Universitat Autònoma de Barcelona

2023/2024

Espectroscòpia

Codi: 102531
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	2	2

Professor/a de contacte

Nom: Albert Rimola Gibert

Correu electrònic: albert.rimola@uab.cat

Idiomes dels grups

Podeu accedir-hi des d'aquest enllaç. Per consultar l'idioma us caldrà introduir el CODI de l'assignatura. Tingueu en compte que la informació és provisional fins a 30 de novembre de 2023.

Equip docent

Mariona Sodupe Roure

Prerequisits

- La docència, inclosos els materials didàctics lliurats als estudiants, es farà en anglès, per la qual cosa calen bones habilitats de comprensió i comunicació en aquesta llengua. Els materials d'avaluació escrits, inclosos els exàmens i els informes de laboratori, es poden realitzar en català i castellà i, per descomptat, en anglès.
- Només els estudiants que han superat l'assignatura Fonaments de Química I poden cursar Espectroscòpia.
- El curs suposa que l'estudiant té coneixements de química quàntica; per tant, és molt aconsellable haver realitzat (i aprovat preferentment) l'assignatura de Química Quàntica.

Objectius

L'espectroscòpia es basa en l'estudi de la interacció entre la radiació electromagnètica i la matèria i en com aquesta interacció es pot utilitzar per obtenir informació estructural d'aquesta última. En primer lloc, es presentaran els fonaments teòrics que expliquen la interacció de la radiació i la matèria i que prediuen la forma estructurada dels espectres, basant-se en coneixements de la química quàntica. Es discutirà la radiació làser, ja que el seu ús és omnipresent en les tècniques espectroscòpiques actuals. Es farà un enfocament específic de la simetria molecular i l'aplicació de la Teoria de Grups en simetria com a eina per interpretar espectres en molècules poliatòmiques. Es discutiran diferents tècniques espectroscòpiques d'absorció, emissió i de dispersió Raman (rotacional, vibracional, i electrònica) com també de ressonància magnètica d'espín (ressonància magètica nuclear). Per a cada tipus d'espectroscòpia, es relacionarà l'espectre amb els paràmetres estructurals de les molècules.

Objectius específics de l'assignatura:

- Comprendre els fonaments d'interacció de la radiació electromagnètica amb la matèria.
- Comprendre les regles que determinen la freqüència i intensitat d'una transició.
- Saber aplicar aquest coneixement a la resolució de problemes tant des d'un punt de vista qualitatiu com quantitatiu.

Competències

- "Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques; identificar-ne el significat i relacionar les dades amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades."
- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se amb claredat en anglès.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
- Mantenir un compromís ètic.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Tenir destresa per al càlcul numèric.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Aplicar els principis físics de les interaccions matèria-radiació a la interpretació qualitativa i quantitativa d'espectres.
3. Aprendre de manera autònoma.
4. Comunicar-se al laboratori en anglès.
5. Comunicar-se amb claredat en anglès.
6. Demostrar motivació per la qualitat.
7. Emprar i generalitzar les relacions entre l'estructura i els mètodes espectroscòpics.
8. Fonamentar la resposta espectroscòpica en les diferents característiques estructurals.
9. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
10. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
11. Identificar els principis físics que regeixen les interaccions matèria-radiació.
12. Manejar els termes químics més habituals en anglès.
13. Manejar programes informàtics, de simulació, entre d'altres, que ajudin a la interpretació anterior.
14. Mantenir un compromís ètic.
15. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
16. Proposar idees i solucions creatives.
17. Raonar de forma crítica.
18. Reconèixer els termes anglesos de l'estructura química.
19. Reconèixer la terminologia espectroscòpica en llengua anglesa.
20. Resoldre problemes i prendre decisions.
21. Tenir destresa per al càlcul numèric.

