



Máster en Ciencia y Tecnología Químicas
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Complutense de Madrid

Guía docente:

**EXPERIMENTACIÓN Y
MODELIZACIÓN AVANZADA EN
QUÍMICA: CARACTERIZACIÓN
ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS
INORGÁNICOS**

Código: 605197

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2023-2024

Nombre de la asignatura (Subject name)

Experimentación y modelización avanzada en Química: Caracterización Estructural de Compuestos Inorgánicos

Advanced experimentation and modelling in Chemistry: Structural Characterization of Inorganic Compounds

Duración

Primer semestre

Créditos ECTS /Carácter

6 / Obligatoria en el Módulo 1 (“Métodos teóricos y experimentales en Química”) dentro de la Materia 1.1 (“Experimentación y Modelización Avanzada en Química”)

Contenidos básicos (Subject knowledge)

Difracción de rayos X. Microscopía electrónica y técnicas asociadas. Resonancia magnética nuclear, resonancia paramagnética electrónica y espectrometría de masas aplicadas a compuestos inorgánicos.

X-Ray Diffraction. Electron Microscopy and associated techniques. Nuclear Magnetic Resonance, Electron Paramagnetic Resonance and Mass Spectrometry applied to inorganic compounds.

Profesores y ubicación

Profesora	Ester García González
Departamento	Química Inorgánica
Correo electrónico	esterg@ucm.es

Profesor	Miguel Cortijo Montes
Departamento	Química Inorgánica
Correo electrónico	miguelcortijomontes@ucm.es

Profesor	Khalid Boulahya
Departamento	Química Inorgánica
Correo electrónico	khalid@quim.ucm.es

Profesor	Elizabeth Castillo Martinez
Departamento	Química Inorgánica
Correo electrónico	ecastill@ucm.es

Profesora	María José Mayoral Muñoz
Departamento	Química Inorgánica
Correo electrónico	mj.mayoral@ucm.es

Profesora	Laura Abad Galán
Departamento	Química Inorgánica
Correo electrónico	laabad03@ucm.es

Objetivos y competencias (*Objectives and Competences*)

OBJETIVOS

1. Proporcionar al estudiante una base sólida y equilibrada de conocimientos sobre las técnicas de caracterización estructural de compuestos inorgánicos.
2. Desarrollar en el estudiante capacidades para aplicar los conocimientos, tanto teóricos como prácticos, a la resolución de problemas en entornos nuevos o dentro de contextos poco conocidos tanto químicos como multidisciplinares.
3. Desarrollar capacidades que le permitan comunicar sus conclusiones, conocimientos y razonamientos sobre la caracterización estructural de compuestos inorgánicos.
4. Desarrollar herramientas de aprendizaje que permitan a los estudiantes continuar su formación de un modo autodirigido o autónomo.
5. Generar en el estudiante interés por la investigación científica.

OBJECTIVES

1. *To give the appropriate basis of knowledge on the techniques of structural characterization of inorganic compounds.*
2. *To develop theoretical and practical abilities to solve scientific problems in new fields of chemistry or multidisciplinary areas.*
3. *To develop abilities for communicating their knowledge and conclusions on the structural characterization of inorganic compounds.*
4. *To develop learning tools that allow the students follow the formation in an autonomous manner.*
5. *To induce the interest for the research.*

COMPETENCIAS GENERALES

- CG1.- Integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de problemas para la caracterización estructural de compuestos inorgánicos.
- CG2.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para resolver problemas de interés científico para la caracterización de compuestos inorgánicos.
- CG3.- Interpretar y analizar datos complejos que contribuyan en la caracterización de compuestos inorgánicos.

- CG4.- Reconocer y evaluar la calidad de los resultados teóricos y prácticos utilizando las herramientas adecuadas.
- CG8.- Aplicar las técnicas de caracterización adecuadas en cada caso, y saber discernir la información suministrada por cada técnica.

GENERAL COMPETENCES

- GC1.- To integrate knowledge on the characterization of inorganic compounds and to face up the complexity of questions in the area.*
- GC2.- To develop capabilities on theory and practice to solve scientific questions for the characterization of inorganic compounds.*
- GC3.- To analyse complex data contributing for the structural characterization of inorganic compounds.*
- GC4.- To recognize and evaluate the quality of the results by using the appropriate tools.*
- GC5.- To apply the adequate techniques and to distinguish the information given for each of them.*

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE1.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas en técnicas de caracterización.
- CE2.- Planificar la experimentación en función del compuesto a caracterizar.
- CE3.- Utilizar programas informáticos adecuados para las diferentes técnicas de caracterización.
- CE4.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para la caracterización y análisis de compuestos y materiales inorgánicos.
- CE5.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para relacionar la estructura de los compuestos inorgánicos con sus propiedades.
- CE6.- Aplicar conocimientos tanto teóricos como prácticos sobre la caracterización de compuestos inorgánicos a la resolución de problemas químicos en entornos poco conocidos.

