

**Espectroscòpia Molecular****2014/2015**

Codi: 103283

Crèdits: 5

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

**Professor de contacte**

Nom: Albert Rimola Gibert

Correu electrònic: Albert.Rimola@uab.cat

**Utilització de llengües**

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: No

**Prerequisits**

No hi ha cap prerequisit obligatori però és molt aconsellable haver superat i tenir presents les assignatures de "Enllaç Químic i Estructura de la Matèria", "Química dels Elements", i "Química Orgànica".

**Objectius**

Aquesta assignatura està focalitzada a l'estudi i comprensió de la interacció entre la radiació electromagnètica i la matèria, i com aquesta interacció pot ser utilitzada en la caracterització estructural de molècules i materials. L'assignatura inclou alguns fonaments teòrics involucrats en la interacció radiació/matèria i d'algunes de les diferents tècniques espectroscòpiques més presents. Per a cada tipus de tècnica espectroscòpica, es pretén establir una connexió entre l'espectre i la informació estructural que se'n pot extreure. Es dona un pes especial a la simetria molecular i a la teoria de grups com a eina improtant per explicar determinats espectres.

Els objectius concrets de l'assignatura són els següents:

- entendre els fonaments bàsics de la interacció entre la radiació electromagnètica i la matèria.
- Entendre les regles que determinen la freqüències i les intensitats d'una transició.
- Saber com aplicar aquest coneixement per resoldre quantitativament i qualitativament problemes químics amb l'ajuda de l'espectroscòpia molecular.

**Competències**

- Aplicar els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia a la resolució de problemes de natura quantitativa o qualitativa en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques, identificar-ne el significat i relacionar-les amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.

- Mantenir un compromís ètic.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer i analitzar problemes físics, químics i biològics en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia i plantejar respostes o treballs adequats per a la seva resolució, incloent-hi en els casos necessaris l'ús de fonts bibliogràfiques.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.

## Resultats d'aprenentatge

1. Analitzar situacions i problemes en l'àmbit de la física i la química, i plantejar respostes o treballs de tipus experimental utilitzant fonts bibliogràfiques.
2. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
3. Aplicar els principis físics de les interaccions matèria-radiació a la interpretació d'espectres.
4. Aprendre de manera autònoma.
5. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
6. Avaluar la millor metodologia espectroscòpica per a la resolució d'un problema estructural.
7. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
8. Descriure els fonaments de les espectroscòpies moleculars més significatives (ANAR, UV-visible, RMN, masses).
9. Dissenyar experiments senzills per a l'estudi de sistemes químicofísics simples.
10. Emprar la tecnologia de la informació i la comunicació per a la documentació de casos i problemes.
11. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
12. Identificar els principis físics que regeixen les interaccions matèria-radiació.
13. Interpretar les dades obtingudes a les mesures experimentals per a la caracterització d'un compost químic o un material.
14. Mantenir un compromís ètic.
15. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
16. Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
17. Proposar idees i solucions creatives.
18. Raonar de forma crítica.
19. Reconèixer i analitzar problemes físics i químics relacionats amb l'estructura de composts orgànics i inorgànics
20. Relacionar els principis físics de les interaccions matèria-radiació amb els senyals dels diferents espectres.
21. Relacionar la teoria de grups i les taules de caràcters amb la simetria de les molècules.
22. Relacionar les dades experimentals amb les propietats fisicoquímiques i/o anàlisi dels sistemes objecte d'estudi.
23. Resoldre problemes i prendre decisions.
24. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
25. Utilitzar correctament les eines informàtiques gràficament per a calcular, representar gràficament i interpretar les dades obtingudes, així com la seva qualitat.
26. Utilitzar programes de disseny gràfic per dibuixar fórmules químiques i les seves reaccions.

## Continguts

### 1. Simetria Molecular

Elements i operacions de simetria. Grups puntuals de simetria. Classificació. Determinació sistemàtica del grup puntual d'una molècula. Aplicacions de la simetria. Isomeria òptica. Moment dipolar.

### 2. Introducció a l'espectroscòpia

Naturalitat 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. Amplada de ratlla espectral. Principi d'incertesa. Escales de temps. Làsers.

### 3. Espectroscòpia de vibració de molècules diatòmiques

Aproximació de Born-Oppenheimer i Equació d'Scrödinger nuclear. Model de l'oscil·lador harmònic. Regles de selecció. Anharmonicitat. Energies de Dissociació.

### 4. Teoria de grups

Propietats dels grups. Classes d'elements de simetria. Representacions reductibles i irreductibles. Espècies de simetria. Taules de caràcters. Descomposició de representacions reductibles en les seves components irreductibles.

### 5. Espectroscòpia de vibració de molècules poliatòmiques

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. Polaritzabilitat. Regles de selecció. Aplicació de la teoria de grups a l'anàlisi vibracional. Regla de mútua exclusió.

