

Titulació	Tipus	Curs
Nanociència i Nanotecnologia	OB	3

Professor/a de contacte

Nom : Vicenç Branchadell Gallo

Correu electrònic : vicenc.branchadell@uab.cat

Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

Prerequisites

No hi ha cap prerequisit obligatori però és molt aconsellable haver superat i tenir presents les assignatures "Enllaç Químic i Estructura de la Matèria", "Càlcul", "Fonaments de Matemàtiques", "Física General", "Química dels Elements", "Química Orgànica", "Fenòmens Quàntics I" i "Eines matemàtiques I".

Objectius

Aquesta assignatura està focalitzada a l'estudi i comprensió de la interacció entre la radiació electromagnètica i la matèria, i com aquesta interacció pot ser utilitzada en la caracterització estructural de molècules i materials. L'assignatura inclou alguns fonaments teòrics involucrats en la interacció radiació/matèria i d'algunes de les diferents tècniques espectroscòpiques més presents. Per a cada tipus de tècnica espectroscòpica, es pretén establir una connexió entre l'espectre i la informació estructural que se'n pot extreure. Es dona un pes especial a la simetria molecular i a la teoria de grups com a eina important per explicar determinats espectres.

Els objectius concrets de l'assignatura són els següents:

- entendre els fonaments bàsics de la interacció entre la radiació electromagnètica i la matèria.
- Entendre les regles que determinen la freqüències i les intensitats d'una transició.
- Saber com aplicar aquest coneixement per resoldre quantitativament i qualitativament problemes químics amb l'ajuda de l'espectroscòpia molecular.

Resultats d'aprenentatge

- CM13 (Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa i qualitativa, incloent-hi, en casos necessaris, l'ús de fonts bibliogràfiques.) Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa i qualitativa, incloent-hi, en casos necessaris, l'ús de fonts bibliogràfiques.
- CM14 (Treballar de forma col·laborativa plantejant i organitzant les tasques bàsiques d'un laboratori d'anàlisi fisicoquímica.) Treballar de forma col·laborativa plantejant i organitzant les tasques bàsiques d'un laboratori d'anàlisi fisicoquímica.
- CM15 (Manipular els productes i els residus químics tenint-ne en compte l'impacte en la seguretat i el medi ambient.) Manipular els productes i els residus químics tenint-ne en compte l'impacte en la seguretat i el medi ambient.
- KM24 (Descriure la interacció radiació electromagnètica - matèria com a base de la caracterització

estructural de molècules i materials.) Descriure la interacció radiació electromagnètica - matèria com a base de la caracterització estructural de molècules i materials.

- SM21 (Aplicar les principals tècniques que s'utilitzen en la identificació i la caracterització de l'estructura i la composició de la matèria.) Aplicar les principals tècniques que s'utilitzen en la identificació i la caracterització de l'estructura i la composició de la matèria.

Continguts

Tema 1. Introducció a l'espectroscòpia

Poblacions dels nivells energètics: Llei de distribució de Boltzmann. Radiació electromagnètica. Absorció i emissió estimulades. Regla de selecció. Espectrofotòmetre. Amplada de bandes. Fonts de radiació. Làsers. Espectroscòpia de transformada de Fourier.

Tema 2. Espectres de rotació i vibració de molècules diatòmiques

Moviment nuclear en una molècula diatòmica. Aproximació de Born-Oppenheimer. Rotor rígid. Nivells rotacionals i espectre de rotació. Oscil·lador harmònic i nivells vibracionals. Estructura fina de les bandes vibracionals. Distorsió centrífuga i anharmonicitat. Acoblament vibració-rotació. Energia de dissociació

Tema 3. Simetria molecular

Operacions i elements de simetria. Eixos de rotació. Plans de simetria i eixos de rotació impròpia. Producte d'operacions de simetria. Grups puntuals de simetria. Conseqüències de la simetria: polaritat i quiralitat

Tema 4. Teoria de grups.

