



**Master en Ciencia y Tecnología Químicas**  
**Facultad de Ciencias Químicas**  
**Universidad Complutense de Madrid**

**Guía docente:**  
**Experimentación y Modelización**  
**Avanzada en Química: Técnicas**  
**Avanzadas en Química Física:**  
**Fundamentos y Aplicaciones**  
**Código: 605197**

**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**  
**UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE**  
**MADRID**  
**CURSO 2018-2019**

### Nombre de la asignatura (Subject name)

Experimentación y Modelización Avanzada en Química. Técnicas Avanzadas en Química Física: Fundamentos y Aplicaciones.

*Advanced experimentation and modelling in Chemistry. Advanced Techniques on Physical Chemistry: Fundamentals and Applications.*

### Duración

Primer semestre

### Créditos ECTS /Carácter

6 créditos/Obligatoria

### Contenidos básicos (Subject knowledge)

Espectroscopia aplicada. Técnicas para caracterización de materiales complejos: coloides, plásticos, pinturas, recubrimientos, etc. Técnicas de trabajo con fluidos supercríticos. Métodos de simulación de sistemas químicos y biomoleculares.

Applied spectroscopy. Techniques for the characterization of complex materials: colloids, plastics, paints, coatings, etc. Supercritical fluid techniques. Simulation methods for chemical systems and biomolecules.

### Profesores

Los profesores de la asignatura pertenecen a los grupos de investigación del Departamento que disponen de los equipos y técnicas mencionadas en el programa de la asignatura.

Profesor Coordinador de la asignatura	Andrés Guerrero
Grupo/Despacho	Química Supramolecular y Simulación/QA249
Laboratorio/Despacho	QA-247-C
Correo electrónico	aguerrero@quim.ucm.es

Profesora	Albertina Cabañas Poveda
Grupo/Despacho	QA-276
Laboratorio/Despacho	Equilibrio de Fases y Fluidos Supercríticos/QB203-QB204
Correo electrónico	a.cabanas@quim.ucm.es

Profesora	Emilio Aicart
Grupo/Despacho	Química Coloidal y Supramolecular/QB250
Laboratorio/Despacho	QB206-QB207
Correo electrónico	aicart@quim.ucm.es

Profesor	Álvaro Lobato Fernández
Grupo/Despacho	Altas Presiones: Determinación de Parámetros Termodinámicos y Espectroscópicos/QA254
Laboratorio/Despacho	QB-218
Correo electrónico	a.lobato@ucm.es

Profesor	Francisco Ortega
Grupo/Despacho	Sistemas Complejos: Coloides, Polímeros e Interfases/QB212
Correo electrónico	fortega@ucm.es

Profesor	José Antonio Rodríguez Cheda
Laboratorio/Despacho	Cristales líquidos Iónicos/QA275
Correo electrónico	cheda@ucm.es

Profesor	Antonio Rey
Laboratorio/Despacho	Simulación de Sistemas Poliméricos Complejos y Proteínas/QB251
Correo electrónico	areygayo@ucm.es

Profesor	Eduardo Sanz García
Laboratorio/Despacho	Termodinámica Estadística y Simulación/QB256
Correo electrónico	esa01@quim.ucm.es

Profesora	Ana Rubio
Laboratorio/Despacho	Simulación de Sistemas Poliméricos Complejos y Proteínas/QB252
Correo electrónico	amrubioc@ucm.es

Profesora	Mercedes Taravillo
Grupo/Despacho	Altas Presiones: Determinación de Parámetros Termodinámicos y Espectroscópicos/QA258
Laboratorio/Despacho	QB-218
Correo electrónico	mtaravil@ucm.es

## Objetivos y competencias (Abilities and Skills)

### Objetivos

Se comparten los objetivos generales del Master (Objetivos 1-6). Además, se tendrán presentes los siguientes objetivos propios:

1. Proporcionar una base sólida de instrumentación químico-física, no adquirida en el Grado en Química.
2. Desarrollo de habilidades experimentales en entornos multidisciplinares.
3. Familiarización con técnicas avanzadas de caracterización de moléculas, materiales y procesos químico-físicos diversos.
4. Aproximación a técnicas avanzadas de simulación molecular para el estudio de materia condensada, polímeros y biomoléculas.

