

Titulación	Tipo	Curso
Nanociencia y Nanotecnología	OB	3

Contacto

Nombre: Vicenç Branchadell Gallo

Correo electrónico: vicenc.branchadell@uab.cat

Idiomas de los grupos

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

Prerrequisitos

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", "Cálculo", "Física General", "Química de los Elementos", "Química Orgánica", "Fenómenos Cuánticos I" y "Herramientas Matemáticas 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.

Resultados de aprendizaje

1. CM13 (Competencia) Aplicar los conocimientos químicos a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa y cualitativa, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
2. CM14 (Competencia) Trabajar de forma colaborativa planteando y organizando las tareas básicas de un laboratorio de análisis físico-químico.
3. CM15 (Competencia) Manipular los productos y residuos químicos teniendo en cuenta su impacto en la seguridad y el medioambiente.
4. KM24 (Conocimiento) Describir la interacción radiación electromagnética - materia, como base a la base de la caracterización estructural de moléculas y materiales.
5. SM21 (Habilidad) Aplicar las principales técnicas que se emplean en la identificación y caracterización de la estructura y composición de la materia.

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 polielectrónicos. 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.

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

Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Prácticas de aula	4	0,16	CM13, CM14, CM13
Sesiones de problemas	16	0,64	CM13, CM13
Sesiones teóricas	30	1,2	
Tipo: Autónomas			
Estudio personal	80	3,2	CM13, CM14, CM13
Realización de ejercicios	10	0,4	CM13, CM14, CM13

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.

Evaluación

Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Ejercicios	15	1	0,04	CM13, CM14, CM15, KM24, SM21
Exámenes	70	5	0,2	KM24, SM21
Prácticas de aula	15	4	0,16	KM24, SM21

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 parciales

El alumnado que se haya acogido a la modalidad de evaluación única deberá realizar una prueba final que consistirá en un examen de todo el temario teórico y de problemas de la asignatura. Esta prueba se realizará el día en que los estudiantes de la evaluación continua hacen el examen del segundo parcial. La calificación del estudiante será:

Nota de la asignatura = (Nota de la prueba final · 85 + Nota de laboratorio · 15)/100

Si la nota final no llega a 5, el estudiante tiene otra oportunidad de superar la asignatura mediante el examen de recuperación que se celebrará en la fecha que fije la coordinación de la titulación. En esta prueba se podrá recuperar el 85% de la nota correspondiente a la parte de teoría y problemas. La parte de prácticas no es recuperable.

La realización y la evaluación de las prácticas se hará en los mismos términos que para los alumnos de evaluación continuada.

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

Grupos e idiomas de la asignatura

La información proporcionada es provisional hasta el 30 de noviembre de 2025. A partir de esta fecha, podrá consultar el idioma de cada grupo a través de este [enlace](#). Para acceder a la información, será necesario introducir el CÓDIGO de la asignatura

Nombre	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(PAUL) Prácticas de aula	1	Catalán	primer cuatrimestre	tarde
(PLAB) Prácticas de laboratorio	1	Catalán	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(PLAB) Prácticas de laboratorio	2	Catalán	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(TE) Teoría	1	Catalán	primer cuatrimestre	tarde