



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PROGRAMA DE  
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: <b>Propiedades ópticas de moléculas y agregados moleculares</b>				
Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 6	
Carácter: Optativa de elección		Horas por semana	Total horas/ semana	Total horas/ semestre
Tipo: Curso		Teoría:	Práctica:	3
		3	0	
Modalidad: Presencial		Duración del programa: 16 semanas		

Actividad académica con seriación antecedente: No aplica
Objetivo general: Describir la respuesta óptica de moléculas y su modificación cuando estas moléculas se agregan. Lograr entender el origen físico de las características de los espectros de absorción y emisión, y derivar una mayor cantidad de información de este tipo de mediciones.
Objetivos específicos: El curso busca darle al estudiante herramientas prácticas para poder entender mejor los procesos fisicoquímicos que ocurren en sistemas moleculares a partir de sus espectros de absorción y emisión. Pasaremos desde entender cuáles son los ingredientes necesarios de los modelos teóricos que pueden explicar los espectros, aprender a usar scripts que permiten hacer ajustes de línea de los datos, saber leer correctamente las progresiones vibrónicas, y sugerir experimentos complementarios estructurales para confirmar las hipótesis deducidas de los espectros. Los estudiantes podrán elegir moléculas de interés para estudiar a lo largo del curso.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Introducción a las principales familias de cromóforos. Particular énfasis en la fotosíntesis.	6	
2	Descripción de las excitaciones en sistemas moleculares y su modificación en agregados de moléculas. Estudiaremos las reglas de selección, los modelos de excitación electrónica acoplada a coordenadas nucleares y espín. Discutiremos conceptos de deslocalización y desorden.	21	
3	Descripción cuantitativa de datos experimentales. Estudiaremos los modelos cuantitativos discutiendo la información que puede deducirse del ajuste de datos reales. Utilizaremos códigos de Python pre-escritos para analizar los datos.	9	
4	Técnicas experimentales para la determinación de agregados. Discutiremos las diferentes escalas de tiempo que rigen la agregación, la respuesta óptica y la fotofísica para poder proveer una imagen completa de estos sistemas. Temas incluirán métodos vibracionales, ópticos y de resonancia magnética.	9	
5	Conclusión y recapitulación de conceptos.	3	
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:			
Suma total de horas:		48	

Bibliografía básica actualizada:
Nicolas Turro. Modern Molecular Photochemistry Nestand and Spano. Expanded Theory of H- and J-Molecular Aggregates.
Bibliografía complementaria:

<b>Sugerencias didácticas:</b>		<b>Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:</b>	
Exposición oral	( x )	Exámenes parciales	( x )
Exposición audiovisual	( x )	Examen final escrito	( x )
Ejercicios dentro de clase	( x )	Trabajos y tareas fuera del aula	( x )
Ejercicios fuera del aula	( x )	Exposición de seminarios por los alumnos	( x )
Seminarios	( x )	Participación en clase	( )
Lecturas obligatorias	( x )	Asistencia	( )
Trabajo de investigación	( )	Seminario	( )
Prácticas de taller o laboratorio	( )	Otras:	( )
Prácticas de campo	( )		
Otras: _____	( )		