

Espectroscopía

Código: 102531
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	2	2

La metodología docente y la evaluación propuestas en la guía pueden experimentar alguna modificación en función de las restricciones a la presencialidad que impongan las autoridades sanitarias.

Contacto

Nombre: Xavier Sala Roman
Correo electrónico: Xavier.Sala@uab.cat

Uso de idiomas

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

Equipo docente

Mariona Sodupe Roure

Prerequisitos

La enseñanza, incluyendo los materiales entregados a los estudiantes, será en inglés, por lo tanto, se necesitan buenas habilidades de comunicación en inglés. Los materiales de evaluación escritos, incluidos los exámenes y los informes de laboratorio, se pueden entregar en catalán y español y, por supuesto, en inglés.

Solo los estudiantes que hayan superado los temas básicos de Fundamentos de Química ("Fonaments de Química") y Experimentación y Documentación ("Experimentació i Documentació") pueden realizar Espectroscopía ("Espectroscòpia").

El curso asume que el estudiante tiene conocimientos prácticos de química cuántica; por lo tanto, es muy recomendable haber tomado (y preferiblemente aprobado) el tema de Química Cuántica ("Química Quàntica").

Objetivos y contextualización

La espectroscopia se basa en el estudio de la interacción entre la radiación electromagnética y la materia y en cómo esta interacción se puede utilizar para determinar detalles sobre la estructura de esta última. Los fundamentos teóricos que explican la interacción de la radiación y la materia y que predicen la forma estructurada de los espectros se plantean primero, basándose en un conocimiento práctico de la química cuántica. Se discute la radiación láser, ya que su uso es omnipresente en las técnicas espectroscópicas actuales. Se hace un enfoque específico en la simetría como una poderosa herramienta para explicar las características de ciertos espectros en moléculas poliatómicas. A partir de ahí, se discuten diferentes técnicas espectroscópicas. Para cada tipo, la estructura del espectro correspondiente se conecta a los parámetros estructurales de las moléculas utilizando relaciones cuantitativas derivadas de la mecánica cuántica.

Objetivos específicos de la asignatura:

- Saber aplicar este conocimiento a la resolución de problemas tanto en aspectos cualitativos como cuantitativos.
- Comprender los fundamentos de interacción de la radiación electromagnética con la materia.
- Comprender las reglas que determinan la frecuencia e intensidad de una transición.

Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones.
- Aplicar los conocimientos químicos a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en ámbitos familiares y profesionales.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse con claridad en inglés.
- Demostrar motivación por la calidad.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales de las diferentes áreas de la Química.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Gestionar, analizar y sintetizar información.
- 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 apropiadas.
- Mantener un compromiso ético.
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
- Poseer destreza para el cálculo numérico.
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Utilizar correctamente la lengua inglesa en el ámbito de la Química.
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones.
2. Aplicar los principios físicos de las interacciones materia-radiación a la interpretación cualitativa y cuantitativa de espectros.
3. Aprender de forma autónoma.
4. Comunicarse con claridad en inglés.
5. Comunicarse en el laboratorio en inglés.
6. Demostrar motivación por la calidad.
7. Emplear y generalizar las relaciones entre la estructura y los métodos espectroscópicos.
8. Fundamentar la respuesta espectroscópica en las diferentes características estructurales.
9. Gestionar la organización y planificación de tareas.
10. Gestionar, analizar y sintetizar información.
11. Identificar los principios físicos que rigen las interacciones materia-radiación.
12. Manejar los términos químicos más habituales en inglés.
13. Manejar programas informáticos, de simulación entre otros, que ayuden a la interpretación anterior.
14. Mantener un compromiso ético.
15. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
16. Poseer destreza para el cálculo numérico.
17. Proponer ideas y soluciones creativas.
18. Razonar de forma crítica.
19. Reconocer la terminología espectroscópica en lengua inglesa.
20. Reconocer los términos ingleses de la estructura química.
21. Resolver problemas y tomar decisiones.
22. Utilizar los principios físicos de las interacciones materia-radiación para relacionar las señales de los distintos espectros con las posibles especies presentes en un determinado sistema químico.
23. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

Contenido

Teoría:

1. Introducción a la espectroscopia. Naturaleza de la radiación electromagnética. Espectro electromagnético. Técnicas espectroscópicas. Espectroscopia FT. Ancho de línea espectral. Intensidad de las líneas espectrales. Reglas de selección. Espectroscopia Raman. Ejemplo: Espectroscopia rotacional de moléculas diatómicas. Láseres.

2. Simetría molecular. Elementos y operaciones de simetría. Grupos puntuales de simetría. Determinación sistemática de grupos puntuales moleculares. Representaciones de grupos. Representaciones reducibles e irreducibles. Tablas de caracteres.