Operacions de simetria i matrius. Caràcters de les matrius. Classes de simetria. Taules de caràcters. Simetria dels orbitals atòmics. Representacions reductibles i irreductibles. Combinacions lineals adaptades a la simetria. Integrals a tot l'espai i regles de selecció.

Tema 5. Espectres de vibració de molècules poliatòmiques

Moviment dels nuclis en una molècula poliatòmica: rotació i vibració. Modes normals de vibració. Regles de selecció en espectres IR. Simetria i regles de selecció. Determinació dels modes normals a partir de la simetria. Espectres IR i interaccions moleculars. Espectroscòpia Raman. Espectroscòpia Raman rotacional. Espectroscòpia Raman vibracional. Regles de selecció i simetria.

Tema 6. Espectres electrònics.

Espectres atòmics. Termes espectrals en àtoms polieletrònics. Termes espectrals, nivells i estats. Termes espectrals en molècules diatòmiques. Estructura vibracional de les bandes electròniques. Principi de Franck-Condon. Fluorescència i fosforescència. Dissociació i predissociació. Espectres electrònics de molècules poliatòmiques.

Tema 7. Espectres de ressonància magnètica

Introducció a la ressonància magnètica nuclear. Regles de selecció en espectres RMN. Model vectorial. Apantallament i desplaçament químic. Acoblament spin-spin. Equivalència química i equivalència magnètica. RMN i processos químics. RMN de transformada de Fourier. Relaxació longitudinal i transversal. Espectres RMN de nuclis amb $I \geq 1$. Espectres RMN en sòlids. Espectres de ressonància de spin electrònic. Acoblament hiperfí.

Pràctiques d'aula informàtica

1. Espectroscòpia vibracional

2. Espectroscòpia electrònica

Activitats formatives i Metodologia

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Realització d'exercicis	10	0,4	CM13, CM14
Estudi personal	80	3,2	CM13, CM14
Sessions de problemes	16	0,64	CM13
Pràctiques d'aula	4	0,16	CM13, CM14
Sessions teòriques	30	1,2	

L'assignatura constarà de tres tipus d'activitats docents:

1. Classes teòriques

El professor desenvoluparà els continguts de l'assignatura de manera presencial o virtual, d'acord amb el que en tot moment determinin les autoritats acadèmiques. Tot el contingut de les classes teòriques estarà disponible prèviament al campus virtual.

2. Classes de Problemes

Per a cada tema es proposaran diversos problemes que s'hauran de resoldre per part dels alumnes, amb la supervisió del professor. En les classes de problemes es resoldran els dubtes que hagi pogut generar la resolució dels problemes.

3. Pràctiques d'aula informàtica

Simulació d'espectres d'algunes molècules utilitzant els mètodes de la Química Quàntica.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, perquè l'alumnat completi les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura.

Avaluació

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exàmens	70	5	0,2	KM24, SM21
Pràctiques d'aula	15	1	0,04	CM13, CM14, CM15, KM24, SM21
Exercicis	15	4	0,16	KM24, SM21

Exàmens

Al llarg del curs es realitzaran dos exàmens parcials. Els pesos d'aquests exàmens en la nota final seran del 40% i del 30%, respectivament, de manera que el conjunt dels dos exàmens parcials representarà el 70% de la nota final.

La nota mínima d'un examen parcial que permet calcular la mitjana del curs és de 4. Si no s'arriba a aquests mínims, al final del curs es poden recuperar un o els dos exàmens parcials. La nota obtinguda en la recuperació reemplaçarà la nota obtinguda en el primer intent. També és possible presentar-se a les recuperacions per millorar nota. En aquest cas l'última nota obtinguda en cada parcial és la que preval. Per tenir dret a presentar-se a una recuperació és obligatori haver-se presentat als dos exàmens parcials.

