

21-22

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y
TECNOLOGÍA QUÍMICA

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



MICROSCOPIA INFRARROJA Y RAMAN

CÓDIGO 21151107

UNED

21-22

MICROSCOPIA INFRARROJA Y RAMAN
CÓDIGO 21151107

ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN
REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA
EQUIPO DOCENTE
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE
COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE
RESULTADOS DE APRENDIZAJE
CONTENIDOS
METODOLOGÍA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Nombre de la asignatura	MICROSCOPIA INFRARROJA Y RAMAN
Código	21151107
Curso académico	2021/2022
Título en que se imparte	MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA
Tipo	CONTENIDOS
Nº ETCS	6
Horas	150.0
Periodo	SEMESTRE 2
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

Esta asignatura se imparte dentro del Postgrado de Química de la Facultad de Ciencias de la UNED "Master en Ciencia y Tecnología Química" y pertenece al Módulo II correspondiente a **Química Física**. En ella se introducen en las técnicas de microespectroscopía infrarroja y Raman.

La asignatura está relacionada con las asignaturas del Grado de Química QUÍMICA FÍSICA II: ESPECTROSCOPIA Y ESTADÍSTICA MOLECULAR, BIOESPECTROSCOPIA, EXPERIMENTACIÓN EN QUÍMICA FÍSICA Y QUÍMICA ANALÍTICA, TÉCNICAS Y MÉTODOS EN BIOQUÍMICA y QUÍMICA ANALÍTICA INSTRUMENTAL; y con la asignatura del Máster en Ciencia y Tecnología Química BIOESPECTROSCOPIA.

La asignatura está orientada a formar a los estudiantes en una técnica instrumental que puede servirles tanto para fines de investigación básica como para realizar estudios de tipo analítico (determinaciones analíticas en general, análisis forenses...).

Inicialmente se describen los fundamentos de estas técnicas y las peculiaridades de la instrumentación usada. Posteriormente, se pone especial énfasis en las aplicaciones tanto en química (identificación, cuantificación, mapeo, imágenes, envejecimiento, catalizadores...) como en medicina, biología, medio ambiente, geología, ciencia de los materiales (microestratigrafías, nanoestructuras), ciencia forense, arqueología, arte, documentos históricos, etc. Se han programado unos ejercicios prácticos para familiarizarse con la instrumentación y ejercitarse en la interpretación y discusión de resultados.

Se presupone el conocimiento de las bases de la espectroscopía de vibración y la aplicación macroscópica de dichas técnicas, pues son contenidos que se imparte en el Grado. En el Máster se describen los fundamentos físicos (ópticos y espectroscópicos) de las modalidades microscópicas de estas técnicas, así como su gran variedad de aplicaciones. Son herramientas que completan la formación de especialistas en química y otras disciplinas.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

Para cursar Microscopía IR y Raman se deben conocer los fundamentos de la espectroscopía de vibración, tanto IR como Raman. Además, se debe tener experiencia, o haber realizado algún ejercicio, en la interpretación de estos espectros. Es asimismo fundamental ser capaz de leer y entender textos y artículos científicos y de redactar trabajos sobre lo aprendido.

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

JOSE MARIA GAVIRA VALLEJO (Coordinador de asignatura)
jm.gavira@ccia.uned.es
91398-7391
FACULTAD DE CIENCIAS
CIENCIAS Y TÉCNICAS FÍSICO-QUÍMICAS

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

La comunicación con el profesor de la asignatura se realizará básicamente mediante el curso virtual y el correo electrónico durante **todos los días lectivos del curso**. También se podrá contactar por teléfono o presencialmente (previa cita) en el siguiente **horario** (o en cualquier otro si se acuerda con antelación):

• Jose María Gavira Vallejo (jm.gavira@ccia.uned.es): **martes de 9 a 13 h.**

La dirección física del profesor de la asignatura es:

UNED - Campus de Las Rozas (edificio Las Rozas 1; Carretera Las Rozas –El Escorial Km 5 (Urbanización Monte Rozas); 28230 Las Rozas)

