

60453 - Técnicas de caracterización estructural

Información del Plan Docente

Año académico: 2024/25

Asignatura: 60453 - Técnicas de caracterización estructural

Centro académico: 100 - Facultad de Ciencias

Titulación: 543 - Máster Universitario en Química Molecular y Catálisis Homogénea

Créditos: 6.0

Curso: 1

Periodo de impartición: Primer semestre

Clase de asignatura: Obligatoria

Materia:

1. Información básica de la asignatura

1.1. Objetivos: El objetivo principal es proporcionar al alumno una variedad de herramientas de caracterización estructural y medida de propiedades físicas y químicas, imprescindibles en la investigación en síntesis química y catálisis en el ámbito académico y en la industria. Se centra en cuatro técnicas: espectroscopia de resonancia magnética nuclear, espectrometría de masas, espectrofotometría visible-ultravioleta y de fluorescencia y técnicas electroquímicas. Se pretende proporcionar al alumno una visión de conjunto (equipamiento específico e interpretación de datos) y cómo combinar la información obtenida de cada una de las técnicas, orientada a la caracterización estructural.

1.2. Sentido de la asignatura: La determinación de las propiedades físicas y/o químicas de nuevos compuestos, una vez conocida la estructura, permite establecer la relación estructura-propiedades-aplicaciones. A nivel general, es una asignatura trascendental y clave para el desarrollo armónico de las demás.

1.3. Recomendaciones: conocimientos previos de métodos instrumentales y espectroscópicos y comprensión de textos en inglés científico.

2. Resultados de aprendizaje

Conocer los fundamentos físicos en los que se basan todas las técnicas que se presentan a lo largo de la asignatura y el tipo de información que genera/proporciona cada técnica.

Interpretar la información proporcionada por los espectros o diagramas que genera cada técnica y relacionarla directamente con la estructura del compuesto.

Conocer e identificar para cada una de las técnicas la instrumentación que utiliza, sus componentes más relevantes y sus funciones específicas.

Llevar a cabo la preparación de muestras, realizar experimentos programados y diseñar nuevos (en los casos en los que el software y la técnica lo permitan) y manipular los parámetros más relevantes de cada experimento para lograr una información determinada.

Adquirir una visión integrada de las distintas técnicas, seleccionando aquella técnica o combinación de técnicas particulares que sean más adecuadas para la resolución de problemas específicos.

3. Programa de la asignatura

Bloque 1. RMN

Tema 1. Fundamentos físicos.

Tema 2. Experimentos 1D.

Tema 3. El efecto NOE.

Tema 4. Experimentos 2D.

Tema 5. Instrumentación.

Tema 6. Procesos dinámicos

Bloque 2. Espectroscopia UV-Vis y Luminiscencia

Tema 7. UV-Vis, principios.

Tema 8. UV-Vis, aplicaciones. Colorantes. Vapocromismo y solvocromismo.

Tema 9. Luminiscencia, principios.

Tema 10. Luminiscencia, aplicaciones. Dispositivos emisores de luz y sensores.

Bloque 3. Espectrometría de Masas y técnicas acopladas

Tema 11. Fundamentos de espectrometría de masas.

Tema 12. Espectrometría de masas tándem.

Tema 13. Técnicas cromatográficas acopladas a la espectrometría de masas.

Bloque 4. Técnicas electroquímicas

Tema 14. Conceptos básicos.

Tema 15. Voltametría cíclica y otras técnicas electroquímicas.

4. Actividades académicas

Metodología basada en:

1. clases expositivas de carácter participativo (3 ECTS).

2. clases de problemas y seminarios en las que se analizan problemas reales y se discute cómo se interpretan los resultados de las distintas técnicas en publicaciones científicas (2 ECTS).

3. Sesiones prácticas, de asistencia obligatoria, en las que se analizan las partes del equipo instrumental y su funcionamiento (1 ECTS).

4. Realización de un trabajo dirigido de carácter práctico.

Otras actividades:

-Tutorías en grupo o individualizadas.

-Los alumnos podrán asistir a las sesiones prácticas correspondientes al curso o realizar el curso de postgrado del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) "Curso práctico de técnicas de determinación estructural".

5. Sistema de evaluación

Tipo de pruebas, criterios de evaluación y niveles de exigencia

La evaluación continua de esta asignatura está basada en las siguientes actividades con la ponderación que se indica:

1. Una prueba escrita a realizar en el periodo de evaluación global consistente en la resolución de problemas y cuestiones teóricas y teórico-prácticas (50 %)

2. Preparación y exposición oral, de forma individual o en grupo, de un trabajo dirigido de carácter práctico (25 %)

3. Controles de resolución de problemas y cuestiones teórico-prácticas de cada técnica o análisis de publicaciones relativas al tema (25 %).

La calificación final será la mejor entre NOTA 1 ó NOTA 2:

NOTA 1 = 0,25 x nota de controles + 0,25 x nota del trabajo presentado + 0,50 x nota prueba escrita global

NOTA 2 = nota prueba escrita global.

La calificación de los alumnos en la segunda convocatoria anual se realizará mediante una única prueba escrita que comprenderá todos los temas de teoría, problemas y práctica definidos como actividades de aprendizaje programadas.

6. Objetivos de Desarrollo Sostenible

4 - Educación de Calidad

7 - Energía Asequible y No Contaminante

12 - Producción y Consumo Responsables