

Espectroscopía

Código: 102531

Créditos ECTS: 6

2024/2025

Titulación	Tipo	Curso
2502444 Química	OB	2

Contacto

Nombre: Albert Rimola Gibert

Correo electrónico: albert.rimola@uab.cat

Equipo docente

Mariona Sodupe Roure

Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al [final](#) del documento.

Prerrequisitos

- Sólo el alumnado que ha superado la asignatura "Fundamentos de Química I" pueden realizar la asignatura de Espectroscopía.
- El curso asume que el alumnado 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 espectroscopía 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 entender 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.
- 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. Demostrar motivación por la calidad.
5. Emplear y generalizar las relaciones entre la estructura y los métodos espectroscópicos.
6. Fundamentar la respuesta espectroscópica en las diferentes características estructurales.
7. Gestionar la organización y planificación de tareas.
8. Gestionar, analizar y sintetizar información.
9. Identificar los principios físicos que rigen las interacciones materia-radiación.
10. Manejar programas informáticos, de simulación entre otros, que ayuden a la interpretación anterior.
11. Mantener un compromiso ético.
12. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
13. Poseer destreza para el cálculo numérico.
14. Proponer ideas y soluciones creativas.
15. Razonar de forma crítica.
16. Reconocer la terminología espectroscópica en lengua inglesa.
17. Reconocer los términos ingleses de la estructura química.
18. Resolver problemas y tomar decisiones.
19. 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.
20. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

Contenido

Teoría y Problemas:

1. Introducción a la espectroscopia.

Naturaleza de la radiación electromagnética. Espectro electromagnético. Técnicas espectroscópicas. Espectroscopia FT. Ancho de línea espectral. Intensidad de las líneas espetrales. Reglas de selección. Espectroscopia Raman. Láseres. Ejemplo de espectroscopia de absorción/emisión: Espectroscopia rotacional.

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: modelo del oscilador armónico; 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 espetrales; reglas de selección. Espectroscopia electrónica de moléculas diatómicas: términos espetrales; reglas de selección; estructura vibracional y espectros vibrónicos; Principio de Franck-Condon. Espectroscopia electrónica de moléculas poliatómicas: orbitales moleculares adaptados a la simetría; términos espetrales moleculares; reglas de selección. Fluorescencia y fosforescencia. Espectroscopia fotoelectrónica: UPS y XPS.

5. Espectroscopia de resonancia magnética.

Spin nuclear. Interacción con un campomagnético. Espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN). Niveles de energía y reglas de selección. Apantallamiento nuclear. Desplazamiento Químico. Acoplamiento spin-spin y patrones de acoplamiento.

Prácticas de laboratorio:

Se realizarán un total de 3 sesiones de 4 horas cada una, cuyos contenidos serán:

Sesión 1: Simulación de espectros vibracionales

Sesión 2: Simulación de espectros electrónicos

Sesión 3: Simulación de espectros de RMN

A lo largo de las prácticas se tendrán que realizar cálculos y simulaciones de los espectros de moléculas, y comprender y analizar los resultados obtenidos, relacionándolos con la materia vista en las sesiones de teoría. El objetivo final de las prácticas es analizar una molécula caso de acuerdo con sus propiedades espectroscópicas, siguiendo una metodología de aprendizaje basado en problemas (ABP) a través de casos.

El desarrollo es el siguiente. Las dos primeras horas se dedican a cálculos relacionados con la simulación de espectros correspondientes a cada sesión (vibracional, electrónica, 1H-NMR) para unas moléculas específicas siguiendo las instrucciones de los guiones. Se les entrega un informe que tendrán que cumplimentar y contestar, y que les sirve para valorar el nivel de comprensión de las tareas realizadas y de la calidad del trabajo. Las dos últimas horas se dedican a la molécula caso, donde se simularán las propiedades de la espectroscopia correspondiente a la sesión, de acuerdo con lo realizado y aprendido anteriormente. También servirán para discutir, organizar la información y preparar la presentación, aprovechando que los docentes estarán en el laboratorio para ayudarles en cualquier duda.

Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de Resolución de Problemas	12	0,48	2, 3, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 15, 17, 16, 18, 13, 19
Clases de Teoría	27	1,08	2, 3, 5, 6, 8, 9, 10, 12, 15, 17, 16, 19
Prácticas de Laboratorio	12	0,48	1, 2, 4, 5, 6, 8, 10, 11, 12, 14, 15, 17, 16, 18, 13, 19, 20
Seminarios	8	0,32	1, 2, 4, 5, 6, 8, 10, 11, 12, 14, 15, 18, 13, 19, 20
Tipo: Supervisadas			
Preparación del Caso	10	0,4	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 18, 13, 19, 20
Tipo: Autónomas			
Estudio personal	50	2	2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 15, 18, 13, 19
Preparación de las evidencias	5	0,2	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 14, 15, 18, 19, 20
Resolución de Problemas	18	0,72	2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 14, 15, 18, 13, 19

Las actividades pertenecen a cuatro categorías diferentes:

Clases de teoría: El docente expondrá los contenidos del temario en el aula combinando el uso de la pizarra y material multimedia que se pondrá a disposición del alumnado 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 al alumnado, 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, conectando los fundamentos teóricos vistos en las sesiones de teoría 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 alumnado.

Sesiones de laboratorio: Las sesiones prácticas presentarán al alumnado 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, el alumnado de todos los grupos se dividirá en cuatro 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 docentes cualificados. Para todas las sesiones de laboratorio, el guión de laboratorio estará disponible en el "Aula Moodle". El alumnado debe llevar su propia copia (impresa o electrónica) 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, el alumnado será convocado en la sala de ordenadores. Al final de cada sesión práctica, el alumnado entregará un informe que servirá de autoevaluación sobre el nivel de comprensión de la tarea terminada y la calidad del trabajo realizado. En cada sesión de prácticas, el alumnado realizará, en grupos, una práctica final donde se aplicarán las técnicas desarrolladas anteriormente a una molécula concreta (caso) y hacer un análisis de las propiedades espectroscópicas de ésta, siguiendo de este modo una metodología de aprendizaje basado en problemas (ABP) a través de casos. Los grupos harán frente a los docentes una exposición de este trabajo final, que será la nota correspondiente a la parte de prácticas.

Trabajo personal: El trabajo personal del alumnado 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 asignará al alumnado para que se trabaje por sí mismo. En estos casos, se pondrá a disposición del alumnado horas de consultas personales (tutorías) que ayuden a consolidar los conocimientos adquiridos.

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.

Evaluación

Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Evidencias	15%	2	0,08	2, 4, 5, 6, 9, 11, 14, 15, 18, 13, 19
Examen Final	60%	3	0,12	2, 3, 5, 6, 9, 11, 14, 15, 18, 13, 19
Exámenes Parciales	60%	3	0,12	2, 3, 5, 6, 9, 11, 14, 15, 18, 13, 19
Prácticas de laboratorio	25%	0	0	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 14, 17, 16, 18, 13, 19, 20

La evaluación puede basarse en una modalidad de evaluación continuada o, por aquel alumnado que se haya acogido a ella, en una modalidad de evaluación única.

La modalidad de evaluación continuada incluye los siguientes elementos:

1. Exámenes parciales: Se realizarán dos exámenes parciales escritos. Se requiere una nota mínima de 4/10 en cada parcial para promediar con el resto de actividades de evaluación de la asignatura (60%).
2. Prácticas de laboratorio: Se resolverá un "caso" determinado, en grupos de 4 personas. El alumnado deberá trabajar y analizar, utilizando software de química cuántica y bases de datos espectroscópicas, las propiedades espectroscópicas de las moléculas propuestas. Deberán presentar la molécula caso en una exposición oral corta y responder a las preguntas frente a los docentes. La nota reflejará tanto la calidad de los resultados como la presentación y las respuestas individuales del alumnado. Se requiere una nota mínima de 4/10 para promediar con el resto de actividades de evaluación de la asignatura (25%).
3. Evidencias: Se propondrán unas pruebas de tipo test que se resolverán en el aula y que se realizarán a lo largo del curso (15%).

