

Espectroscòpia

Codi: 102531
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	2	2

Professor/a de contacte

Nom: Xavier Sala Roman
Correu electrònic: Xavier.Sala@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: anglès (eng)
Grup íntegre en anglès: Sí
Grup íntegre en català: No
Grup íntegre en espanyol: No

Equip docent

Mariona Sodupe Roure

Prerequisits

- L'ensenyament, inclosos els materials didàctics lliurats als estudiants, serà en anglès, per tant, calen bones habilitats de comunicació en aquesta llengua. Els materials d'avaluació per escrit, inclosos els exàmens i els informes de laboratori, es poden respondre en català i castellà i, per descomptat, en anglès.
- Només els estudiants que han superat els continguts bàsics de Fonaments de Química i Experimentació i Documentació poden realitzar Espectroscòpia.
- El curs assumeix que l'alumne té coneixement pràctic de la química quàntica; per tant, és molt aconsellable haver assumit (i preferiblement aprovat) l'assignatura Química Quàntica.

Objectius

L'espectroscòpia es basa en l'estudi de la interacció entre la radiació electromagnètica i la matèria i en com aquesta interacció es pot utilitzar per a determinar detalls sobre l'estructura d'aquesta última. Els fonaments teòrics que expliquen la interacció de la radiació i la matèria i que prediuen la forma estructurada dels espectres es plantegen primer, basant-se en un coneixement pràctic de la química quàntica. Es discuteix la radiació làser, ja que el seu ús és omnipresent en les tècniques espectroscòpiques actuals. Es fa un enfocament específic en la simetria com una poderosa eina per explicar les característiques de certs espectres en molècules poliatòmiques. A partir d'aquí, es discuteixen diferents tècniques espectroscòpiques. Per a cada tipus, l'estructura de l'espectre corresponent es connecta als paràmetres estructurals de les molècules utilitzant relacions quantitatives derivades de la mecànica quàntica.

Objectius específics de l'assignatura:

- Comprendre els fonaments d'interacció de la radiació electromagnètica amb la matèria.
- Comprendre les regles que determinen la freqüència i intensitat d'una transició.
- Saber aplicar aquest coneixement a la resolució de problemes tant en aspectes qualitius com quantitius.

Competències

- "Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques; identificar-ne el significat i relacionar les dades amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades."
- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se amb claredat en anglès.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
- Mantenir un compromís ètic.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Tenir destresa per al càlcul numèric.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Aplicar els principis físics de les interaccions matèria-radiació a la interpretació qualitativa i quantitativa d'espectres.
3. Aprendre de manera autònoma.
4. Comunicar-se al laboratori en anglès.
5. Comunicar-se amb claredat en anglès.
6. Demostrar motivació per la qualitat.
7. Emprar i generalitzar les relacions entre l'estructura i els mètodes espectroscòpics.
8. Fonamentar la resposta espectroscòpica en les diferents característiques estructurals.
9. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
10. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
11. Identificar els principis físics que regeixen les interaccions matèria-radiació.
12. Manejar els termes químics més habituals en anglès.
13. Manejar programes informàtics, de simulació, entre d'altres, que ajudin a la interpretació anterior.
14. Mantenir un compromís ètic.
15. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
16. Proposar idees i solucions creatives.
17. Raonar de forma crítica.
18. Reconèixer els termes anglesos de l'estructura química.
19. Reconèixer la terminologia espectroscòpica en llengua anglesa.
20. Resoldre problemes i prendre decisions.
21. Tenir destresa per al càlcul numèric.
22. Utilitzar els principis físics de les interaccions matèria-radiació per relacionar els senyals dels diferents espectres amb les possibles espècies presents en un determinat sistema químic.
23. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Continguts

Teoria:

1. Introducció a l'espectroscòpia. Naturalesa de la radiació electromagnètica. Espectre electromagnètic. Tècniques espectroscòpiques. Espectroscòpia FT. Ample de línia espectral. Intensitat de les línies espectrals. Regles de selecció. Espectroscòpia Raman. Exemple: Espectroscòpia rotacional de molècules diatòmiques. Làsers.

2. Simetria molecular. Elements i operacions de simetria. Grups puntuals de simetria. Determinació sistemàtica de grups puntuals moleculars. Representacions de grups. Representacions reduïbles i irreductibles. Taules de caràcters.

3. Espectroscòpia vibracional. Vibració de molècules diatòmiques. L'oscil·lador harmònic com a model. Anharmonicitat. Energia de dissociació. Vibració de molècules poliatòmiques: modes normals de vibració. Tipus de modes normals. Simetria dels modes normals. Regles de selecció de molècules poliatòmiques. Regla d'exclusió mútua.

