

Implementació d'aplicacions web interactives per a l'aprenentatge de conceptes complexos

Ajuts per a projectes d'Innovació i Millora Docent (2014PID-UB/020)

Informe final · 20.2.2015

Annexos

Objectiu general del PID: Implementar l'ús docent de l'aplicació web interactiva ESPECTRE (<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>) per a la comprensió i l'aprenentatge del concepte de quantització de l'energia.

Assignatures: Anàlisi Instrumental (Grau de CTA) i Tècniques Instrumentals (Grau de Farmàcia) del curs 2013/2014

Coordinador: Josep M. Campanera Alsina

Professors participants: Jordi Borrell; Victòria Girona; Marisa García; M. Antònia Egea; Axel Bidon-Chanal

a) Material a l'inici del PID

Annex I. Pantalles de l'aplicació ESPECTRE.

Annex II. Enquesta sobre l'ús de la web interactiva ESPECTRE?
(alumnes)

Annex III. Enquesta sobre la implementació de la web
interactiva ESPECTRE? (professors)

Annex IV. Tasca 1. Deducció d'un espectre hipotètic.

Annex V. Fitxa de la planificació inicial del PID.

b) Material resultant del PID

Annex VI. Pantalles de la nova aplicació ESPECTRE i nous punts
d'accés.

Annex VII. Tasca 1. Deducció de l'espectre d'un sistema
hipotètic.

Annex VIII. Tasca 2. Deducció de l'espectre de l'hidrogen.

Annex IX. Tasca 3. Deducció de l'espectre de vibració del CO.

Annex X. Tasca 4. Deducció de l'espectre de vibrorotació de
l'HCl.

Annex XI. Certificat de presentació d'un pòster a les 8enes
Trobadres de Professorat de Ciències de la Salut de la UB (4, 5 i
6 de Febrer de 2015)

Annex XII. Pòster a les 8enes Trobadres de Professorat de
Ciències de la Salut de la UB (4, 5 i 6 de Febrer de 2015)

Annex XIII. Resum presentat a les 8enes Trobadres de
Professorat de Ciències de la Salut de la UB (4, 5 i 6 de Febrer
de 2015)

Annex I. Pantalles de l'aplicació ESPECTRE.

Què és un espectre?

A.La quantització de l'energia

Resolució de l'equació d'Schrödinger per un sistema químic hipotètic

$E(n) = \text{Factor energètic} \cdot \text{Factor de quantització}$

Unitats d'energia:

Factor energètic

Entre 1 i 1000000 cm-1

Factor de quantització:

B.La intensitat de les transicions

Degeneració:

Regla de selecció (absorció):

Regla de selecció (emissió):

Temperatura, K:

Limit detecció senyal, %:

Limitació només a 10 nivells d'energia

C.Aspecte real dels espectres

Aspecte real

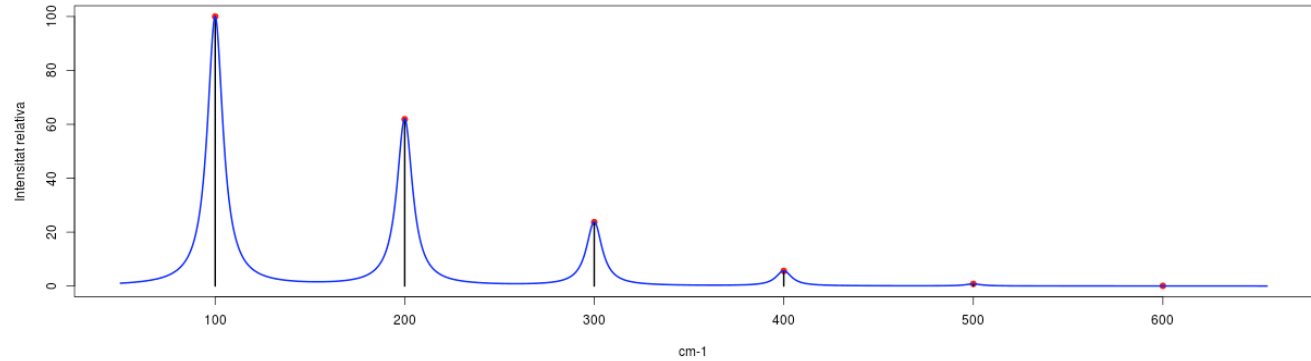
Resolució:

Eix d'abscisses,x:

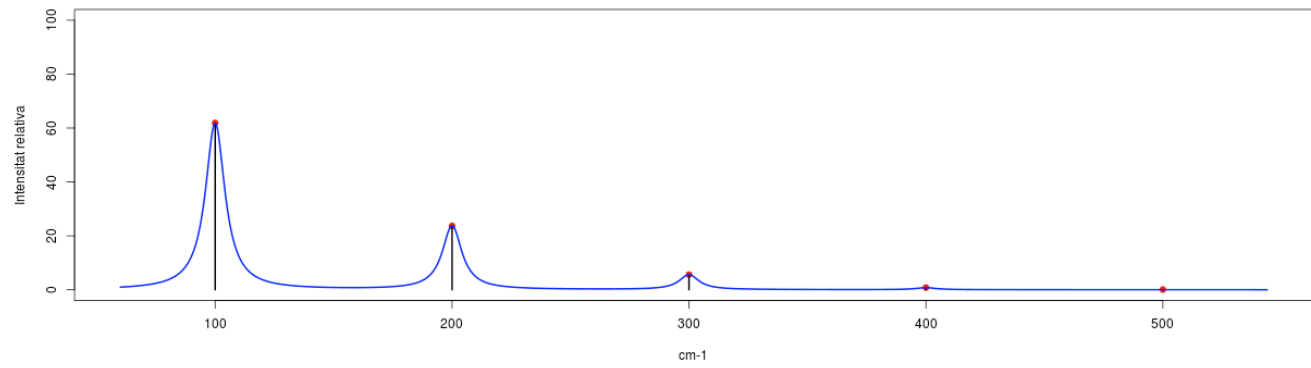
- Els espectres simulats
- [Pas 1. L'equació energètica](#)
 - [Pas 2. La taula d'energies i el diagrama Gotrian](#)
 - [Pas 3. Les transicions d'absorció](#)
 - [Pas 4. L'espectre d'absorció](#)
 - [Pas 5. I l'espectre d'emissió?](#)
- [Com simulo? Ajuda!](#)

Tècniques Instrumentals, Facultat de Farmàcia, UB. campanera@ub.edu. 2013

Espectre d'absorció



Espectre d'emissió



cm-1

Factor energètic

50

Entre 1 i 1000000 cm-1

Factor de quantització:

n*(n+1)

B.La intensitat de les transicions

Degeneració:

Cap

Regla de selecció (absorció):

+1

Regla de selecció (emissió):

-1

Temperatura, K:

300

Limit detecció senyal, %:

0.01

Limitació només a 10 nivells d'energia

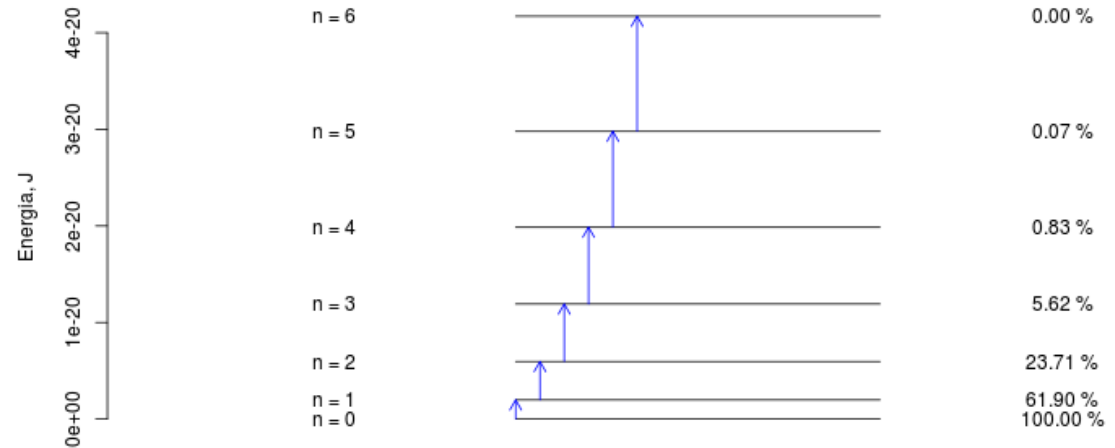
C.Aspecte real dels espectres Aspecte real

Resolució:

10

Eix d'abscisses,x:

	inici	final				1	%	relativa
Absorció 1	0	1	0.000000e+00	1.986000e-21	1.986000e-21	100.00	100.00	100.00
Absorció 2	1	2	1.986000e-21	5.958000e-21	3.972000e-21	200.00	61.90	61.90
Absorció 3	2	3	5.958000e-21	1.191600e-20	5.958000e-21	300.00	23.71	23.71
Absorció 4	3	4	1.191600e-20	1.986000e-20	7.944000e-21	400.00	5.62	5.62
Absorció 5	4	5	1.986000e-20	2.979000e-20	9.930000e-21	500.00	0.83	0.83
Absorció 6	5	6	2.979000e-20	4.170600e-20	1.191600e-20	600.00	0.07	0.07



Taula de transicions agrupada, útil en cas de diverses transicions amb els mateixos valors energètics. Cal recalcular les intensitats de les transicions.

Annex II. Enquesta sobre l'ús de la web interactiva ESPECTRE? (alumnes)

Questionari sobre l'ús de la web interactiva ESPECTRE?
<http://glimmer.rstudio.com/campa/espectre3>

Tècniques Instrumentals (Farmàcia) i Anàlisi Instrumental (CTA), 2013-2014

- 1. A classe.** a) Has utilitzat l'aplicació durant la classe? Sí/No
b) en cas de no, per quina raó?
c) en cas afirmatiu, amb quin dispositiu? i quantes vegades?
d) en cas afirmatiu, en què t'ha estat útil?

- 2. Fora de classe.** a) Has utilitzat l'aplicació a casa o fora de classe? Sí/No
b) en cas de no, per quina raó?
c) en cas afirmatiu, amb quin dispositiu? i quantes vegades?
d) en cas afirmatiu, en què t'ha estat útil?

- 3. Conceptes.** En l'aprenentatge de quins conceptes penses que l'aplicació t'ha ajudat més?
(1-4: 1, poc i 4, molt)

Concepte	Puntuació
	1-4
1. Quantització de l'energia a escala atòmica	
2. L'equació Schrödinger expressa la quantització de la matèria	
3. L'espectroscòpia (interacció llum-matèria) posa de relleu la quantització de l'energia	
4. La interpretació dels espectres per la determinació estructural	
5. Les diferents unitats de l'espectroscòpia	
6. L'espectre una gràfica d'energia (eix d'abscisses, x) front a intensitat (eix d'ordenades, y)	
7. Les transicions energètiques	
8. La diferència entre un espectre d'absorció i un d'emissió	
9. La relació entre la intensitat, el poblament, les regles de selecció.	
10. La relació entre l'energia de les transicions i l'espaiat energètic	

- 4. Incidència.** En què t'ha ajudat més l'aplicació? (Escull-ne una!)
a) en seguir les classes.
b) en autoavaluar els coneixements i les tasques.
c) en realment entendre els conceptes.
d) en motivar-me per l'assignatura.

- 5. Millors.** Com milloraries l'aplicació? Què hi trobes a faltar? Què hi sobra?

- 6. Futures aplicacions.** Quins altres conceptes de Química-Física penses que una aplicació d'aquestes característiques podria ajudar al teu aprenentatge?

- 7. Avaluació final.** En general, l'aplicació t'ha ajudat a l'aprenentatge del concepte de quantització? Sí/no, i en quin grau de l'1 al 4:
quina valoració en fas?

Annex III. Enquesta sobre la implementació de la web interactiva ESPECTRE? (professors)

Questionari sobre la implementació de la web interactiva ESPECTRE?

Projecte d'Innovació docent 2014PID-UB/020

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

Nom Professor:

Assignatura:

Grup:

Data:

1. Ús del professor. Quantes vegades has utilitzat l'aplicació durant les classes presencials?

I per quins conceptes o temes específics has usat l'aplicació?

Has recomanat l'ús de l'aplicació a fora de classe?

2. Conceptes. En l'ensenyament de quins conceptes penses que l'aplicació t'ha ajudat més?
(1-4: 1, poc i 4, molt)

Concepte	Puntuació 1-4
1. Quantització de l'energia a escala atòmica	
2. L'equació Schrödinger expressa la quantització de la matèria	
3. L'espectroscòpia (interacció llum-matèria) posa de relleu la quantització de l'energia	
4. La interpretació dels espectres per la determinació estructural	
5. Les diferents unitats de l'espectroscòpia	
6. L'espectre una gràfica d'energia (eix d'abcisses, x) front a intensitat (eix d'ordenades, y)	
7. Les transicions energètiques	
8. La diferència entre un espectre d'absorció i un d'emissió	
9. La relació entre la intensitat, el poblament, les regles de selecció.	
10. La relació entre l'energia de les transicions i l'espaiat energètic	

4. Incidència. En què t'ha ajudat més l'aplicació? (Escull-ne dues)

- a) en fer que les classes se seguissin més.
- b) en fer autoavaluar els coneixements treballats a classe.
- c) en fer entendre realment els conceptes.
- d) en motivar per l'assignatura.

Penses que és una eina per usar a classe o per fer en classes pràctiques o per autoavaluació de l'estudiant?

5. Millores d'implementació. Després de l'experiència, com penses que s'hauria d'implementar una aplicació interactiva com aquesta? Com ho has fet i com ho faries de cara l'any vinent? Quines possibilitats o potencialitats penses que presenta?

6. Millores tècniques. Com milloraries tècnicament l'aplicació? Què hi trobes a faltar? Què hi sobra?

7. Futures aplicacions. Quins altres conceptes de fisicoquímica podrien ser treballats mitjançant una aplicació d'aquestes característiques?

8. Avaluació i reflexió final. En general, l'aplicació t'ha ajudat a l'ensenyament del concepte de quantització? Sí/no, i en quin grau de l'1 al 4:
quina valoració/reflexió global en fas?

Annex IV. Tasca 1. Deducció de l'espectre d'un sistema hipotètic (versió inicial).

Tasca 3. Deducció d'un espectre

Suposa que la resolució de l'equació d'Schrödinger ($H\Psi=E\Psi$) d'un sistema d'una partícula d'ona: $E = A \cdot n(n+1)$

A (constant) = 20000 nm (500 cm^{-1}), h (constant de Planck) = $6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$; c (velocitat llum) = $3 \cdot 10^{10} \text{ cm/s}$ i n (nombre quàntic) = 0, 1, 2, 3 ...etc.

Dedueix l'espectre d'absorció i d'emissió a $T = 1000\text{K}$ i sabent que la regla de selecció és $\Delta n = \pm 1$.

Passos	Com?
1. Taula de valors d'energia en funció d' n	Per cada n , substituir a l'equació quàntica d' E . Comprovar la coherència de les unitats!
2. Diagrama d'energia, Gotrian	Dibuixar a escalar les energies.
3. Calcular les poblacions de cada estat d'energia	Aplicar l'equació de Boltzman respecte l'estat fonamental N_0 . $K=1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/k}$ $N_1 / N_0 = \exp(-\Delta E / KT)$, N_2/N_0 , N_3/N_0 ... Només hi ha transicions a partir d'estats poblats!
4. Calcular les transicions.	Restar les energies de dos estats energètics tenint en compte les regles de selecció. Passar les energies de J a λ
5. Graficar aquestes transicions en un espectre $I (N_r/N_0)$ vs λ .	En les intensitats tenir en compte les poblacions. Les transicions en λ .

