

Espectroscopia Molecular

Código: 103283
Créditos ECTS: 5

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2501922 Nanociencia y Nanotecnología	OB	3	1

Contacto

Nombre: Vicenç Branchadell Gallo
Correo electrónico: Vicenc.Branchadell@uab.cat

Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)
Algún grupo íntegramente en inglés: No
Algún grupo íntegramente en catalán: Sí
Algún grupo íntegramente en español: No

Prerequisitos

No hay ningún prerrequisito obligatorio pero es muy aconsejable haber superado y tener presentes las asignaturas de "Enlace Químico y Estructura de la Materia", "Fundamentos de Matemáticas", "Mecánica y Ondas", Física Clásica ", · Química de los Elementos" y "Química Orgánica".

Es recomendable cursar simultáneamente la asignatura "Fenómenos Cuánticos I".

Objetivos y contextualización

Esta asignatura está focalizada en el estudio y comprensión de la interacción entre la radiación electromagnética y la materia, y cómo esta interacción puede ser utilizada en la caracterización estructural de moléculas y materiales. La asignatura incluye algunos fundamentos teóricos involucrados en la interacción radiación / materia y de algunas de las diferentes técnicas espectroscópicas más presentes. Para cada tipo de técnica espectroscópica, se pretende establecer una conexión entre el espectro y la información estructural que se puede extraer. Se da un peso especial a la simetría molecular y en la teoría de grupos como herramienta para explicar determinados espectros.

Los objetivos concretos de la asignatura son los siguientes:

- Entender los fundamentos básicos de la interacción entre la radiación electromagnética y la materia.
- Entender las reglas que determinan la frecuencias y las intensidades de una transición.
- Saber cómo aplicar este conocimiento para resolver cuantitativa y cualitativamente problemas químicos con la ayuda de la espectroscopia molecular.

Competencias

- Aplicar los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiada.
- Mantener un compromiso ético.
- Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
- Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo la utilización de medios telemáticos e informáticos.
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer y analizar problemas físicos, químicos y biológicos en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología, plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.

Resultados de aprendizaje

1. Analizar situaciones y problemas en el ámbito de la física y plantear respuestas o trabajos de tipo experimental utilizando fuentes bibliográficas.
2. Aplicar los contenidos teóricos adquiridos a la explicación de fenómenos experimentales.
3. Aplicar los principios físicos de las interacciones materia-radiación a la interpretación de espectros.
4. Aprender de forma autónoma.
5. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
6. Describir los fundamentos de las espectroscopias moleculares más significativas (IR, UV-visible, RMN, masas).
7. Diseñar experimentos sencillos para el estudio de sistemas químico-físicos simples.
8. Emplear la tecnología de la información y la comunicación para la documentación de casos y problemas.
9. Evaluar la mejor metodología espectroscópica para la resolución de un problema estructural.
10. Evaluar resultados experimentales de forma crítica y deducir su significado.
11. Gestionar la organización y planificación de tareas.
12. Identificar los principios físicos que rigen las interacciones materia-radiación.
13. Interpretar los datos obtenidos en las medidas experimentales para la caracterización de un compuesto químico o un material.
14. Mantener un compromiso ético.
15. Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
16. Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo el uso de medios telemáticos e informáticos.
17. Proponer ideas y soluciones creativas.
18. Razonar de forma crítica.
19. Reconocer y analizar problemas físicos y químicos relacionados con la estructura de compuestos orgánicos e inorgánicos.
20. Relacionar la Teoría de Grupos y las Tablas de caracteres con la simetría de las moléculas.
21. Relacionar los datos experimentales con las propiedades físico-químicas y/o análisis de los sistemas objeto de estudio.
22. Relacionar los principios físicos de las interacciones materia-radiación con las señales de los distintos espectros.
23. Resolver problemas y tomar decisiones.

24. Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
25. Utilizar correctamente las herramientas informáticas necesarias para calcular, representar gráficamente e interpretar los datos obtenidos, así como su calidad.
26. Utilizar programas de diseño gráfico para dibujar fórmulas químicas y sus reacciones.

Contenido

1. Introducción a la espectroscopia

Naturaleza de la radiación electromagnética. Energía y tipo de radiación. Espectro electromagnético y técnicas espectroscópicas. Intensidad de las líneas espectrales. Momento dipolar de la transición. Reglas de selección. Anchura de raya espectral. Principio de incertidumbre. Láseres.

2. Espectroscopia de rotación y vibración de moléculas diatómicas

Aproximación de Born-Oppenheimer y Ecuación de Schrödinger nuclear. Modelos del rotor rígido y del oscilador armónico. Reglas de selección. Anarmonicidad. Energías de Disociación.

3. Simetría Molecular

Elementos y operaciones de simetría. Grupos puntuales de simetría. Clasificación. Determinación sistemática del grupo puntual de una molécula. Aplicaciones de la simetría. Isomería óptica. Momento dipolar.