### Competencias Generales

Se comparten las competencias generales del Master CG1-CG10:

- CG1: Integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de problemas químicos.
- CG2: Desarrollar habilidades teórico-prácticas para resolver problemas de interés científico y social en el contexto de la Química.
- CG3: Interpretar y analizar datos complejos en el entorno de la química y la tecnología química.
- CG4: Reconocer y evaluar la calidad de los resultados teóricos y prácticos utilizando las herramientas adecuadas.
- CG5: Utilizar y reconocer la tecnología de los materiales para poder resolver problemas en el entorno de los mismos.
- CG6: Conocer y comprender los fundamentos científicos del mundo de los materiales y sus interrelaciones entre la estructura, propiedades, procesado y aplicaciones.
- CG7: Correlacionar la composición con la estructura y propiedades de las sustancias.
- CG8.: Aplicar las técnicas de caracterización adecuadas al sistema objeto de estudio.
- CG9: Reconocer la importancia y utilidad de los compuestos químicos en diversos campos.
- CG10: Describir los procesos en los que se basan los diversos usos de los compuestos químicos.

### Competencias Específicas

Se comparten las competencias específicas del Master CE1-CE12.

- CE1: Desarrollar habilidades teórico-prácticas en técnicas instrumentales.
- CE2: Planificar la experimentación de acuerdo a modelos teóricos o experimentales establecidos.
- CE3: Utilizar programas informáticos que permitan plantear y resolver problemas químicos.

- CE4: Desarrollar habilidades teórico-prácticas para la caracterización y análisis de diferentes sustancias químicas y materiales.
- CE5: Desarrollar habilidades teórico-prácticas para relacionar la estructura con las propiedades de sustancias de diferente complejidad.
- CE6: Aplicar conocimientos tanto teóricos como prácticos a la resolución de problemas químicos en entornos poco conocidos.
- CE7: Formular juicios a partir de información química en desarrollo, que incluya reflexión sobre responsabilidades sociales.
- CE8: Seleccionar y utilizar los distintos procedimientos de obtención de los materiales y nanomateriales.
- CE9: Discutir e investigar la influencia de la microestructura en las propiedades de los materiales y relacionarla con leyes físicas adecuadas.
- CE10: Utilizar técnicas de diseño y autoorganización de nanomateriales para preparar nanoestructuras con propiedades de interés tecnológico.
- CE11: Identificar las diferentes tecnologías de procesado y discernir la más adecuada en cada caso
- CE12: Conocer los fundamentos para la selección de materiales y saber aplicarlos al diseño de componentes.

### **Competencias Transversales**

Se comparten las competencias transversales del Master CT1-CT8.

- CT1: Elaborar, escribir y defender informes de carácter científico y técnico.
- CT2: Trabajar en equipo.
- CT3: Valorar la importancia de la sostenibilidad y el respeto al medio ambiente.
- CT4: Demostrar capacidad de autoaprendizaje.
- CT5: Demostrar compromiso ético.
- CT6: Comunicar resultados de forma oral/escrita.
- CT7: Trabajar con seguridad en laboratorios de investigación.
- CT8: Demostrar motivación por la investigación científica.

### **Contextualización en el Master**

Los contenidos propuestos complementan los recogidos por otras asignaturas de los módulos orientados del Máster: Nanociencia y Nanomateriales (Asignaturas de Nanomateriales y Nanoquímica); Instrumentación y Análisis (Sensores y Biosensores); y Química Fundamental (Láseres y Nanoquímica).

En esta asignatura se pretende integrar los conocimientos químico-físicos, y aplicarlos a instrumentación avanzada de caracterización de moléculas y materiales. El alumno realizará su aprendizaje en contacto directo con grupos de investigación activos, utilizando un abanico amplio de técnicas experimentales y simulación, y aplicadas a temáticas muy diversas. Este escenario ayudará al alumno a interpretar la complejidad de los fenómenos químicos desde un prisma multidisciplinar.

## Programa de la asignatura

### **Bloque 1. Técnicas de espectroscopia**

- 1.1 Fluorescencia y/o espectroscopia UV/VIS. Aplicación de técnicas espectroscópicas a la caracterización de sistemas autoensamblados.
- 1.2 Espectroscopia Raman aplicada a ciencia de materiales. Fundamentos y aplicaciones en ciencia de materiales, gemología, conservación del patrimonio.
- 1.3 Espectroscopia de RMN aplicada al estudio de los procesos de difusión: DOSY NMR.