Usa <http://glimmer.rstudio.com/campa/espectre3b> per a l'autoavaluació

Usa <http://glimmer.rstudio.com/campa/espectre3c> per a l'autoavaluació

Annex V. Fitxa de la planificació inicial del PID.

Implementació d'aplicacions web interactives per a l'aprenentatge de conceptes complexos

Ajuts per a projectes d'Innovació i Millora Docent (PMID)- 2013

- Fitxa: Planificació inicial
- Competència: Capacitat d'aprendre a aprendre (Competència transversal a Farmàcia)
Capacitat d'avaluar les tècniques instrumentals (Competència pròpia de l'assignatura)
- Títol acció: Implementació d'aplicacions web interactives per a l'aprenentatge de conceptes complexos
- Responsables: Josep Maria Campanera Alsina, grup M1
- Data Versió: 11.11.13
- Descripció breu: Implementar l'ús docent de l'aplicació web interactiva *ESPECTRE* (<http://glimmer.rstudio.com/campa/espectre>) per a la comprensió i l'aprenentatge del concepte de quantització de l'energia i fonament de l'espectroscòpia.

1) Contextualització

1a) De l'assignatura

-Nom de l'assignatura:	Tècniques Instrumentals
-Codi de l'assignatura:	362275
-Tipologia de l'assignatura:	Obligatòria (entre de formació bàsica, obligatòries i optatives)
-Ensenyament:	Grau de Farmàcia
-Curs/semestre:	Segon semestre del segon any d'entre 5 anys.
-Lloc impartició:	Facultat de Farmàcia
-Pla d'estudis:	2008 adaptat al Pla Bolonya
-Curs acadèmic:	2013-2014
-Coordinació:	Ma. Victòria Girona Brumós
-Departament coordinador:	Fisicoquímica (Facultat de Farmàcia), no participen altres departaments
-Crèdits ECTS:	6
-Hores estimades de dedicació	Activitats presencials (60h), Treball tutelat (30h) i Aprenentatge autònom (60h)
-Nombre aprox. d'alumnes totals 2013/14:	300
-Nombre aprox. de grups i alumnes per grup 2013/14:	5/60
-Nombre de professors en les classes magistrals	4
-Aplicació de l'acció	En els 5 grups de l'assignatura

1b) De l'acció

- Títol	Implementació d'aplicacions web interactives per a l'aprenentatge de conceptes complexos
- Tipus intervenció:	Durant el desenvolupament

<ul style="list-style-type: none"> ○ A l'inici ○ Durant el desenvolupament - Intervenció majoritària en activitats: <ul style="list-style-type: none"> ○ Presencials ○ Tutelades ○ D'aprenentatge autònom - Finalitat: <ul style="list-style-type: none"> ○ Intervenció en la millora de la motivació i definició d'objectius ○ Millora de les activitats d'ensenyament-aprenentatge ○ Millora en les activitats d'avaluació - Nombre d'hores presencials: - Nombre d'hores d'autoaprenentatge 	<ul style="list-style-type: none"> ○ Al tancament ○ Continua <p>Presencials amb implicació per l'aprenentatge autònom</p> <p>Millora de les activitats d'ensenyament-aprenentatge amb forta impacte a la motivació</p> <p>2</p> <p>4</p>
--	--

2) Competències i objectius específics

2a) Competència

Capacitat d'aprendre a aprendre (Competència transversal a Farmàcia)

Capacitat d'avaluar les tècniques instrumentals (Competència pròpia de l'assignatura)

2b) Objectius específics de la competència (alumnes)

<i>Coneixements</i>	<i>Procediments</i>	<i>Actituds</i>
2b1) Comprendre l'origen de la quantització de l'energia i de l'espectroscòpia. Aquest concepte és fonamental per la interpretació i aplicació dels espectres en el camp de la determinació estructural.	2b2) Crear espectres a partir d'una funció vinguda de la resolució de l'equació d'Schrödinger d'un sistema químic hipotètic	2b3) incorporar les tecnologies de la informació i la comunicació en el procés d'aprenentatge acceptant el seu rol de catalitzadores de l'aprenentatge.

Conceptes a treballar:

-Equació d'Schrödinger (Unitats d'energia/ factor energètic i factor de quantització,).

- Les transicions (taules d'energia i el diagrama de Gotrian, poblament, regles de selecció en absorció i emissió, temperatura, la senyal relativa, límit de detecció de la senyal)

- Els espectres (eix d'abcisses i eix d'ordenades, aspecte real d'un espectre i resolució)

2c) Objectius específics del professor

<i>Personals</i>	<i>Docents</i>
------------------	----------------

2c1) Formar-se en la implementació d'aplicacions web (explorar les vies d'implementació)

2c2) Avaluar l'impacte de la implementació en la motivació de l'alumnat
2c3) Recollir millores tècniques en l'aplicació
<http://glimmer.rstudio.com/campa/espectre>
per millorar l'aprenentatge i implementar-les l'any vinent.

3) Activitats d'ensenyament-aprenentatge

3a) Alumne o alumne/professor

<i>Codi</i>	<i>Activitat E/A</i>	<i>Tipologia</i>	<i>Descripció</i>	<i>Materials</i>	<i>Resultat aprenentatge /Objectiu específic</i>
3a1)	Presentació aplicació (1h)	Presencial	Sessió expositiva coincidint amb Espectroscòpia Atòmica. Presentació de les capacitats de l'aplicació. Espectre d'absorció atòmic de l'àtom d'H. Factor de quantització ($-1/n^2$)	Aplicació i haver estimulat dies previs la presència de dispositius mòbils (mòbils, tauletes i portàtils) a classe.	2b1, 2b2 i 2b3
3a2)	Interacció autònoma a casa (2h)	Treball autònom	Realitzar un primer espectre de forma manual amb l'avaluació de l'aplicació (factor de quantització senzill, n)	Ibid i Powerpoint presentador de la tasca.	2b1, 2b2 i 2b3
3a3)	Ús per als espectres de rotació (30 min)	Presencial/ autònom	Ús de l'aplicació en el tema d'espectroscòpia rotacional (microones). Factor de quantització ($n(n+1)$)	ibid	2b1, 2b2 i 2b3
3a4)	Interacció autònoma a casa (1 h)	Treball autònom	L'efecte de la temperatura i el factor energètic en els espectres de rotació.	ibid	2b1, 2b2 i 2b3
3a5)	Ús per als	Presencial/	Ús de l'aplicació en	ibid	2b1, 2b2 i 2b3

	espectres de vibració (30 min)	autònom	el tema d'espectroscòpia vibracional (IR). Factor de quantització (n+1/2)		
3a6)	Interacció autònoma a casa (1h)	Treball autònom	Multiples transicions de la mateixa energia i les regles de selecció.	ibid	2b1, 2b2 i 2b3

3b) Professor únicament.

<i>Codi</i>	<i>Activitat E/A</i>	<i>Tipologia</i>	<i>Descripció</i>	<i>Materials</i>	<i>Resultat aprenentatge /Objectiu específic</i>
3b1)	Planificació acció	Planificació	Planificar objectius, activitats i avaluació	Fitxa de la planificació	-
3b2)	Tres sessions d'ús de l'aplicació	Implementació	Treballar els espectres atòmics, de rotació i de vibració.	Aplicació.	2c1, 2c2, 2c3
3b3)	Avaluació global	Avaluació	En base a l'experiència a classe, l'enquesta i l'examen avaluar l'impacte de l'acció	Fitxa d'avaluació	2c1, 2c2, 2c3

3c) Programació. Temporalització

<i>Activitat /Mes</i>	<i>Gener 14</i>		<i>Febrer 2014</i>		<i>Març 2014</i>		<i>Abril 2014</i>		<i>Maig 2014</i>		<i>Juny 2014</i>	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
Quinzena												
3a1												
3a2												
3a3												
3a4												
3a5												
3a6												
3b1												
3b2												
3b3												

4) Avaluació

4a) Avaluació continuada de l'assoliment de la competència en l'acció (alumne).

<i>Codi</i>	<i>Objectiu específic o resultat d'aprenentatge</i>	<i>Acció avaluadora</i>	<i>Descripció</i>	<i>Materials</i>
2b1	Conceptes	Qüestionari i Qüestions a l'examen		Examen global.
2b2	Habilitats	Correcció de l'espectre hipotètic amb factor de quantització n.		
2b3	Actituds	Qüestionaris de valoració de l'experiència.		Qüestionari 2

4b) Avaluació continuada de la implementació de l'acció (professor)

<i>Codi</i>	<i>Objectiu específic o resultat d'aprenentatge</i>	<i>Acció avaluadora</i>	<i>Descripció</i>	<i>Materials</i>
2c1	Formació personal	Reflexió inicial i final de l'experiència. Avaluació de les enquestes.	Creació d'un diari personal de l'acció docent amb reflexions sobre el seu desenvolupament. Més èxit com a eina de classe o com a eina d'autoaprenentatge? Quina és la millor implementació	Llibreta i Enquesta
2c2	Recollida evidències	Anàlisi de les enquestes d'avaluació		Enquesta
2c3	Millores tècniques	Llistat de millores tant del professor com de l'alumne.	Seguiment i apunt de les millores en una llibreta	Enquesta i llibreta

Annex VI. Pantalles de la nova aplicació ESPECTRE i nous punts d'accés.

Què és un espectre?

[Simula l'espectre](#)

A.La quantització de l'energia

Resolució de l'equació d'Schrödinger per un sistema químic hipotètic

$E(n) = \text{Constant energètica} * \text{Factor de quantització}$

Unitats d'energia:

cm-1

Constant energètica

50

Entre 1 i 1000000 cm-1

Factor de quantització:

$n*(n+1)$

B.La intensitat de les transicions

Degeneració:

Cap

Regla de selecció (absorció):

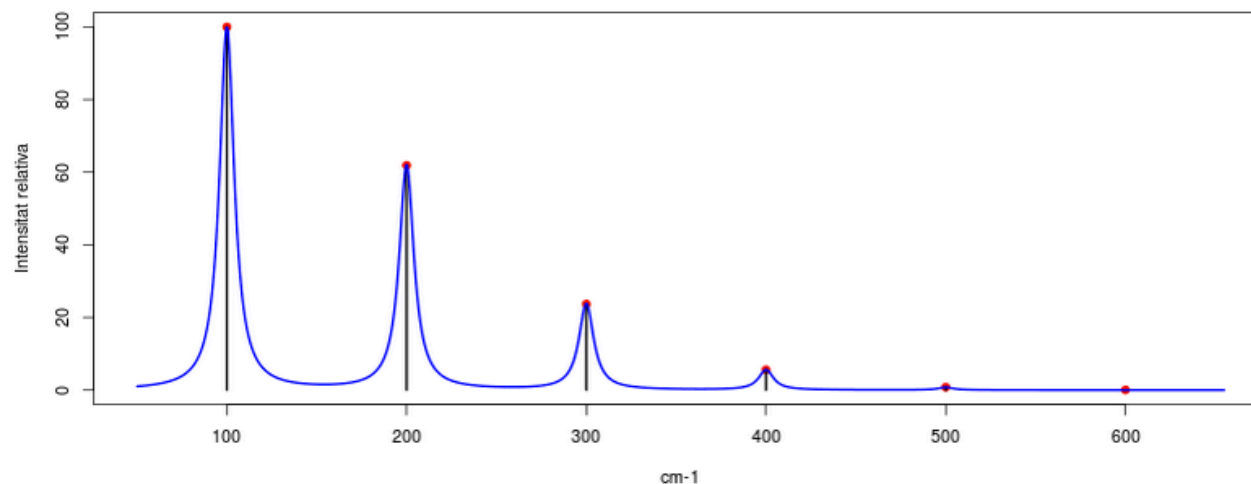
+1

Regla de selecció (emissió):

[Els espectres simulats](#)[Pas 1. L'equació energètica](#)[Pas 2. La taula d'energies i el diagrama Gotrian](#)[Pas 3. Les transicions d'absorció](#)[Pas 4. L'espectre d'absorció](#)[Pas 5. I l'espectre d'emissió?](#)[Com funciona l'aplicació?](#)[Com simulo? Ajuda!](#)

Tècniques Instrumentals i Anàlisi Instrumental. Facultat de Farmàcia. UB. Josep M. Campanera. campanera@ub.edu. 2013. Projecte d'Innovació Docent 2014PID-UB/020

Espectre d'absorció



BETA

Què és un espectre?

A.La quantització de l'energia

Resolució de l'equació d'Schrödinger per un sistema químic hipotètic

$E(n) = \text{Constant energètica} \cdot \text{Factor de quantització}$

Unitats d'energia:

Constant energètica

Entre 1 i 1000000 cm-1

Factor de quantització:

B.La intensitat de les transicions

Degeneració:

Regla de selecció (absorció):

Regla de selecció (emissió):

[Els espectres simulats](#)
[Pas 1. L'equació energètica](#)
[Pas 2. La taula d'energies i el diagrama Gotrian](#)

[Pas 3. Les transicions d'absorció](#)
[Pas 4. L'espectre d'absorció](#)
[Pas 5. I l'espectre d'emissió?](#)

[Com simulo? Ajuda!](#)

L'aplicació calcula inicialment l'espaiat energètic a partir de l'equació quantitzada construïda d'una constant energètica i un factor de quantització que determina la tipologia d'espectroscòpia que estem simulant (atòmica, vibracional, rotacional), Part A. Posteriorment calcula el poblament dels nivells d'energia per cada nombre quàntic a la temperatura seleccionada segons Maxwell-Boltzmann. Finalment calcula totes les transicions (diferències energètiques) entre nivells d'energia poblats i tenint en compte el compliment de les regles de selecció escollides i la degeneració dels nivells energètics, part B. Les diferències energètiques són tractades segons la llei fonamental de l'espectroscòpia i convertides a les unitats d'energia adients, les intensitats de les transicions són proporcionals al poblament del nivell d'energia inicial. Finalment en la part C podem donar un aspecte més realístic als senyals ajustant la resolució i el límit de detecció de l'aparell així com l'escala de l'eix d'abscisses i ordenades.

1) LLEI FONAMENTAL DE L'ESPECTROSCÒPIA

$$\Delta E_{\text{transició}}(J) = E(n_f) - E(n_i) = h\nu = hc\bar{\nu} = h\frac{c}{\lambda}$$

On ν és la freqüència (s^{-1}), $\bar{\nu}$ és el nombre d'ona (cm^{-1}), λ és la longitud d'ona (cm), h és la constant de Planck $6.6261 \cdot 10^{34} \text{ J}\cdot\text{s}$,

Simula l'espectre

A. La quantització de l'energia

Resolució de l'equació d'Schrödinger per un sistema químic hipotètic

$E(n) = \text{Constant energètica} * \text{Factor de quantització}$

Unitats d'energia:

cm⁻¹

Constant energètica

50

Entre 1 i 1000000 cm⁻¹

Factor de quantització:

$n*(n+1)$

B. La intensitat de les transicions

Degeneració:

Cap

Regla de selecció (absorció):

+1

Regla de selecció (emissió):

-1

Temperatura, K:

300

[Pas 3. Les transicions d'absorció](#)
[Pas 4. L'espectre d'absorció](#)
[Pas 5. I l'espectre d'emissió?](#)
[Com funciona l'aplicació?](#)

Com simulo? Ajuda!

Podem simular espectres d'absorció i emissió atòmics, IR i microones.

A. ATÒMICS:

Simulació de l'espectre d'hidrogen.

