



Grado en Química 27221 - Espectroscopia y propiedades moleculares

Guía docente para el curso 2014 - 2015

Curso: 4, Semestre: 1, Créditos: 6.0

Información básica

Profesores

- **Carlos Enrique Lafuente Dios** celadi@unizar.es
- **Rosa Garriga Mateo** rosa@unizar.es
- **Victoriano Polo Ortiz** vipolo@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Haber superado la materia de Química Física del Módulo Fundamental.

Realizar un trabajo regular y continuado a lo largo del curso, participando activamente en las clases y tutorías, y resolviendo los problemas y casos propuestos.

Consultar libros específicos relacionados con la asignatura.

Actividades y fechas clave de la asignatura

El calendario correspondiente al curso así como las fechas y horarios de clases y exámenes de la asignatura se pueden consultar en la siguiente página de Internet: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

Las fechas correspondientes a la realización de las prácticas se indicarán a lo largo del curso.

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

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

- 1:** Adquiere visión espacial para situar los elementos de simetría y clasificar moléculas sencillas en el grupo puntual de simetría al que pertenecen.
- 2:** Aplica los conocimientos de simetría en la resolución de problemas sencillos en química física.

- 3:** Comprende de los procesos primarios fotofísicos y fotoquímicos que puede sufrir una molécula excitada por absorción de luz y del concepto de rendimiento cuántico.
- 4:** Comprende el origen de los fenómenos espectroscópicos en la interacción radiación-materia y el fundamento de las técnicas fundamentales de espectroscopía molecular. Aplica los conocimientos de simetría adquiridos.
- 5:** Distingue el tipo de información que proporcionan las distintas técnicas de espectroscopía molecular que se van a tratar en la asignatura y sus limitaciones.
- 6:** Maneja con habilidad técnicas experimentales básicas en espectroscopía así como los correspondientes tratamientos de datos y elaboración de informes.
- 7:** Adquiere unos conocimientos básicos sobre aspectos químico-físicos de polímeros.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

Se trata de una asignatura de carácter obligatorio (Módulo Avanzado) de 4º curso del Grado de Químicas. Consta de 6 créditos ECTS y se imparte en el primer semestre. Se tratarán aspectos avanzados de Química Física, como nociones de simetría molecular, conceptos básicos de fotoquímica, fundamentos y aplicaciones más relevantes de distintas técnicas de espectroscopía molecular, y finalmente una breve introducción a la química física de polímeros.

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:

- El objetivo de esta asignatura es completar la formación químico-física del alumno adquirida en el Módulo Fundamental. Se estudiarán los conceptos teóricos, prestando atención a sus aplicaciones, en lo relativo a los campos de simetría molecular, fotoquímica, espectroscopía molecular y polímeros.
- Se prestará atención a expresar los conceptos con la precisión requerida en el ámbito científico y a que el alumno sea capaz de establecer relaciones entre los distintos conceptos.
- Aplicar los conocimientos teóricos a la resolución de cuestiones y problemas, utilizando adecuadamente los sistemas de unidades y analizando e interpretando físicamente los resultados obtenidos.
- Profundizar en el manejo de técnicas experimentales así como en los correspondientes tratamientos de datos.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

Se tratan en esta asignatura del Módulo Avanzado aspectos más específicos de Química Física importantes para la formación del alumno.

Los conocimientos de simetría molecular suponen una drástica simplificación de múltiples problemas de la química. Conceptos fundamentales de fotoquímica serán útiles en el estudio de química ambiental, así como partes concretas de asignaturas de las distintas áreas de química.

En la parte que se refiere a espectroscopía molecular, se tendrá en cuenta los modelos químico-cuánticos introducidos en la asignatura de química física II, y es de destacar que esta asignatura se complementa y sirve de base a otras asignaturas del módulo avanzado impartidas por otras áreas de química, tanto de carácter obligatorio como optativo, que tratan distintas técnicas espectroscópicas desde una visión aplicada a sus áreas de conocimiento.

La parte de polímeros supone una introducción desde un punto de vista químico-físico que facilitará la comprensión de esta materia estudiada en ciencia de materiales.

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

- 1:** Manejar las herramientas matemáticas necesarias para tratar de una manera rigurosa aquellos aspectos teóricos y prácticos de la simetría en la Química.
- 2:** Conocer los fundamentos de la fotoquímica, naturaleza fotónica de la radiación, energía transportada y efectos cuánticos de absorción y emisión de energía.
- 3:** Comprender el fundamento teórico de distintas técnicas de espectroscopía molecular y sus aplicaciones, así como las posibilidades y limitaciones de cada técnica espectroscópica, de forma que los alumnos sean capaces de decidir qué técnicas de estudio deben utilizar.
- 4:** Ser capaz de comprender distintos métodos de caracterización químico-física de los distintos tipos de polímeros.
- 5:** Conocer los distintos tipos de mecanismos y cinética de las reacciones de polimerización.
- 6:** Ser capaz de trabajar en grupo correctamente en el laboratorio y de manejar de forma adecuada los equipos, demostrando comprensión del funcionamiento de la parte instrumental y capacidad de elaborar de informes.

