

## Espectroscopía

Código: 102531  
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	2	2

### Contacto

Nombre: Albert Rimola Gibert

Correo electrónico: albert.rimola@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 docencia, incluyendo los materiales entregados a los estudiantes, será en inglés, y por lo tanto, se necesitan buenas habilidades de comprensión y comunicación en esta lengua. 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.

Sólo los estudiantes que han superado la asignatura "Fundamentos de Química I" pueden realizar la asignatura de "Espectroscopia".

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

### 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 obtener información estructural sobre esta última. En primer lugar, se presentarán los fundamentos teóricos que explican la interacción entre la radiación y la materia y que predicen la forma estructurada de los espectros, basándose en conocimientos de la química cuántica. Se discutirá la radiación láser, ya que su uso es omnipresente en las técnicas espectroscópicas actuales. Se hará un enfoque específico de la simetría molecular y de la aplicación de la Teoría de Grupos en simetría como herramienta para explicar las características de ciertos espectros de moléculas poliatómicas. Se discutirán diferentes técnicas espectroscópicas de absorción, emisión y dispersión Raman (esto es, rotacional, vibracional, y electrónica) como también de resonancia magnética de espín (esto es, resonancia magnética nuclear). Para cada tipo, se relacionará el espectro correspondiente con los parámetros estructurales de la molécula en cuestión.

Objetivos específicos de la asignatura:

- Comprender los fundamentos de la interacción de la radiación electromagnética con la materia.

- Comprender las reglas que determinan la frecuencia e intensidad de una transición
- Saber aplicar estos conocimientos a la resolución de problemas tanto de forma cualitativa como cuantitativa

## 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 (GPS). Determinación sistemática de GPS para moléculas. Representaciones de grupos. Representaciones reducibles e irreducibles. Tablas de caracteres.

#### 3. Espectroscopia vibracional.

Vibración de moléculas diatómicas: El modelo del oscilador armónico y la anharmonicidad; 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 y regla de exclusión mutua.

#### 4. Espectroscopia electrónica.

Espectroscopia atómica: términos atómicos espectrales y reglas de selección. Espectroscopia electrónica de moléculas diatómicas: estructura vibracional y espectros vibrónicos; Principio de Franck-Condon. Espectroscopia electrónica de moléculas poliatómicas: consideraciones de simetría. Fluorescencia y fosforescencia. Espectroscopia de fotoelectrones; UPS y XPS.

#### 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:

Se realizarán un total de cuatro sesiones (4 horas cada una).

Los contenidos serán:

1. Simulación de espectros vibracionales
2. Simulación de espectros electrónicos
3. Simulación de espectros de RMN
4. 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 asume 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 calcular las propiedades espectroscópicas de determinadas moléculas utilizando un código de química cuántica u otro software para simular espectros. 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. Los días indicados, los estudiantes serán convocados en el laboratorio o sala de ordenadores. Al final de cada sesión práctica, los estudiantes entregarán un informe que servirá de autoevaluación sobre el nivel de comprensión de la tarea terminada y la calidad del trabajo realizado. Los estudiantes realizarán, en grupos, una práctica final que es aplicar las técnicas desarrolladas en las sesiones de las prácticas anteriores a una molécula (caso) concreto y hacer un análisis de las propiedades espectroscópicas de ésta. Los grupos harán frente a los profesores una exposición de este trabajo final, que será la nota correspondiente a la parte de prácticas.

**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 estudiar, preparar ejercicios, etc.), ciertos ámbitos específicos y bien delimitados del temario se asignarán a los estudiantes para que los trabajen ellos mismos. En estos casos, se pondrán a disposición del alumno horas de consultas personales que ayuden a consolidar los conocimientos adquiridos por los alumnos. Nota importante: La docencia, incluidos todos los materiales del curso 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.

**Nota:** se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

## 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. Prácticas: Se resolverá un "caso" dado. En grupos de 4 personas, los estudiantes tendrán que trabajar, utilizando software de química cuántica y bases de datos, las propiedades espectroscópicas detalladas de las moléculas propuestas. Tendrán que presentar su caso en una breve presentación oral y responder a las preguntas de los evaluadores. La calificación reflejará tanto la calidad de los resultados y la presentación como las respuestas individuales de cada alumno (30%).
2. Evidencias: Se propondrán actividades que incluyen pruebas tipo test y preparación de materiales (Clase Inversa), a lo largo del semestre (10%).
3. Exámenes: Se realizarán dos exámenes parciales escritos. Se requiere una nota media mínima de 5 / 10 (y una nota mínima de 4 en cada parcial) para hacer promedio con el resto de actividades de evaluación de la asignatura (60%).
4. Examen de recuperación. Se programará un examen de recuperación para aquellos alumnos que no hayan obtenido una nota mínima de 4/10 en los exámenes parciales. Sólo será necesario recuperar el parcial (o parciales) cuya nota sea inferior a 4.

Los estudiantes que deseen mejorar su nota pueden realizar el examen final de recuperación, pero al hacerlo renuncian a la calificación obtenida 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 de la media ponderada de las notas de las evidencias, prácticas y exámenes teoría. Es necesario que las calificaciones de las partes práctica (1) y teórica (3) sean iguales o superiores a 5/10 cada una de ellas. La asignatura *Espectroscopia* se supera con una calificación total de 5/10. Debe tenerse en cuenta que la asistencia al laboratorio es obligatoria y que un estudiante que no asista a alguna de las sesiones sin justificación no aprobará la asignatura. 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 no 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.

## **Software**

Gaussian09