-Unitats d'energia: nm (Habituals en espectroscòpia electrònica)

-Constant energètica: 91.1267 nm (això és la constant de Rydberg per l'hidrogen en nm)

-Factor de quantització: $-1/n*n$ (igual que a l'equació de Rydberg)

-Regles de selecció +1,+2,+3,+4 i en negatiu per emissió. No tenim limitació.

-Temperatura: 15000 K. Una mica alt ho sé, però sino no s'observen transicions d'emissió només d'absorció.

-Limit detecció senyal, %: 0.0001. Per veure els senyals d'emissió. Els senyals d'absorció serien extremadament més intenses que les d'emissió.

-Eix abscisses, x: 0,1000 per veure les transicions més energètiques. Vaja les que s'observen!

-Eix d'ordenades, y: 0,0.1 per veure els senyals petits d'emissió. Amb comparació a l'absorció, l'emissió és molt petita.

En l'espectre d'emissió en aquestes condicions es veuen senyals de:

-Sèrie de Lyman (1) els de més a l'esquerre:

5-->1 94.92 nm

4-->1 97.20 nm

3-->1 102.52 nm

2-->1 121.50 nm

-Sèrie de Balmer (2) al mig:

5-->2 433 nm

Simula l'espectre

A.La quantització de l'energia

Resolució de l'equació d'Schrödinger per un sistema químic hipotètic

$E(n) = \text{Constant energètica} \cdot \text{Factor de quantització}$

Unitats d'energia:

cm-1

Constant energètica

50

Entre 1 i 1000000 cm-1

Factor de quantització:

$n \cdot (n+1)$

B.La intensitat de les transicions

Degeneració:

Cap

Regla de selecció (absorció):

+1

Regla de selecció (emissió):

-1

Temperatura, K:

300

Pas 3. Les transicions d'absorció

Pas 4. L'espectre d'absorció

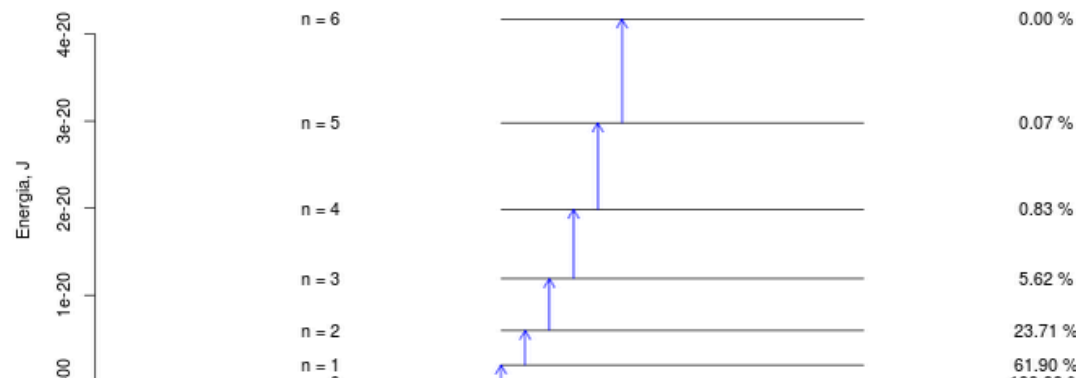
Pas 5. I l'espectre d'emissió?

Com funciona l'aplicació?

Com simulo? Ajuda!

Calculem les transicions, és a dir les diferències energètiques, en Joules preferiblement, entre nivells energètics final i inicials que compleixen amb les regles de selecció. En l'espectroscòpia que aquí simulem només hi ha transicions des de nivells energètics poblats. Passem aquests valors a les unitats energètiques d'interès, normalment en cm-1 o nm.

	n inici	n final	Energia i, J	Energia f, J	Transició, J	Transició, cm-1	Població, %	Intensitat relativa
Absorció 1	0	1	0.000000e+00	1.986000e-21	1.986000e-21	100.00	100.00	100.00
Absorció 2	1	2	1.986000e-21	5.958000e-21	3.972000e-21	200.00	61.90	61.90
Absorció 3	2	3	5.958000e-21	1.191600e-20	5.958000e-21	300.00	23.71	23.71
Absorció 4	3	4	1.191600e-20	1.986000e-20	7.944000e-21	400.00	5.62	5.62
Absorció 5	4	5	1.986000e-20	2.979000e-20	9.930000e-21	500.00	0.83	0.83
Absorció 6	5	6	2.979000e-20	4.170600e-20	1.191600e-20	600.00	0.07	0.07



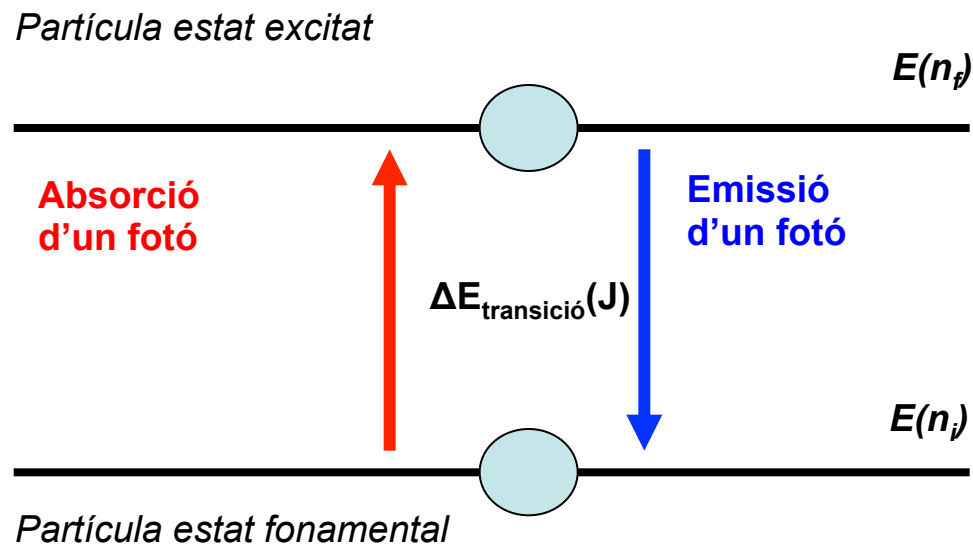
Annex VII. Tasca 1. Deducció de l'espectre d'un sistema hipotètic (versió final).

Tasca 1. Deducció d'un espectre d'una resolució hipotètica de l'equació Schrödinger

Llei Fonamental de l'Espectroscòpia: $\Delta E_{\text{transició}}(\text{J}) = E(n_f) - E(n_i) = h\nu = hc\bar{\nu} = h\frac{c}{\lambda}$

ν , freqüència, s^{-1} ; $\bar{\nu}$, nombre d'ona, cm^{-1} ; λ , longitud d'ona, cm ; c , velocitat de la llum, $\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$

$E(n_f)$, energia del nivell energètic final de nombre quàntic n_f i $E(n_i)$ energia inicial amb n_i



Tasca 1. Deducció d'un espectre. Planteig del problema.

Objectiu 1. Dedueix l'espectre d'absorció d'un sistema hipotètic amb $E=A \cdot n(n+1)$

Suposa que la resolució de l'equació d'Schrödinger ($H\Psi=E\Psi$) d'un sistema d'una partícula dóna: $E = A \cdot n (n + 1)$

A (constant) = 500 cm^{-1} (20000 nm), h (constant de Planck) = $6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$; c (velocitat llum) = $3 \cdot 10^{10} \text{ cm/s}$ i n (nombre quàntic) = $0, 1, 2, 3 \dots$ etc.

Dedueix l'espectre d'absorció a $T = 1000\text{K}$ sabent que la regla de selecció és $\Delta n = +1$.

$$E_{\text{sistema},n} = An(n+1) \qquad \Delta E_{\text{transició},n} = E(n_f) - E(n_i) = A(n_f(n_f+1) - n_i(n_i+1)) = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

Objectiu 2. Usa l'aplicació ESPECTRE per autoavaluar la tasca anterior i fer l'espectre d'emissió amb $\Delta n = -1$.

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

Tasca 1. Deducció d'un espectre. Planteig del problema.

Passos	Com?
1. Taula de valors d'energia en funció d' <i>n</i>	Per cada <i>n</i> , substituir a l'equació quàntica d'energia. Treballar en unitats de J. Comprovar la coherència de les unitats.
2. Diagrama d'energia	Dibuixar a escalar les energies. Això és l'estructura energètica del sistema químic.
3. Calcular les poblacions de cada estat d'energia (eix <i>Y</i>)	<p>Aplicar l'equació de Boltzman respecte l'estat fonamental <i>n</i>=0.</p> <p>On $P_n/P_{n=0}$ és el percentatge de població en el nivell excitat <i>n</i> respecte el nivell fonamental <i>n</i>=0. <i>K</i> és la constant de Boltzman $1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K, <i>T</i> la temperatura i $E_f - E_{n=0}$ és la diferència energètica en Joules entre el nivell energètic <i>n</i> i el nivell energètic <i>n</i>=0. Recorda, només hi ha transicions a partir d'estats poblats!</p> $\frac{P_n}{P_{n=0}} = e^{\frac{-(E_n - E_{n=0})}{KT}}$
4. Dibuixar i calcular les transicions (eix <i>X</i>)	Dibuixar amb fletxes les transicions d'absorció permeses. Això és el diagrama de Grotrian. Restar les energies de dos estats energètics tenint en compte les regles de selecció. Passar les energies de J a λ .
5. Graficar aquestes transicions en λ vs $P_n/P_{n=0}$	L'eix de les abscisses (<i>x</i>) seran les transicions i l'eix de les ordenades (<i>y</i>) les intensitats o poblacions del nivell de partida.

Tasca 1. Deducció d'un espectre. Càlcul de l'espaiat energètic i poblacions (passos 1,3, i 4)

1. Constants

	Valor	Unitats
Esaiat energètic	$A h c n (n+1) J$	
A	20000 nm	
A	$5.00E+02 \text{ cm}^{-1}$	
c	$3.00E+10 \text{ cm/s}$	
h	$6.62E-34 \text{ J s}$	
K	$1.38E-23 \text{ J k}$	
T	1000 k	
1 cm	$1.00E+07 \text{ nm}$	

2. Diagrama d'energia

n	n(n+1)	E/hc(cm ⁻¹)	E (J)	Nn/No
0	0	0	0.00E+00	1.00
1	2	1000	1.99E-20	0.24
2	6	3000	5.96E-20	0.01
3	12	6000	1.19E-19	0.00
4	20	10000	1.99E-19	0.00
5	30	15000	2.98E-19	0.00
6	42	21000	4.17E-19	0.00
7	56	28000	5.56E-19	0.00

3. Transicions absorció

n	n+1	E, inicial, n, J	E, final, n+1, J	$\Delta E, J$	$\lambda, \text{ nm}$	cm-1	Intensitat, P_r/P_0
0	1	0.00E+00	1.99E-20	1.99E-20	10000	1000	1.0000
1	2	1.99E-20	5.96E-20	3.972E-20	5000	2000	0.2371
2	3	5.96E-20	1.19E-19	5.958E-20	3333	3000	0.0133

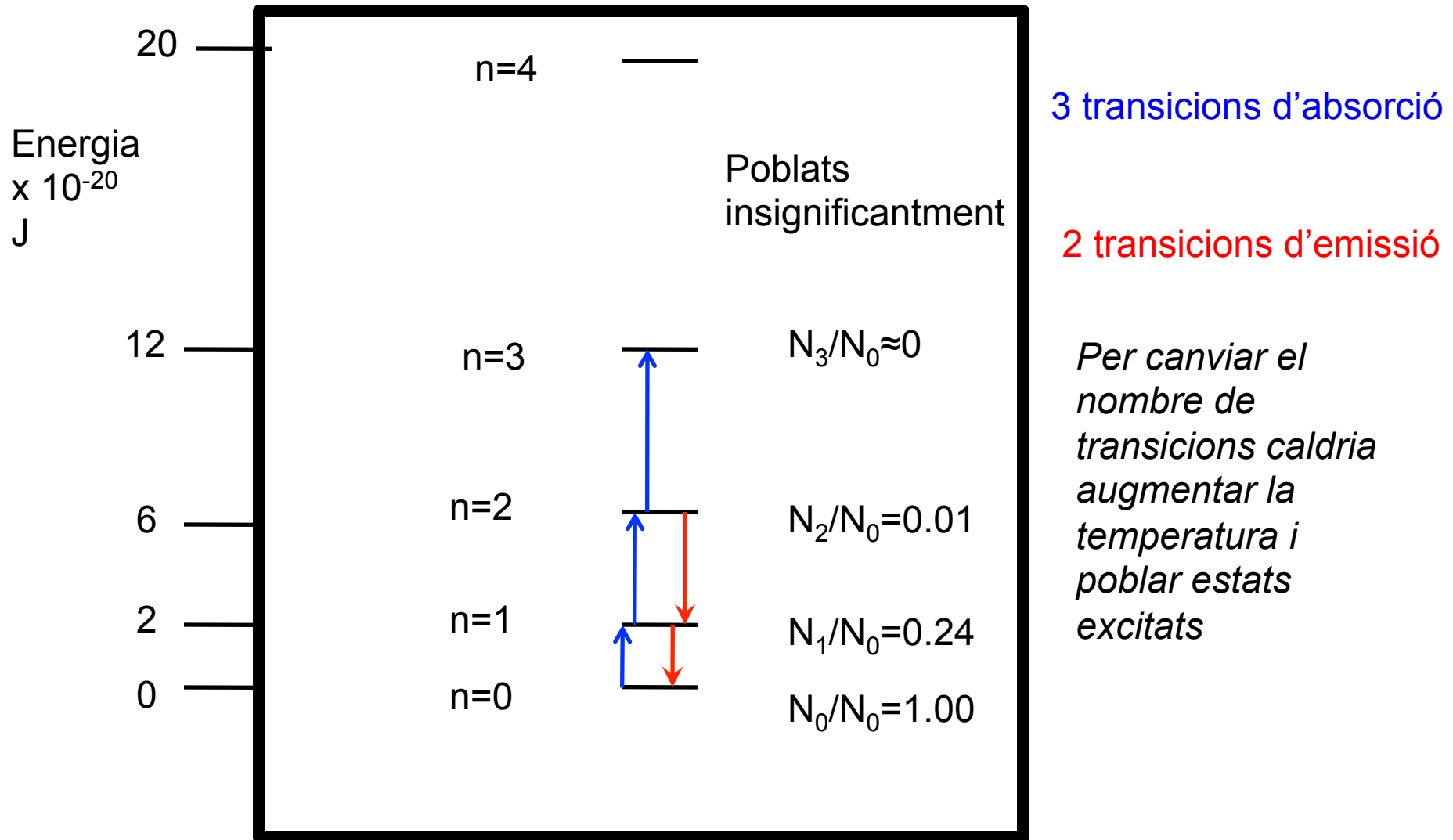
4. Transicions emissió

n	n-1	E, inicial, n	E, final, n-1	$\Delta E, J$	$\lambda, \text{ nm}$	cm-1	Intensitat P_r/P_0
1	0	1.99E-20	0.00E+00	1.986E-20	10000	1000	0.24
2	1	5.96E-20	1.99E-20	3.972E-20	5000	2000	0.01

