

DATOS DE LA ASIGNATURA					
Asignatura:	Métodos Estructurales en Química Inorgánica			Código:	757509218
Módulo:				Materia:	
Carácter:	OBLIGATORIA	Curso:	4º	Cuatrimestre:	Primero
Créditos ECTS	4,875	Teóricos:	4,875	Prácticos:	
Departamento/s:	QUÍMICA Y CC. MATERIALES		Área/s de Conocimiento:	Q.I INORGÁNICA	

PROFESOR/A	E-mail	Ubicación	Teléfono
Prof 1: TOMÁS RODRÍGUEZ BELDERRAIN	trodri@dqcm.uhu.es	Facultad Ciencias Experimentales Módulo 5, planta 4ª, despacho 5-08	959219955
Prof 2:			
Prof 3:			
Horario Tutorías	Prof. 1	Miércoles, Jueves y viernes 18:00-20:00	
	Prof. 2		
	Prof. 3		
Campus Virtual	<input checked="" type="checkbox"/> Web CT <input type="checkbox"/> Página web:		

Contexto de la asignatura	<p><b>Encuadre en el Plan de Estudios</b> Esta asignatura obligatoria se imparte en el cuarto curso de la titulación y pretende proporcionar al alumno los conocimientos fundamentales de caracterización estructural de compuestos inorgánicos, planteamiento del problema y aplicación de los distintos métodos espectroscópicos..</p> <p><b>Repercusión en el perfil profesional</b> Está asignatura ampliará los conocimientos que el alumno ha adquirido sobre la determinación estructural de compuestos químicos.</p>
Objetivo General de la Asignatura:	La asignatura se ha planificado con un enfoque fundamentalmente práctico con objeto de proporcionar al alumno una formación sólida sobre los métodos experimentales de determinación estructural y su utilización, aspectos de gran importancia en la formación actual de un Graduado en Química.
Competencias básicas o transversales	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Capacidad de análisis y síntesis</li> <li>• Capacidad de organizar y planificar</li> <li>• Comunicación oral y escrita en lengua propia</li> <li>• Conocimiento del inglés</li> <li>• Razonamiento crítico</li> <li>• Habilidades en las relaciones interpersonales</li> <li>• Trabajo en equipo</li> <li>• Aprendizaje autónomo</li> <li>• Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica</li> <li>• Habilidad para trabajar de forma autónoma</li> <li>• Iniciativa y espíritu emprendedor</li> <li>• Motivación por la calidad</li> <li>• Sensibilidad hacia temas medioambientales</li> </ul>

<p><b>Competencias específicas</b></p>	<p>Elucidar estructuras de compuestos inorgánicos mediante el análisis de los datos que proporcionan las diferentes técnicas</p>
<p><b>Recomendaciones</b></p>	<p>Para matricularse de esta asignatura, es muy recomendable que el alumno haya aprobado previamente todas las asignaturas teóricas y prácticas, troncales y obligatorias de Química Inorgánica de cursos precedentes y esté cursando o haya aprobado, previamente, las asignaturas "Ampliación de Química Inorgánica y "Determinación Estructural de Compuestos Orgánico".</p>
<p><b>BLOQUES TEMÁTICOS</b></p>	<p><b>BLOQUE 1. Introducción: Tema 1.</b>  <b>BLOQUE 2. Espectroscopía Ultravioleta y visible: Tema 2.</b>  <b>BLOQUE 3. Espectroscopía Vibracional: Tema 3.</b>  <b>BLOQUE 4. Resonancia Magnética Nuclear (RMN): Temas 4 y 5.</b>  <b>BLOQUE 5. Técnicas de caracterización de sólidos: Tema 6.</b>  <b>BLOQUE 6. Determinación Estructural de sustancias desconocidas: Tema 7.</b></p>
<p><b>Temario Teórico y Planificación Temporal:</b></p>	<p><b>Tema 1.</b> Determinando Estructuras. ¿Cómo y por qué?. Introducción a la espectroscopía: El espectro electromagnético. Interacción de la materia con las radiaciones electromagnéticas: Características generales. Escalas de Tiempo. Los espectros de absorción y de emisión. Espectrómetros y Resolución.</p> <p><b>Tema 2.</b> Espectroscopía Ultravioleta y visible. Características específicas de la espectroscopía ultravioleta (UV) y visible (V). Excitación electrónica. Reglas de selección. Absorción de energía: Tipos de transiciones electrónicas.</p> <p><b>Tema 3.</b> Espectroscopía Vibracional. Simetría. Espectroscopía Infrarroja (IR). Conceptos básicos. Espectros de absorción en infrarrojos, frecuencias características. Factores que afectan a la frecuencia característica de un grupo. Regiones del espectro de IR y tipos de enlaces, análisis de un espectro de IR. Espectroscopia Raman.</p> <p><b>Tema 4.</b> Conceptos básicos de Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Introducción a la RMN: El spin nuclear, Estados de spin y campo magnético, parámetros a tener en cuenta. Instrumentación. Desplazamiento químico y factores que lo modifican. Equivalencia química. La intensidad de la señales. Acoplamiento spin-spin. Quiralidad y RMN. Efectos Dinámicos en RMN.</p> <p><b>Tema 5.</b> Profundizando en la Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Aproximación a la RMN de "pulsos" y la transformada de Fourier. La relajación: T1 y T2. Efecto NOE. Espectroscopía de <sup>13</sup>C: desplazamiento químico e intensidades, determinación de la multiplicidad. Espectroscopía de RMN 2D: homonuclear y heteronuclear, tipos de experimentos, como obtener información.</p> <p><b>Tema 6.</b> Técnicas de caracterización de sólidos. Métodos de difracción y de microscopía electrónica. Difracción de rayos X de polvo y de monocristal. Difractogramas. Difracción de electrones. Difracción de neutrones. Microscopía electrónica de transmisión (SEM), de barrido (TEM), de efecto túnel y de fuerza atómica. Microscopía electrónica analítica (AEM). Métodos espectroscópicos. Espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS). Fundamentos. Aplicaciones. Espectroscopia fotoelectrónica ultravioleta (UPS). Espectroscopía electrónica Auger (AES). Espectroscopia XANES. EXAFS. RMN aplicada a sólidos. Otros métodos.</p> <p><b>Tema 7.</b> Determinación Estructural de sustancias desconocidas. Sistemática en la utilización combinada de datos espectroscópicos de las diferentes técnicas. Ejemplos prácticos.</p>