Treball de seguiment

Al llarg del curs es recolliran un cert nombre de proves del seguiment de l'alumne (problemes resolts individualment o en grup, proves curtes d'aula, etc). La nota mitjana d'aquests proves representarà el 15% de la nota final

Pràctiques d'aula

Al llarg del curs es realitzaran dues pràctiques d'aula obligatòries. El resultat d'aquestes pràctiques s'avaluarà mitjançant una prova específica que representarà el 15% de la nota final

En aquesta assignatura, no es permet l'ús de tecnologies d'Intel·ligència Artificial (IA) en cap element d'avaluació. Qualsevol treball que inclogui fragments generats amb IA serà considerat una falta d'honestedat acadèmica i pot comportar una penalització parcial o total en la nota de l'activitat, o sancions majors en casos de gravetat.

En cada element d'avaluació no presencial, la nota obtinguda serà contrastada amb una entrevista amb el professor. Això afectarà entre el 10 i el 20 % de l'alumnat en cada element d'avaluació. El resultat d'aquesta entrevista prevaldrà sobre la nota obtinguda inicialment.

La realització de qualsevol irregularitat en un acte d'avaluació (fraud acadèmic, plagi o ús indegut de la IA, tret

que aquest ús estigui autoritzat expressament a la guia docent), que pugui conduir a una variació significativa de la qualificació, suposa que aquest acte es qualificarà amb un 0. En cas que la guia docent prevegi que per superar l'assignatura sigui requisit imprescindible haver obtingut una nota mínima en aquest acte d'avaluació o que es produeixin diverses irregularitats en els actes d'avaluació d'una mateixa assignatura, la qualificació final d'aquesta assignatura és 0. Al marge d'això, es podrà instruir un procés disciplinari a l'estudiant que incorri en alguna d'aquestes irregularitats.

Els requisits per superar l'assignatura són:

1. La nota de cada examen parcial ha de ser igual o superior a 4
2. La nota mitjana de l'assignatura ha de ser igual o superior a 5
3. La realització de les pràctiques d'aula és obligatòria

L'assignatura es considerarà no avaluable si no s'ha fet cap dels dos exàmens parcials. Per optar a la qualificació "Matrícula d'honor" es tindran en compte de manera preferent les notes obtingudes en els exàmens parcials.

L'alumnat que s'hagi acollit a la modalitat d'avaluació única haurà de realitzar una prova final que consistirà en un examen de tot el temari teòric i de problemes de l'assignatura. Aquesta prova es realitzarà el dia en què els estudiants de l'avaluació contínua fan l'examen del segon parcial. La qualificació de l'estudiant serà:

Nota de l'assignatura = (Nota de la prova final · 85 + Nota de laboratori · 15)/100

Si la nota final no arriba a 5, l'estudiant té una altra oportunitat de superar l'assignatura mitjançant l'examen de recuperació que se celebrarà en la data que fixi la coordinació de la titulació. En aquesta prova es podrà recuperar el 85% de la nota corresponent a la part de teoria y problemes. La part de pràctiques no és recuperable.

La realització i l'avaluació de les pràctiques es farà en els mateixos termes que per als alumnes d'avaluació continuada.

Si en algun dels exàmens parcials no s'arriba a la nota mínima exigida però la nota global calculada segons els pesos de cada element d'avaluació és igual o superior a 5, la nota final de l'assignatura serà 4,5.

Bibliografia

Textos Bàsics:

- P. Atkins, J. de Paula, *Atkins. Química Física*, 8a Ed., Ed. Panamericana , 2008. Disponible electrònicament.
- 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 electrònicament.

Textos especialitzats:

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

Programari

GaussView 6.0 i Gaussian-16

Grups i idiomes de l'assignatura

La informació proporcionada és provisional fins al 30 de novembre.
A partir d'aquesta data, podreu consultar l'idioma de cada grup a

través d'aquest [enllaç](#). Per accedir a la informació, caldrà introduir el CODI de l'assignatura

Tipus de docència	Grup	Idioma	Semestre	Torn
(TE) Teoria	1	Català	primer quadrimestre	tarda
(PAUL) Pràctiques d'aula	1	Català	primer quadrimestre	tarda
(PLAB) Pràctiques de laboratori	1	Català	primer quadrimestre	matí-mixt
(PLAB) Pràctiques de laboratori	2	Català	primer quadrimestre	matí-mixt