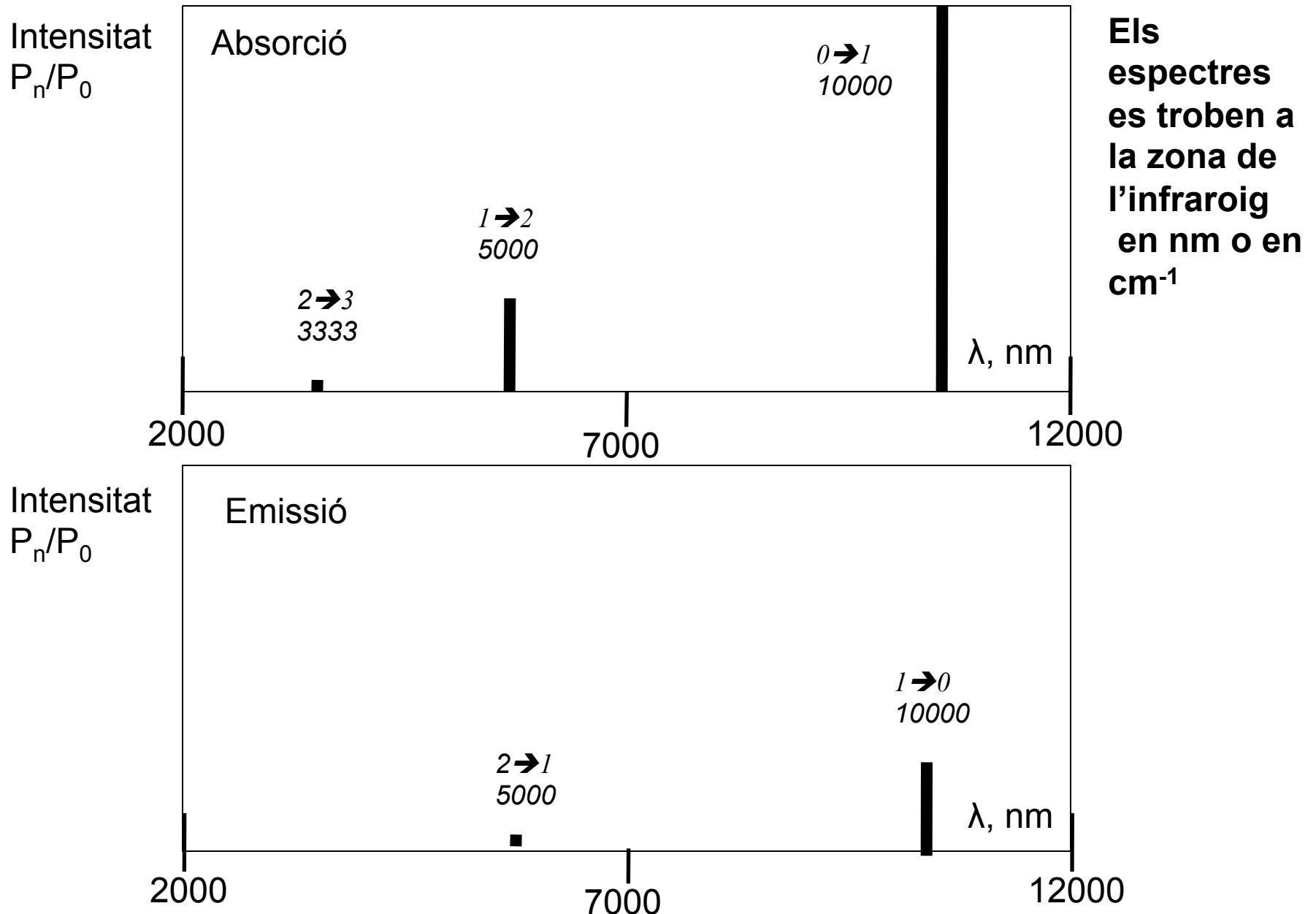
Tasca 1. Deducció d'un espectre. Diagrama de Grotrian (passos 2 i 4)

Regla de selecció $\Delta n = \pm 1$

Diagrama d'energia o diagrama de Grotrian



Tasca 1. Deducció d'un espectre. Espectres d'absorció i emissió (pas 5).



Tasca 1. Deducció d'un espectre. Ús de l'aplicació ESPECTRE.

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

Resolució equació
Schrödinger.

$$E_{\text{sistema},n} = An(n+1)$$

\longleftrightarrow \longleftrightarrow

Constant energètica, A

Factor de
quantització
 $n(n+1)$

Simulem l'espectre amb l'App!

- Unitats d'energia: cm^{-1} (habituals en IR) o bé nm (habituals a l'UV-visible)
- Constant energètica: A, 500 cm^{-1} si hem escollit cm^{-1} o 20000 nm pel cas de treballar en nm. Atenció, en tots els casos cal treballar sempre en J! Els nm no són directament proporcionals a l'energia i per tant no poden ser usats sense conversió.
- Factor de quantització: $n(n+1)$
- Regles de selecció: absorció +1
- Degeneració: Cap
- Temperatura: 1000 K .
- Aspecte real: Desactivem la casella inicialment.

Important! El simulador només usa la llei fonamental de l'espectroscòpia aplicades a l'equació provinent d'Schrödinger, les regles de selecció escollides i la llei de Boltzman per al distribució de poblacions! Res més!

Tasca 1. Deducció d'un espectre. Ús de l'aplicació ESPECTRE.

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

- 1) Ens fixem en l'absorció, seguim el Pas 1. L'equació energètica, Pas 2. La taula d'energies i el Pas 3. Les transicions d'absorció, Pas 4. Espectre d'absorció. Coincideixen amb els teus valors? Quants nivells energètics pobleu? Quantes transicions i senyals tenim? En quina zona de l'espectre electromagnètic apareix aquest espectre? Quin aparell doncs usaries per mesurar aquestes transicions?
- 2) Quants senyals tenim d'emissió respecte l'absorció? A què es deu aquesta reducció? Fixa't en el Pas 5. I l'espectre d'emissió?
- 3) Ara reduïm el límit de detecció de l'aparell a 1%. Què ha passat? Les característiques de l'aparell poden ajudar a trobar més senyals?
- 4) Ara reduïm la temperatura a 100 K. Com han canviat els senyals? I si l'augmentem a 5000 K? Per què? Fixa't en els poblaments del diagrama de Grotrian.
- 5) Ara activem l'aspecte real (això és el que es veuria en un aparell). Què ha passat amb els senyals? A què podria ser degut? Si disminuïm la resolució de l'aparell (a 100) com es veuen ara els senyals? I si finalment actives l'opció "sense transicions teòriques"?
- 6) Com són els espectres si redueixo la constant energètica a 20 cm^{-1} ? Quantes transicions hi ha? I en l'espectre real quantes en veuria? Per què?

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

Tasca 1. Deducció d'un espectre. Ús de l'aplicació ESPECTRE.

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

1) Ens fixem en l'absorció, seguim el Pas 1. L'equació energètica, Pas 2. La taula d'energies i el Pas 3. Les transicions d'absorció, Pas 4. Espectre d'absorció. Coincideixen amb els teus valors? Quants nivells energètics pobleu? Quantes transicions i senyals tenim? En quina zona de l'espectre electromagnètic apareix aquest espectre? Quin aparell doncs usaries per mesurar aquestes transicions?

Els valors han de coincidir, si hi ha alguna diferència és deguda al diferent límit de detecció. Tenim 4 nivells energètics poblats (0,1,2,3), 4 transicions i 4 senyals. Els senyals apareixen entre 1000 i 4000 cm^{-1} , a la zona de l'IR. Un Espectrofotòmetre d'IR.

2) Quantes senyals tenim d'emissió respecte l'absorció? A què es deguda aquesta reducció? Fixa't en el Pas 5. I l'espectre d'emissió?

3 senyals, ara partim dels estats excitats i només n'hi ha 3 de poblats.

3) Ara reduïm el límit de detecció de l'aparell a 1%. Què ha passat? La sensibilitat de l'aparell pot ajudar a trobar més senyals?

Passem a 3 senyals d'absorció i 2 d'emissió. Efectivament sí. Aparells que detectin senyals menys intenses ens donen més informació estructural.

Tasca 1. Deducció d'un espectre. Ús de l'aplicació ESPECTRE.

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

4) Ara reduïm la temperatura a 100 K. Com han canviat els senyals? I si l'augmentes a 5000 K? Per què? Fixa't en els poblaments del diagrama de Grotrian.

A 100 K només tenim un senyal d'absorció i cap d'emissió. A 5000 K en tenim 6 i 5 respectivament. El poblament dels nivells energètics és fonamental per l'espectroscòpia.

5) Ara activem l'aspecte real (això és el que es veuria en un aparell). Què ha passat amb els senyals? A què podria ser degut? Si disminuïm la resolució (a 100) de l'aparell com es veuen ara els senyals?

Això és el que veuríem en un aparell. Si disminuïm la resolució les bandes s'eixamplen i perdem capacitat de diferenciar els senyals i per tant d'extreure informació estructural. L'origen de l'eixamplament és multifactorial.

6) Com són els espectres si redueixo la constant energètica a 20 cm^{-1} ? Quantes transicions hi ha? I en l'espectre real quantes en veuria? Per què?

En absorció tenim 10 nivells energètics poblats, 10 transicions i 10 senyals equiseparats. Ara bé amb la resolució de l'aparell actual només veuríem una sola banda. Si tinguéssim un aparell de major resolució si que aconseguiríem diferenciar-les. Prova una resolució de 10 (o menor), per exemple.

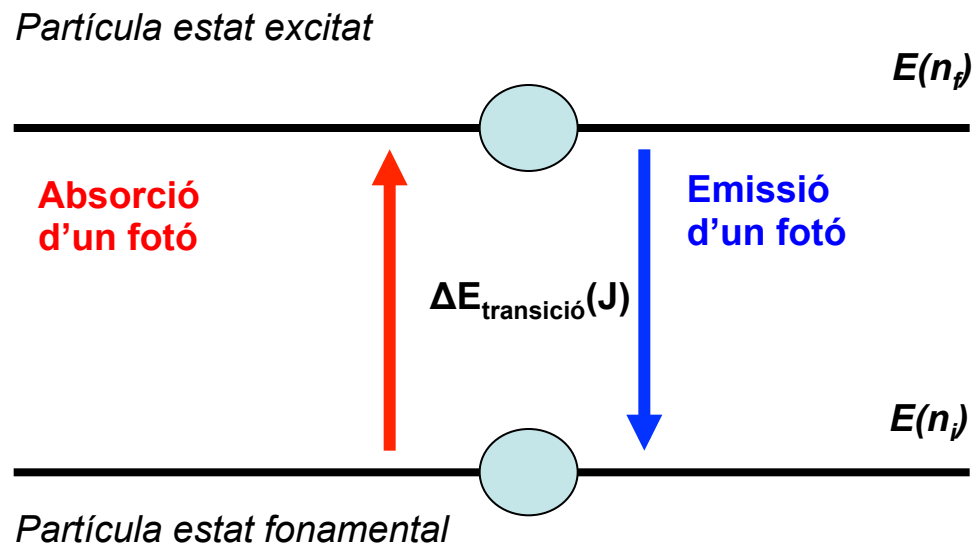
Annex VIII. Tasca 2. Deducció de l'espectre d'hidrogen.

Tasca 2. Espectre d'emissió de l'hidrogen.

Llei Fonamental de l'Espectroscòpia: $\Delta E_{\text{transició}}(\text{J}) = E(n_f) - E(n_i) = h\nu = hc\bar{\nu} = h\frac{c}{\lambda}$

ν , freqüència, s^{-1} ; $\bar{\nu}$, nombre d'ona, cm^{-1} ; λ , longitud d'ona, cm ; c , velocitat de la llum, $\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$

$E(n_f)$, energia del nivell energètic final de nombre quàntic n_f i $E(n_i)$ energia inicial amb n_i



Tasca 2. Espectre d'emissió de l'hidrogen. Objectius i planteig del problema.

Objectiu 1. Dedueix la sèrie de Balmer ($n_i \rightarrow n_f=2$) de l'espectre de l'hidrogen atòmic.

L'energia dels nivells atòmics hidrogenoides ve donada per l'equació de Rydberg

$$E_{\text{atòmica},n} = -\frac{mZ^2e^4}{8h^2\epsilon_0^2} \frac{1}{n^2} = -R_h \frac{Z^2}{n^2} \quad \Delta E_{\text{atòmica},n} = R_h Z^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

On R_h és la constant de Rydberg ($2.1798 \cdot 10^{-18}$ J), Z el nombre atòmic (1 per l'hidrogen), n el nombre quàntic principal (n_i i n_f són l'inicial i el final en una transició), h és la constant de planck ($6.62 \cdot 10^{-34}$ J s), c la velocitat de la llum ($3.0 \cdot 10^8$ m/s), ν és la freqüència (s^{-1} o Hz) i λ la longitud d'ona (nm).

Objectiu 2. Usa l'aplicació ESPECTRE per simular l'espectre d'emissió l'hidrogen i distingir les diferents sèries. Estudia també l'efecte de la temperatura.

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

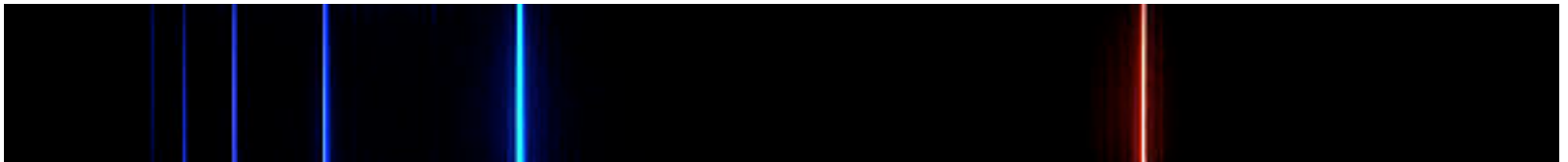
Tasca 2. Espectre d'emissió de l'hidrogen. Planteig del problema.

Donada la sèrie de Balmer de l'espectre d'emissió de l'hidrogen, dedueix els valors de λ a partir de l'equació de Rydberg

- 1) Caracteritza amb els tres nombres quàntics (n , l , m_l) l'estat fonamental ($n=1$) i els successius excitats ($n=2$, $n=3$...)
- 2) Dedueix la sèrie de transicions al nivell $n=2$ (Balmer). La regla de selecció, $\Delta n=0, \pm 1, \pm 2$... i $\Delta l=\pm 1$.
- 3) Aplica l'equació de Rydberg a cada transició

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_f - E_i = \frac{-R_H}{n_f^2} - \frac{-R_H}{n_i^2} \\ &= R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = h\nu = hc/\lambda \quad \text{x nm?}\end{aligned}$$

Font: Wikipedia.org
"Hydrogen spectral series" Wikipedia, The Free Encyclopedia.
Wikimedia Foundation,
22 Feb. 2015.

