

DATOS DE LA ASIGNATURA							
Titulación:	LICENCIADO EN QUÍMICA				Plan:	2004	
Asignatura:	MÉTODOS ESTRUCTURALES EN QUÍMICA INORGÁNICA				Código:	8064	
Créditos Totales LRU:	4,5	Teóricos:	3	Prácticos:	1,5		
Créditos Totales ECTS	3,6	Teóricos:	2,1	Prácticos:	1,5		
Descriptor (BOE):	Aplicación de las técnicas espectroscópicas a la determinación estructural de compuestos químicos inorgánicos						
Departamento:	QUÍMICA Y CC. MATERIALES	Área de Conocimiento:			Q.INORGÁNICA		
Tipo: (troncal/obligatoria/optativa)	OPTATIVA	Curso:	4º	Cuatrimestre:	2	Ciclo:	2

PROFESOR/ES		E-mail	Ubicación	Teléfono
<b>Responsable :</b>	TOMAS RODRÍGUEZ BELDERRAIN	trodri@dqcm.uhu.es	Facultad Ciencias Experimentales Módulo 5, planta 4ª, despacho 4	959219955
<b>Otros:</b>	MANUEL ROMERO FRUCTOS-VAZQUEZ	manuel.romero@dqcm.uhu.es	Facultad Ciencias Experimentales Módulo 5, planta 4ª, despacho 5	959219956
<b>Dirección página WEB de la asignatura</b>	<b>Moodle</b>			

DOCENCIA EN EL CURSO 2011/12	
<b>Contexto de la asignatura</b>	<p><u>Encuadre en el Plan de Estudios</u></p> <p>Esta asignatura optativa 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><u>Repercusión en el perfil profesional</u></p> <p>Está asignatura ampliará los conocimientos que el alumno ha adquirido sobre la determinación estructural de compuestos químicos.</p>
<b>Objetivo General de la Asignatura:</b>	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 Licenciado en Química.
<b>Competencias y destrezas teórico-prácticas a adquirir por el alumno:</b>	Elucidar estructuras de compuestos inorgánicos mediante el análisis de los datos que proporcionan las diferentes técnicas.
<b>Contribución al desarrollo de habilidades y destrezas Genéricas:</b>	<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>
<b>Prerrequisitos:</b>	Bases de Determinación Estructural de Compuestos Químicos
<b>Recomendaciones</b>	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 de Química Inorgánica Avanzada y la Determinación Estructural.

<b>Bloques Temáticos:</b>	<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>
<b>Competencias a adquirir por Bloques Temáticos</b>	<p>El alumno debe aprender a:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Reconocer el tipo de información, relativa a las características estructurales de las sustancias, que proporciona cada uno de los distintos métodos espectroscópicos.</li> <li>- Seleccionar el tipo de espectroscopía a utilizar para resolver un problema referido a una característica estructural concreta de una sustancia.</li> <li>- Integrar toda la información para generar un modelo de estructura molecular que sea coherente con los datos proporcionados por las técnicas espectroscópicas.</li> <li>- Reconocer cuál es la parte de ambigüedad que puede quedar en la estructura aún después de haber interpretado correctamente los datos.</li> </ul>

<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 <math>^{13}\text{C}</math>: 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>
<p><b>Temario Práctico y Planificación Temporal:</b></p>	<p>Las prácticas consistirán en la interpretación de espectros (reales o reproducidos) de RMN, IR y UV (15 h).</p>

<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 (<u>ver anexo 2</u>).</li> </ol>		
<b>Técnicas Docentes:</b>  (marcar con X lo que proceda)	Sesiones teóricas  x	Presentaciones PC  x	Diapositivas
	Transparencias	Sesiones prácticas  X	Lectura de artículos
	Visitas / excursiones	Web específicas  x	Otras (indicar)
<b>Criterios de Evaluación:</b>  (detallar)	<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 70% de la calificación de la asignatura. El examen constará de cuestiones teórico-prácticas y problemas.</li> <li>2. Calificación obtenida por la realización de Prácticas: 15%</li> <li>3. 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>4. 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 15% de la calificación de la asignatura)</li> </ol>		

<b>Bibliografía Fundamental:</b>  <b>(indicar las 5 más significativas)</b>	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)
<b>Bibliografía Complementaria:</b>  <b>(incluir, si procede páginas Web)</b>	

Horas de trabajo del alumno (ver tabla ECTS)									
Presencial			Estudio			AAD (especificar)  (anexo 2)	Otros Trabajos	Examen incluyendo preparación	TOTAL
Teoría	Problemas	Prácticas	Teoría	Problemas	Prácticas				
14	7	15	17,7	3,4	2,3	9	2,9	18,8	91,1

(AAD = Actividades Académicas Dirigidas)

CRONOGRAMA	(ver anexo 3)
------------	---------------

## ANEXO 1 (ejemplo)

### *Competencias a adquirir por Bloques Temáticos*

La siguiente Tabla recoge las capacidades (columna primera) a adquirir por el estudiante en las distintas unidades temáticas (fila primera) de la asignatura. En cada una de las unidades temáticas se entienden incluidas todas las actividades derivadas de la docencia teórica, práctica y dirigida.

