

Espectroscòpia Molecular

Codi: 103283

Crèdits: 5

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

La metodologia docent i l'avaluació proposades a la guia poden experimentar alguna modificació en funció de les restriccions a la presencialitat que imposin les autoritats sanitàries.

Professor/a de contacte

Nom: Vicenç Branchadell Gallo

Correu electrònic: Vicenc.Branchadell@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", "Fonaments de Matemàtiques", "Mecànica i Ones", Física Clàssica", "Química dels Elements" i "Química Orgànica". És recomenable cursar simultàniament l'assignatura "Fenòmens Quàntics I".

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 important 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'espectroscopia 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 quimicofísics 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

Tema 1. Introducció a l'espectroscòpia

Poblacions dels nivells energètics: Llei de distribució de Boltzmann. Radiació electromagnètica. Absorció i emissió estimulades. Regla de selecció. Espectrofotòmetre. Amplada de bandes. Fonts de radiació. Làsers. Espectroscòpia de transformada de Fourier.

Tema 2. Espectres de rotació i vibració de molècules diatòmiques

Moviment nuclear en una molècula diatòmica. Aproximació de Born-Oppenheimer. Rotor rígid. Nivells rotacionals i espectre de rotació. Oscil·lador harmònic i nivells vibracionals. Estructura fina de les bandes vibracionals. Distorsió centrífuga i anharmonicitat. Acoblament vibració-rotació. Energia de dissociació

Tema 3. Simetria molecular

Operacions i elements de simetria. Eixos de rotació. Plans de simetria i eixos de rotació impròpia. Producte d'operacions de simetria. Grups puntuals de simetria. Conseqüències de la simetria: polaritat i quiralitat

Tema 4. Teoria de grups.

Operacions de simetria i matrius. Caràcters de les matrius. Classes de simetria. Taules de caràcters. Simetria dels orbitals atòmics. Representacions reductibles i irreductibles. Combinacions lineals adaptades a la simetria. Integrals a tot l'espai i regles de selecció.

Tema 5. Espectres de vibració de molècules poliatòmiques

Moviment dels nuclis en una molècula poliatòmica: rotació i vibració. Modes normals de vibració. Regles de selecció en espectres IR. Simetria i regles de selecció. Determinació dels modes normals a partir de la simetria. Espectres IR i interaccions moleculars. Espectroscòpia Raman. Espectroscòpia Raman rotacional. Espectroscòpia Raman vibracional. Regles de selecció i simetria.

Tema 6. Espectres electrònics.

Espectres atòmics. Termes espectrals en àtoms polieletrònics. Termes espectrals, nivells i estats. Termes espectrals en molècules diatòmiques. Estructura vibracional de les bandes electròniques. Principi de Franck-Condon. Fluorescència i fosforescència. Dissociació i predissociació. Espectres electrònics de molècules poliatòmiques. Espectres fotoelectrònics.

Tema 7. Espectres de ressonància magnètica

Introducció a la ressonància magnètica nuclear. Regles de selecció en espectres RMN. Model vectorial. Apantallament i desplaçament químic. Acoblament spin-spin. Equivalència química i equivalència magnètica. RMN i processos químics. RMN de transformada de Fourier. Relaxació longitudinal i transversal. Espectres RMN de nuclis amb $I \geq 1$. Espectres RMN en sòlids. Espectres de ressonància de spin electrònic. Acoblament hiperfí.

Pràctiques d'aula informàtica

1. Espectroscòpia vibracional

2. Espectroscòpia electrònica

Metodologia

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

1. Classes teòriques

El professor desenvoluparà els continguts de l'assignatura de manera presencial o virtual, d'acord amb el que en tot moment determinin les autoritats acadèmiques. Tot el contingut de les classes teòriques estarà disponible prèviament al campus virtual.

2. Classes de Problemes

Per a cada tema es proposaran diversos problemes que s'hauran de resoldre per part dels alumnes, amb la supervisió del professor. En les classes de problemes es resoldran els dubtes que hagi pogut generar la resolució dels problemes.

3. Pràctiques d'aula informàtica

Simulació d'espectres d'algunes molècules utilitzant els mètodes de la Química Quàntica.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

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			
Estudi personal	65	2,6	
Realització 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

Avaluació

Exàmens

Al llarg del curs es realitzaran dos exàmens parcials. Els pesos d'aquests exàmens en la nota final seran del 40% i del 30%, respectivament, de manera que el conjunt dels dos exàmens parcials representarà el 70% de la nota final.

La nota mínima d'un examen parcial que permet calcular la mitjana del curs és de 4. Si no s'arriba a aquests mínims, al final del curs es poden recuperar un o els dos exàmens parcials. La nota obtinguda en la recuperació reemplaçarà la nota obtinguda en el primer intent. També és possible presentar-se a les recuperacions per millorar nota. En aquest cas l'última nota obtinguda en cada parcial és la que preval. Per tenir dret a presentar-se a una recuperació és obligatori haver-se presentat als dos exàmens parcials.

Treball de seguiment

Al llarg del curs es recolliran un cert nombre de proves del seguiment de l'alumne (problemes resolts individualment o en grup, proves curtes d'aula, etc). La nota mitjana d'aquests proves representarà el 15% de la nota final

Pràctiques d'aula

Al llarg del curs es realitzaran dues pràctiques d'aula obligatòries. El resultat d'aquestes pràctiques s'avaluarà mitjançant una prova específica que representarà el 15% de la nota final

Els requisits per superar l'assignatura són:

1. La nota de cada examen parcial ha de ser igual o superior a 4
2. La nota mitjana de l'assignatura ha de ser igual o superior a 5
3. La realització de les pràctiques d'aula és obligatòria

L'assignatura es considerarà no avaluable si no s'ha fet cap dels dos exàmens parcials. Per optar a la qualificació "Matrícula d'honor" es tindran en compte de manera preferent les notes obtingudes en els exàmens parcials.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Pràctiques d'aula	15	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
Exercicis	15	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

Bibliografia

Textos Bàsics:

- P. Atkins, J. de Paula, *Atkins. Química Física*, 8a Ed., Ed. Panamericana , 2008. Disponible electrònicament.
- C. N. Banwell, E. M. McCash, *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, 4th Ed., McGraw Hill, 1994.
- J. M. Hollas, *Basic Atomic and Molecular Spectroscopy*, Royal Society of Chemistry, 2002. Disponible electrònicament.

Textos especialitzats:

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

Programari

GaussView 6.0 i Gaussian-16