

## 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 <sup>º</sup>	CUATRIMESTRE	1 <sup>º</sup>
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	2.84	1.67	0	1.5	0

### DATOS DEL PROFESORADO

#### COORDINADOR

NOMBRE	PEDRO JOSÉ PÉREZ ROMERO		
DEPARTAMENTO	QUÍMICA PROFESOR JOSÉ CARLOS VÍLCHEZ MARTÍN		
ÁREA DE CONOCIMIENTO	QUÍMICA INORGÁNICA		
UBICACIÓN	CIQSO - ED. ROBERT H. GRUBBS		
CORREO ELECTRÓNICO	perez@dqcm.uhu.es	TELÉFONO	959219956
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



# Grado en QUÍMICA

Curso 2018/2019



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

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

### 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

#### PORCENTAJE

20 %

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. Supondrá el 20% de la calificación de la asignatura. Para poder tener en cuenta el 20% correspondiente a las prácticas o actividades académicamente dirigidas, hace falta tener al menos una calificación de 4,5 en el examen final.

¿Existe opción alternativa a la evaluación continua arriba contemplada?

NO

#### EVALUACIÓN FINAL

#### PORCENTAJE

80 %



Universidad  
de Huelva

# Grado en QUÍMICA

Curso 2018/2019



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, y podrá contener cuestiones relacionadas con las prácticas de laboratorio. En el caso de la realización de un examen parcial (con carácter voluntario), el alumno debe sacar un mínimo de un 4,5 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. 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 4,5 en cada una de las partes cada parte 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 4,5 de manera independiente, se procederá al promedio de ambas notas, que supondrán el 80% de la nota final de la asignatura. El 20% restante provendrá de la Evaluación Continua.

---

¿Contempla una evaluación parcial voluntaria? SÍ

---

Ver epígrafe anterior

## SEGUNDA EVALUACIÓN ORDINARIA (SEPTIEMBRE) Y OTRAS EVALUACIONES

- El examen será similar al de la convocatoria de junio, manteniendo los porcentajes mencionados y las calificaciones de la evaluación continua para el cálculo de la nota final. En el caso de que se presenten alumnos que no hayan realizado las prácticas de laboratorios y/o las actividades dirigidas, habrá un examen de esa(s) parte(s) para que puedan contabilizar el 20% indicado en el epígrafe explicativo de la convocatoria de junio.

## OTROS CRITERIOS DE EVALUACIÓN

---

¿Contempla la posibilidad de subir nota una vez realizadas las pruebas? NO

---

### Requisitos para la concesión de matrícula de honor

La nota más alta en el examen (siempre con al menos un 9) obtendrá la Matrícula de Honor. En caso de igualdad, se tendrá en cuenta la nota en las prácticas de laboratorio.

## REFERENCIAS

### BÁSICAS

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