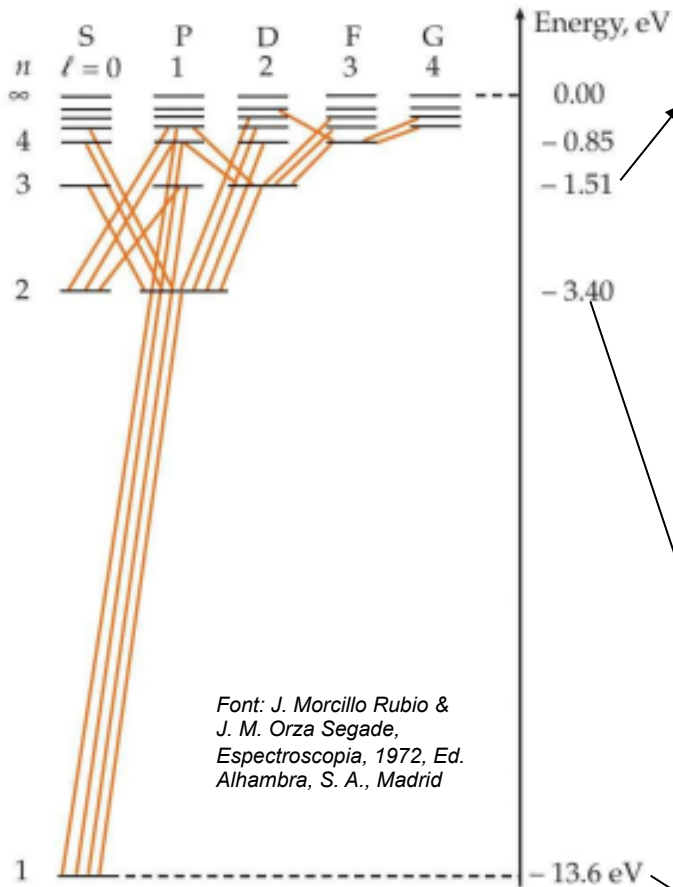


R_H , Constant de Rydberg = $2.1798 \cdot 10^{-18} \text{ J}$

$E(n_i=3) \rightarrow E(n_f=2)$

Tasca 2. Espectre d'emissió de l'Hidrogen. Els nivells energètics i la seva caracterització

n
 $l = 0 \dots +1 \dots (n-1)$
 $m_l = l \dots +1 \dots -l$



Font: J. Morcillo Rubio &
 J. M. Orza Segade,
 Espectroscopia, 1972, Ed.
 Alhambra, S. A., Madrid

$n=3, l=0, m_l=0 ; E = -R_h/n^2 = -R_h/9 = -0.24 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
 $n=3, l=1, m_l=1$
 $n=3, l=1, m_l=0$
 $n=3, l=1, m_l=-1$
 $n=3, l=2, m_l=-2$
 $n=3, l=2, m_l=-1$
 $n=3, l=2, m_l=0$
 $n=3, l=2, m_l=1$
 $n=3, l=2, m_l=2$

9 nivells energètic degenerats

$n=2, l=0, m_l=0 ; E = -R_h/n^2 = -R_h/4 = -0.54 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
 $n=2, l=1, m_l=1$
 $n=2, l=1, m_l=0$
 $n=2, l=1, m_l=-1$

4 nivells energètic degenerats

$n=1, l=0, m_l=0 ; E = -R_h/n^2 = -R_h = -2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$

$1 \text{ eV} = 1.60 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

1 nivell energètic

Tasca 2. Espectre d'emissió de l'hidrogen. El càlcul de les transicions de la línia de Balmer

Primera línia de Balmer

$$\Delta E_{n_f=3 \rightarrow n_i=2} = \frac{-R_h}{n_f^2} - \frac{-R_h}{n_i^2} = -R_h \left(\frac{1}{9} - \frac{1}{4} \right) = \frac{5}{36} R_h = 3.03 \cdot 10^{-19} J$$

$$\Delta E(J) = h (J \cdot s) \cdot \nu \left(\frac{1}{s} \right) = h (J \cdot s) \cdot \frac{c(m/s)}{\lambda(m)} \rightarrow \lambda(m) = \frac{h \cdot c}{\Delta E} = 6.46 \cdot 10^{-7} m \rightarrow \lambda(nm) = 645nm$$

Segona línia de Balmer

$$\Delta E_{n_f=4 \rightarrow n_i=2} = \frac{-R_h}{n_f^2} - \frac{-R_h}{n_i^2} = -R_h \left(\frac{1}{16} - \frac{1}{4} \right) = 4.09 \cdot 10^{-19} J$$

$$\lambda(m) = \frac{h \cdot c}{\Delta E} = 4.86 \cdot 10^{-7} m \rightarrow \lambda(nm) = 486 nm$$

Tercera línia de Balmer

$$\Delta E_{n_f=5 \rightarrow n_i=2} = \frac{-R_h}{n_f^2} - \frac{-R_h}{n_i^2} = -R_h \left(\frac{1}{25} - \frac{1}{4} \right) = 4.58 \cdot 10^{-19} J$$

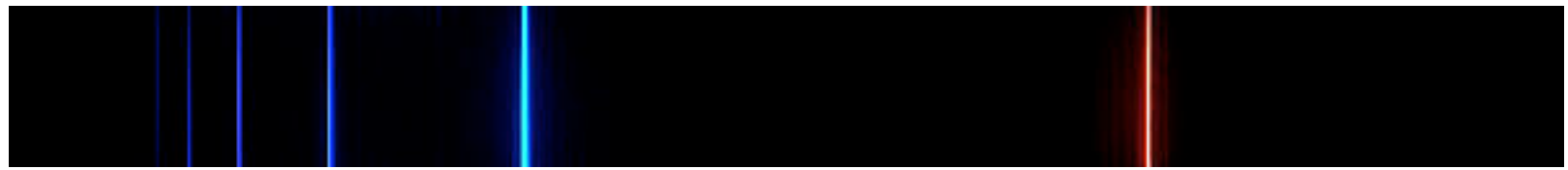
$$\lambda(m) = \frac{h \cdot c}{\Delta E} = 4.34 \cdot 10^{-7} m \rightarrow \lambda(nm) = 434 nm$$

434 nm 486 nm

Atenció!!!! No hi haurà transicions entre orbitals s o p o d ja que la regla de selecció ho prohibeix, $\Delta l = \pm 1!$ Només de p a s o de d a p. Així una transició per la primera sèrie de Balmer seria: $n=3, l=1$ fins a $n=2, l=0$

645 nm

Font: Wikipedia.org "Hydrogen spectral series" Wikipedia, The Free Encyclopedia. Wikimedia Foundation, 22 Feb. 2015.



$E_{n=5} \rightarrow E_{n=2}$

$E_{n=4} \rightarrow E_{n=2}$

$E_{n=3} \rightarrow E_{n=2}$

Tasca 2. Espectre d'emissió de l'hidrogen. Ús de l'aplicació ESPECTRE per simular tot l'espectre d'H

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

Resolució equació
Schrödinger

$$E_{atòmica,n} = -\frac{mZ^2e^4}{8h^2\epsilon_0^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{n^2} (R_h Z^2)$$

Factor de quantització Constant energètica

Paràmetres pel simulador

- Unitats d'energia: nm (Habituals en espectroscòpia electrònica)
- Constant energètica: 91.1267 nm (això és la constant de Rydberg en nm)
- Factor de quantització: $-1/n^2$ (igual que a l'equació de Rydberg)
- Degeneració: atòmica
- Regles de selecció +1,+2,+3,+4 i en negatiu per emissió. No hi tenim limitació.
- Temperatura: 15000 K. Una mica alt, però sinó no s'observen transicions d'emissió només d'absorció.
- Límit detecció senyal, %: 0.001. Per veure els senyals d'emissió.
- Eix abcisses, x: 0,1000 per veure les transicions més energètiques.
- Eix d'ordenades, y: 0,0.2 per veure els senyals petits d'emissió. En comparació a l'absorció, l'emissió és molt petita. Atenció, el simulador usa el sistema anglosaxó per la separació decimal.

Important! El simulador només usa la llei fonamental de l'espectroscòpia aplicada a l'equació provinent d'Schrödinger (equació de Rydberg), les regles de selecció escollides i la llei de Boltzman per la distribució de poblacions! Res més! L'aspecte real usa una funció d'ajust sobre les transicions teòriques.

Tasca 2. Espectre d'emissió de l'hidrogen. Visualitza i interpreta els resultats

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

1) *En l'espectre d'emissió en aquestes condicions es veuen senyals de:*

-Sèrie de Lyman ($n_i \rightarrow n_f=1$) els de més a l'esquerra:

5-->1 94.92 nm

4-->1 97.20 nm

3-->1 102.52 nm

2-->1 121.50 nm

-Sèrie de Balmer ($n_i \rightarrow n_f=2$) al mig:

5-->2 433 nm

4-->2 486 nm

3-->2 656 nm

-De la sèrie de Paschen ($n_i \rightarrow n_f=3$) tenim:

6-->3 1093 nm

Troba'ls!

Qüestions:

2) Familiaritza't amb l'estructura energètica, les poblacions dels nivells energètics, el diagrama de Grotrian i les transicions. Ves a la penstanya "l'emissió"?

3) De totes aquestes, el senyal més intens és el senyal de la sèrie de Lyman $2 \rightarrow 1$ de 121.5 nm, per què? Quin és el nivell energètic més poblat?

4) On apareix la constant de Rydberg en l'espectre d'emissió? Així és una constant? Per què? Com la van trobar els primers investigadors del segle XX?

5) Quin és l'efecte de la temperatura? Simula a 300 K i a 20.000 K (canvia l'eix d'ordenades a 0,5.0).

6) Si mesuréssim amb un aparell de baixa resolució (a 100), què veuríem? Activa l'aspecte real. I activa "Sense transicions teòriques"

7) I l'efecte de les regles de selecció? Si poses només -1 què passa?

8) Com simularies una altre àtom monoelèctric com l'He+. Què canviaries al simulador? Com ho faries?

Tasca 2. Espectre d'emissió de l'hidrogen. Visualitza i interpreta els resultats

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

Qüestions:

1) Identifiquem els senyals.

A l'espectre d'emissió els 4 pics de l'esquerre corresponen a la sèrie de Lyman, els 4 centrals a la sèrie de Balmer i l'últim a la sèrie de Paschen.

2) Familiaritza't amb l'estructura energètica, les poblacions dels nivells energètics, el diagrama de Grotrian i les transicions. Ves a les pestanyes pas 1, pas 2, pas 3 i pas 5. Alerta, l'aplicació mostra només transicions d'absorció en el pas 4.

Tenim fins a 9 nivells poblats a aquest nivell de detecció i temperatura dels quals apareixen 17 transicions d'emissió des de 94 nm fins a 87000 nm, és a dir des de l'UV-visible fins a transicions de radiofreqüència (energia molt petita). Evidentment es necessiten diferents aparells per captar tot el rang d'emissió de l'hidrogen doncs.

3) De totes aquestes, el senyal més intens és el de la sèrie de Lyman $2 \rightarrow 1$ de 121.5 nm, per què? Quin és el nivell energètic més poblat?

Efectivament, el nivell energètic més poblat és el primer excitat, és a dir $n=2$. No obstant això seria cert si tots els estats fossin igualment degenerats i això no és cert com hem vist per $n=1$, tenim un sol nivell energètic i per $n=2$ 4 i per $n=3$ fins a 9 així que afavorim nivells energètics d' n gran. Per això la línia de 1093 nm ($6 \rightarrow 3$) surt també de les més intenses.

4) On apareix la constant de Rydberg en l'espectre d'emissió? Així és una constant? Per què? Com la van trobar els primers investigadors dels segle XX?

Doncs és el límit de la sèrie de Lyman, si mesuréssim més transicions fins a n infinit arribaríem a la constant de Rydberg, 91.1267 nm. Aquesta és la longitud d'ona mínima i per tant l'energia màxima de l'espectre de l'hidrogen. És a dir el cost d'ionització de l'hidrogen. Una constant! Cal pensar que l'emissió es podia observar simplement escalfant H mentre que per l'absorció es necessitava un aparell per mesurar-la.

Tasca 2. Espectre d'emissió de l'hidrogen. Visualitza i interpreta els resultats

5) Quin és l'efecte de la temperatura? Simula a 300K i a 20.000K.

A 300 K no observem cap transició d'emissió. A 20.000K observem els mateixos senyals però més intensos. Amb un aparell de menys resolució ja seríem capaços d'observar-los. De fet els canvis principals són a les transicions de baixes energies ja que hem poblat nivells energètics molt elevats que fan transicions d'energia petita. Fixa't en el diagrama de Grotrian del pas 5.

6) Si mesuréssim amb un aparell de baixa resolució (100), què veuríem? Activa l'aspecte real i activa "Sense transicions teòriques"

Això és el que veuríem a l'espectrofotòmetre. Visca! Doncs dels 9 senyals passaríem només 3! Ups, atenció! aquí quan parlem de resolució ens referim a la mínima diferència energètica (cm^{-1} , nm, etc) entre dos senyals que pot ser distingida. Així, valors petits indiquen grans resolucions. El simulador usa el concepte de resolució espectral.

7) I l'efecte de les regles de selecció? Si poses només -1 que passa?

Disminueixen radicalment els senyals d'emissió. Només veiem 2->1 (Lyman) i de 3->2 (Balmer). Això però no correspon a la realitat! La regla de selecció no està limitada a -1!

8) Com simularies una altre àtom monoelectrònic com l'He+. Què canviaries al simulador? Com ho faries?

Ara caldria introduir $Z=2$ i la constant energètica seria 22.781675 nm . És a dir $R_h \cdot Z^2$, $4 \cdot R_h$ en cm^{-1} i $R_h/4$ en nm, és a dir $0.25 \cdot R_h = 22.78 \text{ nm}$. I atenció, hem de pujar fins a 70.000 K per veure senyals d'emissió. Això realment no és cert però aquest simulador funciona a partir dels senyals relatius respecte de l'absorció i per això cal pujar tant la temperatura. També indica que per ionitzar els àtoms més pesants cada vegada necessitem més energia.

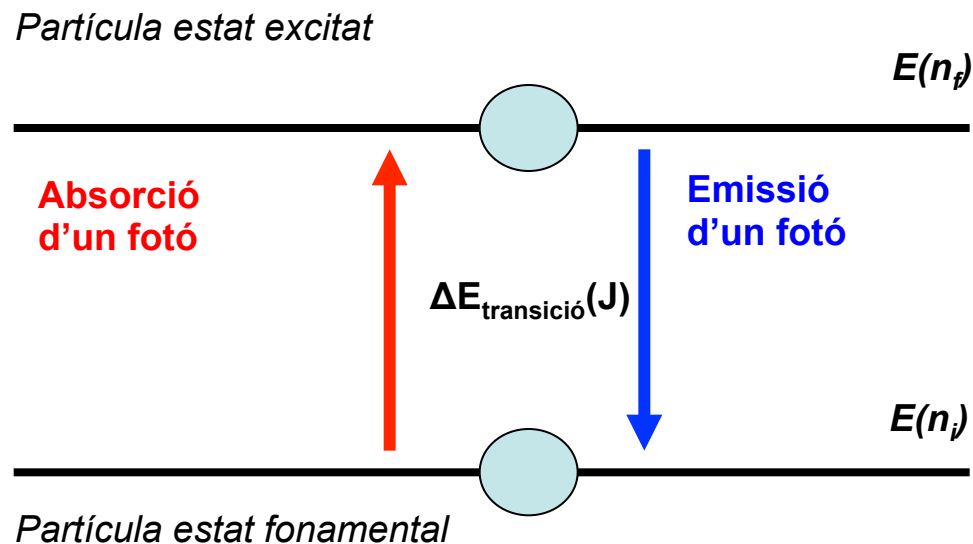
Annex IX. Tasca 3. Deducció de l'espectre de vibració del CO.

Tasca 3. Espectre de vibració del grup carbonil

Llei Fonamental de l'Espectroscòpia: $\Delta E_{\text{transició}}(\text{J}) = E(n_f) - E(n_i) = h\nu = hc\bar{\nu} = h\frac{c}{\lambda}$

ν , freqüència, s^{-1} ; $\bar{\nu}$, nombre d'ona, cm^{-1} ; λ , longitud d'ona, cm ; c , velocitat de la llum, $\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$

$E(n_f)$, energia del nivell energètic final de nombre quàntic n_f i $E(n_i)$ energia inicial amb n_i



Tasca 3. Espectre de vibració del grup carbonil. Planteig del problema.

