

Año académico	2015-16
Asignatura	11350 - Espectroscopia Óptica Aplicada
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

## Identificación de la asignatura

<b>Asignatura</b>	11350 - Espectroscopia Óptica Aplicada
<b>Créditos</b>	0,72 presenciales (18 horas) 2,28 no presenciales (57 horas) 3 totales (75 horas).
<b>Grupo</b>	Grupo 1, 1S (Campus Extens)
<b>Período de impartición</b>	Primer semestre
<b>Idioma de impartición</b>	Castellano

## Profesores

Profesor/a	Horario de atención a los alumnos					
	Hora de inicio	Hora de fin	Día	Fecha inicial	Fecha final	Despacho
Josefa Laurentina Donoso Pardo <a href="mailto:josefa.donoso@uib.es">josefa.donoso@uib.es</a>	15:00	17:00	Lunes	14/09/2015	22/07/2016	QF-107 Edifici Mateu Orfila

## Contextualización

### El profesorado

Profesor responsable: Dra. Josefa Donoso Pardo

La Dra. Donoso es Catedrática de Química Física en el Departamento de Química de la UIB desde el año 2004. Obtuvo su licenciatura en Ciencias Químicas en la Universidad Complutense de Madrid en 1978 y el Doctorado en Ciencias (Química) en la UIB en el año 1984. Forma parte del grupo de investigación "Reactividad Molecular y diseño de fármacos" de la UIB, integrado en el IUNICS.

Su trabajo de investigación se ve reflejado en más de un centenar de artículos científicos publicados en diversas revistas internacionales con índice de impacto y más de un centenar de comunicaciones, ponencias y conferencias convidadas en encuentros científicos y congresos especializados, nacionales e internacionales. En la metodología experimental de sus trabajos de investigación utiliza habitualmente la espectrometría óptica ultravioleta visible, tanto absorción como fluorescencia, para el estudio de mecanismos cinéticos, estabilidad termodinámica y estructura molecular.

### La asignatura

La asignatura de *Espectroscopia Óptica Aplicada* está incluida en el módulo de *Técnicas Instrumentales* en el Master en Ciencia y Tecnología Química y es una asignatura de carácter obligatorio. El objetivo fundamental del módulo de Técnicas Instrumentales es dotar al alumnado de los conocimientos y competencias necesarios para poder realizar con solvencia los trabajos experimentales más habituales en investigación química.

Generalmente la espectroscopia óptica trata todos aquellos aspectos espectroscópicos que tienen que ver con la interacción entre la componente eléctrica de la luz y la materia; de manera que, en los tratados especializados correspondientes, se suele incluir la espectroscopia de absorción y de emisión de átomos y moléculas en todo el rango espectral, así como la espectroscopia de reflexión y de dispersión. El contenido de la asignatura que se trata aquí es mucho más restrictivo y se reduce exclusivamente al rango espectral ultravioleta-visible.

Año académico	2015-16
Asignatura	11350 - Espectroscopia Óptica Aplicada
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

Los descriptores que el plan de estudios indica para esta asignatura son: "Tecnologías avanzadas de espectroscopia UV-visible. Análisis de bandas. Espectroscopia de fluorescencia avanzada. Aplicación al estudio de biomoléculas y a la determinación de contaminantes" que, como puede apreciarse, tienen un carácter marcadamente aplicado. Es por esto que aproximadamente dos tercios de las sesiones docentes presenciales se dedican al trabajo práctico de laboratorio y seminarios.

Por otro lado hay que señalar que en el módulo de Técnicas Instrumentales del máster, está incluida otra asignatura específicamente dedicada al estudio de la espectroscopia atómica de emisión y absorción, motivo por el que aquí sólo se hace referencia a la espectroscopia molecular óptica UV-visible

### Requisitos

Es una asignatura básica y obligatoria del Máster en Ciencia y Tecnología Química, por tanto no tiene más requisitos que los necesarios para la admisión a la titulación, es decir tener un nivel de formación y competencial equivalente al de un graduado en química.