Tfno.: 913987391

Despacho 123

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS BÁSICAS

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

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

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

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

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

CG05 - Adquirir capacidad de organización y de decisión

CG06 - Comprender y manejar sistemáticamente los aspectos más importantes relacionados con un determinado campo de la química

CG07 - Dominar las habilidades y métodos de investigación relacionados con el campo de estudio

CG08 - Adquirir la capacidad de detectar carencias en el estado actual de la ciencia y tecnología

CG09 - Desarrollar la capacidad para proponer soluciones a las carencias detectadas

CG10 - Desarrollar la capacidad para proponer y llevar a cabo experimentos con la metodología adecuada, así como para extraer conclusiones y determinar nuevas líneas de investigación

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE01 - Desarrollar la habilidad y destreza necesarias en la experimentación química para aplicar sus conocimientos químicos, teóricos y prácticos en el análisis químico

CE02 - Adquirir la capacidad de la utilización de variables que permiten obtener información químico-analítica.

CE04 - Manejar equipos e instrumentos especializados

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los objetivos de aprendizaje son:

1. Que los estudiantes conozcan los fundamentos y características de los microscopios IR y Raman, los fenómenos y efectos físicos en los que se basan estos instrumentos, sus posibilidades y limitaciones.
2. Que conozcan, asimismo, las principales aplicaciones de estas técnicas en muy diversos campos.
3. Estimular la creatividad e imaginación de los estudiantes para que, conociendo las aplicaciones realizadas en biología, medicina, ciencias de los materiales, nanotecnologías, catálisis, medio ambiente, geología, gemología, arte, arqueología, documentos, historia, ciencia forense, etc., sean capaces de sugerir otras posibles aplicaciones en áreas de su interés.
4. Adquirir alguna experiencia en el uso de estas técnicas aplicándolas en ejercicios prácticos sugeridos por los estudiantes o propuestos por los profesores.

CONTENIDOS

Tema 1. Fundamentos de microespectroscopía IR e instrumentación

- 1.1. Fundamentos físicos de la espectroscopía IR*
- 1.2. Espectroscopía IR dispersiva y de Transformada de Fourier*
- 1.3. Espectroscopía IR de transmisión y de reflexión*
- 1.4. Instrumentos dispersivos e interferométricos.*
- 1.5. Microespectroscopía IR*
- 1.6. Fuentes térmicas y de sincrotrón*
- 1.7. Transmisión, reflexión, reflexión difusa, total atenuada y de haz rasante*
- 1.8. Microespectrómetros de infrarrojo*
- 1.9. Accesorios especiales para estudios microscópicos fisicoquímicos*
- 1.10. Preparación de muestras para microespectroscopía IR*

Tema 2. Aplicaciones de la microespectroscopía IR

- 2.1. Identificación de sustancias químicas*
- 2.2. Interpretación de los espectros obtenidos por microespectroscopía*
- 2.3. Mapeo químico e imágenes IR*
- 2.4. Análisis cuantitativo*
- 2.5. Estudios cinéticos (envejecimiento de materiales)*
- 2.6. Estudios de catalizadores*
- 2.7. Estudios fisicoquímicos de polvos, cuerpos, fibras, superficies, películas y capas.*
- 2.8. Estudios de líquidos y gases*
- 2.9. Estudios de muestras médicas, biológicas y ambientales*

Tema 3. Fundamentos de microespectroscopía Raman e instrumentación

- 3.1. Efecto Raman. Espectroscopía Raman. Complementariedad entre las espectroscopías IR y Raman*
- 3.2. Instrumentación. Líneas láser de excitación. Filtros Rayleigh. Espectrómetros dispersivos e interferométricos*
- 3.3. Calibrado*
- 3.4. Problemas: radiación de fluorescencia, luz ambiental, cambios de temperatura... etc.*
- 3.5. Condiciones de registro de los espectros Raman. Selección de variables. Resolución espectral y relación señal/ruido*
- 3.6. Especies químicas que se estudian. Región espectral apropiada. Características de los espectros de gases, líquidos y sólidos*