<b>Temario Práctico y Planificación Temporal:</b>											
<b>Actividades Dirigidas y Planificación Temporal</b>	-Realización/ y exposición de trabajo bibliográfico (semana 3-5) -Resolución de cuestiones y problemas relacionados con la materia impartida (semana 7-9)										
<b>Metodología Docente Empleada:</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. <u>Impartición de clases teóricas</u> (clase magistral). Los recursos utilizados son la pizarra, proyector de transparencias, proyecciones con ordenador y fotocopias de apoyo con figuras, esquemas y tablas. Las clases se desarrollan de manera interactiva con los alumnos, discutiendo con ellos los aspectos que resultan más dificultosos o especialmente interesantes de cada tema.</li> <li>2. <u>Impartición de clases de problemas</u>. Se resuelven problemas tipo, haciendo hincapié en la comprensión del mecanismo de resolución y resaltando la relación de los problemas con aplicaciones prácticas.</li> <li>3. <u>Realización de actividades académicas dirigidas</u>. Trabajo tutorizado con grupos reducidos donde el profesor/a orienta a los estudiantes para la realización de actividades que les ayuden a reforzar y asimilar los contenidos de la asignatura. Se asignará a cada grupo una serie de actividades de entre las relacionadas en la presente Guía.</li> </ol>										
<b>Criterios de Evaluación:</b>	<p>La calificación final de la asignatura se obtendrá con los siguientes sumandos:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Calificación obtenida en el examen final de la asignatura. Supondrá el 80% de la calificación de la asignatura. El examen constará de cuestiones teórico-prácticas y problemas. Se contemplará la posibilidad de realizar un examen parcial eliminatorio.</li> <li>2. Las capacidades adquiridas en cada unidad temática se evaluarán conjuntamente con las distintas actividades de la asignatura, es decir, con las calificaciones de la docencia teórica, práctica y de las actividades académicas dirigidas.</li> <li>3. Calificación obtenida por la realización y/o exposición de trabajos realizados (bibliográficos, problemas, cuestiones), individualmente o en equipo y otras actividades académicas dirigidas (supondrá el 20% de la calificación de la asignatura)</li> </ol>										
<b>Distribución Horas Presenciales</b>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Grupo Grande</th> <th>Grupo Pequeño</th> <th>Laboratorio</th> <th>Lab. Informática</th> <th>Campo</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>21</td> <td>13</td> <td>15</td> <td>-</td> <td>-</td> </tr> </tbody> </table>	Grupo Grande	Grupo Pequeño	Laboratorio	Lab. Informática	Campo	21	13	15	-	-
Grupo Grande	Grupo Pequeño	Laboratorio	Lab. Informática	Campo							
21	13	15	-	-							
<b>Bibliografía:</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) E. A. V. EBSWORTH, D. W. H. RANKIN, S. CRADOCK, "Structural Methods in Inorganic Chemistry", Blackwell Scientific Publications, 1987.</li> <li>2) R. Macomber "A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy John Wiley &amp; Sons Inc (8 Jan 1998)</li> <li>3) J. W. AKITT, "NMR and Chemistry", 2ª edición, Chapman and Hall, 1983.</li> <li>4) A. K. Brisdon "Inorganic Spectroscopic Methods (Oxford Chemistry Primers)" Oxford University Press (18 Jun 1998)</li> </ol>										