Es muy conveniente tener un buen conocimiento de idioma inglés, dado que una buena parte de la bibliografía está editada en este idioma

Así mismo es muy conveniente tener un conocimiento del uso de ordenadores personales y paquetes estándar de software a nivel de usuario (edición de textos y gráficos, tratamiento de resultados experimentales, análisis matemático de funciones, etc)

### Recomendables

Tal como se apuntó anteriormente, es muy conveniente tener un **buen conocimiento de idioma inglés y del uso de ordenadores personales y paquetes estándar de software a nivel de usuario.**

Se debe tener un conocimiento de química cuántica equivalente al exigido en la titulación de grado en química

### Competencias

Las competencias que se describen en este apartado son algunas de las que, de acuerdo con el Plan de Estudios verificado de la titulación, el alumnado egresado debe conseguir y que se trabaje en este módulo temático

#### Específicas

- \* Desarrollar habilidades teórico-prácticas en el manejo y aplicación de técnicas analíticas instrumentales de amplio espectro (espectroscopia óptica).
- \* Comprensión y dominio de las técnicas de caracterización de compuestos moleculares y capacidad para relacionar las características espectroscópicas con la estructura molecular.
- \* Capacidad para la aplicación de metodologías analíticas instrumentales a la resolución de problemáticas medioambientales, biológicos y agroalimentarios.
- \* Capacidad de planificar la experimentación de acuerdo con los modelos teóricos y los procedimientos experimentales establecidos.

#### Genéricas

- \* No se han descrito competencias genéricas para esta asignatura.

Año académico	2015-16
Asignatura	11350 - Espectroscopia Óptica Aplicada
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

## Básica

\* Se pueden consultar las competencias básicas que el estudiante tiene que haber adquirido al finalizar el máster en la siguiente dirección: [http://estudis.uib.cat/es/master/comp\\_basiques/](http://estudis.uib.cat/es/master/comp_basiques/)

## Contenidos

Los contenidos que se describen a continuación son el desarrollo de los descriptores de la asignatura que aparecen en el Plan de Estudios verificado de la titulación.

### Contenidos temáticos

#### Bloque temático I. Fundamentos mecanocuánticos de la espectroscopia óptica molecular

Para justificar la técnica experimental y la información molecular cualitativa y cuantitativa que se puede obtener con ella, en este capítulo se presenta un resumen de la función de onda electrónica molecular en el estado fundamental y los estados excitados. Se describen los fenómenos a los que puede dar lugar la interacción del campo eléctrico oscilante de la radiación UV-Vis con la materia y se describen las características de los fenómenos de absorción, emisión, refracción y dispersión de luz.

#### Bloque temático II. La espectroscopia UV-vis de absorción molecular

Se dedica este capítulo al estudio de las características de la espectroscopia de absorción molecular en el rango espectral ultravioleta-visible: las reglas de selección, la estructura de las bandas, etc.

Se presta particular atención a la descripción y el estudio del espectro de los cromóforos más habituales en biomoléculas y contaminantes y el efecto que sobre ellos tiene el cambio de temperatura, pH y disolvente

Es en este capítulo en donde se tratan las ventajas del tratamiento matemático del espectro de absorción: utilidad de la primera y segunda derivada y la deconvolución del espectro global.

Se estudian también otros aspectos técnicos de la espectroscopia como la espectroscopia de diferencia, la espectroscopia dual y el análisis de multicomponentes

Casos de estudio: ejemplos del uso de la espectroscopia de absorción uv-visible en el estudio y tratamiento de problemas químicos, medioambientales y biológicos

#### Bloque temático III. Espectroscopia de fluorescencia

En este capítulo se incluyen todos los aspectos teóricos relativos a la espectroscopia de fluorescencia molecular: los fundamentos mecanocuánticos (diagramas de Jablonski), el rendimiento cuántico, la influencia del disolvente, el fenómeno de la atenuación de fluorescencia (quenching), la anisotropía de la fluorescencia, el tiempo de vida de la fluorescencia, etc.

Casos de estudio: ejemplos del uso de la espectroscopia de fluorescencia en el estudio y tratamiento de problemas químicos, medioambientales y biológicos

#### Bloque temático IV. Instrumentación en la espectroscopia óptica molecular

Este capítulo se ocupa de las cuestiones técnicas de la espectroscopia de absorción uv-vis molecular: descripción de los espectrofotómetros UV-vis de uso más habitual (fuentes de luz, monocromadores, detectores, portamuestras, cubetas, etc.) así como a las fuentes de error más habituales en este tipo de técnicas (el ruido, la radiación de stray, las medidas en muestras

Año académico	2015-16
Asignatura	11350 - Espectroscopia Óptica Aplicada
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

turbias). Los espectrofotómetros utilizados para el seguimiento de las cinéticas rápidas mediante flujo detenido (stopped flow) tienen también su ubicación en este capítulo.

