

GRADO EN QUÍMICA

DATOS DE LA ASIGNATURA

ASIGNATURA	MÉTODOS ESTRUCTURALES EN QUÍMICA INORGÁNICA	SUBJECT	STRUCTURAL METHODS IN INORGANIC CHEMISTRY
CÓDIGO	757509218		
MÓDULO	FUNDAMENTAL	MATERIA	Q. INORGÁNICA
CURSO	4 ^º	CUATRIMESTRE	1 ^º
DEPARTAMENTO	QUÍMICA PROFESOR JOSÉ CARLOS VÍLCHEZ MARTÍN	ÁREA DE CONOCIMIENTO	QUÍMICA INORGÁNICA
CARÁCTER	OBLIGATORIA	CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

DISTRIBUCIÓN DE CRÉDITOS

	TOTAL	TEÓRICOS GRUPO GRANDE	TEÓRICOS GRUPO REDUCIDO	PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA	PRÁCTICAS DE LABORATORIO	PRÁCTICAS DE CAMPO
ECTS	6	4.5	0	0	1.5	0

DATOS DEL PROFESORADO

COORDINADOR

NOMBRE TOMÁS RODRÍGUEZ BELDERRAIN

DEPARTAMENTO QUÍMICA PROFESOR JOSÉ CARLOS VÍLCHEZ MARTÍN

ÁREA DE CONOCIMIENTO QUÍMICA INORGÁNICA

UBICACIÓN MÓDULO 5. FACULTAD DE CC. EXPERIMENTALES

CORREO ELECTRÓNICO trodri@dqcm.uhu.es

TELÉFONO 959219955

URL WEB

CAMPUS VIRTUAL MOODLE

DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA ASIGNATURA

DESCRIPCIÓN GENERAL

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.

OBJETIVOS: RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

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.

REPERCUSIÓN EN EL PERFIL PROFESIONAL

Está asignatura ampliará los conocimientos que el alumno ha adquirido sobre la determinación estructural de compuestos químicos

RECOMENDACIONES AL ALUMNADO

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 Orgánicos”.

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

CB1 - Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

CB2 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.

CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.

CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

B1 - Capacidad de análisis y síntesis.

B2 - Capacidad de organización y planificación.

B3 - Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.

B5 - Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/conocimiento.

B6 - Resolución de problemas.

B8 - Trabajo en equipo.

B9 - Razonamiento crítico.

B11 - Sensibilidad hacia temas medioambientales.

COMPETENCIAS GENERALES

CG1 - Que los estudiantes hayan desarrollado y demostrado poseer habilidades de aprendizaje y conocimientos procedentes de su campo de estudio, siendo capaces de aplicarlos en su trabajo, interpretando datos relevantes para emitir juicios de temas de diversa índole pudiendo transmitirlos a un público tanto especializado como no especializado.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

C2 - Conocer los tipos principales de reacción 4 y las principales características asociadas a cada una de ellas.

C4 - Conocer las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo espectroscopía.

C10 - Conocer los aspectos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo estereoquímica.

C16 - Conocer las técnicas instrumentales y sus aplicaciones.

Q1 - Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la química.

Q2 - Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

Q3 - Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química.

Q4 - Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico y profesional.

Q6 - Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.

P1 - Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas,

incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.

P2 - Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.

P4 - Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para estudios estructurales y separaciones.

P5 - . Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

TEMARIO Y DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

TEORÍA

Tema 1. 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. Introducción a la instrumentación. Espectrómetros de barrido. Transformada de Fourier.

Tema 2. Espectroscopía Electrónica. 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.

Tema 3. 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.

Tema 4. Fundamentos de Resonancia Magnética Nuclear (I). Núcleo atómico y spin nuclear. Alineación magnética. Transiciones. Sensitividad. El origen de la señal de RMN. La precesión del spin nuclear. Perturbación del sistema. Detección de la señal de RMN. Secuencia de pulso. Free Induction Decay (FID). La relación señal/ruido. Espectrómetros de RMN. Equipos de onda continua. Equipos de FT-RMN.

Tema 5. Fundamentos de Resonancia Magnética Nuclear (II). Acoplamiento escalar Tipos de acoplamiento escalar. Sistemas de primer orden. Desacoplamiento de spin. Ejemplos con heteronúcleos. Equivalencia química y magnética. Sistemas de segundo orden Constantes de acoplamiento. RMN de carbono 13.

