

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
FACULTAD DE QUÍMICA**

**PROGRAMAS DE ESTUDIO  
TERCER SEMESTRE**

<b>Asignatura:</b> FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA	<b>Ciclo:</b> FUNDAMENTAL DE LA PROFESIÓN	<b>Área:</b> FÍSICA	<b>Departamento:</b> FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICA
-----------------------------------------------------	----------------------------------------------	------------------------	--------------------------------------------------

**HORAS/SEMANA/SEMESTRE**

<b>OBLIGATORIA</b>	<b>Clave 1309</b>	<b>TEORÍA 3h/48 h</b>	<b>PRÁCTICA 2h/32 h</b>	<b>CRÉDITOS 8</b>
--------------------	-------------------	-----------------------	-------------------------	-------------------

<b>Tipo de asignatura:</b>	<b>TEÓRICO-PRACTICA</b>
<b>Modalidad de la asignatura:</b>	<b>CURSO</b>

**ASIGNATURA PRECEDENTE:** Seriación obligatoria con Física II, seriación indicativa con Estructura de la Materia.

**ASIGNATURA SUBSECUENTE:** Seriación obligatoria con Química Cuántica I.

**OBJETIVO(S):**

El objetivo de este curso es introducir a los estudiantes de química en los conceptos de los fenómenos ondulatorios, vibracionales y de respuesta de las sustancias ante campos electromagnéticos. Tendrán una visión semiclásica de las funciones de respuesta lineal más comunes en química como son la susceptibilidad eléctrica y magnética. Comprenderán conceptos de gran uso en química como son la polarización y el índice de refracción. Así mismo, obtendrán una introducción a los aspectos más generales de la espectroscopia molecular que se puede abordar semiclásicamente. Estos temas encontrarán su uso en los cursos subsiguientes de Química Cuántica, Químicas Inorgánicas, Químicas Orgánicas y Químicas Analíticas.

**UNIDADES TEMÁTICAS**

<b>NÚMERO DE HORAS POR UNIDAD</b>	<b>UNIDAD</b>
<b>9 T-6P 15 H</b>	<b>1. Vibraciones. 1.1 Oscilador armónico simple. 1.2 Funciones de respuesta y Resonancia. 1.3 Oscilador armónico amortiguado. 1.4 Oscilador armónico amortiguado-forzado. 1.5 Superposición y descomposición mediante series de Fourier.</b>
<b>3T-2P 5H</b>	<b>2. Sistemas Análogos. 2.1 Circuitos eléctricos resonantes simples. 2.2 Impedancia, admitancia y reactancia. 2.3 Aplicaciones en electroquímica.</b>
<b>7T-5P 12H</b>	<b>3. Ondas. 3.1 Definición general. 3.2 Ondas mecánicas en medios continuos. 3.3 Ondas electromagnéticas a partir de ecuaciones de Maxwell. 3.4 Conexión entre la energía de una onda y la hipótesis de Planck.</b>
<b>9T-6P 15H</b>	<b>4. Susceptibilidades Eléctrica y Magnética. 4.1 Campos constantes y variables. 4.2 Definición y aproximación Lineal-Isótropa-Homogénea (LIH). 4.3 Medios dieléctricos: Polarización inducida y polarizabilidad. 4.4 Sistemas magnéticos (espín y momento angular). 4.5 Casos: polaridad de disolventes. 4.6 Casos: Ley de Curie-Weiss.</b>

<b>8T-5P 13H</b>	<b>5. Aspectos de Óptica.</b> <b>5.1 Interferencia.</b> <b>5.2 Reflexión.</b> <b>5.3 Difracción: ley de Bragg.</b> <b>5.4 Refracción: ley de Snell.</b>
<b>6T-4P 10H</b>	<b>6 Espectroscopia vibracional.</b> <b>6.1 Preliminares: análisis clásico de moléculas diatómicas.</b> <b>6.2 Ecuaciones de movimiento clásicas y modos normales.</b> <b>6.3 Caso detallado: moléculas triatómicas.</b> <b>6.4 Extensión cualitativa a otras moléculas poliatómicas.</b>
<b>6T-4P 10H</b>	<b>7. Bases de RMN.</b> <b>7.1 Modelo de Larmor.</b> <b>7.2 Resonancia y apantallamiento.</b> <b>7.3 Mecanismos de Relajamiento.</b> <b>7.4 Ecuaciones de Bloch.</b> <b>7.5 Corrimientos químicos y la formación del espectro RMN.</b>

**SUMA: 48T-32P/80 H**

#### **BIBLIOGRAFÍA BÁSICA**

1. Main, Iain G., *Vibrations and Waves in Physics*, 3th Ed. Cambridge, University Press (1993).
2. Requena Rodríguez, Alberto; Zúñiga Román, José, *Espectroscopia atómica y molecular*, Pearson Alhambra, (2004).
3. Hollas, J.M. *Modern Spectroscopy*, 4th Ed. Wiley (2004).
4. Levitt, M. H., *Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, 2nd Ed. Wiley-Blackwell (2008).

#### **BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA**

1. Halliday, D., Resnick, R., Walker, J, K., *Fundamentals of Physics*, 10th Ed., Wiley, (2013).
2. Ohanian, H. C., Markert, J.T., *Physics for Engineers and Scientists*, 3th Ed. W. W. Norton & Company (2006).

#### **SUGERENCIAS DIDÁCTICAS**

**Se recomienda desarrollar los conceptos a través del estudio de casos.**

#### **FORMA DE EVALUAR**

**Tres exámenes parciales, examen departamental y exámenes ordinarios.**

#### **PERFIL PROFESIOGRÁFICO DE QUIENES PUEDEN IMPARTIR LA ASIGNATURA**

**Profesores con formación en química y especialidad en química teórica o fisicoquímica, orgánica y/o inorgánica.**