22. Utilitzar els principis físics de les interaccions matèria-radiació per relacionar els senyals dels diferents espectres amb les possibles espècies presents en un determinat sistema químic.
23. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Continguts

Teoria:

1. Introducció a l'espectroscòpia.

Naturalesa de la radiació electromagnètica. Espectre electromagnètic. Tècniques espectroscòpiques. Espectroscòpia FT. Ample de línia espectral. Intensitat de les línies espectrals. Regles de selecció. Espectroscòpia Raman. Exemple: Espectroscòpia rotacional de molècules diatòmiques. Làsers.

2. Simetria molecular.

Elements i operacions de simetria. Grups puntuals de simetria (GPS). Determinació sistemàtica del GPS d'una molècula. Representacions de grups. Representacions reduïbles i irreductibles. Taules de caràcters.

3. Espectroscòpia vibracional.

Vibració de molècules diatòmiques: Model d'oscil·lador harmònic; anharmonicitat; energia de dissociació. Vibració de molècules poliatòmiques: modes normals de vibració; tipus de modes normals; simetria dels modes normals; regles de selecció de molècules poliatòmiques i regla d'exclusió mútua.

4. Espectroscòpia electrònica.

Espectroscòpia atòmica: termes espectrals; regles de selecció. Espectroscòpia electrònica de molècules diatòmiques: estructura vibracional i espectres vibrònics; Principi de Franck-Condon. Espectroscòpia electrònica de molècules poliatòmiques: consideracions de simetria. Fluorescència i fosforescència. Espectroscòpia fotoelectrònica: UPS i XPS.

5. Espectroscòpia de ressonància magnètica.

Spin nuclear i electrònic. Interacció amb un camp magnètic. Espectroscòpia de ressonància magnètica nuclear (RMN). Nivells d'energiairegles de selecció. Apantallament nuclear. Desplaçament Químic. Acoblament spin-spin. Altres espectroscòpies de RM.

Pràctiques de laboratori:

Es realitzaran un total de 3 sessions de 4 hores cadascuna, els continguts del qual seran:

Sessió 1: Simulació d'espectres vibracionals

Sessió 2: Simulació d'espectres electrònics

Sessió 3: Simulació d'espectres de RMN

Al llarg de les pràctiques s'hauran de realitzar càlculs i simulacions dels espectres de molècules, i comprendre i analitzar els resultats obtinguts, relacionant-los amb la matèria vista a les sessions de teoria. L'objectiu final de les pràctiques és analitzar una molècula cas d'acord amb les seves propietats espectroscòpiques.

El desenvolupament és el següent. Les ca. dues primeres hores es dediquen a càlculs relacionats amb la simulació d'espectres corresponents a cada sessió (vibracional, electrònica, 1H-NMR) per a unes molècules específiques seguint les instruccions dels guions. Se'ls lliura un informe que hauran d'emplenar i contestar, i que els serveix per valorar el nivell de comprensió de les tasques realitzades i de la qualitat del treball. Les dues darreres hores es dediquen a la molècula cas, on es simularan les propietats de l'espectroscòpia corresponent a la sessió, d'acord amb allò que s'ha fet i après anteriorment. També serviran per discutir,

organitzar la informació i preparar la presentació, aprofitant que els docents estaran al laboratori per ajudar-los en qualsevol dubte.

Metodologia

Les activitats pertanyen a quatre categories diferents:

Classes de teoria: El docent exposarà els continguts del temari a l'aula combinant l'ús de la pissarra i material multimèdia que es posarà a disposició de l'alumnat mitjançant l'"Aula Moodle" de l'assignatura. Aquestes sessions expositives conformaran la major part de la docència teòrica del programa.

Sessions de resolució de problemes: es distribuirà una llista d'exercicis a l'alumnat, mitjançant l'"Aula Moodle" de l'assignatura a l'inici del curs, classificats segons les unitats del pla d'estudis. Els dies indicats, anunciats durant les classes de teoria o sempre que sigui adequat pel que fa a materials coberts, es resoldran problemes seleccionats a classe, explicant els fonaments teòrics, detalls computacionals, etc., necessaris per resoldre l'exercici i amb l'objectiu de reforçar les competències exposades en les classes teòriques. No es pren cap compromís de resoldre explícitament tots els problemes de la col·lecció, deixant així espai per a la iniciativa individual i fomentant el treball individual de l'estudiant.