Tema 6. Resonancia Magnética Nuclear en dos dimensiones (RMN 2D). Experimentos en 2 dimensiones. Introducción. Representación de los espectros de RMN 2D. Tipos de experimentos de RMN 2D. COSY. TOCSY. HETCOR. HSQC. HMQC y HMBC. INADEQUATE. Experimentos 2DJ. El efecto "NOE". Experimentos de 2D basados en el efecto NOE

Tema 7. Procesos de intercambio dinámico mediante RMN. Proceso de Intercambio Dinámico. Fluxionalidad. Espectros a temperatura variable. La ecuación de Eyring. Ejemplos.

Tema 8. Relajación y RMN de núcleos con $I > 1/2$. Fenómenos de Relajación. T1 y T2. Medida del T1. Hidruros metálicos. RMN de núcleos con $I > 1/2$. Acoplamiento de spines.

Tema 9. Resonancia de Espín Electrónico. Fundamentos. Factor de proporcionalidad. Interacción hiperfina. Intensidades relativas. Ejemplos. Resumen.

Tema 10. Determinación Estructural de sustancias desconocidas. Sistemática en la utilización combinada de datos espectroscópicos de las diferentes técnicas. Ejemplos prácticos.

PRÁCTICAS DE LABORATORIO

-Determinación mediante técnica de Resonancia Magnética Nuclear de compuestos orgánicos y organometálicos.

METODOLOGÍA DOCENTE



Universidad
de Huelva

GUÍA DOCENTE

Curso 2021/2022



Grupo grande	<ul style="list-style-type: none"> • Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos. • Prácticas de laboratorio con grupos reducidos manejo de técnicas experimentales, discusión de resultados, obtención de conclusiones, presentación de una memoria final. • Cualquier actividad dirigida que ayude a la adquisición de conocimientos, habilidades y destrezas. • Resolución de dudas. • Ejercicios de autoevaluación sobre los contenidos de la materia.
Grupo reducido	<ul style="list-style-type: none"> • Seminarios tutorizados de resolución de problemas y de supuestos prácticos. • Actividades transversales. • Cualquier actividad dirigida que ayude a la adquisición de conocimientos, habilidades y destrezas. • Resolución de dudas. • Ejercicios de autoevaluación sobre los contenidos de la materia.
Prácticas de laboratorio	<ul style="list-style-type: none"> • Prácticas de laboratorio con grupos reducidos manejo de técnicas experimentales, discusión de resultados, obtención de conclusiones, presentación de una memoria final. • Resolución de dudas.

CRONOGRAMA ORIENTATIVO I

SEMANAS (S):	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
GRUPO GRANDE	T1	T1	T2	T2	T3	T3	T4	T4	T5	T6	T6	T7	TP47	T8	T8
GRUPO REDUCIDO				P1	P1	P2	P2		P3	P3		P4		P5	P5
PRÁCTICAS DE LABORATORIO														G1	G2
PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA															
PRÁCTICAS DE CAMPO															

EVALUACIÓN DE LA ASIGNATURA

PRIMERA EVALUACIÓN ORDINARIA (FEBRERO/JUNIO)

EVALUACIÓN CONTINUA

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, las cuales nos ayudan a realizar una evaluación continua del alumno. Las calificaciones tendrán el siguiente valor relativo:

- El 70 % corresponderá a la calificación obtenida en el examen final de la asignatura. El examen constará de cuestiones teórico-prácticas y problemas. En el caso de la realización de un examen parcial (con carácter voluntario), el alumno debe conseguir una calificación mínima de 5 para que no tenga que ser evaluado en el examen final de los temas incluidos en el examen parcial. De no conseguirlo, realizará el examen final, en el que se evaluarán los contenidos de todo el programa impartido. La puntuación del mismo se realizará en dos bloques: el primero con la materia que fue objeto de evaluación en el examen parcial y el segundo con el resto de la materia. Será necesario obtener un mínimo de 5 en cada una de las partes para poder hacer la nota media. De no ser así, la nota global de la asignatura sería de suspenso. En el caso de que ambas partes superen 5 de manera independiente, se procederá al promedio de ambas notas, que supondrán el 70% de la nota final de la asignatura.
- El 20% corresponderá a la calificación de las prácticas de laboratorio. La asistencia a las clases prácticas de laboratorio es obligatoria. Asimismo, en el día que tenga lugar el examen final de la asignatura se realizará una prueba sobre conocimientos adquiridos en las clases de laboratorio, que supondrá el 20% de la nota de la asignatura. Esta nota sólo se adicionará a la total siempre que se alcance un 5 en el bloque anterior.
- El 10% corresponderá a la calificación de las actividades complementarias (ejercicios, cuestionarios...). De nuevo, esta nota sólo se adicionará a la total siempre que se alcance un 5 en el bloque del examen final.