Objectiu 1. Calcula la longitud d'ona i el nombre d'ona aproximats del pic d'absorció de la vibració de tensió del grup carbonil.

L'energia dels nivells vibracionals ve donada per

$$E_{\text{vibraciona}(v)} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \Delta E_{\text{vibracional},v} = (v_f - v_i) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

La transició principal es produirà entre $v=0$ i $v=1$. h és la constant de Planck ($6.62 \cdot 10^{-34}$ J s), μ és la massa reduïda ($m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$) i k la constant de força d'un doble enllaç (1000 N/m o Kg/s²). Compara-ho amb el valor experimental.

Objectiu 2. Usa l'aplicació ESPECTRE per veure l'aparició dels sobretons del CO i l'efecte de la temperatura.

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

Tasca 3. Espectre de vibració del grup carbonil. Càlcul de la transició.

Calculem la banda fonamental de la transició vibracional del CO:

$$\begin{aligned}\Delta E(v_i = 0 \rightarrow v_f = 1) &= (v_f + 1/2) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} - (v_i + 1/2) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \\ &= \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = h \cdot \nu\end{aligned}$$

Calculem la massa reduïda. Primer, la massa d'un àtom de carboni

$$m_c = \frac{12 \cdot 10^{-3} \text{ kg / mol}}{6.0 \cdot 10^{23} \text{ àtoms / mol}} = 2.0 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

De la mateixa manera per l'oxigen, $m_o = 2.7 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$

La massa reduïda del sistema C = O serà:

$$\mu = m_r = \frac{m_c \cdot m_o}{m_c + m_o} = \frac{2.0 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \cdot 2.7 \cdot 10^{-26} \text{ kg}}{2.0 \cdot 10^{-26} \text{ kg} + 2.7 \cdot 10^{-26} \text{ kg}} = 1.1 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

Substituïm a la fórmula inicial i tindrem la transició en Joules:

$$\Delta E(\text{J}) = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{2\pi} \sqrt{\frac{1000 \text{ kg / s}^2}{1.1 \cdot 10^{-26} \text{ kg}}} = 3.18 \cdot 10^{-20} \text{ J}$$

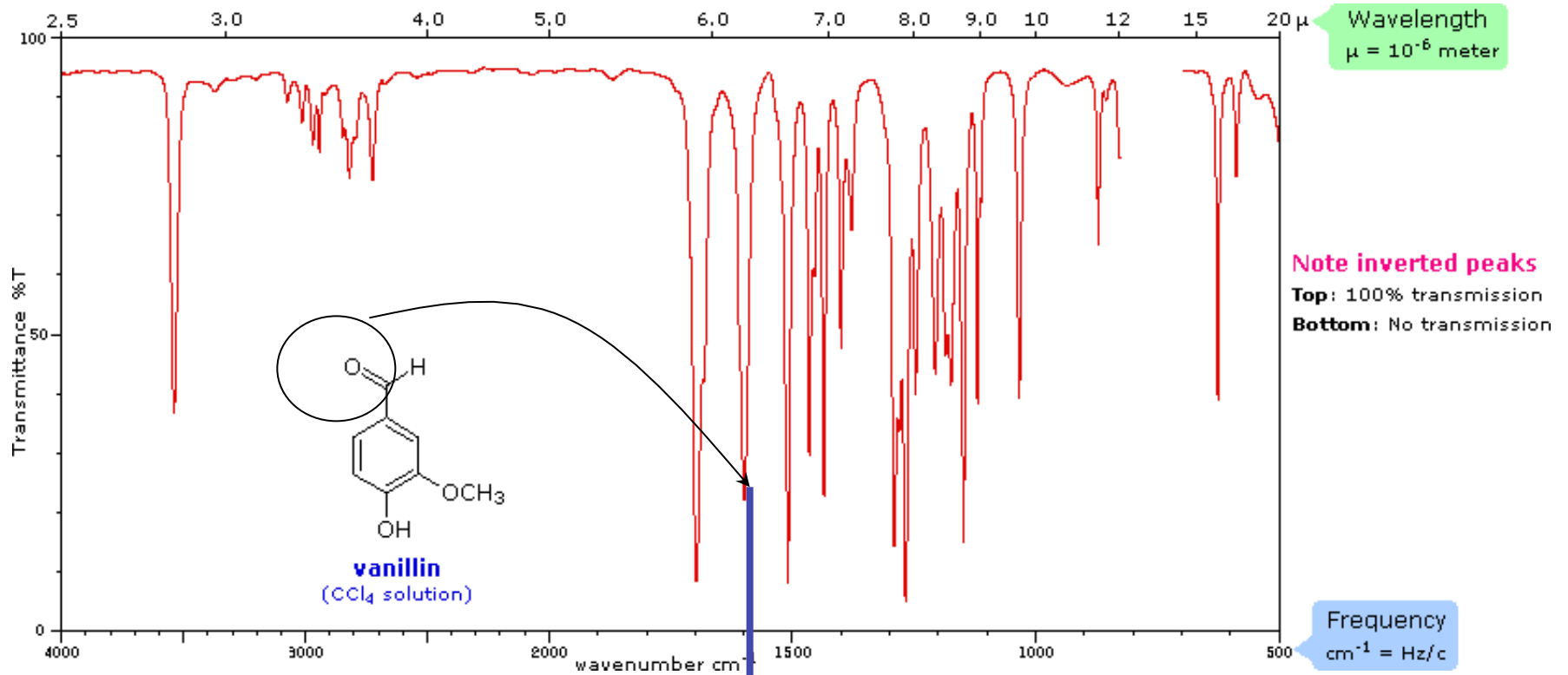
Si passem l'energia de Joules a cm^{-1} obtenim:

$$\Delta E(\text{J}) = h(\text{J} \cdot \text{s}) \nu(\text{s}^{-1}) = h(\text{J} \cdot \text{s}) \frac{c(\text{m / s})}{\lambda(\text{m})} = h(\text{J} \cdot \text{s}) \cdot c(\text{m} \cdot \text{s}) \cdot \bar{\nu}(\text{m}^{-1})$$

$$\bar{\nu}(\text{m}^{-1}) = \frac{\Delta E(\text{J})}{h(\text{J} \cdot \text{s})c(\text{m} \cdot \text{s})} = 159956.7 \text{ m}^{-1} \rightarrow 1600 \text{ cm}^{-1}$$

Així en l'espectre IR la tensió del CO surt al voltant dels 1600 cm^{-1} .

Tasca 3. Espectre de vibració del grup carbonil. Exemple de localització de la tensió del CO



Font: <https://jahschem.wikispaces.com/FTIR+spectroscopy,+Johnsonburg+Area+High+School+Chemistry+Wiki>, 22 Feb. 2015.

$\bar{\nu}$

Aquest pic a 1600 cm^{-1} correspon indiscutiblement a la tensió del CO de la molècula

Tasca 3. Espectre de vibració del grup carbonil. Ús de l'aplicació ESPECTRE per veure l'aparició dels sobretons del CO i l'efecte de la temperatura.

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

Resolució
equació
Schrödinger

$$E_{vibraciona(v)} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

↔ ↔
Factor de Constant
quantització energètica

v és el nombre quàntic vibracional, h és la constant de Planck ($6.62 \cdot 10^{-34}$ J s), μ és la massa reduïda ($m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$) i k la constant de força de l'enllaç (N/m)

Paràmetres per simular l'espectre del CO amb l'App!

- Unitats d'energia: cm^{-1} (habituals en IR)
- Constant energètica: 1600 cm^{-1} , en el cas del CO amb $k = 1000 \text{ N/m}$ (Vist anteriorment).
- Factor de quantització: $n+1/2$
- Degeneració: vibracional.
- Regles de selecció +1 (pur), +2, +3, +4 (sobretons). I l'emissió?
- Temperatura: 300 K. Temperatura ambient
- Aspecte real: Desactivem la casella inicialment.

Important! El simulador només usa la llei fonamental de l'espectroscòpia aplicada a l'equació provinent d'Schrödinger (equació vibracional), les regles de selecció escollides i la llei de Boltzman per la distribució de poblacions! Res més! L'aspecte real usa una funció d'ajust sobre les transicions teòriques.

Tasca 3. Espectre de vibració del grup carbonil. Interacciona amb l'aplicació ESPECTRE per veure l'aparició dels sobretons del CO i l'efecte de la temperatura.

- 1) Quantes transicions formen part del senyal a 1600 cm^{-1} ? Per què? Quants nivells energètics es troben poblats?
- 2) Com introduïm l'aparició de sobretons? Quina intensitat relativa tenen respecte el senyal principal? Els espectres reals són així? Per què?
- 3) Què passa si augmentes la temperatura a 1000 K ?
- 4) Com és l'hipotètic espectre d'emissió de vibració? Per què la intensitat relativa és tant petita respecte l'absorció? Si ampliem les regles de selecció en emissió com és que no s'observen més senyals? Si augmentes la temperatura a 1000 K què passa?
- 5) Ara activem l'aspecte real. Què ha passat amb els senyals? A què podria ser degut? Si disminuïm la resolució de l'aparell (a 100) com es veuen ara els senyals?

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

Tasca 3. Espectre de vibració del grup carbonil. Interacciona amb l'aplicació ESPECTRE per veure l'aparició dels sobretons del CO i l'efecte de la temperatura.

1) Quantes transicions formen part del senyal a 1600 cm^{-1} ? Per què? Quants nivells energètics es troben poblats?

Tenim 2 nivells energètics poblats (1 i 2), tenim 2 transicions però resulta que coincideixen en energia i per tant tenim només 1 senyal.

2) Com introduïm l'aparició de sobretons? Quin senyal tenen? Quina intensitat relativa tenen respecte el senyal principal? Els espectres reals són així?

Doncs es trenquen les regles de selecció i ara +2 també és possible, tot i que amb baixa intensitat. Apareix al doble del senyal fonamental de 1600 cm^{-1} , doncs 3200 cm^{-1} . En el simulador tenen la mateixa intensitat però no és cert ja que si incomplim les regles de selecció les intensitats són significativament menors. Recordem que l'aplicació només usa l'equació de Boltzmann per determinar les intensitats.

3) Què passa si augmentem la temperatura a 1000 K?

Continuen apareixent 2 senyals però ara corresponen a 4 transicions per senyal (4 punts vermells en cada senyal). Mira el pas 3 del simulador per veure-les. Es fan doncs més intenses simplement però no augmenten en nombre! Això és determinació estructural!

Tasca 3. Espectre de vibració del grup carbonil. Interacciona amb l'aplicació **ESPECTRE** per veure l'aparició dels sobretons del CO i l'efecte de la temperatura.

4) Baixem la temperatura a 300K. Com és l'hipotètic espectre d'emissió de vibració? Per què la intensitat relativa és tant petita respecte l'absorció? Si ampliem les regles de selecció en emissió com és que no s'observen més senyals? Si augmentes la temperatura a 1000 K què passa?

Tenim un sol senyal, una sola transició i un sol nivell energètic excitat poblat. Doncs no podem el nivell energètic $n=2$ que permetria una transició de sobretó. A 1000 K apareixen dos senyals molt febles, hem aconseguit poblar el $n=2$.

5) Ara activem l'aspecte real. Què ha passat amb els senyals? A què podria ser degut? Si disminuïm la resolució (a 100) de l'aparell com es veuen ara els senyals?

La línia blava marca un eixamplament si disminuïm la resolució doncs encara s'accentua més la tendència. Bons aparells, altes resolucions. Atenció reduir el valor vol dir augmentar la resolució, això és resolució espectral. El simulador usa el concepte de resolució espectral.

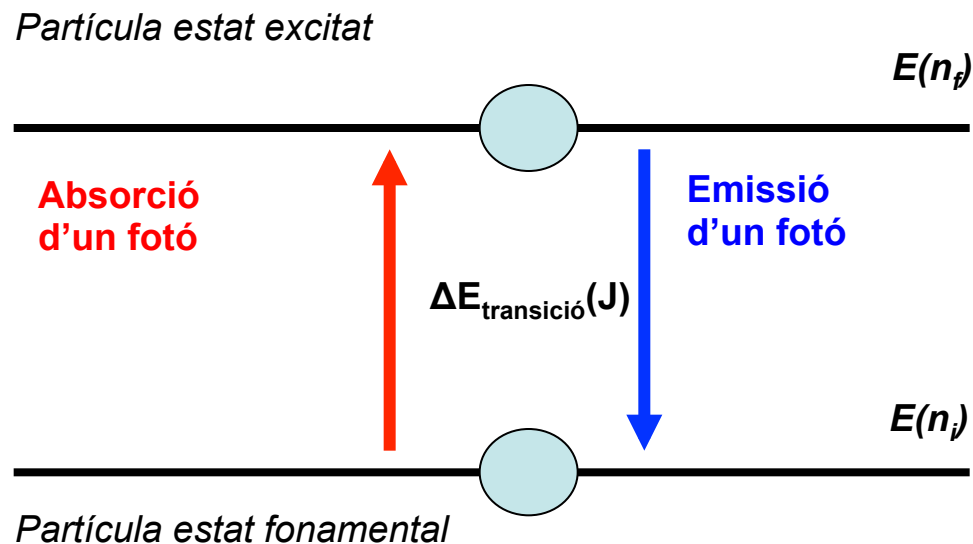
Annex X. Tasca 4. Deducció de l'espectre de vibrorotació de l'HCl.

Tasca 4. Espectre de vibrorotació de l'HCl.

Llei Fonamental de l'Espectroscòpia: $\Delta E_{\text{transició}}(J) = E(n_f) - E(n_i) = h\nu = hc\bar{\nu} = h\frac{c}{\lambda}$

ν , freqüència, s^{-1} ; $\bar{\nu}$, nombre d'ona, cm^{-1} ; λ , longitud d'ona, cm ; c , velocitat de la llum, $cm \cdot s^{-1}$

$E(n_f)$, energia del nivell energètic final de nombre quàntic n_f i $E(n_i)$ energia inicial amb n_i



Tasca 4. Espectre de vibrorotació de l'HCl. Planteig del problema.

Objectiu 1. Dedueix l'espectre de vibrorotació de l'HCl a partir de l'ajuda visual dels nivells vibrorotacionals i el propi espectre.

L'energia dels nivells vibrorotacionals ve donada per $E_{\text{total}} = E_{\text{vibracional},v} + E_{\text{rotacional},J}$.

