

Llicenciatura de Química**Espectroscòpia****Simetria i grups puntuals de simetria**

- Elements i operacions de simetria.
- Grups puntuals de simetria. La seva classificació.
- Determinació sistemàtica del grup puntual de simetria d'una molècula.
- Algunes aplicacions de la simetria: Isomeria òptica. Moment dipolar.

Teoria de grups i taules de caràcters

- Propietats dels grups. Classes d'elements de simetria.
- Relació entre propietats moleculars i operacions de simetria. La seva representació.
- Representacions reducibles i irreducibles. Espècies de simetria.
- Taules de caràcters. Les seves característiques.
- Descomposició de representacions reducibles en les seves components irreducibles.

Introducció general a l'espectroscòpia

- Naturalesa de la radiació electromagnètica. Energia i tipus de radiació.
- Espectre electromagnètic i tècniques espectroscòpiques.
- Intensitat de les línies espectrals. Moment dipolar de la transició. Regles de selecció.
- Principi d'incertesa. Amplada de ratlla espectral. Escalles de temps.
- Làsers i tipus de làsers

Espectroscòpia rotovibracional (microones, IR, Raman)

- Rotació de molècules diatòmiques. Model del rotor rígid. Model del rotor no rígid.
- Vibració de molècules diatòmiques. Model oscil·lador harmònic. Anharmonicitat. Energia de dissociació.
- Interacció vibració-rotació. Espectres de vibració-rotació.
- Vibració de molècules poliatòmiques. Modes normals de vibració. Tipus de vibracions: tensió i deformació. Simetria dels modes normals de vibració. Regles de selecció.
- Efecte Raman. Regles de selecció Raman. Regla de mútua exclusió.
- Aplicació de la teoria de grups a l'anàlisi vibracional.

Espectroscòpia electrònica (UV-VIS)

- Transicions electròniques en molècules diatòmiques.
- Estructura vibracional de les bandes electròniques. Principi de Franck-Condon
- Transicions electròniques en molècules poliatòmiques. Regles de selecció. Consideracions de simetria.
- Aproximació general a l'espectre electrònic d'una molècula orgànica. Tipus de transicions i zona espectral corresponent. Aplicació a l'anàlisi de l'espectre electrònic de la molècula de formaldehid.
- Fotoionització. Introducció a l'espectroscòpia fotoelectrònica [UV- PES, XPS (ESCA)].

Espectroscòpia de Ressonància Magnètica Nuclear (RMN)

- Propietats del nucli en relació a la seva interacció amb un camp magnètic. Ressonància Magnètica Nuclear (RMN). Ressonància d'Spin Electrònic (RSE-RPE).
- Nivells energètics nuclears. Regles de selecció.
- Magnetització. Relaxament.
- Apantallament nuclear. El desplaçament químic.
- Acoblaments spin-spin. Nuclis equivalents. Sistemes de primer ordre.
- Alguns factors que afecten la forma de l'espectre: reaccions d'intercanvi.
- Equivalències química i magnètica. Espectres de segon ordre. Efecte dels valors relatius de J i $\Delta\nu$.
- RMN per transformació de Fourier: Pols de radiofreqüència. Tractament matemàtic del senyal de resposta.
- Experiments de doble ressonància. Desacoblament d'spins. El cas $^{13}\text{C} - \text{H}$

Espectrometria de masses (EM)

- El fenomen físic. Components de l'espectròmetre.
- Generació d'ions: Impacte electrònic, ionització química, mètodes FAB, SIMS i ESI.
- Mètodes d'anàlisi dels ions: quadrupolars, magnètics, de temps de vol (TOF).
- Anàlisi general de l'espectre: Pic base, pic molecular, pics isotòpics.

BIBLIOGRAFIA GENERAL

BANWELL, C. N. AND McCASH, E.M. *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*. 4a. Ed., McGraw-Hill Europe. 1994 . ISBN 0-07-707976-0

BROWN, J. M. *Molecular Spectroscopy*. Oxford Univ. Press, 1998. ISBN 0-19-855785-X

DRAGO, R.S. *Physical Methods for Chemists*. 2ona. Ed., Saunders, 1992. ISBN 0-03-075176-4

VINCENT, A. *Molecular Symmetry and Group Theory*. Wiley, 1997. ISBN: 0-471-01868-6

WALTON, P.H. *Beginning Group Theory for Chemists*. Oxford Univ. Press, 1998. ISBN 0-19-855964-X

DAVIDSON, G. *Group Theory for Chemists*. McMillan, 1991. ISBN 0-333-49297-8

CONSTANTIN, E. AND SCHNELL, A. *Mass Spectrometry*. Ellis Horwood, 1991. ISBN 13- 553363-5

ESTEBAN, LUIS *La Espectrometría de Masas en Imágenes*. ACK Editores, Madrid 1993

HORE, P.J. *Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*. Oxford Univ. Press, 1995. ISBN 0-19-855682-9

REQUENA, A. AND ZÚÑIGA, J. *Espectroscopía* Pearson Prentice Hall, 2004. ISBN 84-205-3677-6

BIBLIOGRAFIA ADDICIONAL

AKITT, J.W. *NMR and Chemistry. An Introduction to Modern NMR Spectroscopy*. 3ª.Ed., Chapman and Hall, 1992. ISBN 0-412-37260-6

HARRIS, R.K. *Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*. 2ona. Ed., Longman 1986. ISBN 582- 44653-8

CARTER, R.L., *Molecular Symmetry and Group Theory*. Wiley-VCH, 1997. ISBN: 0-471-14955-1

COTTON, F.A. *La Teoría de Grupos Aplicada a la Química*. 2a Ed., Limusa, 1977.

ORCHIN; JAFFÉ. *Simetría, Orbitales y Espectros*. Bellaterra, 1975.

HOLLAS, J.M. *Modern Spectroscopy*. 3a. Ed., Wiley, 1996. ISBN 0-471-96523-5

McHALL, J.L., *Molecular Spectroscopy*. Prentice Hall, 1998. ISBN: 0-13-229063-4

PROFESSORS

Teoria i problemes

Mariona Sodupe

Despatx: C7-143

Dimecres 15.00-17:00