### **Bloque 2. Técnicas de caracterización de materiales complejos y técnicas de trabajo con fluidos supercríticos**

- 2.1 Dispersión de luz estática y dinámica. Aplicación a sistemas coloidales y macromoleculares.
- 2.2 Caracterización de materiales por calorimetría DSC. Estudio de transiciones de fase (poli y meso-morfismo), transiciones vítreas y cristalización mediante DSC y microscopía de luz polarizada.
- 2.3 Técnicas de trabajo con fluidos supercríticos. Celda de observación de volumen variable, dispositivo de micronización por agente antidisolvente, reactores de alta presión, y calorímetro de flujo isoterma.

### **Bloque 3. Técnicas de simulación de sistemas químicos y biomoleculares**

- 3.1 Visualización molecular. Representaciones y su información. Programas de acceso libre. Dibujo de moléculas (Avogadro). Representaciones complejas de estructura y resultados de simulación (VMD).
- 3.2 Dinámica Molecular. Algoritmos. Condiciones periódicas de contorno. Termostatos. Análisis de trayectorias.
- 3.3 Método de Simulación de Monte Carlo. Aplicaciones. Práctica: Modelización de disoluciones diluidas de polímeros flexibles. Caracterización de las dimensiones de un polímero. Efectos de peso molecular. Efectos de la calidad del disolvente. Comportamiento universal.

## Metodología y programación docente

Las actividades formativas relativas a esta asignatura constan de clases teóricas y seminarios con un tratamiento equivalente. A continuación, los alumnos irán abordando el estudio y utilización de las técnicas recogidas en el programa de acuerdo a una división temporal básica: 1 clase teórica o seminario (1 hora) (competencias CG1, CG2, CG3, CG4, CG8, CE1, CE2, CE4, CE5, CE6, CE7, CT3, CT7, CT8), y dos sesiones experimentales (2 horas) (competencias CG2, CG4, CG8, CE1, CE2, CE3, CE4, CE5,

CE6, CE7, CT1, CT2, CT3, CT7, CT8). El profesorado encargado de presentar estas técnicas explicará sus bases teóricas, sus principales aplicaciones, y facilitará una bibliografía básica. Tras esta introducción, los alumnos realizarán las sesiones de laboratorio correspondiente, que en la mayoría de los casos comprenden las actividades siguientes: a) presentación del plan de trabajo a seguir; b) realización de los experimentos; y c) puesta en común de los resultados. Para realizar estas actividades los alumnos contarán con un guión experimental preparado por cada laboratorio.

Al final del curso, cada alumno acometerá el desarrollo de un experimento, discutido previamente con su tutor. Este profesor supervisará su realización en el laboratorio que haga la propuesta. La asignación de este experimento de evaluación será realizada por sorteo.

### Horas de trabajo/créditos de las principales actividades

Actividad	Presencial (h)	Trabajo autónomo (h)	Créditos ECTS
Clases teóricas/Theory classes	10	15	1
Seminarios/Seminars	5	7,5	0,5
Tutorías/ Tutorials	2	3	0,2
Laboratorio/ Lab	55	41	3,84
Realización y presentación de experimento individualizado; examen/ Exam experiment preparation, lab report	3	8,5	0,46
<b>Total</b>	<b>75</b>	<b>75</b>	<b>6</b>

### Técnicas y Métodos de Caracterización (70 horas)

Bloque 1. Técnicas espectroscópicas (26 horas = 6 horas t/s + 20 horas l)

Bloque 2. Técnicas de caracterización de materiales complejos y técnicas de trabajo con fluidos supercríticos (27 horas = 7 horas t/s + 20 horas l).

Bloque 3. Técnicas de simulación de sistemas químicos y biomoleculares (17 horas = 5 horas t/s + 12 horas l)

### Tutorías (2 horas)

El alumno consultará con su profesor tutor todas las cuestiones relacionadas con el desarrollo del curso, con la finalidad de asegurar la ejecución del experimento de evaluación.

### Diseño, realización y presentación del experimento de evaluación (3 horas)

En las dos últimas semanas del curso el alumno deberá de programar y realizar un experimento que requiera alguna/as de las técnicas utilizadas en el curso. Los resultados serán presentados públicamente.