3. Espectroscopia vibracional. Vibración de moléculas diatómicas. El oscilador armónico como modelo. Anarmonicitat. Energía de disociación. Vibración de moléculas poliatómicas: modos normales de vibración. Tipo de modos normales. Simetría de los modos normales. Reglas de selección de moléculas poliatómicas. Regla de exclusión mutua.

4. Espectroscopia electrónica. Espectroscopia atómica. Términos espectrales. Reglas de selección. Espectroscopia electrónica de moléculas diatómicas. Estructura vibracional: espectros vibronic. Principio de Franck-Condon. Espectroscopia electrónica de moléculas poliatómicas. Consideraciones de simetría. Fluorescencia y fosforescencia. Espectroscopia de fotoelectrones.

5. Espectroscopia de resonancia magnética. Spin nuclear y electrónico. Interacción con un campo magnético. Espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN). Niveles de energía y reglas de selección. Apantallamiento nuclear. Desplazamiento Químico. Acoplamiento spin-spin. Otras espectroscopias de RM.

Sesiones de laboratorio:

Un total de cuatro sesiones (4 horas cada una), más una quinta sesión de evaluación (orden a determinar).

Los contenidos serán:

1. Técnicas experimentales básicas en espectroscopia: IR, UV-VIS y RMN

2. Simulación de espectros vibracionales

3. Simulación de espectros electrónicos

4. Simulación de espectros de RMN

5. Un proyecto / caso, elaborado en las sesiones de simulación anteriores).

A menos que las restricciones impuestas *por las autoridades sanitarias obliguen a una priorización o reducción de estos contenidos.*

Metodología

Las actividades pertenecen a cuatro categorías diferentes:

Clases de teoría: El profesor expondrá los contenidos del temario en el aula combinando el uso de la pizarra y material multimedia que se pondrá a disposición de los alumnos mediante el "Aula Moodle" de la asignatura. Estas sesiones expositivas conformarán la mayor parte de la docencia teórica del programa.

Sesiones de resolución de problemas: se distribuirá una lista de ejercicios a los alumnos, mediante el "Aula Moodle" de la asignatura al inicio del curso, clasificados según las unidades del plan de estudios. Los días indicados, anunciados durante las clases de teoría o siempre que sea adecuado en cuanto a materiales cubiertos, se resolverán problemas seleccionados en clase, explicando los fundamentos teóricos, detalles computacionales, etc. necesarios para resolver el ejercicio y con el objetivo de reforzar los conceptos

explicados en las clases teóricas. No se toma ningún compromiso de resolver explícitamente todos los problemas de la colección, dejando así espacio para la iniciativa individual y fomentando el trabajo individual del estudiante.

Sesiones de laboratorio: Las sesiones prácticas presentarán a los estudiantes la posibilidad de (1) calcular las propiedades espectroscópicas de determinadas moléculas utilizando código de química cuántica u otro software para simular espectros y (2) introducirse en las técnicas espectroscópicas básicas en un laboratorio de química experimental. El objetivo de las sesiones de laboratorio es poner de manifiesto la sinergia entre los enfoques teóricos y experimentales de la química moderna. Logísticamente, los estudiantes de todos los grupos de matriculación se dividirán en dos grupos, la composición se conocerá de antemano, a fin de hacer un uso eficiente del laboratorio y de las instalaciones informáticas disponibles. Las sesiones prácticas para cada subgrupo tendrán lugar en las fechas previstas en diferentes laboratorios y bajo la supervisión de profesores cualificados. Para todas las sesiones de laboratorio, el guión de laboratorio estará disponible en el "Aula Moodle". Los estudiantes deben llevar su propia copia impresa y leerla antes de la sesión de laboratorio correspondiente. Es recomendable llevar también un bloc de notas personal para escribir los resultados obtenidos y otras anotaciones. Además, a las sesiones de laboratorio experimental, es obligatorio que los alumnos lleven sus propias batas y gafas de protección. Los días indicados, los estudiantes serán convocados a laboratorio / sala de ordenadores. Al final de cada sesión práctica, se les entregará una hoja de respuesta y un cuestionario que se completará y se entregará antes de salir del laboratorio que servirá para evaluar el nivel de comprensión de la tarea terminada y la calidad del trabajo realizado.

Trabajo personal: El trabajo personal del alumno es un aspecto importante e indispensable para alcanzar y superar los contenidos de la asignatura. Además de las tareas más obvias (como preparar y estudiar anotaciones y libros, preparar ejercicios, etc.), ciertos ámbitos específicos y bien delimitados del temario se dejarán a los estudiantes para trabajar por ellos mismos. En estos casos, se pondrán a disposición horas de consultas personales que ayuden a unir los conocimientos adquiridos por los alumnos. Nota importante: La enseñanza, incluidos todos los materiales de enseñanza y evaluación (p. Ej. Exámenes, informes de laboratorio) se publicarán en inglés. Sin embargo, las respuestas escritas en materiales de evaluación serán aceptadas en catalán y en castellano.

