

Introducción a los principios de espectroscopía

Requisitos de la materia: Física moderna, Mecánica cuántica I.

Descripción de la asignatura: Este curso abordará principios fundamentales de las diferentes técnicas espectroscópicas que se conocen actualmente y las utiliza para aplicarlas al análisis estructural de sustancias desconocidas provenientes de diversas fuentes. Se abordan problemas de análisis estructural empleando toda la información espectroscópica con que se cuente y el análisis de las diversas técnicas espectroscópicas.

Índice Temático:

- 1. Fundamentos de espectroscopía:** Introducción, Radiación electromagnética y materia, Procesos resonantes y no resonantes (Dispersión), Tratamiento clásico de la interacción radiación-materia, Tratamientos semiclásico (Coeficientes de Einstein y momento de transición), Emisión espontánea, Reglas de selección.
- 2. Transiciones espectroscópicas:** Regiones del Espectro Electromagnético, Tipos de espectros, Población de los niveles de energía, Láseres, Ley de Bouguer-Lambert-Beer, Técnicas experimentales, Forma y anchura de línea.
- 3. Espectros de rotación:** Mecánica clásica de la rotación molecular, Clasificación de las moléculas, Espectros de moléculas diatómicas y lineales, Población de niveles e intensidad de las transiciones, Distorsión Centrifuga, Espectros de trompos simétricos, Espectros de trompos asimétricos, Determinación de la estructura molecular, Aspectos experimentales de la Espectroscopia de microondas (Efecto Stark y momento dipolar).
- 4. Espectros de vibración de moléculas diatómicas:** Oscilador armónico, Anarmónicidad, Potenciales empíricos, Reglas de selección (Espectros), Energías de disociación, Espectros de rotación y vibración.
- 5. Espectros de vibración de moléculas poliatómicas:** Tratamiento clásico (Modos y coordenadas normales), Tratamiento cuántico, Consideraciones de simetría, Reglas de selección (Espectros de vibración), Frecuencias de grupo, Técnicas experimentales.
- 6. Espectros Raman:** Polarizabilidad molecular (Tensor de polarizabilidad), Teoría clásica de la dispersión Rayleigh y Raman, Representación cuántica, Espectros de rotación pura, Espectros de vibración, Técnicas experimentales.
- 7. Espectros electrónicos de moléculas diatómicas:** Estados electrónicos, Reglas de Selección, Intensidad de las componentes de vibración (Principio de Frank-Condon), Estructura de vibración, Energías de disociación.
- 8. Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas:** Estructura y estados electrónicos, Espectros del agua, formaldehído, butadieno y benceno, Cromóforos, Fluorescencia y fosforescencia (Diagrama de Jablonski), Espectroscopía de UV-VIS (Técnicas experimentales y aplicaciones analíticas).

-
- 9. Espectros fotoelectrónicos:** Procesos de Ionización, Técnicas experimentales, Espectroscopía fotoelectrónica de ultravioleta (UPS), Interpretación de los espectros, Interpretación de los espectros fotoelectrónicos de rayos X (XPS o ESCA), Desplazamiento químico.
- 10. Espectros de resonancia magnética:** Estados de spin nuclear y electrónico, Espectroscopia de resonancia magnética nuclear $^1\text{H-NMR}$, El desplazamiento químico (Contribuciones al factor de apantallamiento), Estructura fina y acoplamientos, Aspectos experimentales y espectroscopia con transformadas de Fourier, Procesos de relajación, Espectroscopia de resonancia de spin electrónico (ESR), estructura fina e hiperfina, Técnicas experimentales y aplicaciones.

Bibliografía:

1. J. M. Hollas., **"Modern Spectroscopy"**, John Wiley & Sons, 1998.
2. P. Bernath, **"Spectra of Atoms and Molecules"**, Oxford University Press, 1995.
3. C. N. Banwell, E. M. McCash **"Fundamentals of Molecular Spectroscopy"**, McGraw-Hill, 1994.
4. J. I. Steinfeld, **"Molecules and Radiation"**, MIT Press, 1985.
5. D. C. Harris and M. D. Bertolucci, **"Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy"**, Dover, 1989.
6. A. Requena, J. Zúñiga, **"Espectroscopía"**, Pearson Prentice Hall, 2004.

Planeación Educativa

Competencias a desarrollar:

Generales:

1. Capacidad para identificar, plantear y resolver problemas.
2. Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica.
3. Conocimientos sobre el área de estudio y la profesión.
4. Habilidad para trabajar en forma autónoma.
5. Capacidad de investigación.

Específicas:

1. Adquirir el conocimiento de los fundamentos básicos de espectroscopia que le permitan proponer técnicas espectroscópicas concretas para la caracterización de materiales.
2. Ser capaz de documentarse, seleccionar y plantear cuestiones e hipótesis en el marco de las técnicas espectroscópicas desarrolladas en el curso.
3. Interpretar correctamente espectros de las diferentes técnicas desarrolladas en el curso.
4. Adquirir las destrezas para el manejo básico de las técnicas espectroscópicas del curso.
5. Exponer y comunicar de manera clara y concisa los resultados de los trabajos prácticos realizados en el curso.

Resultados del aprendizaje	Actividades educacionales	TETEH	Evaluación
Fundamentos de espectroscopia	Teóricas, Practicas (3T+3P= 6 hrs.) Autoestudio	6 4	Examen escrito
Transiciones espectroscópicas	Teóricas, Practicas (6T+3P= 9 hrs.) Autoestudio	9 4	Examen escrito
Espectros de rotación	Teóricas, Practicas (6T+4P= 10 hrs.) Autoestudio	10 5	Examen oral
Espectros de vibración de moléculas diatómicas	Teóricas, Practicas (7T+3P= 10 hrs.) Autoestudio	10 4	Examen escrito
Espectros de vibración de moléculas poliatómicas	Teóricas, Practicas (7T+3P= 10 hrs.) Autoestudio	10 5	Examen oral
Espectros Raman	Teóricas, Practicas (7T+3P= 10 hrs.) Autoestudio	10 4	Examen oral
Espectros electrónicos de moléculas diatómicas	Teóricas, Practicas (7T+3P= 10 hrs.) Autoestudio	10 4	Examen oral
Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas	Teóricas, Practicas (7T+3P= 10 hrs.) Autoestudio	10 5	Examen oral
Espectros fotoelectrónicos	Teóricas, Practicas (7T+3P= 10 hrs.) Autoestudio	10 5	Examen oral
Espectros de resonancia magnética	Teóricas, Practicas (7T+3P= 10 hrs.) Autoestudio	10 5	Examen oral

Total de horas de trabajo del estudiante: (64+31) horas presenciales + (45) horas de autoestudio= 140 hrs.
Número de créditos: 8