Se programará un examen de recuperación para el alumnado que no haya obtenido una nota mínima de 4/10 en los exámenes parciales. Sólo será necesario recuperar el parcial (o parciales) con la nota inferior a 4/10. El alumnado que desee mejorar su nota puede realizar el examen final de recuperación, pero al hacerlo renuncia a la calificación obtenida en los exámenes parciales y asume la calificación del examen final.

En la modalidad de evaluación continuada, para aprobar la asignatura, el alumnado debe conseguir una competencia suficiente en los aspectos prácticos y teóricos de la asignatura. La calificación final se obtendrá de la media ponderada de las notas de los exámenes parciales, prácticas y evidencias. La asignatura de Espectroscopía se supera con una calificación total de 5/10.

La modalidad de evaluación única (sólo para aquel alumnado que se haya acogido a ella) consistirá en:

1. Examen final escrito, equivalente a los exámenes primer y segundo parcial, que se realizará el mismo día que se haga el segundo parcial en la modalidad de evaluación continuada. Se requiere una nota mínima de

5/10 para promediar con las prácticas de laboratorio (75%).

2. Prácticas de laboratorio. La parte de prácticas de laboratorio será idéntico a los de la evaluación continuada, es decir, realización de las prácticas según el calendario establecido, y presentación de la molécula caso el día que corresponda (25%).

Se programará un examen de recuperación para el alumnado que no haya obtenido una nota mínima de 5/10 en el examen final, que se realizará el mismo día que se haga el examen de recuperación en la modalidad de evaluación continuada. Se deberá obtener una nota mínima de 5/10 para promediar con las prácticas de laboratorio.

En la modalidad de evaluación única, para aprobar la asignatura, el alumnado debe conseguir una competencia suficiente en los aspectos prácticos y teóricos de la asignatura. La calificación final se obtendrá de la media ponderada de las notas del examen final y de las prácticas de laboratorio. La asignatura de Espectroscopia se supera con una calificación total de 5/10.

ALUMNADO NO EVALUABLE

El alumnado que no se presente a un mínimo de un 25% de los ítems de evaluación propuestos, la calificación final será de NO EVALUABLE.

ADVERTENCIA IMPORTANTE SOBRE LAS PRÁCTICAS DE LABORATORIO:

La asistencia a las prácticas de laboratorio es obligatoria y aquel alumnado que no asista a alguna sesión de éstas sin motivo no superará la asignatura.

Cualquier estudiante que esté involucrado en un incidente que pueda tener consecuencias graves en materia de seguridad puede ser expulsado del laboratorio y suspender la asignatura.

Bibliografía

Llibros de Texto Básicos:

- 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

Las prácticas de laboratorio se llevarán a cabo con el programa Gaussian16 por los cálculos y Gausview6 para la construcción y visualización de moléculas.

Lista de idiomas

Nombre	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(PAUL) Prácticas de aula	1	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(PAUL) Prácticas de aula	2	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(PLAB) Prácticas de laboratorio	1	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(PLAB) Prácticas de laboratorio	2	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(PLAB) Prácticas de laboratorio	3	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(PLAB) Prácticas de laboratorio	4	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(PLAB) Prácticas de laboratorio	5	Catalán	segundo cuatrimestre	tarde
(PLAB) Prácticas de laboratorio	6	Catalán	segundo cuatrimestre	tarde
(PLAB) Prácticas de laboratorio	7	Catalán	segundo cuatrimestre	tarde
(PLAB) Prácticas de laboratorio	8	Catalán	segundo cuatrimestre	tarde
(SEM) Seminarios	1	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(SEM) Seminarios	2	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(SEM) Seminarios	3	Catalán	segundo cuatrimestre	tarde
(SEM) Seminarios	4	Catalán	segundo cuatrimestre	tarde
(TE) Teoría	1	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(TE) Teoría	2	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto