. 5. Niveles de energía: modelo del rotor rígido. 6. Espectros infrarrojos y Raman. 7. Determinación de parámetros espectrales y constantes

moleculares.
Ref. bibliográfica (1) Tema XXIII y XXIV
Tema 5. **Espectros de vibración: moléculas poliatómicas.**
1. Tratamiento clásico de las vibraciones moleculares. 2. Tratamiento mecano-cuántico de las vibraciones moleculares. 3. Vibraciones normales. 4. Actividad en infrarrojo. 5. Actividad en Raman. 6. Vibraciones características.
Ref. bibliográfica (1) Tema XXV y XXVI
Tema 6. **Espectros de vibración-rotación y estructura molecular.**
1. Contorno de rotación de las bandas de vibración. 2. Predicción de los espectros infrarrojo y Raman. 3. Sobretonos y bandas de combinación. 4. Asignación de frecuencias.
Ref. bibliográfica (1) Tema XXVII y XXVIII
Tema 7. **Aplicaciones de los espectros de vibración.**
1. Nociones de las técnicas experimentales. 2. Aplicaciones físico-químicas. 3. Aplicaciones practicas.
Ref. bibliográfica (1) Tema XXIX y X
Unidad Didáctica II: Espectroscopía Electrónica
Tema 8. **Espectros electrónicos: moléculas diatómicas.**
1. Origen de los espectros electrónicos. 2. Estructura de vibración. 3. Intensidades relativas de las bandas de vibración. 4. Frecuencias de las bandas de vibración. 5. Determinación de energías de disolución.
Ref. bibliográfica (1) Tema XXXI
Tema 9. **Estructura fina de rotación: moléculas diatómicas.**
1. Clasificación de los estados electrónicos de moléculas diatómicas. 2. Estructura fina de rotación. 3. Predisociación: sus consecuencias.
Ref. bibliográfica (1) Tema XXXII
Tema 10. **Espectros electrónicos: moléculas poliatómicas.**
1. Complejidad de los espectros. 2. Estados electrónicos de moléculas poliatómicas. 3. Principales tipos de transiciones electrónicas.
Ref. bibliográfica (1) Tema XXXIII
Tema 11. **Aplicaciones de la espectroscopía electrónica.**

1. Nociones de las técnicas experimentales. 2. Análisis cualitativo. 3. Análisis cuantitativo: aplicaciones de la ley de Lambert-Beer.
Ref. bibliográfica (1) Tema XXXIII
Tema 12. **Espectroscopía de fluorescencia y fosforescencia.**
1. Emisión espontánea de radiación. 2. Fluorescencia. 3. Fosforescencia
Ref. bibliográfica (1) Tema XXXVI
Tema 13. **Espectros de energías electrónicas.**
1. Origen de los espectros de energías electrónicas. 2. Espectros producidos por electrones de valencia. 3. Espectros producidos por electrones internos.
Ref. bibliográfica (1) Tema XXXIV
Tema 14. **Dispersión óptica rotatoria y dicroismo circular.**
1. Luz polarizada. 2. Dispersión óptica rotatoria. 3. Dicroismo circular. 4. Aplicaciones.

Ref. bibliográfica (1) Tema XXXVI

Unidad Didáctica III: Espectroscopía de Resonancia

Tema 15. **Resonancia Magnética Nuclear: principios básicos.**

1. Origen de los espectros de RMN. 2. Fenómeno de resonancia. 3. Tiempo de relajación.

Ref. bibliográfica (1) Tema XVI

Tema 16. **Resonancia Magnética Nuclear: desplazamiento químico. Acoplamiento spin-spin. Técnicas de doble resonancia.**

1. Desplazamiento químico. 2. Desdoblamiento de las líneas por interacción de spines. 3. Técnicas de doble resonancia.

Ref. bibliográfica (1) Tema XVI

Tema 17. **Técnica experimental y aplicaciones**.

