



FACULTAD DE CIENCIAS EXPERIMENTALES

GUIA DOCENTE

CURSO 2022-23

GRADO EN QUÍMICA

DATOS DE LA ASIGNATURA

Nombre:

MÉTODOS ESTRUCTURALES EN QUÍMICA INORGÁNICA

Denominación en Inglés:

Structural Methods In Inorganic Chemistry

Código:

757509218

Tipo Docencia:

Presencial

Carácter:

Obligatoria

Horas:

	Totales	Presenciales	No Presenciales
Trabajo Estimado	150	60	90

Créditos:

Grupos Grandes	Grupos Reducidos			
	Aula estándar	Laboratorio	Prácticas de campo	Aula de informática
4.5	0	1.5	0	0

Departamentos:

QUIMICA.PROF. JOSE CARLOS VILCHEZ MARTIN

Áreas de Conocimiento:

QUIMICA INORGANICA

Curso:

4º - Cuarto

Cuatrimestre

Primer cuatrimestre

DATOS DEL PROFESORADO (*Profesorado coordinador de la asignatura)

Nombre:	E-mail:	Teléfono:
* Tomas Rodriguez Belderrain	trodri@dqcm.uhu.es	

Datos adicionales del profesorado (Tutorías, Horarios, Despachos, etc...)

Tutorías: Miércoles, Jueves y Viernes de 17-19 h

UBICACIÓN DESPACHO 2.4 CIQSO

CORREO ELECTRÓNICO trodri@dqcm.uhu.es TELÉFONO 959219955

DATOS ESPECÍFICOS DE LA ASIGNATURA

1. Descripción de Contenidos:

1.1 Breve descripción (en Castellano):

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 de problemas y aplicación de los distintos métodos espectroscópicos.

1.2 Breve descripción (en Inglés):

This compulsory subject is taught in the fourth year of the degree and aims to provide the student with the fundamental knowledge of structural characterization of inorganic compounds, problem solutions and application of the different spectroscopic methods.

2. Situación de la asignatura:

2.1 Contexto dentro de la titulación:

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.

2.2 Recomendaciones

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"

3. Objetivos (Expresados como resultado 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

4. Competencias a adquirir por los estudiantes

4.1 Competencias específicas:

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

C16: Conocer las técnicas instrumentales y sus aplicaciones.

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

P1: Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.

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.

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.

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

4.2 Competencias básicas, generales o transversales:

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.

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.

5. Actividades Formativas y Metodologías Docentes

5.1 Actividades formativas:

- Grupo teórico práctico.
- Grupo docente de laboratorio.

5.2 Metodologías Docentes:

- 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.
- Empleo de páginas Web como apoyo a la docencia de la materia.

5.3 Desarrollo y Justificación:

Grupo Teórico Práctico:

La metodología principal consistirá en clases magistrales al grupo completo sobre los contenidos teóricos de la asignatura. Así como la resolución de ejercicios que ayuden a afianzar esos contenidos.

Grupo docentes de laboratorio:

Prácticas de laboratorio con grupos reducidos manejo de técnicas instrumentales, discusión de resultados, obtención de conclusiones. Los conocimientos adquiridos en este apartado se evaluarán mediante un examen tipo test.

6. Temario Desarrollado

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 spín. 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.

7. Bibliografía

7.1 Bibliografía básica:

- 1) E. A. V. EBSWORTH, D. W. H. RANKIN, S. CRADOCK, "Structural Methods in Inorganic Chemistry", Blackwell Scientific Publications, 1987.
- 2) R. Macomber "A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy John Wiley & Sons Inc (8 Jan 1998)
- 3) J. W. AKITT, "NMR and Chemistry", 2ª edición, Chapman and Hall, 1983.
- 4) A. K. Brisdon "Inorganic Spectroscopic Methods (Oxford Chemistry Primers)" Oxford University Press (18 Jun 1998)

7.2 Bibliografía complementaria:

Joseph P. Hornak, "The Basics of NMR"

<https://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/bnmr.html>

Paul Callaghan lectures on the principles of NMR and MRI:

<http://www.magritek.com/support/videos/>

Organometallic HyperTextBook

<http://www.ilpi.com/organomet>

8. Sistemas y criterios de evaluación

8.1 Sistemas de evaluación:

- Examen final.
- Evaluación continua.

8.2 Criterios de evaluación relativos a cada convocatoria:

8.2.1 Convocatoria I:

La distribución de la calificación final será la siguiente:

- 20%: calificación de la asignatura test
- 10%: calificación de actividades complementarias (ejercicios, trabajos bibliográficos...)
- 70%: calificación del examen final de la asignatura. El examen constará de cuestiones teórico-prácticas y problemas.

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

8.2.2 Convocatoria II:

Se realizará un examen final que supondrá el 100 % de la nota. Este examen constará de dos pruebas:

- 1.- Cuestiones teórico prácticas del temario de la asignatura 80% (indispensable obtener una calificación igual o superior a 5 puntos (sobre 10).
- 2.- Test de prácticas realizadas en el laboratorio 20%.

8.2.3 Convocatoria III:

Se realizará un examen final que supondrá el 100 % de la nota. Este examen constará de dos pruebas:

- 1.- Cuestiones teórico prácticas del temario de la asignatura 80% (indispensable obtener una calificación igual o superior a 5 puntos (sobre 10).
- 2.- Test de prácticas realizadas en el laboratorio 20%.

8.2.4 Convocatoria extraordinaria:

Se realizará un examen final que supondrá el 100 % de la nota. Este examen constará de dos

pruebas:

1.- Cuestiones teórico prácticas del temario de la asignatura 80% (indispensable obtener una calificación igual o superior a 5 puntos (sobre 10).

2.- Test de prácticas realizadas en el laboratorio 20%.

8.3 Evaluación única final:

8.3.1 Convocatoria I:

El alumno deberá comunicar al profesor, en el plazo establecido por la normativa de evaluación, su disposición a ser evaluado por el sistema de evaluación única, cumplimentado la solicitud que desde la Facultad o el propio profesor le harán llegar. Una vez entregada la documentación correspondiente, el alumno estará en disposición de ser evaluado por este sistema.

El 20 % restante se obtendrá de la realización de un examen de prácticas.

La 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.

8.3.2 Convocatoria II:

La 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.

El 20 % restante se obtendrá de la realización de un examen de prácticas.

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.

8.3.3 Convocatoria III:

La 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.

El 20 % restante se obtendrá de la realización de un examen de prácticas.

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.

8.3.4 Convocatoria Extraordinaria:

La 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.

El 20 % restante se obtendrá de la realización de un examen de prácticas.

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.

9. Organización docente semanal orientativa:

Fecha	Grupos Grandes	G. Reducidos				Pruebas y/o act. evaluables	Contenido desarrollado
		Aul. Est.	Lab.	P. Camp	Aul. Inf.		
19-09-2022	3	0	0	0	0	Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos.	
26-09-2022	3	0	0	0	0		
03-10-2022	3	0	0	0	0		
10-10-2022	3	0	0	0	0		
17-10-2022	3	0	0	0	0		
24-10-2022	3	0	0	0	0		
31-10-2022	3	0	0	0	0		
07-11-2022	3	0	0	0	0		
14-11-2022	3	0	0	0	0		
21-11-2022	3	0	0	0	0		
28-11-2022	3	0	3	0	0		
05-12-2022	3	0	3	0	0		
12-12-2022	3	0	3	0	0		
19-12-2022	3	0	3	0	0		
09-01-2023	3	0	3	0	0		
TOTAL	45	0	15	0	0		