

PROGRAMA		
1. Nombre de la actividad curricular Espectroscopia (QC762)		
2. Nombre de la actividad curricular en inglés Spectroscopy		
3. Unidad Académica / organismo de la unidad académica que lo desarrolla Departamento de Química		
4. Ámbito Ámbito de Formación de las Disciplinas Químicas (DQ) Ámbito de Formación en Investigación (FI)		
5. Horas de trabajo	presencial	no presencial
6. Tipo de créditos 5 SCT	6 hrs a la semana	3 hrs. a la semana
7. Número de créditos SCT – Chile 5		
8. Requisitos	Sexto Semestre Aprobado	
9. Propósito general del curso	Proporcionar a los estudiantes de Licenciatura en Química los fundamentos Mecano Cuánticos de las espectroscopias tradicionales de átomos y moléculas como: rotacional, vibracional, electrónica, fotoelectrónica y resonancia magnética. Esto implica el conocimiento de la naturaleza cuántica de la materia y los procesos que se derivan de su interacción con la radiación electromagnética que perturba a un sistema molecular.	
10. Competencias a las que	DQ1: Utiliza los conocimientos teóricos y experimentales adquiridos para dar explicación a fenómenos propios de la química con	

<p>contribuye el curso</p>	<p>perspectiva crítica.</p> <p>DQ2: Identifica las problemáticas específicas de la disciplina química con el fin de analizarlas y proponer soluciones contextualizadas aplicando en el método científico.</p> <p>FI2: Explica el conocimiento disciplinario de forma oral y escrita para la comprensión de una audiencia especializada y no especializada.</p> <p>FI3: Demuestra una actitud constructiva y propositiva de acuerdo a los conocimientos y habilidades con los que cuenta, aportando a los grupos de trabajo donde participa.</p> <p>CS1: Capacidad de investigación</p> <p>CS2: Capacidad crítica y autocrítica</p> <p>CS3: Capacidad de comunicación oral y escrita</p> <p>CS6: Compromiso ético</p>
<p>11. Subcompetencias</p>	<p>DQ1.1: Identifica las contribuciones de las distintas áreas químicas para fundamentar el conocimiento de un mismo fenómeno químico profundizando en su comprensión.</p> <p>DQ1.2: Explica fenómenos químicos utilizando los conceptos y metodologías propios de la disciplina para comunicarse de manera clara con la comunidad científica.</p> <p>DQ2.1: Reconoce en una problemática común los fenómenos químicos involucrados formulando una hipótesis y preguntas que permitan afrontar una posible solución de forma pertinente</p> <p>DQ2.2: Analiza los conocimientos asociados a problemáticas particulares de la disciplina, considerando los marcos teóricos y experimentales apropiados para identificar el proceso de posibles soluciones.</p> <p>DQ2.3: Determina las áreas de la química involucradas en la solución de una problemática específica, precisando los pasos necesarios para resolver el problema.</p> <p>DQ3.1: Detecta la necesidad de información y formación que requiere para afrontar la comprensión de nuevos conceptos de la disciplina evaluando sus propios conocimientos.</p> <p>DQ3.2: Selecciona fuentes de información confiables que incluye el idioma inglés para ampliar sus conocimientos considerando la relevancia e importancia para la disciplina en</p>

[Escriba aquí]

	<p>forma autónoma.</p> <p>DQ3.3: Relaciona la nueva información adquirida con sus conocimientos previos de forma crítica para responder a los requerimientos formativos.</p> <p>FI1.2: Fundamenta la pertinencia de los procedimientos experimentales utilizados para la resolución de un problema de naturaleza química de forma lógica y de acuerdo a estándares basados en el método científico.</p> <p>FI1.3: Interpreta los datos procedentes de observaciones y mediciones experimentales y teóricas para obtener conclusiones a problemas científicos contrastando sus resultados con la información ya existente tanto en el idioma español como en inglés.</p> <p>FI2.1: Elabora escritos para informar procedimientos, resultados, discusiones y conclusiones aportando al desarrollo de una línea de investigación.</p>
--	--

12. Resultados de Aprendizaje

Comprender la fundamentos asociados a los procesos de absorción y emisión de radiación electromagnética de átomos y moléculas aplicando conceptos mecano-cuánticos de la estructura de la materia.