Pràctiques de laboratori: Les sessions pràctiques presentaran a l0alumnat la possibilitat de calcular les propietats espectroscòpiques de determinades molècules utilitzant codi de química quàntica o altre programari per simular espectres. L'objectiu de les sessions de laboratori és posar de manifest la sinergia entre els enfocaments teòrics i experimentals de la química moderna. Logísticament, l'alumnat de tots els grups de matriculació es dividiran en dos grups, la composició dels quals esconeixerà per endavant, per tal de fer un ús eficient del laboratori i de les instal·lacions informàtiques disponibles. Les sessions pràctiques per a cada subgrup tindran lloc a les dates previstes en diferents laboratoris i sota la supervisió de docents qualificats. Per a totes les sessions de laboratori, el guió de laboratori estarà disponible al l'"Aula Moodle". L'alumnat haurà de portar la seva pròpia còpia impresa i llegir-la abans de la sessió de laboratori corresponent. És recomanable portar també un bloc de notes personal per escriure els resultats obtinguts i altres anotacions. Els dies indicats, l'alumnat serà convocat a la sala d'ordinadors. Al final de cada sessió pràctica, l'alumnat lliurarà un informe que servirà d'autoavaluació sobre el nivell de comprensió de la tasca realitzada i la qualitat del treball realitzat. L'alumnat realitzarà, en grups, una pràctica final on s'aplicarà les tècniques desenvolupades en les sessions de les pràctiques anteriors a una molècula (cas) concreta i fer un anàlisi de les propietats espectroscòpiques d'aquesta. Els grups faran davant dels docents una exposició d'aquest treball final, que serà la nota corresponent a la part de pràctiques.

Treball personal: El treball personal de l'alumnat és un aspecte important i indispensable per a assolir i superar els continguts de l'assignatura. A més de les tasques més òbvies (com ara preparar i estudiar anotacions i llibres, preparar exercicis, etc.), certs àmbits específics i ben delimitats del temari es deixaran a l'alumnat per treballar autònomament. En aquests casos, es posaran a disposició hores de consultes personals que ajudin a unir els coneixements adquirits perl'alumnat. Nota important: L'ensenyament, inclosos tots els materials d'ensenyament i avaluació (p. Ex. Exàmens, informes de laboratori) es publicaran en anglès. No obstant això,les respostes escrites en materials d'avaluació seran acceptades en català i en castellà.

La metodologia docent proposada pot experimentar alguna modificació en funció de les restriccions a la presencialitat que imposin les autoritats sanitàries.

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			
Classes de Problemes	12	0,48	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 11, 12, 13, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Classes de Teoria	27	1,08	2, 3, 5, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 15, 17, 18, 19, 22
Pràctiques de Laboratori	20	0,8	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23
Tipus: Supervisades			
Preparació del Cas	10	0,4	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23
Tipus: Autònomes			
Estudi personal	50	2	2, 3, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Preparació de les evidències	5	0,2	1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 22, 23
Resolució de Problemes	18	0,72	2, 3, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22

Avaluació

L'avaluació pot basar-se en una modalitat d'avaluació continuada o, per aquell alumnat que s'hi hagi acollit, en una modalitat d'avaluació única.

La modalitat d'avaluació continuada inclou els següents elements:

1. Exàmens parcials: Es realitzaran dos exàmens parcials escrits. Es requereix una nota mitjana mínima de 5/10 (i una nota mínima de 4 en cada parcial) per fer mitjana amb la resta d'activitats d'avaluació de l'assignatura (60%).

2. Pràctiques de laboratori: Es resoldrà un "cas" determinat, en grups de 4 persones. L'alumnat haurà de treballar i analitzar, utilitzant programari de química quàntica i bases de dades espectroscòpiques, les propietats espectroscòpiques de les molècules proposades. Hauran de presentar la molècula cas en una exposició oral curta i respondre preguntes dels docents. La nota reflectirà tant la qualitat dels resultats com de la presentació i les respostes individuals de l'alumnat (25%).