EVALUACIÓN FINAL

Para acogerse a la evaluación única final, el estudiante, en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura, o en las dos semanas siguientes a su matriculación, si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de la asignatura, lo comunicará al responsable de la asignatura a través de correo electrónico. Esto implicará la renuncia expresa al sistema de evaluación continua, sin posibilidad de que el estudiante pueda cambiar de sistema. Como en el caso de la evaluación continua, en la calificación final de la asignatura se tendrá en cuenta el incumplimiento por parte del alumno de las normas básicas de comportamiento y funcionamiento que debe respetar la comunidad universitaria de la Facultad de Ciencias Experimentales y que ha sido aprobada en Junta de Centro.

Los alumnos que opten por esta opción realizarán un examen final de todo el temario, que contabilizará por el 80% de la calificación de la asignatura. El examen constará de cuestiones teórico-prácticas y problemas.

Asimismo, el alumno realizará un examen práctico en el laboratorio, donde desarrollará un experimento siguiendo un protocolo que se le facilitará al comenzar dicho examen. Esta prueba contabilizará por el 20% de la calificación de la asignatura.

Para sumar las calificaciones de los dos apartados se deberá obtener una calificación igual o superior a 5 puntos (sobre 10) en el examen final.

¿Contempla una evaluación parcial?

SÍ

Este apartado sólo se tendrá en cuenta en el caso de evaluación continua. Como se ha comentado anteriormente, en el caso de la realización de un examen parcial (con carácter voluntario), el alumno debe sacar un mínimo de un 5 en el mismo para que no tenga que ser evaluado en el examen final de los temas incluidos en el examen parcial. De no conseguirlo, realizará el examen final, en el que se evaluarán los contenidos de todo el programa impartido de la manera que se indica en el apartado de evaluación continua

La convocatoria ordinaria II está abierta a ambos sistemas de evaluación: continuo y final.

1. Sistema de evaluación continua: se aplican los mismos criterios establecidos en la convocatoria ordinaria I. Las notas obtenidas en ésta en los apartados de actividades académicas y prácticas de laboratorio se emplearán en la determinación de la nota final de la convocatoria ordinaria II. No obstante, el alumno podrá presentarse, si así lo desea, a un examen de las prácticas de laboratorio y de las actividades dirigidas para mejorar la nota.

2. Sistema de evaluación final. Se aplican los mismos criterios que los ya expuestos para la convocatoria ordinaria I.

TERCERA EVALUACIÓN ORDINARIA Y OTRAS EVALUACIONES

Para la convocatoria ordinaria III, ambas convocatorias continua y final estarán disponibles, con los criterios ya expuestos anteriormente

OTROS CRITERIOS DE EVALUACIÓN

¿Contempla la posibilidad de subir nota una vez realizadas las pruebas?

NO

Requisitos para la concesión de matrícula de honor

Máxima calificación de la asignatura, siempre superior a 9.

REFERENCIAS

BÁSICAS

- 1) E. A. V. EBSWORTH, D. W. H. RANKIN, S. CRADOCK, "Structural Methods in Inorganic Chemistry", Blackwell Scientific Publications, 1987.
- 2) D. W. H. Rankin, Norbert Mitzel, Carole Morrison "Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry" Wiley; 1 edition (April 1, 2013)
- 3) R. Macomber "A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy John Wiley & Sons Inc (Jan 8, 1998)
- 4) J. W. AKITT, "NMR and Chemistry", 2nd Ed., Chapman and Hall, 1983.
- 5) A. K. Brisdon "Inorganic Spectroscopic Methods (Oxford Chemistry Primers)" Oxford University Press (Jun 18, 1998)
- 6) Housecroft, Catherine, "Inorganic Chemistry" Oxford University Press, 1999. ISBN:0-19-850103-X
- 7) "Inorganic Chemistry, 5th ed.", Duward F. Shriver, Peter W. Atkins, Tina Overton, Jonathan Rourke; W. H. Freeman, 2009
- 8) Joseph P. Hornak, "The Basics of NMR" <https://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/bnmr.htm>.

OTROS RECURSOS

Paul Callaghan lectures on the principles of NMR and MRI: <http://www.magritek.com/support/videos/> Introduction to NMR Spectroscopy <https://www.youtube.com/watch?v=TJhVotrZt9I> Organometallic HyperTextBook <http://www.ilpi.com/organomet/>