3.7. Análisis cualitativo. Frecuencias de grupo e interpretación de espectros. Bases de datos. Dificultades de los análisis cuantitativos. Bases de datos

3.8. Programas para tratamiento digital de espectros. Tratamientos numéricos y consejos

3.9. Efecto confocal. Microscopios Raman de laboratorio, portátiles y manuales. Materiales y accesorios

3.10. Perfilado en profundidad. Secciones transversales, láminas delgado-pulidas. Programas para fotografía microscópica

3.11. Imagen Raman

3.12. Una secuencia de operaciones recomendada

3.13. Acoplamiento con otras técnicas microscópicas (electrónica, rayos X, fuerza atómica...)

3.14. Microscopía óptica de campo próximo mediante barrido Raman (RSNOM)

Tema 4: Aplicaciones de la microespectroscopía Raman

4.1. Catalizadores

4.2. Cerámica

4.3. Recubrimientos

4.4. Microelectrónica

4.5. Semiconductores

4.6. Polímeros

4.7. Materiales nanoestructurados

4.8. Química

4.9. Geología. Mineralogía. Petrología. Geoquímica. Gemología

4.10. Biología

4.11. Medicina

4.12. Ciencia forense

4.13. Aplicaciones en arte y arqueología

METODOLOGÍA

La materia está planteada para su realización a través de la metodología general de la UNED, en la que se combinan distintos recursos metodológicos: los textos escritos y los medios virtuales. La metodología estará basada en los siguientes elementos:

1.- Recursos Humanos de apoyo al estudiante: equipos docentes, tutores de los Centros Asociados y personal de administración y servicios por vía telefónica, en-línea, o a través de videoconferencia.

2.- Materiales impresos, audiovisuales (radio, televisión educativa, canal UNED) y multimedia (comunidad virtual, plataforma aLF, etc.).

- 3.- Posibilidad de realizar prácticas: laboratorios en los Centros Asociados y en la Sede Central.
- 4.- Servicios de apoyo al alumno: bibliotecas, librerías y librería virtual.

Estas son las pautas para estudiar la asignatura:

- 1) Leer en profundidad y con espíritu crítico el **material documental** que se facilitará en el aula para adquirir los conocimientos básicos necesarios.
- 2) Responder dentro de los plazos señalados en el aula virtual a **cuatro cuestionarios** (de 10 preguntas cada uno):
 1. *Fundamentos de la microespectroscopía IR. Instrumentación*
 2. *Aplicaciones de la microespectroscopía IR:*
 3. *Fundamentos de la microespectroscopía Raman. Instrumentación*
 4. *Aplicaciones de la microespectroscopía Raman:*
- 3) Por cada técnica (*Microespectroscopía IR y Microespectroscopía Raman*) redactar un **ensayo** de tema libre, de una extensión *no superior* a las 3.000 palabras. Estos ensayos pueden consistir en un estudio sobre una aplicación particular (algún aspecto de interés en Medicina, Arqueología...) redactado con el mismo estilo de los artículos científicos que se han leído, una revisión bibliográfica sobre algún aspecto concreto (no general) de la técnica o cualquier otro tipo de presentación de contenidos siempre que estos se refieran a un aspecto específico, no general.
- 4) Realizar una **práctica presencial**, si bien también se contempla una alternativa no presencial para quienes no puedan asistir.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL

Tipo de examen No hay prueba presencial

CARACTERÍSTICAS DE LA PRUEBA PRESENCIAL Y/O LOS TRABAJOS

Requiere Presencialidad No

Descripción

Esta asignatura tiene una parte práctica obligatoria, si bien puede realizarse en modalidad no presencial, como se describe en el apartado "Plan de trabajo". La evaluación de esta parte se basará en los correspondientes **informes de prácticas**. Por otro lado, se deben redactar **dos ensayos**, uno referido a la microespectroscopía IR y otro referido a la Raman. Los temas serán libres siempre que se adapten a las condiciones que se mencionan en el apartado "Plan de trabajo"; antes de empezar a redactarlos deberán proponerse a los profesores de la asignatura y esperar su visto bueno. La extensión de cada ensayo no deberá ser superior a las 3.000 palabras (unos 7 folios por una cara a un espacio)

Criterios de evaluación

En los **informes de prácticas** se valorará que se redacten siguiendo el esquema de los artículos de investigación: resumen, introducción teórica, experimental, resultados, discusión, conclusiones y bibliografía y que en ellos se dé una solución clara a los problemas propuestos.