4. Teoría de grupos

Propiedades de los grupos. Clases de elementos de simetría. Representaciones reducibles e irreducibles. Especies de simetría. Tablas de caracteres. Descomposición de representaciones reducibles en sus componentes irreducibles.

5. Espectroscopia de vibración de moléculas poliatómicas

Vibración de moléculas poliatómicas. Modos normales de vibración. Tipo de vibraciones: tensión y deformación. Simetría de los modos normales de vibración. Reglas de selección. Efecto Raman. Polarizabilidad. Reglas de selección. Aplicación de la teoría de grupos al análisis vibracional. Regla de mutua exclusión.

6. Espectroscopia electrónica

Espectroscopia Atómica. Términos Espectrales. Interacción Spin Órbita. Transiciones Permitidas. Estado electrónico de moléculas diatómicas. Transiciones electrónicas en moléculas diatómicas. Estructura vibracional de las bandas electrónicas. Principio de Franck-Condon. Transiciones electrónicas. Reglas de selección. Consideraciones de simetría. Fluorescencia y fosforescencia. espectroscopia fotoelectrónica

7. Espectroscopia de resonancia magnética

Spin nuclear. Interacción con un campo magnético. Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Niveles energéticos nucleares. Reglas de selección. Apantallamiento nuclear. El desplazamiento químico. Acoplamientos spin-spin. Núcleos equivalentes. Sistemas de primer orden. Equivalencias química y magnética. Aplicaciones. Resonancia de spin electrónico

Prácticas de aula informática

1. Espectroscopia vibracional

2. Espectroscopia electrónica

Metodología

La asignatura constará de tres tipos de actividades docentes:

1. Clases teóricas

El profesor desarrollará los contenidos del programa en el aula. Se dispondrá de material de apoyo en el Campus Virtual.

2. Clases de Problemas

Resolución de algunos de los problemas propuestos para cada tema. Estas clases permiten profundizar y / o reforzar algunos de los conceptos introducidos en las clases teóricas.

3. Prácticas de aula informática

Simulación de espectros de algunas moléculas utilizando los métodos de la química cuántica.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Prácticas de aula	4	0,16	1, 2, 3, 4, 10, 5, 6, 7, 8, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 22, 20, 23, 24, 25, 26
Sesiones de problemas	15	0,6	1, 2, 3, 4, 10, 9, 5, 7, 8, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 22, 20, 21, 23, 24
Sesiones teóricas	26	1,04	1, 2, 3, 4, 10, 9, 5, 6, 7, 8, 11, 12, 13, 14, 15, 18, 19, 22, 20, 21, 23
Tipo: Autónomas			
Estudio personal	65	2,6	
Realización de ejercicios	5	0,2	1, 2, 3, 4, 10, 9, 5, 6, 8, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 22, 20, 21, 23, 24

Evaluación

Exámenes

A lo largo del curso se realizarán dos exámenes parciales que corresponderán a los temas 1-4 y 5

La nota mínima de un examen parcial que permite calcular la media del curso es de 4. Si no se llega a estos mínimos, al final del curso se pueden recuperar uno o los dos exámenes parciales. La nota obtenida en la recuperación reemplazará la nota obtenida en el primer intento. También es posible presentarse a las recuperaciones para mejorar nota. En este caso

la última nota obtenida en cada parcial es la que prevalece. Para tener derecho a presentarse a una recuperación es obligatorio haberse presentado a los dos exámenes parciales.

Trabajo de seguimiento

A lo largo del curso se recogerán un cierto número de pruebas del seguimiento del alumno (problemas resueltos individualmente o en grupo, pruebas cortas de aula, etc). La nota media de estos pruebas representará el 15% de la nota final

Prácticas de aula

A lo largo del curso se realizarán dos prácticas de aula obligatorias. El resultado de estas prácticas se evaluará mediante una prueba específica que representará el 15% de la nota final

Los requisitos para superar la asignatura son:

- 1.La nota de cada examen parcial debe ser igual o superior a 4
- 2.La nota media de la asignatura debe ser igual o superior 5
- 3.La realización de las prácticas de aula es obligatoria

La asignatura se considerará no evaluable si no se ha hecho ninguno de los dos exámenes parcia

Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Ejercicios	15	1	0,04	1, 2, 4, 10, 9, 5, 6, 7, 8, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 22, 20, 21, 23, 24, 25, 26
Exámenes	70	5	0,2	2, 3, 4, 10, 9, 5, 6, 12, 13, 14, 17, 18, 19, 22, 20, 21, 23
Prácticas de aula	15	4	0,16	1, 2, 3, 4, 10, 9, 5, 8, 12, 13, 14, 16, 17, 18, 19, 22, 20, 21, 23

Bibliografía

Textos Básicos:

- 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.

Textos especializados:

- P. Atkins, R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 5th Ed., Oxford University Press, 2011.