1. Nociones de la técnica experimental. 2. Desplazamiento químico y estructura molecular. 3. Principales tipos de acoplamientos spin-spin. 4. RMN de núcleos distintos del protón. 5. RMN bidimensional.

Ref. bibliográfica (1) Tema XVII

Tema 18. **Resonancia Magnética de spin electrónico**.

1. Origen de los espectros de RSE. 2. Estructura hiperfina. 3. Nociones de la técnica experimental. 4. Aplicaciones: estudio de radicales libres.

Ref. bibliográfica (1) Tema XVIII

Tema 19. **Resonancia magnética de cuadrupolo nuclear**

1. Origen de los espectros de RCN. 2. Nociones de la técnica experimental. 3. Aplicaciones químicas.

Ref. bibliográfica (1) Tema XVIII

Tema 20. **Resonancia de rayos : Espectroscopía Mössbauer**.

1. Origen de los espectros Mössbauer. 2. Estructura hiperfina. 3. Nociones de la técnica experimental. 4. Aplicaciones.

Ref. bibliográfica (1) Tema XXXV

EQUIPO DOCENTE

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13):9788420536774
Título:ESPECTROSCOPIA (1ª)
Autor/es:Requena Rodríguez, Alberto ; Zúñiga Román, José ;
Editorial:PEARSON ALHAMBRA

ISBN(13):9788436226683
Título:ESPECTROSCOPIA (1ª)
Autor/es:Núñez Barriocanal, José Luis ; Morcillo Rubio, Jesús ;
Editorial:U.N.E.D.

ISBN(13):9788497453592
Título:PROBLEMAS DE ESPECTROSCOPÍA MOLECULAR (1ª)
Autor/es:Pérez Juste, Ignacio ; Carballeira Ocaña, Luis ;
Editorial:: NETBIBLO

MORCILLO, J. y NÚÑEZ, J. L.: Unidades Didácticas de *Espectroscopía*. UNED, 1977.
REQUENA, A. y ZÚÑIGA, J.: *Espectroscopía,* Pearson-Prentice Hall, Madrid, 2003.
CARBALLEIRA OCAÑA, L. y PÉREZ JUSTE, I.: *Problemas de Espectroscopía Molecular*, Netbiblo, A Coruña, 2008.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13):9780071282215
Título:FUNDAMENTALS OF MOLECULAR SPECTROSCOPY
Autor/es:Mccash, Elaine M. ; Banwell, C.N. ;
Editorial:: MCGRAW-HILL

ISBN(13):9780132290630
Título:MOLECULAR SPECTROSCOPY (1st ed.)
Autor/es:Mchale, J.L. ;
Editorial:PRENTICE HALL

ISBN(13):9780136131069
Título:QUANTUM CHEMISTRY (6ª)
Autor/es:Levine, I.N. ;
Editorial:Upper Saddle River, N.J. : Prentice Hall

ISBN(13):9780412133909
Título:SPECTROSCOPY
Autor/es:Walker, Stanley ; Straughan, B. P. ;
Editorial:CHAPMAN AND HALL

ISBN(13):9780470844151
Título:MODERN SPECTROSCOPY (4ª)
Autor/es:Hollas, J. Michael ;
Editorial:Chichester Wiley

ISBN(13):9788420530963
Título:QUÍMICA CUÁNTICA (5ª)
Autor/es:Levine, Ira N. ;
Editorial:PRENTICE-HALL

BANWELL, C. N.: *Fundamentos de Espectroscopía Molecular*, Ed. del Castillo, Madrid, 1977.
BANWELL, C. N y McCASH, Elaine M..: *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, McGraw-Hill, Boston, 2008.

HERNANZ, A. y SESÉ, L. M.: *Relaciones y Tablas Matemáticas*, UNED, Madrid, 1990.

HOLLAS, J. M.: *Moderm Spectroscopy*, J. Wiley and Sons, Londres, 1996.

LEVINE, I. N.: *Química Cuántica*, Prentice Hall, Madrid, 2001.

LEVINE, I. N.: *Quantum Chemistry,* Pentice Hall, New Jersey, 2000.