13. Saberes / contenidos

1. TEORIA DE PERTURBACIONES DEPENDIENTE DEL TIEMPO

- 1.1. Radiación electromagnética
- 1.2. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo
- 1.3. Perturbaciones dependientes del tiempo
- 1.4. La aproximación dipolo-eléctrico
- 1.5. Reglas de selección

2. ATOMOS POLIELECTRONICOS

- 2.1 Hamiltoniano de átomos polielectrónicos
- 2.2 Acoplamientos de Russel-Sander
- 2.3 Términos electrónicos y reglas de selección

2.4 Acoplamiento Espín-Órbita en Átomos Polieletrónicos

2.5 Espectros Atómicos

3. SIMETRÍA MOLECULAR Y TEORIA DE GRUPOS

3.1 Elementos y operaciones de simetría

3.2 Tablas de Caracteres

3.3 Orbitales Moleculares de simetría. (Funciones CLAS)

4. MOLECULAS DIATOMICAS

4.1. La aproximación de Born-Oppenheimer

4.2. Energías y espectros: vibracionales y rotacionales

4.3. Estructura electrónica y orbitales moleculares

4.4. Principio de Franck-Condon y espectros electrónicos

4.5. Transiciones vibrónicas y reglas de selección.

5. ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DE MOLECULAS POLIATOMICAS

5.1 Vibraciones moleculares

5.2 Espectroscopia Infrarroja (IR) y Raman (R)

5.3 Reglas de selección para espectroscopia IR y Raman

6. ESPECTROSCOPIA ELECTRONICA DE MOLECULAS POLIATOMICAS

6.1 Estructura electrónica y espectros electrónicos

6.2 Reglas de selección. Transiciones $n \rightarrow \pi^*$ y $\pi \rightarrow \pi^*$

6.2 Procesos fotofísicos y fotoquímicos

6.3 Espectroscopia de Absorción y de Emisión.

6.4 Método Hückel

7. RESONANCIA MAGNETICA

7.1 Momentos magnéticos nucleares

7.2 Resonancia magnética nuclear

[Escriba aquí]

- 7.3 Corrimientos químicos RMN
- 7.4 Interacción espín-espín
- 7.5 Espectros de RMN de núcleos mayores
- 7.6 Resonancia paramagnética electrónica

14. Metodología

Se propone el desarrollo de contenidos en conjunto con resolución de problemas, con apoyo de lecturas específicas y capítulos de libro.

15. Evaluación

Tres pruebas parciales (80%)

<i>Fechas</i>	Prueba I	Semana 7 (Capítulos 1-3)
	Prueba II	Semana 13 (Capítulos 4-5)
	Prueba III	Semana 17 (Capítulos 6-7)

Ayudantía: N pruebas (20%)

REGLAMENTO DEL CURSO

1. La inasistencia **JUSTIFICADA** a alguna Prueba Parcial **SERÁ RECUPERADA** con la nota **una prueba recuperativa al final del curso**
2. La inasistencia **JUSTIFICADA** a no más de una prueba de ayudantía, será rendida al término del curso con contenidos que no hayan sido evaluados.
3. La aprobación del curso implica tener **nota promedio 4.0 en las evaluaciones de PRUEBAS PARCIALES Y DE AYUDANTIAS por separado.**
4. *El curso está **REPROBADO CON NOTA PROMEDIO < 3.5 EN LAS PRUEBAS PARCIALES.***
5. Para aquellos estudiantes que tengan promedio comprendido entre 3.5 y 3.9 en las pruebas parciales, **tienen derecho a dar la prueba recuperativa. La ponderación es 60% notas pruebas parciales y 40% Prueba recuperativa**
6. Quienes tengan promedio menor que 4.0 en los controles de ayudantía debe dar la **prueba recuperativa.**
7. Los contenidos a evaluar en la prueba recuperativa se indicarán oportunamente

16. Requisitos de aprobación

Nota mínima de aprobación es 4.0 en las pruebas parciales y ayudantía.

17. Palabras Clave

Absorción, Emisión, Radiación Electromagnética, Procesos Cuánticos, Espectros

18. Bibliografía Obligatoria (no más de 5 textos)

1. P.W. Atkins, De Paula. "Química Física". Panamericana 2008
2. D. A. Mc Quarrie J. D. Simon. "Physical Chemistry a molecular approach". University Science books. Sausalito California
3. J. M. Hollas. "Modern Spectroscopy". John Wiley and Sons, 2004
4. D.C. Harris and M.D. Betolucci. "Symmetry and Spectroscopy" Dover P. INC. 1989
5. A. Requena y J. Zuñiga. "Espectroscopia". Pearson Prentice Hall. 2004

19. Bibliografía Complementaria

6. G.M. Barrow. "Introduction to Molecular Spectroscopy". McGraw-Hill. 1962
7. F.A. Cotton. "La Teoría de Grupos Aplicada a la Química". Limusa 1977.

20. Recursos web

1.- Espectroscopía – ICTAN: <https://www.ictan.csic.es>

2.- Fundamentos de Espectroscopia Molecular: Hardware – Agilent:
<https://www.agilent.com>