Los **ensayos** igualmente deberán escribirse como artículos. Deben referirse a las modalidades microscópicas de las técnicas vibracionales, no a las macroscópicas. Se valorará especialmente que estas revisiones presenten el tema propuesto desde una óptica crítica y *comparativa*, destacando factores comunes y diferencias, y no se limiten a comentar (y menos copiar) los resúmenes de los trabajos consultados, uno tras otro, sin establecer nexos entre ellos.

Ponderación de la prueba presencial y/o los trabajos en la nota final

•La parte práctica se evaluará con un máximo de 30 puntos sobre el total de 100 de la asignatura. Pero según se opte por el sistema presencial o no presencial, esta parte se evaluará de distinto modo: 1) Prácticas presenciales. Se darán dos notas, una por la asistencia y otra por el informe, ambas de 0 a 10. La asistencia y actitud en la misma representará el 30% de estos 30 puntos; el informe, el 70%. 2) Prácticas no presenciales. Se darán dos notas, una por el informe de la práctica y otra por el informe adicional, ambas de 0 a 10. La primera representará el 70% de estos 30 puntos; la segunda, el 30%. •En cuanto a los ensayos, por cada uno de ellos (Microespectroscopía IR y Microespectroscopía Raman) se dará un máximo de 20 puntos sobre los 100 del total de la asignatura. •Los 30 puntos restantes para completar el máximo de 100 se podrán obtener como se describe a continuación.

Fecha aproximada de entrega

Ensayos: 30 de abril y 15 de junio. Prácticas: en torno al 25 de junio.

Comentarios y observaciones

Es necesario advertir que se sancionará el plagio y la mala práctica de componer los ensayos como "collage" o "refrito" de otros trabajos, es decir, copiar párrafos de diversas fuentes y después hilvanarlos introduciendo ligeras modificaciones para que parezcan propios; o traducir literalmente de otro idioma lo escrito por otras personas. No se deben copiar literal o semiliteralmente frases o párrafos de artículos de otros autores, salvo si la importancia de la frase lo justifica y se cita. Si se detecta cualquier proceder de ese tipo, el ensayo será completamente descalificado. Lo mismo es aplicable a los informes de prácticas.

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC?

Si, PEC no presencial

Descripción

Se trata de **cuatro cuestionarios**, uno por cada tema del temario. Cada cuestionario consiste en 10 preguntas objetivas (test).

Criterios de evaluación

Para cada cuestionario, cada pregunta bien respondida será calificada con un punto; cada pregunta mal respondida restará 1/3 de punto.

Cada cuestionario se calificará entre 0 y 10 y representará como máximo 7,5 puntos en la calificación final. En total, 30 puntos por los cuatro cuestionarios.

Ponderación de la PEC en la nota final	7,5% cada PEC; 30 % las cuatro.
Fecha aproximada de entrega	En torno a: 10 de marzo, 31 de marzo, 30 de abril y 20 de mayo

Comentarios y observaciones

Las soluciones a los cuestionarios se darán en el aula virtual una vez terminado el plazo para realizarlos.

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

La calificación final, sobre 100, se obtendrá sumando estas aportaciones (máximas):

7,5 puntos por el cuestionario 1

7,5 puntos por el cuestionario 2

7,5 puntos por el cuestionario 3

7,5 puntos por el cuestionario 4

20 puntos por el ensayo de microespectroscopía IR

20 puntos por el ensayo de microespectroscopía Raman

9 puntos por la asistencia a las prácticas (o por el informe complementario en la modalidad no presencial)

21 puntos por el informe de las prácticas

Para aprobar la asignatura será preciso

haber realizado y aprobado las prácticas;

haber obtenido al menos 50 puntos en el conjunto de todas las tareas.