### 6. Espectroscòpia electrònica

Estat electrònic de molècules diatòmiques. Transicions electròniques en molècules diatòmiques. Estructura vibracional de les bandes electròniques. Principi de Franck-Condon. Transicions electròniques. Regles de selecció. Consideracions de simetria. Aproximació general a l'espectre electrònic d'una molècula orgànica. Fotoionització. Introducció a l'espectroscòpia fotoelectrònica [UV- PES, XPS (ESCA)].

### 7. Espectroscòpia de ressonància magnètica nuclear

Spin nuclear. Interacció amb un camp magnètic. Ressonància Magnètica Nuclear (RMN). Nivells energètics nuclears. Regles de selecció. Apantallament nuclear. El desplaçament químic. Acoblaments spin-spin. Nuclis equivalents. Sistemes de primer ordre. Equivalències química i magnètica. Aplicacions.

### 8. Espectrometria de masses

Fonaments d'espectrometria de masses. Tècniques de generació de ions. Analitzadors de massa. Espectrometria en tàndem. Aplicacions.

### Pràctiques d'aula

Es realitzaran dues pràctiques d'aula:

#### 1. Espectroscòpia vibracional

#### 2. Espectroscòpia electrònica

## Metodologia

L'assignatura constarà de tres tipus d'activitats docents:

#### 1. Sessions teòriques

El professor desenvoluparà els continguts del programa a l'aula utilitzant tant la pissarra com transparències, les quals els alumnes se les podran descarregar via Campus Virtual.

#### 2. Sessions de Problemes

En aquestes sessions es resoldran a l'aula alguns dels problemes que els alumnes hauran obtingut prèviament a través del Campus Virtual. Aquestes sessions són de gran utilitat ja que permetran aprofundir i/o reforçar alguns dels conceptes explicats en les sessions teòriques.

#### 3. Pràctiques d'aula

En aquestes sessions els estudiants tindran la possibilitat de simular, mitjançant codis basats en la química quàntica, propietats espectroscòpiques i espectres d'algunes molècules.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Pràctiques d'aula	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 23, 24, 25, 26
Sessions de problemes	15	0,6	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24
Sessions teòriques	26	1,04	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 18, 19, 20, 21, 22, 23
Tipus: Autònomes			
Entrega d'exercicis	5	0,2	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24
Estudi personal	65	2,6	

## Avaluació

### Exàmens parcials:

Al llarg de l'assignatura es realitzaran dos exàmens parcials, els quals contindran aproximadament la meitat del programa (temes 1 - 5 i temes 6 - 8). Seran exàmens on s'avaluaran els coneixements adquirits de cada part de l'assignatura i tindran una part de preguntes teòriques i una component important de problemes. Cada parcial tindrà un pes del 35% de la nota final, de tal manera que el pes total d'aquests dos parcials en la nota final és del 70%. Per tal de comptabilitzar les notes de cada parcial s'haurà de treure una puntuació mínima de 4/10 en cada parcial. Aquells alumnes que no treguin el mínim de nota del primer i/o del segon parcial tindran la possibilitat de realitzar un únic examen final que per comptabilitzar la nota s'haurà de treure un mínim de 4/10. Aquest examen és només de recuperació, no per millorar nota.

### Feines:

Al llarg del curs s'hauran de desenvolupar 3 feines que es definiran quan pertoqui. Tindran un pes del 15% de la nota final. Una feina no entregada tindrà una nota de 0. Per tal que aquestes feines comptabilitzin a la nota final s'haurà de treure una puntuació mínima (global de les 3 feines) de 4/10.

### Pràctiques d'aula:

S'avaluarà amb un examen de tipus test relacionat amb les pràctiques d'aula. Tindran un pes total del 15% de la nota final. Per tal de comptabilitzar a la nota final s'ha de treure una puntuació mínima de 3/10, amb el que significa que l'assistència a l'examen és obligatòria.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exercicis	20	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 10, 12, 13, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23
Exàmens	70	5	0,2	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 12, 13, 14, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23
Informe pràctiques d'aula	10	1	0,04	1, 2, 3, 4, 5, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26

## Bibliografia

Textos Bàsics:

- P. Atkins, J. de Paula, Atkins' Physical Chemistry, 8th Ed., Oxford University Press, 2005.
- C. N. Banwell, E. M. McCash, Fundamentals of Molecular Spectroscopy, 4th Ed., McGraw Hill, 1994.
- A. Requena, J. Zúñiga, Espectroscopía, Pearson Prentice Hall, 2004.

Textos especialitzats:

- F. A. Cotton, La Teoría de grupos aplicada a la Química, 2a Ed., Limusa-Wiley, 1999.
- P. Atrkins, R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 5th Ed., Oxford University Press, 2011.