

Espectroscòpia Molecular

Codi: 103283
Crèdits: 5

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

Professor de contacte

Nom: Ramón Yáñez López

Correu electrònic: Ramon.Yanez@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

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 dóna 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 necessàries 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. Introducció 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. Amplada de ratlla espectral. Principi d'incertesa. Escales de temps. Espectroscòpia Atòmica. Termes Espectrals. Interacció Spin Òrbita. Transicions Permeses. Làsers.

2. 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.

3. 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.

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.

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

A efectes d'avaluació, l'assignatura pot considerar-se dividida en dues parts.

Al llarg del semestre es realitzaran dos exàmens parcials, un de cada part (ExP1 i ExP2), i un examen global de recuperació (ExG), tots ells amb una nota entre 0 i 10.

Treball de seguiment

Al llarg del semestre es recolliran un cert nombre de proves del seguiment de l'alumne (problemes resolts individualment o en grup, proves curtes d'aula, etc). Cada alumne obtindrà, per tant, dues notes de seguiment (S1 i S2), que seran les mitjanes de les qualificacions obtingudes en les proves de seguiment de cada part de l'assignatura, i una nota sobre l'informe de pràctiques d'aula (PA)

Pràctiques d'aula

L'alumne farà al llarg del curs dues pràctiques d'aula obligatòries. Aquestes practiques 'avaluaran amb preguntes de tipus test durant l'examen ExP2.

Qualificacions:

Cada part de l'assignatura tindrà una qualificació (Not1 i Not2) que serà:

$$\text{Not1} = 0,90 \times \text{ExP1} + 0,10 \times \text{S1}$$

$$\text{Not2} = 0,80 \times \text{ExP2} + 0,10 \times \text{S2} + 0,1 \times \text{PA}$$

La nota final (NF) s'obtindrà de la manera següent:

$$\text{NF} = (\text{Not1} + \text{Not2})/2$$

Per superar l'assignatura per parcials s'han de complir les dues condicions següents:

1) La nota final de l'assignatura (NF) ha de ser $\geq 5,0$

2) Per a poder fer mitjana, ExP1 i ExP2 han de ser $\geq 4,0$

En cas de que no es compleixi el requisit anterior, l'alumne s'haurà de presentar a l'examen global de recuperació, on podrà recuperar un o els dos parcials, donat que les matèries de cada parcial estaran separades i identificades com tals (NR1 i NR2). La NF es calcularà reemplaçant els valors de Not1 i/o Not2 pels obtinguts a l'examen de recuperació NR1 i/o NR2.

Per a superar l'assignatura a l'examen global s'han de complir les dues condicions següents:

1) La nota final de l'assignatura ha de ser $\geq 5,0$

2) Per a poder fer mitjana, Not1 i Not2 (NR1 i NR2 en cas de recuperació) han de ser $\geq 4,0$

Els alumnes que superin el curs per parcials però vulguin millorar la seva qualificació, podran presentar a l'examen global però hauran de fer-lo complet; es a dir, les dues subproves corresponents a cada parcial. La nota de l'examen de recuperació substituirà la nota que es pogués tenir del conjunt dels dos parcials i, per tant, tindrà un pes del 85% (la nota dels treballs de seguiment i/o practiques d'aula no es podrà recuperar)

Per a poder ser considerat alumne evaluable cal:

- Assistir com a mínim al 80% de les classes
- Entregar com a mínim el 75% de les evidències sol·licitades
- Presentar-se com a mínim a un dels dos examens parcials
- Entregar l'informe de les pràctiques d'aula
- Assistir a totes les pràctiques d'aula

Si no es compleixen algun dels cinc requisits anteriors, l'alumne serà considerat No Evaluable

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exàmens	85	5	0,2	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 12, 13, 14, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23
Exercicis	10	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 10, 12, 13, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23
Informe pràctiques d'aula	5	1	0,04	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 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. Atkins, R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 5th Ed., Oxford University Press, 2011.