SPECIFIC COMPETENCES

- SC1.- To develop theoretical and practical abilities in characterization techniques.*
- SC2.- To design the research according to the compound to be characterized.*
- SC3.- To use computational tools for the different characterization techniques.*
- SC4.- To develop theoretical and practical abilities for the characterization and analysis of inorganic compounds and materials.*
- SC5.- To develop abilities focused to establish relations between the structure and properties of inorganic compounds.*
- SC6.- To apply the knowledge in the structural characterization of inorganic compounds to solve chemical problems in different areas.*

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- 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.

TRANSVERSAL COMPETENCES

- TC1.- *To elaborate, write and defend scientific and technical reports.*
- TC2.- *To work in multidisciplinary team.*
- TC3.- *To understand the importance of sustainability and respect for the environment.*
- TC4.- *To demonstrate self-learning ability.*
- TC5.- *To show ethical commitment.*
- TC6.- *To communicate results orally/written.*
- TC7.- *To work safely in research laboratories.*
- TC8.- *To show motivation for scientific research.*

Resultados de aprendizaje (*Learning outcomes*)

Al final de la asignatura el alumno debe ser capaz de:

- Aplicar los principios básicos de la difracción en función de la radiación seleccionada y la naturaleza del problema a resolver y en términos del nivel de resolución.
- Aplicar las diferentes técnicas de difracción de rayos X a la resolución y refinamiento de estructuras cristalinas.
- Interpretar diagramas de difracción de electrones obtenidos en sus distintos modos (haz paralelo y haz convergente) para la determinación estructural.
- Interpretar espectros de RMN de cualquier núcleo.
- Interpretar espectros de masas de especies inorgánicas.
- Interpretar espectros de EPR.
- Identificar especies inorgánicas utilizando diversas técnicas de caracterización estructural.
- Aplicar la técnica más adecuada para resolver un problema específico de caracterización estructural del material.

At the end of this subject, the students will be able to:

- *Apply the basic principles of diffraction according to the selected radiation, depending on the nature of the problem to be solved in terms of the level of resolution.*
- *Apply the different techniques of X-ray diffraction for solving and refining crystal structures.*
- *Interpret electron diffraction patterns obtained in their different modes for the structural elucidation*
- *Interpret NMR spectra from any nucleus applied to inorganic species.*
- *Interpret mass spectra of inorganic species.*
- *Interpret EPR spectra.*
- *Identify inorganic species by using different structural characterization techniques.*

- *Apply the most adequate technique to tackle a specific problem in the material structural characterization.*

Contextualización en el Máster

La asignatura “Experimentación y Modelización Avanzada en Química: Caracterización Estructural de Compuestos Inorgánicos” se oferta dentro del módulo 1 “Métodos Teóricos y Experimentales en Química”, con un carácter obligatorio en la materia 1.1 “Experimentación y Modelización Avanzada en Química”.

Se pretende que el estudiante conozca y sepa utilizar técnicas avanzadas para la caracterización estructural de compuestos inorgánicos. Se resalta la complementariedad de las técnicas espectroscópicas y las difractométricas en la determinación estructural de una sustancia para que el estudiante seleccione aquella/s más adecuada/s en cada situación particular. Se pretende, por último, que sea capaz de describir una estructura cristalina y de analizar la validez de los datos finales obtenidos en un estudio, así como de aplicar conjuntamente las diferentes técnicas instrumentales a la determinación de la estructura de una sustancia.

Esta asignatura mantiene relación con el resto de las asignaturas del módulo 1, en el que se pretende que el estudiante se familiarice con métodos y técnicas avanzadas en experimentación y modelización en química y que adquiera conocimientos avanzados de estructuras químicas y su síntesis.

Programa de la asignatura

Bloque I. Fundamentos de la difracción

Geometría y física de la difracción.

Bloque II. Resolución y refinamiento de estructuras por difracción de Rayos-X

Monocristal.

Materiales policristalinos.

Bloque III. Microscopia electrónica

Difracción de electrones: SAED, CBED y microdifracción

Microscopia electrónica de alta resolución (HREM): obtención, cálculo y procesado de imágenes.

Técnicas asociadas: XEDS, EELS

Bloque IV. Técnicas espectroscópicas para determinación de entornos locales

Resonancia magnética nuclear.

Resonancia paramagnética electrónica.

Espectrometría de masas.