4. Espectroscòpia electrònica. Espectroscòpia atòmica. Termes espectrals. Regles de selecció. Espectroscòpia electrònica de molècules diatòmiques. Estructura vibracional: espectres vibrònics. Principi de Franck-Condon. Espectroscòpia electrònica de molècules poliatòmiques. Consideracions de simetria. Fluorescència i fosforescència. Espectroscòpia de fotoelectrons.

5. Espectroscòpia de ressonància magnètica. Spin nuclear i electrònic. Interacció amb un camp magnètic. Espectroscòpia de ressonància magnètica nuclear (RMN). Nivells d'energia i regles de selecció. Apantallament nuclear. Desplaçament Químic. Acoblament spin-spin. Altres espectroscòpies de RM.

Sessions de laboratori:

Un total de quatre sessions (4 hores cadascuna), més una cinquena sessió d'avaluació (ordre a determinar).

Els continguts seran:

1. Tècniques experimentals bàsiques en espectroscòpia : IR, UV-VIS i RMN
2. Simulació d'espectres vibracionals
3. Simulació d'espectres electrònics
4. Simulació d'espectres de RMN
5. Un projecte / cas, elaborat en les sessions de simulació anteriors).

Metodologia

Les activitats pertanyen a quatre categories diferents:

Classes de teoria: El professor exposarà els continguts del temari a l'aula combinant l'ús de la pissarra i material multimèdia que es posarà a disposició dels alumnes mitjançant l'"Aula Moodle" de l'assignatura. Aquestes sessions expositives conformaran la major part de la docència teòrica del programa.

Sessions de resolució de problemes: es distribuirà una llista d'exercicis als alumnes, mitjançant l'"Aula Moodle" de l'assignatura a l'inici del curs, classificats segons les unitats del pla d'estudis. Els dies indicats, anunciats durant les classes de teoria o sempre que sigui adequat pel que fa a materials coberts, es resoldran problemes seleccionats a classe, explicant els fonaments teòrics, detalls computacionals, etc. necessaris per resoldre l'exercici i amb l'objectiu de reforçar els conceptes explicats en les classes teòriques. No es pren cap compromís de resoldre explícitament tots els problemes de la col·lecció, deixant així espai per a la iniciativa individual i fomentant el treball individual de l'estudiant.

Sessions de laboratori: Les sessions pràctiques presentaran als estudiants la possibilitat de (1) calcular les propietats espectroscòpiques de determinades molècules utilitzant codi de química quàntica o altre programari per simular espectres i (2) introduir-se en les tècniques espectroscòpiques bàsiques en un laboratori de química experimental. L'objectiu de les sessions de laboratori és posar de manifest la sinergia entre els

enfocaments teòrics i experimentals de la química moderna. Logísticament, els estudiants de tots els grups de matriculació es dividiran en dos grups, la composició dels quals es coneixerà per endavant, per tal de fer un ús eficient del laboratori i de les instal·lacions informàtiques disponibles. Les sessions pràctiques per a cada subgrup tindran lloc a les dates previstes en diferents laboratoris i sota la supervisió de professors qualificats. Per a totes les sessions de laboratori, el guió de laboratori estarà disponible al "Aula Moodle". Els estudiants han de portar la seva pròpia còpia impresa i llegir-la abans de la sessió de laboratori corresponent. És recomanable portar també un bloc de notes personal per escriure els resultats obtinguts i altres anotacions. A més, a les sessions de laboratori experimental, és obligatori que els alumnes portin les seves pròpies bates i ulleres de protecció. Els dies indicats, els estudiants seran convocats a laboratori / sala d'ordinadors. Al final de cada sessió pràctica, se'ls lliurarà un full de resposta i un qüestionari que es completarà i es lliurarà abans de sortir del laboratori que servirà per a avaluar el nivell de comprensió de la tasca acabada i la qualitat del treball realitzat.

Treball personal: El treball personal de l'alumne és un aspecte important i indispensable per a assolir i superar els continguts de l'assignatura. A més de les tasques més obvies (com ara preparar i estudiar anotacions i llibres, preparar exercicis, etc.), certs àmbits específics i ben delimitats del temari es deixaran als estudiants per treballar per ells mateixos. En aquests casos, es posaran a disposició hores de consultes personals que ajudin a unir els coneixements adquirits pels alumnes. Nota important: L'ensenyament, inclosos tots els materials d'ensenyament i avaluació (p. Ex. Exàmens, informes de laboratori) es publicaran en anglès. No obstant això, les respostes escrites en materials d'avaluació seran acceptades en català i en castellà.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de Problemes	12	0,48	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 11, 12, 13, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Classes de Teoria	27	1,08	2, 3, 5, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 15, 17, 18, 19, 22
Pràctiques de Laboratori	20	0,8	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23
Tipus: Supervisades			
Preparació del Cas	10	0,4	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23
Tipus: Autònomes			
Estudi personal	57	2,28	2, 3, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Resolució de Problemes	16	0,64	2, 3, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22