## Resultados del aprendizaje

1. Resolver problemas en diferentes ámbitos de aplicación de las técnicas estudiadas.
2. Planificar experimentos que requieran el uso de las técnicas estudiadas.
3. Utilizar programas informáticos que permitan simular sistemas químico físicos.
4. Comunicar los contenidos que se hayan trabajado en la asignatura.
5. Valorar los contenidos de trabajos científicos de contenidos vistos en el curso.

## Learning outcomes

1. Problem solving in different applications of the studied techniques.
2. Design of experiments using the studied techniques.
3. Use of software programs for chemical physics simulations.
4. Communicate the contents involved in this course.
5. Evaluation of the contents of scientific papers read along the course.

## Evaluación del aprendizaje

Para ser evaluado el estudiante deberá haber participado, al menos, en el 70% de las actividades presenciales. A los alumnos que no aprueben en la convocatoria ordinaria, se les indicará aquellas partes de la evaluación que deberán ser nuevamente evaluadas en la convocatoria extraordinaria.

La evaluación se realizará atendiendo a los siguientes conceptos y coeficientes de ponderación:

**Participación en tutorías y seminarios:** **1/10**

Se evaluará la participación del alumno en tutorías y seminarios.

**Examen práctico:** **2/10**

Se evaluará las habilidades teórico-experimentales adquiridas por el alumno, a través del diseño y realización de un experimento. Esta prueba se realizará bajo la tutela de un profesor de la asignatura. Se puntuarán la comprensión de la fenomenología asociada al experimento, la capacidad de elaboración de un protocolo experimental, la ejecución de la experiencia; así, como el análisis y discusión de resultados.

**Presentación pública del experimento de examen:** **2/10**

Se evaluará la calidad de la presentación (contenidos, organización, y claridad expositiva). La puntuación quedara determinada a partir de la nota media puesta por los profesores asistentes a la prueba.

**Trabajo personal:** **5/10**

Se tendrá en cuenta el trabajo realizado por el alumno a lo largo del curso; valorándose la calidad de los resultados y contestaciones de las cuestiones correspondientes a cada práctica. Los profesores pondrán una nota de su práctica y el valor medio definirá la puntuación global de este apartado.



## Idioma o idiomas en que se imparte

Inglés/Español, el idioma inglés se usará preferentemente.

## Bibliografía y recursos complementarios

### Básica

Atkins, P., de Paula, J.: "Atkins's Physical Chemistry", 8th ed., Oxford University Press, Oxford, 2006. Versión española: "Química Física", Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008.

Bertrán Rusca, J.; Núñez Delgado, J. (coord.): "Química Física", Volumen I y II, Ariel Ciencia, 2002.

Skoog D.A., Holler F.J. and Nieman T.A., "Principios de análisis instrumental", McGrawHill (1992).

### Complementaria

Lakowicz J.R., "Principles of fluorescence spectroscopy", Kluwer (1999).

Perkampus H.H., "UV-Visible spectroscopy", Springer (1992).

Sanders J.K.M. and Hunter B.K., "Modern NMR spectroscopy", Oxford (1993).

Smith E. and Dent G., "Modern Raman spectroscopy", Wiley (2005).

Ferraro, J.R., Nakamoto, K., Brown C.W., "Introductory Raman spectroscopy", Academic Press (2003).

Nakamoto K., "Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds", Part A and B, Wiley (2009).

Berger, S., Braun, S., "200 and More NMR Experiments", Wiley (2004).

McCash E. M., "Surface chemistry", Oxford (2001).

Øgden, L. "Light Scattering Demystified, Theory and Practice", 2013 (disponible gratuitamente en internet).

Berne B.J. and Pecora R., "Dynamic Light Scattering: With Applications to Chemistry, Biology, and Physics", Dover Books on Physics (2000).

Prausnitz J.M., Lichtenthaler R.N., Gomes de Azevedo E., "Molecular thermodynamics of fluid phase equilibria", Edición 3ª, Prentice-Hall, New Jersey (2001).

Haile J.M., "Molecular dynamics simulation", Wiley (1992).

Leach, A.R., "Molecular Modeling", 2ª Ed., Longman (2001).