

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

Poblaciones de los niveles energéticos: Ley de distribución de Boltzmann. Radiación electromagnética. Absorción y emisión estimuladas. Regla de selección. Espectrofotómetro. Ancho de bandas. Fuentes de radiación. Láseres. Espectroscopia de transformada de Fourier.

2. Espectros de rotación y vibración de moléculas diatómicas

Movimiento nuclear en una molécula diatómica. Aproximación de Born-Oppenheimer. Rotor rígido. Niveles rotacionales y espectro de rotación. Oscilador armónico y niveles vibracionales. Estructura fina de las bandas vibracionales. Distorsión centrífuga y anarmonicidad. Acoplamiento vibración-rotación. Energía de disociación

3. Simetría molecular

Operaciones y elementos de simetría. Ejes de rotación. Planes de simetría y ejes de rotación impropia. Producto de operaciones de simetría. Grupos puntuales de simetría. Consecuencias de la simetría: polaridad y quiralidad

4. Teoría de grupos.

Operaciones de simetría y matrices. Caracteres de las matrices. Clases de simetría. Tablas de caracteres. Simetría de los orbitales atómicos. Representaciones reducibles e irreducibles. Combinaciones lineales adaptadas a la simetría. Integrales en todo el espacio y reglas de selección.

5. Espectros de vibración de moléculas poliatómicas

Movimiento de los núcleos en una molécula poliatómicas: rotación y vibración. Modos normales de vibración. Reglas de selección en espectros IR. Simetría y reglas de selección. Determinación de los modos normales a partir de la simetría. Espectros IR e interacciones moleculares. Espectroscopia Raman. Espectroscopia Raman rotacional. Espectroscopia Raman vibracional. Reglas de selección y simetría.

6. Espectros electrónicos.

Espectros atómicos. Términos espectrales en átomos polieletrónicos. Términos espectrales, niveles y estados. Términos espectrales en moléculas diatómicas. Estructura vibracional de las bandas electrónicas. Principio de Franck-Condon. Fluorescencia y fosforescencia. Disociación y predissociación. Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas. Espectros fotoelectrónicos.

7. Espectros de resonancia magnética

Introducción a la resonancia magnética nuclear. Reglas de selección en espectros RMN. Modelo vectorial. Apantallamiento y desplazamiento químico. Acoplamiento spin-spin. Equivalencia química y equivalencia magnética. RMN y procesos químicos. RMN de transformada de Fourier. Relajación longitudinal y transversal. Espectros RMN de núcleos con $I \geq 1$. Espectros RMN en sólidos. Espectros de resonancia de spin electrónico. Acoplamiento hiperfino.

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 de manera presencial o virtual, de acuerdo con lo que determinen las autoridades académicas. Todo el material de las clases teóricas estará disponible previamente en el Campus Virtual.

2. Clases de Problemas

Se propondrán problemas para cada tema que deberán ser resueltos por los alumnos bajo la supervisión del profesor. Las clases de problemas se destinarán a la discusión de los resultados de los problemas.

3. Prácticas de aula informática

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

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			
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. El peso de estos exámenes parciales es

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. Química Física*, 8a Ed., Ed. Panamericana , 2008. Disponible electrónicamente.
- 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 electrónicamente.

Textos especializados:

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

Software

GaussView 6.0 y Gaussian-16