

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA

DATOS DE LA ASIGNATURA					
Asignatura:	Métodos Estructurales en Química Inorgánica			Código:	757509218
Módulo:				Materia:	OBLIGATORIA
Curso:	CUARTO			Cuatrimestre:	1
Créditos ECTS	6.0	Teóricos:	4,5	Prácticos:	1.5
Docencia en inglés:	--				
Departamento/s:	QUÍMICA Y CC. MATERIALES		Área/s de Conocimiento:	QUÍMICA INORGÁNICA	

DATOS DEL PROFESORADO	
Coordinador:	Manuel Romero Frutos-Vázquez
Campus Virtual	<input checked="" type="checkbox"/> Moodle <input type="checkbox"/> Página web:

PROFESOR/A	e-mail	Ubicación	Teléfono
Manuel Romero Frutos-Vázquez	manuel.romero@dqcm.uhu.es	CIQSO-2.13	959219948
Departamento:	QUÍMICA Y CC. MATERIALES		
Horario Tutorías	Lunes 17:00-19:00	Martes 17:00-19:00	Miércoles 17:00-19:00
		Jueves	Viernes

PROFESOR/A	e-mail	Ubicación	Teléfono
Departamento:			
Horario Tutorías	Lunes	Martes	Miércoles
		Jueves	Viernes

Contexto de la asignatura	<p>Encuadre en el Plan de Estudios 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>Repercusión en el perfil profesional 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
Descripción de competencias	
Competencias básicas o transversales	<ul style="list-style-type: none"> • 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 específicas	<ul style="list-style-type: none"> • C4. Conocer las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo espectroscopía. • 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. • 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.
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 Orgánicos".
BLOQUES TEMÁTICOS	BLOQUE 1. Introducción: Tema 1. BLOQUE 2. Espectroscopía Ultravioleta y visible: Tema 2. BLOQUE 3. Espectroscopía Vibracional: Tema 3. BLOQUE 4. Resonancia Magnética Nuclear (RMN): Temas 4 y 5. BLOQUE 5. Técnicas de caracterización de sólidos: Tema 6. BLOQUE 6. Determinación Estructural de sustancias desconocidas: Tema 7.

<p>Temario Teórico y Planificación Temporal:</p>	<p>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. Espectrómetros y Resolución.</p> <p>Tema 2. 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>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.</p> <p>Tema 4. 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>Tema 5. 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 ^{13}C: desplazamiento químico e intensidades, determinación de la multiplicidad. Espectroscopía de RMN 2D: homonuclear y heteronuclear, tipos de experimentos, como obtener información.</p> <p>Tema 6. 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>Tema 7. Resonancia Paramagnética Electrónica (RSE o EPR). Introducción. Aspectos Experimentales de la Resonancia Paramagnética Electrónica. Factores de proporcionalidad. Interacción hiperfina.</p> <p>Tema 8. Determinación Estructural de sustancias desconocidas. Sistemática en la utilización combinada de datos espectroscópicos de las diferentes técnicas. Ejemplos prácticos.</p>
<p>Temario Práctico y Planificación Temporal:</p>	
<p>Actividades a realizar en las horas de Grupo Reducido</p>	<p>/</p>
<p>Actividades Dirigidas y Planificación Temporal</p>	<p>-Realización/ y exposición de trabajo bibliográfico (semana 3-5) -Resolución de cuestiones y problemas relacionados con la materia impartida (semana 7-9)</p>

Metodología Docente Empleada:	<p>1. Impartición de clases teóricas (clase magistral). Los recursos utilizados son la pizarra, proyector o transparencias, proyecciones con ordenador y fotocopias de apoyo con figuras, esquemas y tablas. Las actividades se desarrollan de manera interactiva con los alumnos, discutiendo con ellos los aspectos que resultan más difíciles o especialmente interesantes de cada tema.</p> <p>2. Impartición de clases de problemas. Se resuelven problemas tipo, haciendo hincapié en la comprensión del mecanismo de resolución y resaltando la relación de los problemas con aplicaciones prácticas.</p> <p>3. Realización de actividades académicas dirigidas. 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.</p>				
Criterios de Evaluación:	<p>La calificación final de la asignatura se obtendrá con los siguientes sumandos:</p> <p>1. Calificación obtenida en el examen final de la asignatura. Supondrá el 75% 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 de Competencias: B1, B3, B6, B9, C4, C16, Q1, Q2, Q3, Q6).</p> <p>2. Realización del trabajo práctico de laboratorio y presentación del informe de resultados. (Competencias: B2, B5, B8, B11, C4, C16, P4, P5, Q3, Q4, Q6). Y de actividades académicamente dirigidas, las cuales nos ayudan a realizar una evaluación continua del alumno, supondrán el 25% de la calificación de la asignatura.</p> <p>Para sumar las calificaciones de los dos apartados se deberá obtener una calificación igual o superior a 4 puntos (sobre 10) en el examen final.</p>				
Distribución Horas Presenciales	Grupo Grande	Grupo Pequeño	Laboratorio	Lab. Informática	Campo
	21	13	15		
Bibliografía:	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)				
	Específica:				
	Otros recursos: MANUALES EN PLATAFORMA MOODLE				

ANEXO 1

HORAS DE TRABAJO DEL ALUMNO									
Presencial			Estudio			AAD (especificar)	Otros Trabajos	Examen incluyendo preparación	TOTAL
Teoría	Problemas	Prácticas	Teoría	Problemas	Prácticas				
21	13	15	14	12	7	8,5	14	12	112,5

(AAD = Actividades Académicas Dirigidas)

Cronograma orientativo (se indica la temporalización de la asignatura por semanas)

Unidades temáticas:

Dedicación presencial (incluye actividades dirigidas)

Cuatrimestre

Actividad	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
Teoría	T1	T1	T2	T2	T3	T3	T4	T4	T5	T5	T6	T6	T6	T7	T7
Prácticas				P					P					P	
Actividades dirigidas					A1					A2					A3