Metodología y programación docente

La práctica docente seguirá una metodología mixta basada en el aprendizaje cooperativo, el aprendizaje colaborativo y el autoaprendizaje. Esta metodología se desarrollará a través de clases de seminarios (2,0 ECTS; CG2, CG3, CG4, CG8, CE1, CE2, CE5) en las que se explicarán los fundamentos de las diferentes técnicas de caracterización, y que contribuirán a un mejor desarrollo de las clases prácticas (3,4 ECTS; CG2, CG4, CG8, CE1, CE2, CE3, CE4, CE5, CE6, CT1, CT2, CT3, CT7, CT8). Los alumnos tendrán que elaborar un informe de las diferentes actividades prácticas que desarrollen en la asignatura. Como apoyo, se proporcionará a los alumnos el material docente apropiado a través del **Campus Virtual**, en inglés o en español dependiendo de la fuente de procedencia.

Se realizarán también tutorías dirigidas (0,2 ECTS; CG4, CE4, CT2, CT3, CT5) sobre cuestiones relacionadas con el temario de la asignatura. Ellas servirán para conocer las capacidades de los alumnos en la adquisición de conocimientos y competencias de la materia.

Además, los alumnos elaborarán trabajos individuales o en grupo relacionados con los contenidos de la asignatura (CG1, CG2, CG8, CE5, CE6, CT1, CT2, CT3, CT4, CT5, CT6, CT8). Ello permitirá que los estudiantes pongan en práctica sus capacidades en la obtención de información, empleando la bibliografía o recursos adecuados. También podrán asistir a aquellas conferencias, recomendadas por la Comisión de Coordinación del Máster, cuyo perfil sea más adecuado a los contenidos de la materia. Estas actividades, junto con los exámenes orales o escritos, supondrán 0,4 ECTS.

PROGRAMACIÓN DOCENTE

Actividad	Presencial (hrs)	Trabajo autónomo (hrs)	Créditos ECTS (horas)
Seminarios / Seminars	20	30	2,0 (50,0)
Prácticas / Practical works	48	37	3,4 (85,0)
Tutorías/ Tutorials	2	3	0,2 (5,0)
Preparación de trabajos, conferencias y exámenes / Works preparation, conferences and exams	4	6	0,4 (10,0)
Total	74	76	6 (150)

Evaluación del aprendizaje

El rendimiento académico del estudiante se computará atendiendo a la calificación del examen final y la evaluación del trabajo personal en los siguientes porcentajes:

- Examen escrito u oral: 30 %

Se realizará un examen final según la convocatoria oficial.

- Trabajo personal y prácticas de laboratorio: 60 %

La evaluación del trabajo individual del alumno se llevará a cabo teniendo en cuenta su destreza en la resolución de problemas y

ejercicios propuestos durante la realización de las prácticas. Se podrá solicitar la entrega de algunas cuestiones.

- Participación en tutorías y seminarios: 10 %
Se valorará la capacidad y actitud que demuestre en las actividades planteadas.

Para poder ser evaluado, el estudiante deberá haber participado, al menos, en el 70% de las actividades presenciales.

Las calificaciones estarán basadas en la puntuación absoluta sobre 10 puntos y de acuerdo con la escala establecida en el RD 1125/2003.

Idioma o idiomas en que se imparte

Español

Bibliografía y recursos complementarios

- Drago, R. S.: “*Physical Methods for Chemists*”, 2ª Ed., Saunders, 1992.
- Egerton, R. F.: “*Electron Energy-Loss Spectroscopy in the Electron Microscope*”, 2ª Ed., Plenum Press, 1996.
- Hammond, C.: “*The Basics of Crystallography and Diffraction*”, 2ª Ed., Oxford University Press, 2001.
- Henderson, W.; McIndoe, J. S.: “*Mass Spectrometry of Inorganic and Organometallic Compounds*”, Wiley Series of Advances Textbooks, 2005.
- Iggo, J. A.: “*NMR Spectroscopy in Inorganic Chemistry*”, Oxford University Press, 1999.
- “*International Tables for Crystallography*”, Vol. A, 5ª Ed., Kluwer Academic Publishers, 2002.
- Pico, C.; López, M. L.; Veiga, M. L.: “*Cristaloquímica de Materiales*”, Síntesis, 2007.
- Shindo, D.; Hiraga, K.: “*High Resolution Electron Microscopy for Materials Science*”, Springer, 1996.
- Shindo, D.; Oikawa, T.: “*Analytical Electron Microscopy for Materials Science*”, Springer, 2002.
- Spence, J. C. H.: “*Experimental High Resolution Electron Microscopy*”, 3ª Ed., Oxford University Press, 2004.
- Stout, G. H.; Jensen, L. H.: “*X-Ray Structure Determination*”, Wiley, 1989.
- Weil, J. A.; Bolton, J. R.; Wertz, J. E.: “*Electron Paramagnetic Resonance*”, Wiley, 1994.
- Williams, D. B.; Carter, C. B.: “*Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Materials Science*”, 2ª Ed., Springer, 2009.
- Henderson, W; McIndoe, JS, “*Mass Spectrometry of Inorganic, Coordination and Organometallic Compounds*”, John Wiley & Sons Ltd, 2005
-