

Guía docente

Identificación de la asignatura

Asignatura / Grupo	11350 - Espectroscopia Óptica Aplicada / 1
Titulación	Máster Universitario en Ciencia y Tecnología Química
Créditos	3
Período de impartición	Primer semestre
Idioma de impartición	Castellano

Profesores

Horario de atención a los alumnos

Profesor/a	Hora de inicio	Hora de fin	Día	Fecha inicial	Fecha final	Despacho / Edificio
Josefa Laurentina Donoso Pardo						
Hay que concertar cita previa con el/la profesor/a para hacer una tutoría						
<i>Responsable</i> josefa.donoso@uib.es						

Contextualización

La asignatura de *Espectroscopia Óptica Aplicada* está incluida en el módulo de *Técnicas Instrumentales* en el Máster en Ciencia y Tecnología Química y es una asignatura de carácter obligatorio. El objetivo fundamental del módulo 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 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.

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.

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

Guía docente

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

Específicas

- * E1-Desarrollar habilidades teórico-prácticas en el manejo y aplicación de técnicas analíticas instrumentales de amplio espectro (espectroscopia óptica)
- * E2-Comprensión y dominio de las técnicas de caracterización de compuestos moleculares y capacidad para relacionar las características espectroscópicas con la estructura molecular
- * E3-Capacidad para la aplicación de metodologías analíticas instrumentales a la resolución de problemáticas medioambientales, biológicos y agroalimentarios
- * E4-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

Básicas

- * 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/

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

Guía docente

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 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

Guía docente

Actividades de trabajo presencial (0,72 créditos, 18 horas)

Modalidad	Nombre	Tip. agr.	Descripción	Horas
Clases teóricas	Clases teóricas	Grupo grande (G)	Finalidad: aprendizaje conceptual A1-Clases teóricas.M1.-Método expositivo (lecciónmagistral).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 Aula Digital	8
Clases de laboratorio	Practicar de laboratorio	Grupo mediano 2 (X)	Finalidad: aprendizaje conceptual y adquisición de destrezas A3-Clases prácticas en laboratorio.M6-Trabajo autónomo en el laboratorio Para que el alumnado profundice en el manejo de las técnicas sobre las que versa esta asignatura y experimente con su utilización para el estudio y el tratamiento de problemas de interés medioambiental, químico y biológico, se realizarán prácticas sobre estos asuntos de interés La documentación empleada en estas sesiones estará a disposición del alumnado en la página de la asignatura en Aula Digital	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 Aula Digital.

Actividades de trabajo no presencial (2,28 créditos, 57 horas)

Modalidad	Nombre	Descripción	Horas
Estudio y trabajo autónomo individual	Elaboración de informes	Finalidad: aprendizaje conceptual y adquisición de destrezas A8.Estudio y/o trabajo autónomo. El alumno, de manera individual ha de elaborar una memoria de prácticas. La memoria consiste en una exposición razonada de las prácticas realizadas, los objetivos perseguidos y la metodología experimental utilizada. La memoria debe contener una pequeña introducción que relacione la práctica realizada con los conocimientos teórico-prácticos expuestos en las clases presenciales. Finalmente la memoria debe tener un amplio apartado de tratamiento matemático de resultados experimentales: espectros cuantitativos y	32

Guía docente

Modalidad	Nombre	Descripción	Horas
		cualitativos, graficas de la variación cinética de las reacciones, etc. Finalmente la memoria debe contener una pequeña discusión de resultados y una comparación con otros similares ya publicados. Todas los informes deben contener una sección bibliográfica en donde se referencien las fuentes utilizadas en la elaboración de los informes Los informes/memorias de prácticas se entregan en formato electrónico a través de la aplicación correspondiente en la página de la asignatura en Aula Digital	
Estudio y trabajo autónomo en grupo	Análisis crítico de trabajos científicos	Finalidad: aprendizaje conceptual y adquisición de destrezas A7.Estudio y/o trabajo en grupo. M7.Uso de nuevas tecnologías educativas: plataforma Moodle, edición de blogs, uso de otras Cada alumno, de acuerdo con el campo de su módulo de especialidad debe buscar en las revistas científicas especializadas trabajos de investigación que hayan utilizado las técnicas espectroscópicas objeto de esta asignatura. El alumno realizará un análisis crítico de este artículo y lo pondrá a disposición del resto del grupo en el blog creado para este fin en la página de la asignatura en Aula digital. Los trabajos elegidos para la discusión, que por su idiosincrasia estarán escritos en idioma inglés, deben ser actuales (no más de 10 años desde la fecha de publicación) y deben ayudar a ampliar el conocimiento del alumnado sobre los diferentes campos de aplicación de estas técnicas experimentales. Cada artículo que se somete a discusión debe tener una entrada en el blog. Todos los alumnos deben aportar al menos una entrada en el blog y deben participar en la discusión de todos los trabajos, él propone, como de los que han propuesto el resto de los compañeros. En la discusión se deben contrastar ideas y resultados alternativos o complementarios al tema de discusión. La finalidad siempre será aumentar los conocimientos sobre el campo de aplicación de la técnica y sus límites dentro del ámbito de la química ambiental, biológica, agroalimentaria, etc.	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