Capacidad	Bloque I (identificar)	Bloque II (identificar)	Bloque III (identificar)	Bloque IV (identificar)	Bloque V
Conocimiento y comprensión de conceptos básicos	X	X	X	X	X
Planificación del trabajo	X	X	X	X	X
Análisis y discusión de bibliografía	X	X	X	X	X
Análisis y discusión de datos	X	X	X	X	X
Resolución de problemas	X	X	X	X	X
Trabajo en equipo	X	X	X	X	X
Compromiso ético y/o ambiental	X	X	X	X	X
Destreza técnica	X	X	X	X	X
Otras .....					

## Anexo 2 (ejemplo)

### ***Relación de Actividades Académicas Dirigidas para la asignatura de Química, de 1er. curso de Ldo. en Ciencias Ambientales***

Se realizarán según el cronograma, para las distintas sesiones. Las AAD se realizarán sobre los distintos bloques temáticos de la asignatura, y lógicamente contribuirán de manera significativa a alcanzar las competencias indicadas en los bloques temáticos.

D1. Resolución de problemas por grupos. Se organizarán grupos de trabajo donde los compañeros se prestarán ayuda a la hora de superar las dificultades que se encuentren en la resolución de cuestiones teórica y problemas. Se generarán cuadernillos de de cuestiones teórica y problemas que se pasarán a otros Grupos de Trabajo. Así, se animará al estudiante a alcanzar los siguientes objetivos: entender y asimilar los conceptos básicos, pasar con facilidad de la teoría a la práctica, trabajar en grupo y ser competitivos.

D2. Resolución de Cuestiones Teóricas y Problemas extraídos de la Bibliografía: de los manuales disponibles en la Biblioteca, el estudiante extraerá aquellos problemas que le resulten interesantes, los resolverá y expondrá en clase.

D3. Elaboración de temas de actualidad relacionados con el medioambiente y la Química: se buscarán temas de las vida cotidiana que relacionen al medioambiente y la Química, de tal manera, que los estudiantes comprendan la importancia de este tipo de asignaturas en esta Titulación.

### ANEXO 3 (ejemplo)

***Cronograma orientativo (se indica la temporización de la asignatura por semanas)***

**Unidades temáticas:**

**BLOQUE 1. Introducción: Tema 1. (1T)**

**BLOQUE 2. Espectroscopía Ultravioleta y visible: Tema 2. (2T+1P)**

**BLOQUE 3. Espectroscopía Vibracional: Tema 3. (2T+1P)**

**BLOQUE 4. Resonancia Magnética Nuclear (RMN): Temas 4 y 5. (5T+3P)**

**BLOQUE 5. Técnicas de caracterización de sólidos: Tema 6. (2T+1P)**

**BLOQUE 6. Determinación Estructural de sustancias desconocidas: Tema 7. (2T+1P)**

Dedicación presencial (incluye actividades dirigidas)

Actividad	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
Clases de teoría	B1 (1T) B2 (1T)	B2 (1T)	B3 (2T)		B4 (1T)	B4 (2T)		B4 (2T)	B5 (1T)		B5 (1T)		B6 (2T)		
Clases prácticas															
Clases de problemas		B2 (1P)			B3 (1P)		B4 (2P)		B4 (1P)		B5 (1p)			B6 (1P)	
Actividades dirigidas				G1-G2 (2 h) D1						G1-G2 (2 h) D2		G1-G2 (2 h) D3		1 hora seminario	G1-G2 (2 h) D4

Según consta en la tabla de adaptación ECTS de primer curso:

(S1, S2, S3... : semana 1, semana 2, semana 3...)

Clases teóricas: 14 horas

Clase de problema: 7 horas

Clases laboratorio: 15 horas, según horario (posibilidad de prácticas intensivas 4 h durante 3 días en la semana. La fecha de comienzo de las prácticas queda pendiente de la coordinación con otras asignaturas prácticas)



Actividades Académicas Dirigidas: 9 horas. Cada grupo de Teoría se dividirá en 2 grupos (G1 y G2) de 10 alumnos

Dedicación no presencial (según consta en la tabla de adaptación ECTS de primer curso)

Actividad	Horas Totales	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
Estudio de teoría	17,7	1	1	1	1	1	2	1	1	1	2	1	1	1	1	1,7
Estudio de problemas	3,4		1					1				1,4				
Estudios de prácticas	2,3	VER CUADRANTE DE PRÁCTICAS DE LA TITULACIÓN														
Exámenes incluyendo preparación	18,8				2	1	1	2	1	2	1	1	2	2	2	1,8