La metodología docente propuesta puede experimentar alguna modificación en función de las restricciones a la presencialidad que impongan las autoridades sanitarias.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de Resolución de Problemas	12	0,48	2, 3, 5, 4, 6, 7, 8, 9, 11, 12, 13, 18, 20, 19, 21, 16, 22
Clases de Teoría	27	1,08	2, 3, 4, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 15, 18, 20, 19, 22
Prácticas de Laboratorio	20	0,8	1, 2, 5, 4, 6, 7, 8, 10, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 20, 19, 21, 16, 22, 23
Tipo: Supervisadas			
Preparación del Caso	10	0,4	1, 2, 3, 5, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 20, 19, 21, 16, 22, 23
Tipo: Autónomas			
Estudio personal	47	1,88	2, 3, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 18, 20, 19, 21, 16, 22
Preparación Clase Inversa	10	0,4	1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 17, 18, 20, 19, 21, 22, 23
Resolución de Problemas	16	0,64	2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 17, 18, 20, 19, 21, 16, 22

Evaluación

La evaluación se basa en un esquema de "evaluación continua", que comprende los siguientes ítems:

1. Resolver un "caso" dado: trabajando en grupos de 4 personas, los estudiantes tendrán que trabajar, utilizando el software de química cuántica y las bases de datos espectroscópicas según sea necesario, las propiedades espectroscópicas detalladas de las moléculas propuestas, presentar su caso en una breve presentación oral y responder Preguntas de los evaluadores. La calificación reflejará tanto la calidad de los resultados y la presentación (igual para todos los miembros) como las respuestas individuales de cada alumno, 25%.
2. Se propondrá un cierto número de actividades que incluyen pruebas tipo test y preparación de materiales (Clase Inversa), distribuidas a lo largo del semestre, 15%.
3. Dos exámenes parciales escritos que cubren aproximadamente el 60% y el 40%, respectivamente, del programa de estudios. Se requiere una nota media ponderada mínima de 5 / 10 para hacer promedio con el resto de actividades de evaluación de la asignatura. P1 contará un 36% y P2 un 24% de la nota final de la asignatura (total, 60%).

Un examen final que solo será obligatorio para los estudiantes que no hayan obtenido una nota media ponderada de 5/10 en los exámenes parciales. Este examen será una prueba única que incluirá todo el temario de la asignatura. Los estudiantes que deseen mejorar su nota pueden tomar este examen final, pero al hacerlo abandonan la calificación en los exámenes parciales y asumen la calificación del examen final.

Para aprobar la asignatura, los estudiantes deben alcanzar una competencia suficiente en los aspectos prácticos y teóricos de la asignatura. La calificación final se obtiene al agregar las siguientes tres contribuciones, (a), (b) y (c):

(a) Aspectos prácticos: ítems (1)

(b) Aspectos teóricos: Ítem (3)

(c) Trabajo personal: ítem (2)

Sin embargo, es necesario que las calificaciones de las partes práctica (a) y teórica (b) sean iguales o superiores a 5/10 cada una. La asignatura *Espectroscopia* se supera con una calificación total de 5/10. Cabe tener en cuenta que la asistencia al laboratorio es obligatoria y que un estudiante que no asiste a alguna de las sesiones sin justificación no aprobará la asignatura. Para propósitos de calificación, un estudiante será considerado como "no evaluable" si no entrega el 66% de los elementos de evaluación propuestos.

La evaluación propuesta puede experimentar alguna modificación en función de las restricciones a la presencialidad que impongan las autoridades sanitarias.

ADVERTENCIA IMPORTANTE SOBRE LA SEGURIDAD EN EL LABORATORIO:

Cualquier estudiante que esté involucrado en un incidente que pueda tener serias consecuencias con respecto a la seguridad puede ser expulsado del laboratorio y de esta manera no se puede superar la materia.

Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Clase Inversa	10%	0	0	1, 3, 4, 6, 9, 10, 12, 15, 17, 18, 20, 19, 23
Examen Final	60%	3	0,12	2, 3, 7, 8, 11, 12, 14, 17, 18, 20, 19, 21, 16, 22
Exámenes Parciales	60%	5	0,2	2, 3, 7, 8, 11, 12, 14, 17, 18, 20, 19, 21, 16, 22
Presentación del Caso	25%	0	0	1, 2, 3, 5, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 14, 15, 17, 20, 19, 21, 16, 22, 23
Tests	5%	0	0	2, 6, 7, 8, 12, 14, 17, 18, 20, 19, 21, 16, 22

Bibliografía

Llibros de Texto Bàsicos:

- 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

Llibros de Texto Especialitzados:

- 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.