Avaluació

L'avaluació es basa en un esquema d' "avaluació continuada" que inclou els següents elements:

1. Informes de laboratori, activats al final de cada sessió pràctica, 10%
2. Resoldre un "cas" determinat: treballant en grups de 4 persones: els estudiants hauran de treballar, utilitzant el programari de química quàntica i les bases de dades espectroscòpiques, segons sigui necessari, les propietats espectroscòpiques detallades de les molècules proposades, presentin el seu cas en una presentació oral curta i responguin preguntes dels avaluadors. La nota reflectirà tant la qualitat dels resultats com la presentació (el mateix per a tots els membres) i les respostes individuals de cada estudiant, 15%
3. Es proposaran una sèrie d'exercicis curts, distribuïts al llarg del semestre, per realitzar a l'aula o a fora d'aquesta, 15%

4. Dos exàmens parcials escrits, que cobreixen aproximadament la meitat del pla d'estudis cadascun i que se celebraran en dates i hores conegudes en el moment de la matrícula. Es requereix un puntuació mínima de 3.5 / 10 per cadascun perquè compti cap a la nota final. Cadascuna d'aquestes proves comptarà al 30% de la nota final. $2 \times 30\% = 60\%$.

Un examen final que: (a) només serà obligatori per als estudiants que no hagin assolit una nota de 3.5/10 en algun dels exàmens parcials i, (b) al qual només es poden presentar els estudiants avaluats en activitats d'avaluació continuada que representin 2/3 parts de la nota final de l'assignatura . Aquest examen es dividirà en dues meitats que coincideixin amb els continguts del primer conjunt de proves. Es requereix que l'estudiant s'examini com a mínim de la part on no obtingui 3,5/10. Els estudiants que vulguin millorar la puntuació obtinguda en un dels exàmens parcials poden fer-ho presentant-se a una de les meitats d'aquest examen, però al fer-ho, renuncien a la nota de l'examen parcial i, en canvi, es queden amb la nota obtinguda a l'examen final.

Per tal d'aprovar l'assignatura, els estudiants han d'assolir competències suficients tant en els aspectes pràctics com teòrics de l'assignatura. La nota final s'obté afegint les tres contribucions següents (a), (b) i (c):

(a) Aspectes pràctics: elements (1) + (2)

(b) Aspectes teòrics: punt (4)

(c) Treball personal: element (3)

Tanmateix, és necessari que les notes de les parts pràctiques (a) i teòriques (b) de l'assignatura siguin com a mínim de 3,5/10. Es supera l'assignatura amb una nota global de 5/10. Tingueu en compte que l'assistència al laboratori és obligatòria i qualsevol alumne que no assisteixi a alguna sessió d'aquest sense motiu no superarà l'assignatura. Per a finalitat de qualificació, un estudiant serà considerat com a "no evaluable" si no es presenta al 50% dels ítems d'avaluació proposats.

ADVERTÈNCIA IMPORTANT SOBRE LA SEGURETAT DEL LABORATORI: Qualsevol estudiant que estigui involucrat en un incident que pugui tenir conseqüències greus en matèria de seguretat pot ser expulsat del laboratori i, d'aquesta manera, suspendre l'assignatura.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Examen Final	60%	3	0,12	2, 3, 7, 8, 11, 12, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Exercicis	15%	0	0	2, 6, 7, 8, 12, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Exàmens Parcials	60%	5	0,2	2, 3, 7, 8, 11, 12, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Informes de Laboratori	10%	0	0	3, 4, 6, 10, 12, 14, 16, 18, 19, 23
Presentació del Cas	15%	0	0	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 14, 15, 16, 18, 19, 20, 21, 22, 23

Bibliografia

Llibres de Text Bàsics:

- C. N. Banwell, E. M. McCash, Fundamentals of Molecular Spectroscopy, 4th Ed., McGraw Hill, 1994. (An old Spanish translation exists: C. N. Banwell, Fundamentos de Espectroscopía Molecular, Ed. del Castillo, Madrid, 1977, ISBN 9788421901526).
- J. M. Hollas, Modern Spectroscopy, 4th Ed., John Wiley & Sons, 2004 (Does not cover magnetic resonance).
- P. Atkins, J. de Paula, Atkins' Physical Chemistry, 8th Ed., Oxford University Press, 2005

Llibres de Text Especialitzats:

- P. Atkins, R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 5th Ed., Oxford University Press, 2011.
- D. J. Willock, Molecular Symmetry, Wiley, 2009.
- P. J. Hore, Nuclear Magnetic Resonance, Oxford Chemistry Primers, Oxford University Press, 1995.