También aquí se incluyen los aspectos técnicos de este tipo de espectroscopia: los requerimientos de un buen espectrofluorímetro y de la metodología de medida

Bloque temático V. Experimentación en espectrofluorimetría y espectroscopia de absorción Uv-visible

Prácticas en el laboratorio de experimentación en donde se utilicen las técnicas de espectrometría óptica objeto de esta asignatura.

Tratamiento matemático de resultados experimentales. Métodos de ajuste y deconvolución de espectros.

## Metodología docente

### Actividades de trabajo presencial

Modalidad	Nombre	Tip. agr.	Descripción	Horas
Clases teóricas	Clases teóricas	Grupo grande (G)	Las clases teóricas expositivas del profesor tienen como finalidad presentar y explicar los conceptos y procedimientos que se contemplan en los contenidos de la asignatura.  Estas presentaciones se realizarán fundamentalmente con ayuda de documentos Power Point en los que se destacan los aspectos fundamentales del programa. También se utilizarán las pizarras tradicionales, fundamentalmente como soporte para el desarrollo matemáticos de aquellos aspectos del programa que lo requieran y para la realización de los problemas numéricos relacionados  La documentación empleada en estas sesiones estará a disposición del alumnado en la página de la asignatura en Campus Extens	8
Clases de laboratorio	Prácticas de laboratorio	Grupo mediano 2 (X)	Para que el alumnado profundice en el manejo de las técnicas sobre las que versa esta asignatura y experimente como se utilicen para el estudio y el tratamiento de problemas de interés medioambiental, químico y biológico, se realizarán prácticas en las que la utilización de estas técnicas sea un factor esencial.  La documentación empleada en estas sesiones estará a disposición del alumnado en la página de la asignatura en Campus Extens	10

Al inicio del semestre estará a disposición de los estudiantes el cronograma de la asignatura a través de la plataforma UIBdigital. Este cronograma incluirá al menos las fechas en las que se realizarán las pruebas de evaluación continua y las fechas de entrega de los trabajos. Asimismo, el profesor o la profesora informará a los estudiantes si el plan de trabajo de la asignatura se realizará a través del cronograma o mediante otra vía, incluida la plataforma Campus Extens.

Año académico	2015-16
Asignatura	11350 - Espectroscopia Óptica Aplicada
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

## Actividades de trabajo no presencial

Modalidad	Nombre	Descripción	Horas
Estudio y trabajo autónomo individual	Trabajo individual del alumno	<p>El alumno ha de trabajar sobre los contenidos expuestos en las clases expositivas de teoría, así como sobre los problemas planteados i/o resueltos</p> <p>El alumno, de manera individual ha de realizar un informe de las prácticas realizadas en las sesiones de laboratorio en donde se traten específicamente los procedimientos realizados, los resultados obtenidos y su tratamiento matemático.</p> <p>El informe de las sesiones de prácticas, así como cualquier otro documento que deba elaborarse sobre los contenidos de la asignatura se entregará en formato electrónico a través de las herramientas correspondientes del software de gestión académica Moodle (Campus Extens)</p>	32
Estudio y trabajo autónomo en grupo	estudio de casos prácticos	<p>Se trabajará en pequeños grupos (parejas o tríos) en la búsqueda de ejemplos representativos de los aspectos que trata la asignatura en la bibliografía especializada.</p> <p>El grupo de alumno habrá de estudiar ejemplos concretos ya resueltos y publicados en revistas o en libros especializados (que por su naturaleza estarán editados fundamentalmente en idioma inglés) y elaborar un informe sobre el trabajo que se realiza y la innovación/adecuación de la/s técnica/s utilizada/s</p> <p>En este apartado de actividades también se incluyen la resolución de problemas numéricos o supuestos prácticos.</p> <p>Se espera que con esta modalidad de metodología docente el alumno sepa coordinar esfuerzos con sus compañeros para alcanzar con éxito los objetivos que se proponen</p>	25

## Riesgos específicos y medidas de protección

Las actividades de aprendizaje de esta asignatura no conllevan riesgos específicos para la seguridad y salud de los alumnos y, por tanto, no es necesario adoptar medidas de protección especiales.

## Evaluación del aprendizaje del estudiante

Los criterios de evaluación que se exponen aquí son los que se utilizan para calibrar el grado de adquisición de las competencias requeridas

### Prácticas de laboratorio

Modalidad	Clases de laboratorio
Técnica	Técnicas de observación ( <b>no recuperable</b> )
Descripción	Para que el alumnado profundice en el manejo de las técnicas sobre las que versa esta asignatura y experimente como se utilizan para el estudio y el tratamiento de problemas de interés medioambiental, químico y biológico, se realizarán prácticas en las que la utilización de estas técnicas sea un factor esencial.