Oscil·lador harmònic

$$E_{\text{vibracional}(v)} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Rotor rígid

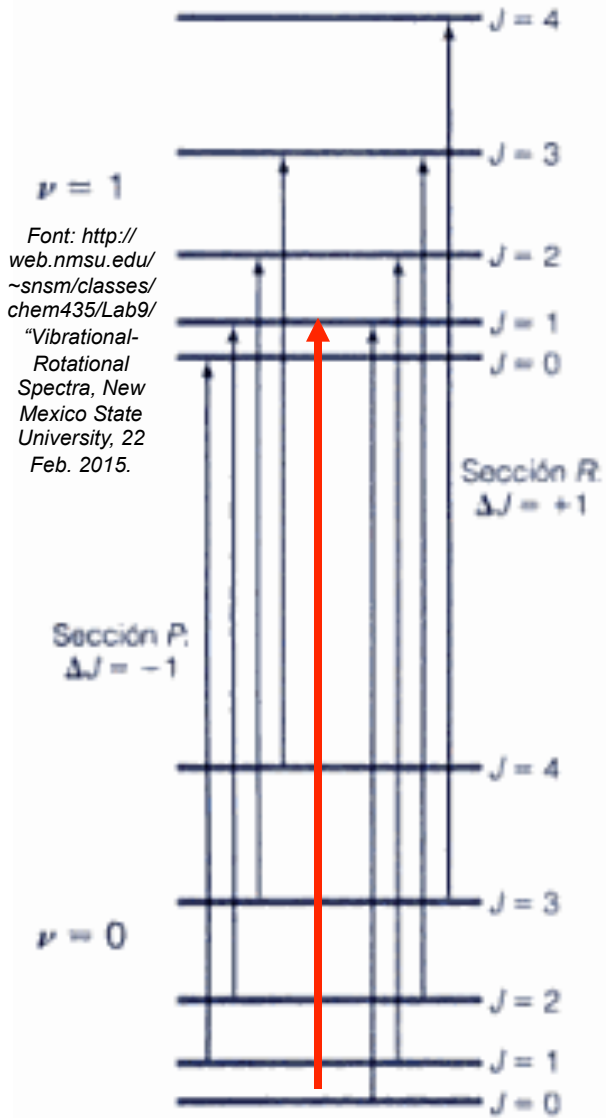
$$E_{\text{rotacional}(J)} = J(J+1) \frac{h^2}{8\pi^2 \mu R^2} = J(J+1)B$$

La transició principal es produirà entre $v=0$ i $v=1$ i acompanyada de totes les transicions rotacionals simultànies. h és la constant de Planck ($6.62 \cdot 10^{-34}$ J s), μ és la massa reduïda ($m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$), k la constant de força de l'enllaç (487 N/m o Kg / s²) i R la distància interatòmica (0.127 nm).

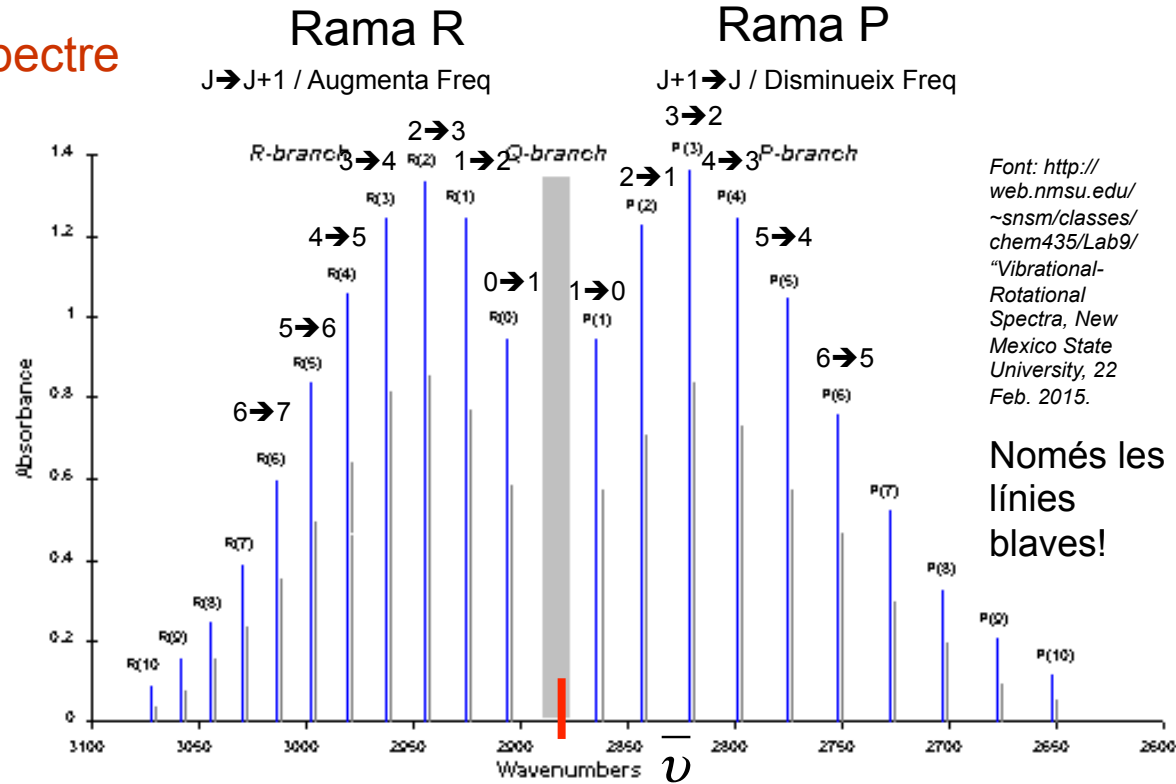
Objectiu 2. Usa l'aplicació ESPECTRE per simular l'espectre de rotació pura de l'HCl (una de les branques).

Tasca 4. Espectre de vibració de l'HCl. Estructura energètica i espectre.

Nivells vibrorotacionals



Espectre



$\nu=0 \rightarrow \nu=1$ Vibració / Banda fonamental

Només les línies blaves!

- 1) Identifica la transició vibracional i calcula el seu nombre d'ona.
- 2) Identifica les transicions rotacionals.
- 3) Troba la separació en nombre d'ona (cm^{-1}) entre els diferents pics rotacionals.
- 4) Troba la distància interatòmica.

$$E_{\text{total}} = E_{\text{vibracional}}(\nu) + E_{\text{rotacional}}(J)$$

Tasca 4. Espectre de vibrorotació de l'HCl. Transició vibracional pura.

Suposem aquí que no tenim canvi en el nombre quàntic rotacional, només en el vibracional! Això però no està permès ja que la regla de selecció rotacional és $\Delta J = \pm 1$

Calculem la banda fonamental de la transició vibracional de l'HCl:

$$\begin{aligned}\Delta E(v_i = 0 \rightarrow v_f = 1) &= (v_f + 1/2) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} - (v_i + 1/2) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \\ &= \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}\end{aligned}$$

Calculem la massa reduïda. Primer la massa d'un àtom de clor:

$$m_{Cl} = \frac{35.4 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}}{6.0 \cdot 10^{23} \text{ àtoms/mol}} = 5.9 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

De la mateixa manera per l'hidrogen, $m_H = 1.7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

La massa reduïda del sistema H-Cl serà:

$$\mu = m_r = \frac{m_{Cl} \cdot m_H}{m_{Cl} + m_H} = \frac{5.9 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \cdot 1.7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}{5.9 \cdot 10^{-26} \text{ kg} + 1.7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}} = 1.65 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

Substituïm a la fórmula inicial i tindrem la transició en Joules:

$$\Delta E(J) = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{2\pi} \sqrt{\frac{487 \text{ kg/s}^2}{1.65 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}} = 5.73 \cdot 10^{-20} \text{ J}$$

Si passem l'energia de Joules a cm^{-1} obtenim:

$$\Delta E(J) = h(J \cdot s) \nu(\text{s}^{-1}) = h(J \cdot s) \frac{c(m/s)}{\lambda(m)} = h(J \cdot s) \cdot c(m \cdot s) \cdot \bar{\nu}(m^{-1})$$

$$\bar{\nu}(m^{-1}) = \frac{\Delta E(J)}{h(J \cdot s)c(m \cdot s)} = 288000.0 m^{-1} \rightarrow 2880 \text{ cm}^{-1}$$

Així en l'espectre IR la tensió de l'HCl surt al voltant dels 2880 cm^{-1} .

Tasca 4. Espectre de vibrorotació de l'HCl. Transicions de rotació pura.

Ara sobre la transició vibracional afegim les transicions rotacionals de menor energia. Segons les regles de selecció tenim diverses possibilitats: (1) que el nombre quàntic rotacional augmenti o bé 2) que disminueixi. Com que els estat rotacionals estan separats de molt poca energia i a més es troben degenerats en $2J+1$ estats, molts estats es troben poblats.

Calculem l'expressió general d'una transició rotacional:

$$\Delta E(J \rightarrow J') = B \cdot J' \cdot (J' + 1) - B \cdot J \cdot (J + 1)$$

$$\Delta E(J \rightarrow J + 1) = B \cdot (J + 1) \cdot (J + 2) - B \cdot J \cdot (J + 1) = 2 \cdot B(J + 1)$$

$$\Delta E(J \rightarrow J - 1) = B \cdot (J - 1) \cdot J - B \cdot J \cdot (J + 1) = -2 \cdot B \cdot J$$

Així les primeres transicions de $\Delta J = +1$ seran

$$\Delta E(0 \rightarrow 1) = 2B$$

$$\Delta E(1 \rightarrow 2) = 4B$$

$$\Delta E(2 \rightarrow 3) = 6B$$

$$\Delta E(3 \rightarrow 4) = 8B$$

$$\Delta E(4 \rightarrow 5) = 10B$$

Així les primeres transicions de $\Delta J = -1$ seran

$$\Delta E(1 \rightarrow 0) = -2B$$

$$\Delta E(2 \rightarrow 1) = -4B$$

$$\Delta E(3 \rightarrow 2) = -6B$$

$$\Delta E(4 \rightarrow 3) = -8B$$

Quan val B? doncs una constant de la molècula de HCl.

$$B = \frac{h^2}{8\pi^2 \mu R^2}; \mu \text{ és la massa reduïda } 1.65 \cdot 10^{-22} \text{ kg i}$$

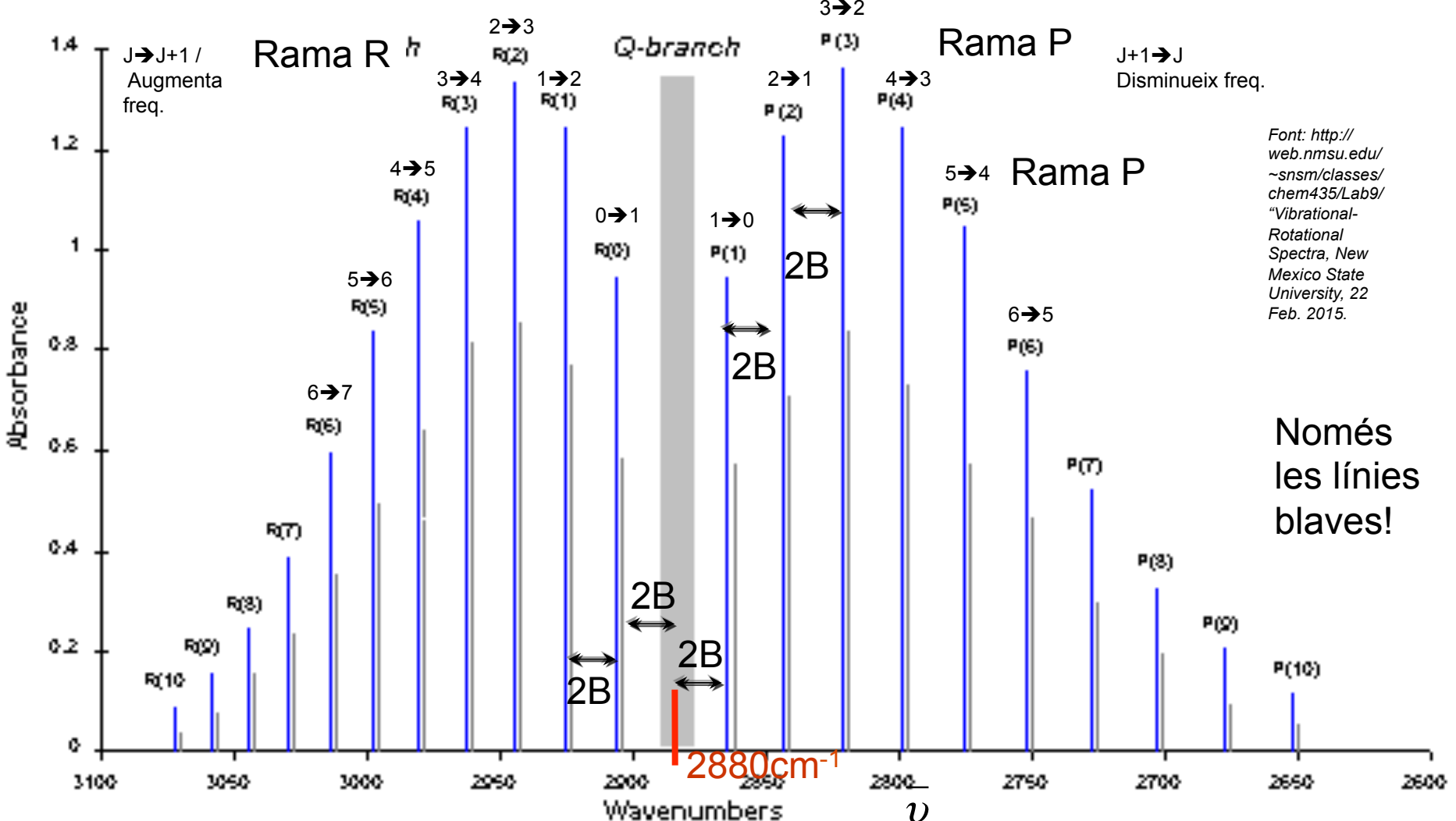
R distància d'enllaç $0.127 \cdot 10^{-9} \text{ m}$ i h la constant de planck $6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

Substituint amb unitats del sistema internacional surt $B = 2.09 \cdot 10^{-22} \text{ J}$ que passat a cm^{-1} dóna 10.5 cm^{-1} .

També podem plantejar-ho al revés. A partir de l'espectre sabem que la separació entre pics és de 21 cm^{-1} , llavors sabem que aquesta separació correspon a $2B$ i per tant B val 10.5 cm^{-1} i d'aquí podem trobar que R és $0.127 \cdot 10^{-9} \text{ m}$.

Tasca 4. Espectre de vibrorotació de l'HCl. Vibrorotació.

$$\frac{\Delta E}{hc} (cm^{-1}) = \frac{\Delta E_{vibracional}}{hc} (cm^{-1}) + \frac{\Delta E_{rotacional}}{hc} (cm^{-1}) = 2980 cm^{-1} + \Delta E_{J \rightarrow J'}$$



Font: <http://web.nmsu.edu/~snsm/classes/chem435/Lab9/>
 "Vibrational-Rotational Spectra, New Mexico State University, 22 Feb. 2015.

Només les línies blaves!

Totes les transicions de rotació surten separades entre elles per $2B$, aprox $21 cm^{-1}$. Alternativament, si obtenim la separació dels pics experimentalment podem obtenir B i a partir d'aquest valor trobar la distància interatòmica, R_e .

Tasca 4. Espectre de vibrorotació de l'HCl. Ús de l'aplicació ESPECTRE per simular espectre de rotació pura de l'HCl i els possibles aspectes reals.

<http://science.lsi.upc.edu/#/live/app/@campa:tests/Espectre2/Open>

Resolució equació
Schrödinger pel
sistema rotacional

$$E_{\text{rotacional},J} = J(J+1) \frac{h^2}{8\pi^2 \mu R^2}$$

↔ ↔
Factor de
quantització Constant
energètica (B)

J és el nombre quàntic
rotacional, h és la constant de
Planck ($6.62 \cdot 10^{-34}$ J s), μ és la
massa reduïda ($m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$) i R la distància
interatòmica

Simulem l'espectre de l'HCl amb l'App!

- Unitats d'energia: cm^{-1} (habituals en IR)
- Constant energètica: 10.5 cm^{-1} és la constant de rotació de l'HCl (Calculada anteriorment)
- Factor de quantització: $n(n+1)$
- Degeneració: cap inicialment, després ho canviarem a rotacional.
- Regles de selecció: absorció +1
- Temperatura: 300 K. Temperatura ambient.
- Aspecte real: Desactivem la casella inicialment.

Important! El simulador només usa la llei fonamental de l'espectroscòpia aplicades a l'equació provinent d'Schrödinger, les regles de selecció escollides i la llei de Boltzman per al distribució de poblacions! Res més!