Es decir, *no será obligatorio realizar todas las tareas teóricas (cuestionarios y artículos) para aprobar en la convocatoria ordinaria, sino obtener al menos 50 puntos en total. Si no se entrega alguna tarea teórica dentro del plazo establecido será calificada con 0 puntos, pero eso no supondrá suspender la asignatura. Ahora bien, independientemente del número de puntos totales obtenidos, no se podrá aprobar si no se han hecho las prácticas o no se han entregado los informes correspondientes. Sin embargo, si se han entregado los informes *razonablemente trabajados* y estos reciben una calificación de suspenso pero se cumple la condición de obtener al menos 50 puntos en total, la asignatura estará aprobada.*

Si se obtienen al menos 50 puntos en total y se han hecho las prácticas y entregado los informes (razonablemente trabajados) la asignatura estará aprobada y no cabrá mejorar nota en septiembre. Pero si se obtienen menos de 50 puntos se dispondrá de una segunda oportunidad en septiembre.

Para la convocatoria de septiembre:

Si se realizaron las prácticas en junio y se aprobaron, no cabe mejorar la nota de las prácticas. Si se suspendieron, se podrán repetir los informes y entregarlos antes del 10 de septiembre, pero la calificación máxima que se recibirá por ellos será de 5 (ya que se contará con la ventaja de disponer de las correcciones hechas por los profesores). Si no se realizaron las prácticas en junio, se podrán hacer para septiembre, pero solo en la modalidad no presencial, habiendo de entregarse antes del 10 de septiembre los informes correspondientes y teniendo en cuenta que la *máxima* nota que se recibirá por los informes será de 5.

No se podrá responder de nuevo a los cuestionarios, pues estos tienen el carácter de *evaluación continua*.

Si no se entregó uno o los dos artículos dentro de plazo y se suspendió la asignatura en la convocatoria ordinaria, se podrán escribir para septiembre y serán calificados entre 0 y 10. Si se hicieron los artículos no se podrán repetir aquellos en los que se obtuvo más de un 5 (pues no existe la opción de "mejora de nota" en la convocatoria extraordinaria), pero sí aquellos en los que se obtuvo menos de 5, si bien se tendrá que elegir *un nuevo*

tema que habrá de ser comunicado a los profesores. Los informes para la convocatoria extraordinaria habrán de entregarse antes del 10 de septiembre.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Los documentos para el estudio de la asignatura se facilitarán en el aula virtual. La mayoría de ellos se han extraído de estas obras:

- *Handbook of Vibrational Spectroscopy*, vols. 1-5, J.M. Chalmers y P.R. Griffiths (eds.), Wiley, Chichester, UK, 2002.
- *Raman Microscopy. Developments and Applications*, G. Turrell y J. Corset (eds.), Elsevier Academic Press, London, UK, 1996.
- *Practical guide to infrared microspectroscopy*, Howard J. Humecki (ed.), CRC Press, 1995 (ISBN-10: 0824794494, ISBN-13: 978-0824794491)
- *Infrared Microspectroscopy: Theory and Applications (Practical Spectroscopy Series, Vol 6)*, Robert G. Messerschmidt, Matthew Harthcock (eds.), Marcel Dekker Inc, 1988 (ISBN-10: 0824780035, ISBN-13: 978-0824780036)
- *The Design, Sample Handling, and Applications of Infrared Microscopes*, Patricia B. Roush (ed.), ASTM International, 1987 (ISBN 0803109539)
- *Selected Applications of Modern Ft-IR Techniques*, Koichi Nishikida, Etsuo Nishio, Robert W. Hannah, 1995, CRC Press (ISBN 2884490736)

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Los profesores podrán incluir bibliografía reciente que consideren de interés.

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

- El material escrito necesario será proporcionado por los profesores.
- Para las prácticas, los profesores facilitarán los espectros necesarios, que podrán visualizarse mediante el programa gratuito Spectragryph.

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.