Año académico	2015-16
Asignatura	11350 - Espectroscopia Óptica Aplicada
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

La documentación empleada en estas sesiones estará a disposición del alumnado en la página de la asignatura en Campus Extens

**Criterios de evaluación** Se valorará la actitud y la aptitud del alumno en el laboratorio: dominio de los procedimientos y de las técnicas experimentales. Uso correcto y eficaz del instrumental del laboratorio

Porcentaje de la calificación final: 20%

### Trabajo individual del alumno

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo individual
Técnica	Informes o memorias de prácticas ( <b>no recuperable</b> )
Descripción	El alumno ha de trabajar sobre los contenidos expuestos en las clases expositivas de teoría, así como sobre los problemas planteados i/o resueltos. El alumno, de manera individual ha de realizar un informe de las prácticas realizadas en las sesiones de laboratorio en donde se traten específicamente los procedimientos realizados, los resultados obtenidos y su tratamiento matemático. El informe de las sesiones de prácticas, así como cualquier otro documento que deba elaborarse sobre los contenidos de la asignatura se entregará en formato electrónico a través de las herramientas correspondientes del software de gestión académica Moodle (Campus Extens)
Criterios de evaluación	Se evaluará la correcta elaboración y presentación de la memoria de prácticas, tanto en los aspectos formales (edición de texto, tablas, figuras) como en la calidad de los datos obtenidos y el tratamiento matemático de los resultados experimentales.  Se valorará asimismo la correcta fundamentación de los experimentos realizados y las conclusiones científicas de la práctica.

Porcentaje de la calificación final: 40%

### estudio de casos prácticos

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo en grupo
Técnica	Trabajos y proyectos ( <b>no recuperable</b> )
Descripción	Se trabajará en pequeños grupos (parejas o trios) en la búsqueda de ejemplos representativos de los aspectos que trata la asignatura en la bibliografía especializada. El grupo de alumno habrá de estudiar ejemplos concretos ya resueltos y publicados en revistas o en libros especializados (que por su naturaleza estarán editados fundamentalmente en idioma inglés) y elaborar un informe sobre el trabajo que se realiza y la innovación/adecuación de la/s técnica/s utilizada/s. En este apartado de actividades también se incluyen la resolución de problemas numéricos o supuestos prácticos. Se espera que con esta modalidad de metodología docente el alumno sepa coordinar esfuerzos con sus compañeros para alcanzar con éxito los objetivos que se proponen
Criterios de evaluación	El pequeño grupo de trabajo (parejas o trios) habrá de trabajar en un espacio colaborativo accesible desde la página en CE y supervisable por el profesor. Se valorará el trabajo colaborativo del alumnado.  Se valorará la actualización/adecuación de los experimentos elegidos para su análisis y estudio  Se valorará la memoria del trabajo realizado.

Porcentaje de la calificación final: 40%

### Recursos, bibliografía y documentación complementaria



Año académico	2015-16
Asignatura	11350 - Espectroscopia Óptica Aplicada
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

A través de la biblioteca de la UIB se podrá tener acceso a un buen número de bases de datos y de recursos electrónicos que serán imprescindibles a la hora de realizar búsquedas bibliográficas para la realización de los proyectos y trabajos establecidos.

<http://biblioteca.uib.cat/>

[http://biblioteca.uib.cat/oferta/recursos\\_electronicos/](http://biblioteca.uib.cat/oferta/recursos_electronicos/)

### **Bibliografía básica**

*Optical spectroscopy in chemistry and life sciences*. W. Schmidt. Wiley-VCH Verlag GmbH and Co. Weinheim (2005)

*Molecular fluorescence. Principles and applications*. B. Valeur. Wiley-VCH Verlag GmbH and Co. (2001)

*Spectrometry and spectrofluorimetry. Practical approach*. M. G. Gore (ed). Oxford university press. Oxford (2000)

### **Bibliografía complementaria**

*Spectrometry and spectrofluorimetry. A practical approach*. D.A. Harris and C. L. Bashford (ed). IRL press. Oxford (1987)

*UV-Vis spectroscopy and its applications*. H. H. Perkampus. Springer-Verlag. Berlin (1992)

*Principles of fluorescence spectroscopy*. J.R. Lakowicz. Kluwer Academic. New York (1999)

*Biological spectroscopy*. I.D. Campbell and R.A. Dwek. Benjamin/Cummings Pub. Menlo Park (1984)

