

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA

PROGRAMAS DE ESTUDIO
TERCER SEMESTRE

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

HORAS/SEMANA/SEMESTRE

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

Tipo de asignatura:	TEÓRICO-PRACTICA
Modalidad de la asignatura:	CURSO

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

NÚMERO DE HORAS POR UNIDAD	UNIDAD
9 T-6P 15 H	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.
3T-2P 5H	2. Sistemas Análogos. 2.1 Circuitos eléctricos resonantes simples. 2.2 Impedancia, admitancia y reactancia. 2.3 Aplicaciones en electroquímica.
7T-5P 12H	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.
9T-6P 15H	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.

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

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.