



Grado en Física 26947 - Espectroscopia

Guía docente para el curso 2014 - 2015

Curso: 4, Semestre: 2, Créditos: 5.0

Información básica

Profesores

- **Rafael Cases Andreu** cases@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se recomienda haber cursado las asignaturas: Física Cuántica I y II, Óptica y Estado Sólido I.

Actividades y fechas clave de la asignatura

Las clases de teoría y de problemas se imparten a lo largo del segundo semestre del cuarto curso del Grado en Física.

Las clases prácticas se imparten en sesiones de tarde.

Sesiones de evaluación: Las sesiones de evaluación mediante una prueba escrita global son las que el Decanato de la Facultad de Ciencias determina y publica cada año en su página web.

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

- 1:** Interpretar correctamente los efectos de las aproximaciones de campo cristalino débil, intermedio y fuerte sobre la estructura electrónica de iones y moléculas.
- 2:** Obtener las reglas de selección asociadas a la simetría en estados electrónicos y vibraciones de iones y moléculas.
- 3:** Interpretar la información básica que se obtiene mediante la aplicación de las distintas técnicas espectroscópicas a sistemas sencillos.
- 4:** Reconocer los elementos sobre los que se basa la elección de cada técnica espectroscópica para la

caracterización de sistemas moleculares o sólidos concretos.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

Con esta asignatura se pretende proporcionar al alumno un conocimiento de diversas técnicas espectroscópicas utilizadas para la caracterización de sólidos (material masivo), así como sistemas moleculares e iones magnéticos y tierras raras.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

Esta asignatura es una asignatura optativa y su objetivo es proporcionar al alumno una visión amplia de diferentes técnicas espectroscópicas utilizadas en la caracterización de los iones 3d y tierras raras en los sólidos así como de las vibraciones de la red en el material masivo. Concretamente se cubrirán los siguientes puntos:

Introducción. Teoría de Grupos Puntuales.

Campo cristalino y sus diferentes aproximaciones. El papel de la simetría. La simetría de las moléculas y sus modos normales de vibración.

Espectroscopia Raman para determinar los modos normales o modos de vibración de las partículas del sólido.

Instrumentación básica en resonancia paramagnética electrónica.

El Hamiltoniano de Spín y la interpretación de los espectros de resonancia paramagnética electrónica.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura tiene carácter optativo, lo que permite que el alumno decida cómo orientar la parte final de su formación como graduado en función de sus afinidades e intereses. En este sentido, esta asignatura aborda una temática interesante y actual, que además resulta útil y aplicable en diferentes campos de la Física.

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

- 1:** Comprender el efecto de la simetría del entorno sobre la estructura electrónica de átomos, iones y moléculas.
- 2:** Relacionar las propiedades de emisión y absorción de radiación con la simetría del entorno de iones y moléculas.
- 3:** Conocer los distintos grados de libertad microscópicos activos en las técnicas espectroscópicas.
- 4:** Conocer los principales ámbitos de aplicación de la caracterización mediante las distintas técnicas espectroscópicas

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

La asignatura de Espectroscopia constituye un elemento fundamental para la adquisición por parte del alumno de las competencias necesarias para la caracterización de átomos o iones magnéticos en los sólidos desde un punto de vista espectroscópico.

Evaluación

Actividades de evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

- 1:** Realización de prácticas de laboratorio a lo largo del periodo de impartición de la asignatura. Los alumnos deberán entregar un informe escrito de cada una de las sesiones de laboratorio realizadas. La nota de estos informes constituyen el 15% de la nota final.
- 2:** Resultado de la prueba de examen que constituirá un 85% del resultado global.

Superación de la asignatura mediante una prueba global única

La evaluación se obtendrá directamente a partir de una prueba de examen. Este examen tendrá una parte escrita y otra parte práctica.

El examen escrito (85%) consistirá de dos partes, una de cuestiones teóricas, y otra de problemas. El resultado total será el promedio de las dos partes.

El examen práctico (15 %) consistirá en la resolución de varios supuestos prácticos similares a los realizados por los alumnos presenciales en las sesiones de laboratorio.

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

Las metodologías de enseñanza-aprendizaje que se plantean para conseguir los objetivos planteados y adquirir las competencias son las siguientes:

- Lecciones magistrales: presentan al alumno los contenidos teóricos básicos para lograr la adquisición por su parte de las competencias técnicas asociadas (CE1, CE2, CE3, CE4, CE5, CE6, CE10).
- Realización de problemas: permiten la adquisición de las competencias técnicas desde un punto de vista práctico (CE1, CE2, CE3, CE5, CE6, CE10).
- Realización de prácticas de laboratorio: permiten la adquisición de las competencias técnicas desde un punto de vista práctico (CE7, CE8, CE9).
- Examen de la asignatura: permite la evaluación de todas las competencias y objetivos de la asignatura.

Las competencias CE son las definidas en la memoria de verificación del grado en Física,
<http://ciencias.unizar.es/aux/generalDcha/EEES/MemVerifFisicaANECA.pdf>

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

- 1:** Efecto de la simetría del entorno sobre la estructura electrónica.
- 2:** Espectroscopia óptica: absorción y emisión.
- 3:** Modos de vibración: espectroscopia infrarroja y espectroscopia Raman.
- 4:** Resonancias magnéticas.
- 5:** Otras técnicas de resonancia y dispersión inelástica.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

La distribución, en función de los créditos, de las distintas actividades programadas es la siguiente:

Las clases magistrales dedicadas a teoría impartirán en 35 horas.

Las clases magistrales dedicadas a resolución de problemas se impartirán en 10 horas.

Las prácticas de laboratorio se realizarán en 5 horas

Los trabajos e informes se presentarán al final del cuatrimestre

BIBLIOGRAFÍA

[1] Cotton, Frank Albert. La teoría de grupos aplicada a la química / F. Albert Cotton ; [versión española, Francisco de Asis Gonzales Vilchez ; revisión, Jaime Keller Torres] . 2a. ed., [1a. reimp.] México, D.F. : Limusa, 1983

[2] Di Bartolo, Baldassare. Optical interactions in solids / Baldassare Di Bartolo . New York [etc] : John Wiley and Sons, cop.1968.

[3] ELECTRON SPIN RESONANCE: Elementary Theory and Applications
J. W. Wertz (McGraw-Hill 1972)

BIBLIOGRAFÍA

[1] Cotton, Frank Albert. La teoría de grupos aplicada a la química / F. Albert Cotton ; [versión española, Francisco de Asis Gonzales Vilchez ; revisión, Jaime Keller Torres] . 2a. ed., [1a. reimp.] México, D.F. : Limusa, 1983

[2] Di Bartolo, Baldassare. Optical interactions in solids / Baldassare Di Bartolo . New York [etc] : John Wiley and Sons, cop.1968.

[3] ELECTRON SPIN RESONANCE: Elementary Theory and Applications]. W. Wertz (McGraw-Hill 1972)

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Cotton, Frank Albert. La teoría de grupos aplicada a la química / F. Albert Cotton ; [versión española, Francisco de Asis Gonzales Vilchez ; revisión, Jaime Keller Torres] . - 2a. ed., [1a. reimp.] México, D.F. : Limusa, 1983
- Di Bartolo, Baldassare. Optical interactions in solids / Baldassare Di Bartolo New York [etc] : John Wiley and Sons, cop.1968
- Wertz, John E. & Bolton, James R.. Electron spin resonance : elementary theory and practical applications. Chapman and Hall. 1986