3. Evidències: Es proposaran unes proves de tipus test que es resoldran online a através de l'aula Moodle que es realitzaran al llarg del curs (15%).

Es programarà un examen de recuperació per a aquell alumnat que no hagi obtingut una nota mínima de 4/10 en els exàmenes parcials. Només serà necessari recuperar el parcial (o parcials) amb la nota inferior a 4/10. Els estudiants que desitgin millorar la seva nota poden realitzar l'examen final de recuperació, però al fer-ho renuncien a la qualificació obtinguda en els exàmens parcials i assumeixen la qualificació de l'examen final.

En la modalitat d'avaluació continuada, per aprovar l'assignatura, l'alumnat ha d'aconseguir una competència suficient en els aspectes pràctics i teòrics de l'assignatura. La qualificació final s'obtindrà de la mitjana ponderada de les notes dels exàmens parcials, de les pràctiques i les evidències. És necessari que les qualificacions de les parts teòrica (1) i pràctica (2) siguin iguals o superiors a 5/10 cadascuna. L'assignatura d'Espectroscòpia se supera amb una qualificació total de 5/10.

La modalitat d'avaluació única (només per aquell alumnat que s'hi hagi acollit) consistirà en:

1. Examen final escrit, equivalent als exàmens primer i segon parcial, que es realitzarà el mateix dia que es faci el segon parcial en la modalitat d'avaluació continuada. Es requereix una nota mínima de 5/10 per fer mitjana amb les pràctiques de laboratori (75%).

2. Pràctiques de laboratori. La part de pràctiques de laboratori serà idèntic als de de l'avaluació continuada, és a dir, realització de les pràctiques segons el calendari establert, i presentació de la molècula cas el dia que pertoqui (25%).

Es programarà un examen de recuperació per a aquell alumnat que no hagi obtingut una nota mínima de 5/10 en l'examen final, que es realitzarà el mateix dia que es faci l'examen de recuperació en la modalitat d'avaluació continuada. S'haurà d'obtenir una nota mínima de 5/10 per fer mitjana amb les pràctiques de laboratori.

En la modalitat d'avaluació única, per aprovar l'assignatura, l'alumnat ha d'aconseguir una competència suficient en els aspectes pràctics i teòrics de l'assignatura. La qualificació final s'obtindrà de la mitjana ponderada de les notes de l'examen final i de les pràctiques de laboratori. És necessari que les qualificacions de les parts teòrica (1) i pràctica (2) siguin iguals o superiors a 5/10 cadascuna. L'assignatura d'Espectroscòpia se supera amb una qualificació total de 5/10.

Un estudiant serà considerat com a "no evaluable" si no es presenta al 66% dels ítems d'avaluació proposats.

ADVERTÈNCIA IMPORTANT SOBRE LES PRÀCTIQUES DE LABORATORI:

L'assistència a les pràctiques de laboratori és obligatòria i aquell alumnat que no assisteixi a alguna sessió d'aquestes sense motiu no superarà l'assignatura.

Qualsevol estudiant que estigui involucrat enunincident que pugui tenir conseqüències greus en matèria de seguretat pot ser expulsat del laboratori i suspendre l'assignatura.

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Evidències	15%	2	0,08	2, 6, 7, 8, 11, 12, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Examen Final	60%	3	0,12	2, 3, 7, 8, 11, 12, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Exàmens Parcials	60%	3	0,12	2, 3, 7, 8, 11, 12, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Pràctiques de laboratori	25%	0	0	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 14, 15, 16, 18, 19, 20, 21, 22, 23

Bibliografia

Llibres de Text Bàsics:

- 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

Llibres de Text Especialitzats:

- 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.

Programari

Les pràctiques de laboratori es duran a terme amb el programa Gaussian16 pels càlculs i Gausview6 per a la construcció i visualització de molècules.