Tasca 4. Espectre de vibrorotació de l'HCl. Ús de l'aplicació ESPECTRE per simular l'espectre de rotació pura de l'HCl i els possibles aspectes reals.

- 1) Quina separació hi ha entre els senyals? Quin rang total abarquen? Quants senyals tenim en absorció? Quin és el més intens? Quants nivells energètics poblats? Quantes transicions?
- 2) Ara reduïm el límit de detecció de l'aparell a 3%. Què ha passat? La sensibilitat de l'aparell pot ajudar a trobar més senyals? Quines són aquestes que estan en el límit de ser vistes?
- 3) Ara reduïm la temperatura a 100 K. Com han canviat els senyals? I si l'augmentem a 500 K? Per què?
- 4) Ara activem la degeneració dels nivells rotacionals, al nivell J tenim, de fet, $2J+1$ nivells energètics. Com han canviat els senyals? Quin és el més intens ara? Per què?
- 5) Ara activem l'aspecte real (això és el que es veuria en un aparell). Quants n'hi ha? Què ha passat amb els senyals? A què podria ser degut? Si disminuïm la resolució de l'aparell (a 100) com es veuen ara els senyals? Quants en veuríem realment?

Tasca 4. Espectre de vibrorotació de l'HCl. Ús de l'aplicació ESPECTRE per simular l'espectre de rotació pura de l'HCl i els possibles aspectes reals.

1) Quina separació hi ha entre els senyals? Quin rang total abarquen? Quants senyals tenim en absorció? Quin és el més intens? Quants nivells energètics poblats? Quantes transicions?

Senyals equiseparats de 21 cm^{-1} , 2B. De 21 cm^{-1} a 210 cm^{-1} a l'IR. Tenim 10 nivells energètics poblats, 10 transicions i 10 senyals.

2) Ara reduïm el límit de detecció de l'aparell a 3%. Què ha passat? La sensibilitat de l'aparell pot ajudar a trobar més senyals? Quines són aquestes que estan en el límit de ser vistes?

Tenim 8 senyals ara. Hem perdut les transicions més energètiques, de $J=8$ a $J=9$ i de $J=9$ a $J=10$. Resulta que aquests senyals eren els més dèbils en intensitat i són els primers que perdem si el nostre aparell té poc límit de detecció.

3) Ara reduïm la temperatura a 100 K. Com han canviat els senyals? I si l'augmentem a 500 K? Per què?

A 100K només tenim 5 senyals, a 500K 10 senyals amb un límit de detecció de 3%. Doncs això està relacionat amb el poblament dels estats rotacionals excitats. Mira el poblament en el pas 3 del simulador.

Tasca 4. Espectre de vibrorotació de l'HCl. Ús de l'aplicació ESPECTRE per simular l'espectre de rotació pura de l'HCl i els possibles aspectes reals.

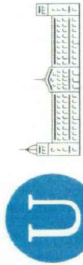
4) Ara activem la degeneració dels nivells rotacionals, al nivell J tenim, de fet, $2J+1$ nivells energètics. Com han canviat els senyals? Quin és el més intens ara? Per què?

S'han desplaçat cap a la dreta. El més intens és el senyal 4art (J=3 a J=4) o 5è (de J=4 a J=5). Ara sí que això és un típic espectre rotacional.

5) Ara activem l'aspecte real (això és el que es veuria en un aparell). Quants n'hi ha? Què ha passat amb els senyals? A què podria ser degut? Si disminuïm la resolució de l'aparell (a 100) com es veuen ara els senyals? Quants en veuríem realment?

Doncs enlloc de les 10 transicions, ara es veuen 9 pics només. Si disminuïm la resolució veiem una banda però no distingim ja els 10 senyals. Usant un aparell de baixa resolució doncs perdríem molta informació!

Annex XI. Certificat de presentació de Pòster a les 8enes Trobades de Professorat de Ciències de la Salut de la UB (4, 5 i 6 de Febrer de 2015)



Universitat de Barcelona



Certificat Pòster

IMPLEMENTACIÓ D'APLICACIONS WEB INTERACTIVES PER A L'APRENENTATGE DE CONCEPTES COMPLEXOS

Campanera, J. M.; Bidon-Chanal, A.; Borrell, J.; Girona, V.; García, M.

a la

8a. TROBADA DE PROFESSORAT DE CIÈNCIES DE LA SALUT

que ha tingut lloc a la Facultat de Medicina els dies 4 i 5 i 6 de febrer de 2015

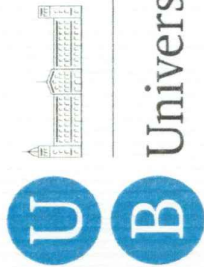
Barcelona, 6 de febrer de 2015

El President del Comitè Organitzador

F. Cardellach López

El President del Comitè Científic

J. Palés Argullós



Universitat de Barcelona



Certificat

JOSEP MARIA CAMPANERA ALSINA

ha assistit
a la

8a. TROBADA DE PROFESSORAT DE CIÈNCIES DE LA SALUT

que ha tingut lloc a la Facultat de Medicina els dies 4 i 5 i 6 de febrer de 2015

Barcelona, 6 de febrer de 2015

El President del Comitè Organitzador

F. Cardellach López

El President del Comitè Científic

J. Palés Argullós

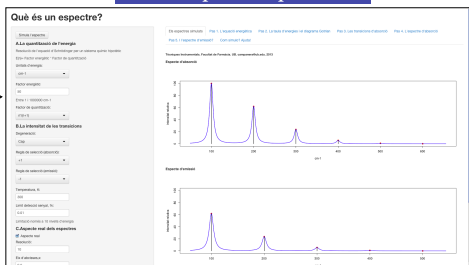
Annex XII. Pòster a les 8enes Trobades de Professorat de Ciències de la Salut de la UB (4, 5 i 6 de Febrer de 2015)

Implementació d'Aplicacions Web Interactives per a l'Aprenentatge de Conceptes Complexos

Campanera, Josep M.; Bidon-Chanal, A.; Borrell, J.; Girona, V.; García, M.
 Departament de Físicoquímica · Facultat de Farmàcia · Universitat de Barcelona · Barcelona · campanera@ub.edu

L'enteniment dels **conceptes principals** sovint és clau pel procés d'aprenentatge d'una matèria i l'obertura cap a la resta de conceptes secundaris. A Farmàcia un dels conceptes més difícils d'entendre entre els estudiants és el de la **quantificació de l'energia**. L'espectroscòpia, basada en la quantificació de l'energia, es usada en el dia a dia d'un químic o farmacèutic per a la determinació estructural. Per tant, l'entesa d'aquest concepte apareix com a fonamental i transcendent pel futur científic i professional dels estudiants. **Com ens podrien ajudar les Apps?**

1 OBJECTIUS: Una aplicació interactiva web per consolidar la comprensió de conceptes complexos



Input. L'estudiant escull les opcions per interactuar

Output. A l'esquerra surt la simulació

Alumnes		
CONeixEMENTS: Comprendre l'origen de la quantificació de l'energia. Aquest concepte és fonamental per a la interpretació dels espectres en el camp de la determinació estructural	PROCEDIMENTS: Crear espectres a partir d'una funció vinguda de la resolució de l'equació d'Schrödinger d'un sistema químic hipotètic	ACTITUDS: Incorporar les tecnologies de la informació i la comunicació en el procés d'aprenentatge acceptant el seu rol de catalitzadores de l'aprenentatge.
Professors		
Formar-se en la implementació d'aplicacions web (explorar les vies d'implementació)		

Ensenyament centrat en l'aprenentatge dels alumnes

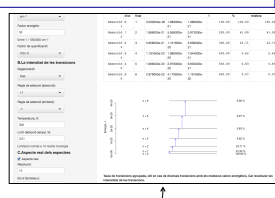
3 AVALUACIÓ: L'avaluació per l'aprenentatge: avalua allò que vols que aprenguin

Alumnes	Eina avaluativa	Resultats
Coneixements	Preguntes en les proves teòriques i enquesta	- De les 13 qüestions relacionades amb la quantificació de l'energia introduïdes als exàmens teòrics 11 són respostes correctament per un mínim d'un 50% de l'alumnat. - En l'enquesta els alumnes indiquen que l'aplicació els ha ajudat en tots els 10 conceptes pel qual l'aplicació va ser dissenyada.
Procediments	Lliurament d'una tasca	- No s'ha pogut implementar en tots els grups. En un dels grups 19 estudiants sobre 45 d'avaluació continuada varen lliurar la tasca.
Actituds	Enquesta	-De les enquestes es desprèn que uns 80 alumnes l'han usada a classe i 68 fora de classe. -84 estudiants indiquen que efectivament els ha ajudat en el seu aprenentatge i només 28 l'han trobada irrellevant. En la puntuació global obtenim 2.4 punts sobre 4.
Professors		
Vies d'implementació	Reunions, enquesta i reflexió	1) Substituir temari per introduir noves eines per explicar-lo, el contingut no canvia sinó el mitjà. 2) Demostració a classe, autoavaluació fora de classe. 3) Autoavaluació de tasques que desenvolupin casos pràctics. 4) La innovació docent no es pot plantejar de forma aïllada.

2 ACTIVITATS D'ENSENYAMENT/APRENENTATGE: Les Apps serveixen per l'autoavaluació

Activitat	Tipologia	Temari	Descripció
Presentació aplicació i tasca fora de classe	Classe presencial	Espectroscòpia atòmica	Sessió expositiva coincidint amb Espectroscòpia Atòmica. Presentació de les capacitats de l'aplicació. Espectre d'emissió atòmic de l'àtom d'H.
Espectre Hipotètic	Treball autònom	Generalitats espectroscòpia	Tasca de simulació d'un espectre. Autoavaluació amb l'aplicació.
Espectre CO	Classe presencial	Espectroscòpia vibracional	Usen l'aplicació per simular un espectre clàssic de vibració
Espectre HCl	Classe presencial	Espectroscòpia rotacional	Usen l'aplicació per simular un espectre clàssic de rotació.

Tasca 3. Deducció d'un espectre hipotètic:
 Busca que la resolució de l'equació d'Schrödinger (HΨ=EΨ) d'un sistema d'una partícula lliure E = ħ²k²/2m
 A (constant) i 20000 m (200 nm). h (constant de Planck) = 6.626 · 10⁻³⁴ J·s; c (velocitat de la llum) = 3 · 10⁸ m/s; i responde què seria E, λ, i λ⁻¹.
 Dedueix respecte d'absorció i d'emissió a T = 1000K i saber que la regla de selecció és Δl = ±1.



Enunciat de la tasca a realitzar. Els passos a seguir són els mateixos que usa l'aplicació. Així ajudem en l'autoavaluació

L'aplicació mostra pas a pas els resultats intermitjos necessaris per la consecució d'un espectre. Així ajuda a la comprensió i l'autoavaluació de la tasca

Tens algun concepte complex que es pugui explicar a partir d'una simulació? Una equació? Una relació complexa? T'interessa donar vida a les teves dades per ensenyar-les als estudiants? Aquest és el teu pòster!

Fitxa del projecte 2014PID-UB/020	
Tècniques Instrumentals (Farmàcia) i Anàlisi Instrumental (CTA)	Assig. obligatòries
Docència en grups grans	371 alumnes d'avaluació continuada sobre 435 totals
1 hora presencial pel projecte	7 grups, 5 professors
2 hores treb. autònom	

Annex XIII. Resums presentats a les 8enes Trobades de Professorat de Ciències de la Salut de la UB (4, 5 i 6 de Febrer de 2015)

IMPLEMENTACIÓ D'APLICACIONS WEB INTERACTIVES PER A L'APRENTATGE DE CONCEPTES COMPLEXOS

Campanera, J. M.; Bidon-Chanal, A.; Borrell, J.; Girona, V.; García, M.

Departament de Físicoquímica, Facultat de Farmàcia, Avinguda de Joan XXIII,
s/n, 08028 Barcelona

L'enteniment dels conceptes nuclears sovint és clau pel procés d'aprenentatge d'una matèria i l'obertura cap a la resta de conceptes. Un dels conceptes més difícils de comprendre entre els estudiants de Farmàcia és el de la quantització de l'energia i les seves implicacions en l'espectroscòpia i conseqüentment en el camp de la determinació estructural. En aquest projecte (2014PID-UB/020) explorem com l'aplicació web interactiva ESPECTRE (<http://glimmer.rstudio.com/campa/espectre3a>), per tot tipus de dispositius, permet explicar i apropar-se a aquest concepte científic complex amb relativa facilitat. La reciprocitat instantània facilita les connexions entre conceptes, fórmules, dades i gràfics. No només això, transporta la pissarra davant de cada estudiant i per tant els fa participants actius del seu propi aprenentatge, tot d'una forma atractiva i propera als canals actuals de comunicació i aprenentatge de l'alumnat. L'aplicació permet simular espectres d'espectroscòpia electrònica molecular i atòmica, vibracional i rotacional així com treballar els conceptes d'absorció, emissió, espaiat energètic, unitats d'energia, efecte de la temperatura, regles de selecció, intensitat de les transicions i aspecte real dels espectres. El recurs està orientat bàsicament per a funcionar com a eina d'autoavaluació per la resolució d'exercicis i tasques d'espectroscòpia. És important ressaltar que el present objectiu va en línia amb les conclusions expressades en el famós informe Horizon (2008) on indica que les organitzacions educatives d'ensenyament superior "s'enfronten a una creixent expectativa d'oferta de serveis, continguts i documents audiovisuals per a dispositius mòbils i personals".

IMPLEMENTACIÓN DE APLICACIONES WEB INTERACTIVAS PARA EL APRENDIZAJE DE CONCEPTOS COMPLEJOS

Campanera, J. M. ; Bidon-Chanal, A. ; Borrell, J. ; Girona, V. ; García, M.

Departament de Físicoquímica, Facultat de Farmàcia, Avinguda Joan XXIII, s/n,
08028 Barcelona

El entendimiento de los conceptos nucleares es clave para el proceso de aprendizaje de una materia y la apertura hacia el resto de conceptos. Uno de los conceptos más difíciles de comprender entre los estudiantes de Farmacia es el de la cuantización de la energía y sus implicaciones en la espectroscopía y consecuentemente en el campo de la determinación estructural. En este proyecto (2014PID-UB/020) exploramos como la aplicación web interactiva ESPECTRO (<http://glimmer.rstudio.com/campa/espectre3a>), para todo tipo de dispositivos, permite explicar y acercarse a este concepto científico complejo con relativa facilidad. La reciprocidad instantánea facilita las conexiones entre conceptos, fórmulas, datos y gráficos. No sólo eso, transporta la pizarra delante de cada estudiante y por lo tanto los hace partícipes activos de su propio aprendizaje, todo de una forma atractiva y cercana a los canales actuales de comunicación y aprendizaje del alumnado. La aplicación permite simular espectros de espectroscopía electrónica molecular y atómica, vibracional y rotacional así como trabajar los conceptos de absorción, emisión, espaciado energético, unidades de energía, efecto de la temperatura, reglas de selección, intensidad de las transiciones y aspecto real de los espectros. El recurso está orientado básicamente para funcionar como herramienta de autoevaluación para la resolución de ejercicios y tareas de espectroscopía. Es importante resaltar que el presente objetivo va en línea con las conclusiones expresadas en el famoso Informe Horizon (2008) donde indica que las organizaciones educativas de enseñanza superior "se enfrentan a una creciente expectativa de oferta de servicios, contenidos y documentos audiovisuales para dispositivos móviles y personales".