Fraude en elementos de evaluación

De acuerdo con el artículo 33 del Reglamento Académico, "con independencia del procedimiento disciplinario que se pueda seguir contra el estudiante infractor, la realización demostrablemente fraudulenta de alguno de los elementos de evaluación incluidos en guías docentes de las asignaturas comportará, a criterio del profesor,

Guía docente

una minusvaloración en su calificación que puede suponer la calificación de «suspense 0» en la evaluación anual de la asignatura".

Prácticas de laboratorio

Modalidad	Clases de laboratorio
Técnica	Técnicas de observación (no recuperable)
Descripción	Finalidad: aprendizaje conceptual y adquisición de destrezas A3-Clases prácticas en laboratorio.M6-Trabajo autónomo en el laboratorio Para que el alumnado profundice en el manejo de las técnicas sobre las que versa esta asignatura y experimente con su utilización para el estudio y el tratamiento de problemas de interés medioambiental, químico y biológico, se realizarán prácticas sobre estos asuntos de interés La documentación empleada en estas sesiones estará a disposición del alumnado en la página de la asignatura en Aula Digital
Criterios de evaluación	Criterios de evaluación: EV7. 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 Evaluación de las competencias E1 y E2
Porcentaje de la calificación final: 20%	

Elaboración de informes

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo individual
Técnica	Informes o memorias de prácticas (no recuperable)
Descripción	Finalidad: aprendizaje conceptual y adquisición de destrezas A8.Estudio y/o trabajo autónomo. El alumno, de manera individual ha de elaborar una memoria de prácticas. La memoria consiste en una exposición razonada de las prácticas realizadas, los objetivos perseguidos y la metodología experimental utilizada. La memoria debe contener una pequeña introducción que relacione la práctica realizada con los conocimientos teórico-prácticos expuestos en las clases presenciales. Finalmente la memoria debe tener un amplio apartado de tratamiento matemático de resultados experimentales: espectros cuantitativos y cualitativos, gráficas de la variación cinética de las reacciones, etc. Finalmente la memoria debe contener una pequeña discusión de resultados y una comparación con otros similares ya publicados. Todos los informes deben contener una sección bibliográfica en donde se referencien las fuentes utilizadas en la elaboración de los informes Los informes/memorias de prácticas se entregan en formato electrónico a través de la aplicación correspondiente en la página de la asignatura en Aula Digital
Criterios de evaluación	Criterios de Evaluación: EV10. Se evalúa 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. Evaluación de las competencias E3 y E4
Porcentaje de la calificación final: 40%	

Análisis crítico de trabajos científicos

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo en grupo
Técnica	Otros procedimientos (no recuperable)
Descripción	Finalidad: aprendizaje conceptual y adquisición de destrezas A7.Estudio y/o trabajo en grupo. M7.Uso de nuevas tecnologías educativas: plataforma Moodle, edición de blogs, uso de otras Cada alumno, de acuerdo con el campo de su módulo de especialidad debe buscar en las revistas científicas especializadas trabajos de investigación que hayan utilizado las técnicas espectroscópicas objeto de esta asignatura. El alumno realizará

Guía docente

un análisis crítico de este artículo y lo pondrá a disposición del resto del grupo en el blog creado para este fin en la página de la asignatura en Aula digital. Los trabajos elegidos para la discusión, que por su idiosincrasia estarán escritos en idioma inglés, deben ser actuales (no más de 10 años desde la fecha de publicación) y deben ayudar a ampliar el conocimiento del alumnado sobre los diferentes campos de aplicación de estas técnicas experimentales. Cada artículo que se somete a discusión debe tener una entrada en el blog. Todos los alumnos deben aportar al menos una entrada en el blog y deben participar en la discusión de todos los trabajos, él propone, como de los que aún propone el resto de los compañeros. En la discusión se deben contrastar ideas y resultados alternativos o complementarios al tema de discusión. La finalidad siempre será aumentar los conocimientos sobre el campo de aplicación de la técnica y sus límites dentro del ámbito de la química ambiental, biológica, agroalimentaria, etc.

Criterios de evaluación Criterios de evaluación: EV7. Se evaluará la actualidad y la adecuación de los trabajos propuestos para discusión en el blog a los objetivos de la actividad educativa. Se valorará la calidad de las discusiones en cada uno de los temas del blog propuestos.

Evaluación de las competencias E3

Porcentaje de la calificación final: 40%

Recursos, bibliografía y documentación complementaria

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/

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)