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

El alumno necesita adquirir una formación sobre los fundamentos y aplicaciones de las técnicas de espectroscopía molecular, tanto en el ámbito de su especialización o su posterior labor profesional, ya que son técnicas ampliamente empleadas por todas las áreas de la química y disciplinas relacionadas como bioquímica, ciencia de materiales etc.

Nociones de simetría molecular y fotoquímica son útiles dentro de la propia asignatura para la parte de espectroscopia molecular, así como por ejemplo para estudios relacionados con geometría molecular y reacciones en química orgánica e inorgánica.

Una introducción a polímeros desde el punto de vista físico-químico favorecerá al alumno la comprensión de estudios en esta materia.

Evaluación

Actividades de evaluación

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

- 1:** Prueba escrita con cuestiones teórico-prácticas sobre las partes de simetría y fotoquímica (prueba 1), a realizar tras acabar la explicación de estas partes. La fecha concreta se comunicará con suficiente antelación. Si el alumno obtiene una calificación en la prueba 1 igual o superior a 5 sobre 10, si lo desea puede eliminar materia. Se guardará esta calificación para la convocatoria de septiembre.
- 2:** **Prueba escrita** con cuestiones teórico-prácticas (prueba 2) sobre toda la asignatura, a realizar en los periodos habilitados de evaluación global por la Facultad (en enero-febrero y en septiembre). Los alumnos

que obtengan una calificación igual o superior a 5 sobre 10 en la prueba 1, si lo desean pueden presentarse en la prueba 2 sólo a las preguntas sobre el resto de la asignatura, en cuyo caso su calificación se calculará a partir de la obtenida en la prueba 1 (25%) y en la prueba 2 (75%).

- 3:** Las **prácticas de laboratorio** se evaluarán atendiendo a la preparación y calidad del trabajo realizado en el mismo y a la realización de informes/cuestionarios sobre las mismas. Las prácticas aprobadas se guardan para la convocatoria de septiembre. Es obligatorio aprobar las prácticas de laboratorio para aprobar la asignatura, de forma que si la calificación en prácticas de laboratorio fuera suspenso, el alumno tendrá la posibilidad de aprobar las prácticas de laboratorio, tanto en la primera como en la segunda convocatoria de la asignatura mediante la realización de una prueba teórico-práctica (en la fecha asignada en el periodo de evaluación global) sobre contenidos relacionados con las prácticas.
- 4:** Para aprobar la asignatura será necesario aprobar independientemente tanto la prueba escrita con cuestiones teórico-prácticas como las prácticas de laboratorio. La calificación en la prueba escrita con cuestiones teórico-prácticas supondrá el 90% de la nota final de la asignatura, y la calificación de las prácticas de laboratorio contribuirá con un 10% a la nota final de la asignatura.
- 5:** El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho (2 por matrícula) así como el consumo de dichas convocatorias se ajustará a la Normativa de Permanencia en Estudios de Grado (http://www.unizar.es/sg/doc/BOUZ10-10_001.pdf) y Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje. A este último reglamento, también se ajustarán los criterios generales de diseño de las pruebas y sistema de calificación, y de acuerdo a la misma se hará público el horario, lugar y fecha en que se celebrará la revisión al publicar las calificaciones. Dicha normativa puede consultarse en:
<http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

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

El proceso de aprendizaje constará de:

- Actividad formativa 1: Clases de exposición de contenidos teóricos por parte del profesor (3.1 ECTS), incluyendo cuestiones que promuevan la participación del alumno.
- Actividad formativa 2: Clases de resolución de problemas/seminario (1.5 ECTS), con participación activa de los alumnos.
- Actividad formativa 3: Clases prácticas de laboratorio (1.4 ECTS). Se prestará atención al funcionamiento de la parte instrumental, habilidad en el laboratorio y tratamiento de resultados.

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:**
- 1. Simetría Molecular: 9 horas (6 de teoría y 3 de problemas/seminarios)**

Introducción a la simetría puntual. Clasificación de moléculas según su simetría. Representaciones lineales de grupos. Representaciones irreducibles. Tablas de caracteres. Productos de representaciones. Aplicación en la obtención de reglas de selección espectroscópicas. Espacios base de representación de grupos: modos normales, orbitales moleculares.

- 2. Fotoquímica: 5 horas (3 de teoría y 2 de problemas/seminarios)**

Introducción a la fotoquímica. Estados electrónicos moleculares y excitación electrónica. Propiedades de las moléculas en un estado electrónico excitado. Clasificación de procesos de desactivación electrónica. Procesos fotofísicos: diagrama de Jablonski. Reacciones fotoquímicas básicas.

3. Espectroscopía Molecular: 25 horas (17 de teoría y 8 de problemas/seminarios) + 10 horas de prácticas de laboratorio repartidas en tres sesiones.

Principios espectroscópicos generales; interacción de la radiación electromagnética y la materia. Momento de transición. Reglas de selección. Anchura de las líneas espectrales.