McHALE, J. L. : *Molecular Spectroscopy*. Pentice Hall, New Jersey, 1999.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

6.1. PRUEBAS DE EVALUACIÓN A DISTANCIA

Durante el curso se deberá responder a una Prueba de Evaluación a Distancia. Esta Prueba de Evaluación corresponde a las Unidades Didácticas I, II y III. Los ejemplares podrá conseguirlos en la página web de la asignatura.

A pesar de ser de carácter **voluntario**, se recomienda la resolución de esta Prueba de Evaluación a Distancia. Resulta ser una buena medida de autocontrol para el alumno, ya que los ejercicios propuestos en ella son del tipo de los que luego deberá resolver en las Pruebas Presenciales.

Los Cuadernillos de la Prueba de Evaluación a Distancia deberá ser entregados o enviados para su corrección al Profesor-Tutor del Centro Asociado. Si en su Centro Asociado no existe Profesor-Tutor para esta asignatura, puede enviar el Cuadernillo al Equipo Docente de la asignatura en la Sede Central de Madrid.

6.2. TRABAJOS Y PRÁCTICAS DE LABORATORIO

Los alumnos deben realizar una serie de trabajos prácticos de carácter **obligatorio**, que se les propondrán a lo largo del cuatrimestre.

6.3. PRUEBAS PRESENCIALES

Las Pruebas Presenciales, que se celebran en junio y septiembre, constan de dos partes. La primera parte es de carácter teórico y consiste en varias preguntas cortas (generalmente 10) de respuesta múltiple, de las cuales **solamente una** es cierta. En la segunda parte se incluyen dos o tres ejercicios de cálculo en los que se valorará, sobre todo, el planteamiento, resolución y **lógica** a la hora de interpretar el resultado obtenido. La duración total del ejercicio será de **dos horas.**

No es necesario la utilización de hoja de lectura óptica. En cuanto a otro tipo de material, solamente está permitido el uso de **tablas de constantes fisicoquímicas** durante el examen. Si en algún caso es necesario el manejo de algún material complementario, se informará oportunamente al alumno y se hará constar en la cabecera del examen y en las Normas del Tribunal Examinador.

6.4. INFORMES DEL PROFESOR-TUTOR

El informe sobre el trabajo cotidiano del alumno, será el complemento que, junto con las calificaciones de las Pruebas Presenciales y de otras actividades que se realicen a lo largo del curso, y que son evaluadas por el profesor de la asignatura, darán lugar a la evaluación final de la asignatura.

6.5. CRITERIOS GENERALES PARA LA EVALUACIÓN FINAL

El núcleo de esta evaluación serán los resultados obtenidos en las Pruebas Presenciales. Como ya se ha explicado en otro apartado, éstas constarán de dos partes que, salvo que en

algún caso se indique otro criterio, aportará cada una el 50% en la nota final del ejercicio.
La valoración final de la actividad del alumno a lo largo del curso se hará teniendo, además, en cuenta todas las actividades (prácticas, trabajos, ...) que se le puedan proponer a lo largo del curso. También queda dicho que la valoración positiva del trabajo continuado con el Profesor-Tutor, de aquellos alumnos en cuyo Centro Asociado lo tengan, o con la Profesora de la asignatura, formará parte del resultado final de la evaluación.

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

Día de guardia: jueves de 15 a 19 horas
Despacho: 306 del Edificio de la Facultad de Ciencias
Tel.: 91 398 73 88
Correo electrónico: mtroitino@ccia.uned.es

NOTA IMPORTANTE

Si usted se ha matriculado en esta asignatura, deberá enviar al equipo docente una de las fichas que encontrará en el apartado de esta guía dedicado a la información general del Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas.
Esta ficha también puede enviarla a través de la página web de la asignatura o la del Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas.

MATERIALES AUDIOVISUALES Y TELEMÁTICOS

La asignatura dispone de una página de información actualizada en el servidor de la UNED en la dirección: www.uned.es/095354/.

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.