La rotación molecular. Niveles de energía de rotación en el caso de rotores moleculares rígidos. Deformación centrífuga. El efecto Stark en los espectros de rotación.

La vibración en moléculas diatómicas; anarmonicidad. Modos normales de vibración en moléculas poliatómicas. Frecuencias de grupo.

El efecto Raman. Espectros Raman de rotación y vibración. La polarización de la luz en el efecto Raman. Aplicación de los espectros IR y Raman a la determinación de estructuras moleculares sencillas.

La espectroscopia electrónica de moléculas diatómicas. El principio de Frank-Condon. Espectroscopía electrónica de moléculas poliatómicas. Características y aplicaciones de las transiciones en V-UV.

Fluorescencia molecular. Ejemplos y aplicaciones en espectroscopia.

Fundamento de la espectroscopia fotoelectrónica. Interpretación de espectros UPS y XPS.

Espectroscopía de resonancia de spin; precesión de Larmor. La espectroscopía RMN en el caso de núcleos de hidrógeno. Desplazamiento químico y acoplamiento. Análisis de espectros RMN de núcleos distintos al de hidrógeno; relajación cuadrupolar nuclear.

Fundamento de la espectroscopía de resonancia de spin electrónico ESR. Análisis de la estructura hiperfina en algunos casos sencillos.

4. Polímeros: 7 horas (5 de teoría y 2 de problemas/seminarios) + 4 horas de prácticas de laboratorio

Propiedades químico-físicas y caracterización. Cinéticas y mecanismos de polimerización. Degradación y estabilidad. Solubilidad de polímeros.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

El calendario de la asignatura en cuanto a clases presenciales se podrá consultar en:

<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

El calendario de sesiones prácticas se anunciará oportunamente en clase y en los tablones del departamento.

Bibliografía

La bibliografía recomendada es la siguiente:

1: BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- La teoría de grupos aplicada a la química. F. A. Cotton. Ed. Limusa (2000).
- Beginning group theory for chemistry. P. H. Walton. Ed. Oxford University Press (1998).
- Photochemistry. C. E. Wayne and R. P. Wayne. Ed. Oxford University Press (2002).
- Fundamentals for molecular spectroscopy (4th edition). C.N. Banwell. Ed. McGraw-Hill (2001).

- Introduction to molecular spectroscopy. G. M. Barrow. McGraw-Hill (1986).
- Principios básicos de espectroscopía. R. Chang. Traducción I. A. Katime. Ed. AC, D.L. (1983).
- Physical methods for chemists (2nd edition). R. S. Drago. Ed. Saunders, cop. (1992).
- Espectroscopía molecular. I. N. Levine. Traducción, A. F. Ortigosa, A. R. Rodríguez. Ed. AC, cop.(1980).
- Polímeros. J. Areizaga. Ed. Síntesis D.L. (2002).

2:

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Molecular symmetry. D. J. Willock. Ed. Wiley (2009).
- Espectroscopía. A. Requena Rodríguez, J. Zúñiga Román. Ed. Pearson/Prentice Hall (2004).
- **Modern molecular photochemistry. N. J. Turro. Ed.** University science books (1991).
- Química física macromolecular. I. A. Katime. Ed. Universidad del País Vasco, Servicio Editorial, (1994).

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Banwell, C.N.. Fundamentals of molecular spectroscopy / C.N. Banwell . - 3rd ed London [etc.] : McGraw-Hill, cop. 1983
- Barrow, Gordon M.. Introduction to molecular spectroscopy / Gordon M. Barrow. - International student ed., 16th print. Auckland [etc] : McGraw-Hill, 1986
- Chang, Raymond. Principios básicos de espectroscopía / Raymond Chang ; traducción I.Katime Amashta . - [1a. ed. española] Madrid : AC, D.L. 1983
- 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
- Drago, Russell S.. Physical methods for chemists. 2nd. Saunders College Pub. 1992
- Katime Amashta, Issa A.. Química física macromolecular / Issa A. Katime Bilbao : Universidad del Pais Vasco, Servicio Editorial, 1994
- Levine, Ira N.. Espectroscopía molecular / Ira N. Levine ; [traducción, A. Fuster Ortigosa, A. Requena Rodríguez] . - [1a. ed. española] Madrid : Editorial AC, cop.1980
- Polímeros / Javier Areizaga...[et. al.] Madrid : Síntesis , D.L. 2002
- Requena Rodríguez, Alberto. Espectroscopía / Alberto Requena Rodríguez, José Zúñiga Román Madrid [etc.] : Pearson/Prentice Hall, cop. 2004
- Turro, Nicholas John. Modern molecular photochemistry / Nicholas J. Turro Mill Valley, California : University science books, 1991
- Walton, Paul H.. Beginning group theory for chemistry / Paul H. Walton Oxford [etc] : Oxford University Press, 1998
- Wayne, Carol E.. Photochemistry / Carol E. Wayne and Richard P. Wayne . - Repr. with corr. Oxford [etc.]: Oxford University Press, 2002
- Willock, David J.. Molecular symmetry / David J. Willock Chichester : Wiley, 2009