



## 1. DATOS GENERALES

<b>Asignatura:</b> TÉCNICAS AVANZADAS DE DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL	<b>Código:</b> 310590
<b>Tipología:</b> OPTATIVA	<b>Créditos ECTS:</b> 6
<b>Grado:</b> 2326 - MASTER UNIVERSITARIO EN INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA	<b>Curso académico:</b> 2019-20
<b>Centro:</b> 1 - FTAD. CC. Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS CR.	<b>Grupo(s):</b> 20
<b>Curso:</b> 1	<b>Duración:</b> C2
<b>Lengua principal de impartición:</b> Español	<b>Segunda lengua:</b> Inglés
<b>Uso docente de otras lenguas:</b>	<b>English Friendly:</b> S
<b>Página web:</b>	<b>Bilingüe:</b> N

Profesor: ANTONIO DE LA HOZ AYUSO - Grupo(s): 20				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
San Alberto Magno	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.	926295411	antonio.hoz@uclm.es	Lunes, Martes y Jueves 10 a 12 h
Profesor: BLANCA ROSA LOURDES MANZANO MANRIQUE - Grupo(s): 20				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
San Alberto Magno/first floor	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.	926052050	blanca.manzano@uclm.es	Monday, wednesday 16.30 to 18.30 h tuesday and thursday 19:00-20:00
Profesor: ANA MARIA RODRIGUEZ FERNANDEZ-PACHECO - Grupo(s): 20				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Politécnico/A23	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.	926051961	anamaria.rfdez@uclm.es	Se anunciará a través del Moodle a principio de curso

## 2. REQUISITOS PREVIOS

No se han establecido.

## 3. JUSTIFICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS, RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS Y CON LA PROFESIÓN

La materia técnicas avanzadas de determinación estructural está diseñada para enseñar las técnicas más habituales para la caracterización de nuevos compuestos orgánicos e inorgánicos. Los alumnos deberán saber aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de estructuras, de procesos químicos, estereoquímica, etc.... Asimismo se debe hacer evidente cómo estas técnicas están evolucionando y desarrollando nuevas metodologías con aplicaciones muy variadas desde la biología y medicina a la ciencia de materiales. Los alumnos deberán:

- Conocer el efecto de los pulsos de radiofrecuencias en RMN.
- Conocer el origen de la información que se transmite en las técnicas mono y bidimensionales.
- Conocer las aplicaciones de las principales secuencias de pulsos mono y bidimensionales.
- Conocer los principales métodos de transferencia de sensibilidad.
- Conocer las técnicas más avanzadas de RMN, resonancia de sólidos, gradientes, resonancia inversa, imagen, difusión...
  - Manejar software de procesado y simulación de RMN.
  - Conocer el fenómeno de la difracción de rayos X aplicado a la determinación de estructuras a partir de monocristales.
  - Saber manejar bases de datos cristalográficos y programas de tratamiento de datos de estructuras determinadas por difracción de rayos X.
  - Conocer el fundamento y la información que suministran diferentes técnicas, tanto de microscopía electrónica como espectroscópicas, de caracterización de superficies y de compuestos de coordinación.
  - Saber utilizar las técnicas adecuadas y obtener información para la caracterización de catalizadores y precatalizadores.
- Ser capaz de analizar la información que suministra una determinada técnica con objeto de deducir la estructura del derivado objeto de estudio y saber seleccionar y aplicar la técnica de caracterización más adecuada para cada tipo de análisis estructural.

Es una asignatura íntimamente relacionada con todas las asignaturas metodológicas del Master, Espectrometría de masas, técnicas avanzadas de análisis instrumental, química computacional, ... con las que se complementa eficazmente, así como con las asignaturas avanzadas de las áreas de Química inorgánica y Química orgánica, fundamentos de catálisis homogénea, materiales en química orgánica, química inorgánica avanzada, química orgánica avanzada, ya que se aplican fundamentalmente al análisis y caracterización de compuestos orgánicos e inorgánicos. Finalmente, con las asignaturas prácticas del Master, química experimental avanzada y trabajo fin de master, donde se aplicarán estas técnicas.

## 4. COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN QUE LA ASIGNATURA CONTRIBUYE A ALCANZAR

## Competencias propias de la asignatura

Código	Descripción
E05	Conocer la utilidad de las técnicas de separación, análisis y determinación estructural, su aplicación conjunta en la resolución de problemas de investigación, así como tener destreza en la utilización de dichas técnicas.
E06	Conocer los principales conceptos y aplicaciones de Química de la coordinación y organometálica.

E07	Conocer los principios de química sostenible y las normas de seguridad para la manipulación de productos químicos conocidos o de nueva síntesis fruto de actividades de investigación.
E08	Conocer la cinética de los procesos químicos, incluyendo la catálisis, los mecanismos de reacción y los métodos y técnicas utilizados para su determinación.
E10	Ser capaz de abordar problemas de síntesis, incluyendo la planificación y desarrollo de preparación de compuestos con nuevas propiedades, los métodos de control de la selectividad, y especialmente los métodos estereoselectivos.
G01	Conocer la precisión de los datos experimentales y su utilización para la planificación del trabajo experimental de investigación.
T02	Capacidad para trabajar en equipo y, ejercer funciones de liderazgo, fomentando el carácter emprendedor
T04	Capacidad de utilización de software específico para investigación en química.
T05	Capacidad de obtener información bibliográfica a nivel de investigación, incluyendo recursos en Internet (bases de datos, bibliografía científica especializada, redes sociales, etc...), así como llevar a cabo una selección y clasificación de la misma.
T06	Tener aptitud para desarrollarse profesionalmente mediante la formación continua.

## 5. OBJETIVOS O RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPERADOS

### Resultados de aprendizaje propios de la asignatura

#### Descripción

Conocer el efecto de los pulsos de radiofrecuencias en RMN.

Conocer el fenómeno de la difracción de rayos X aplicado a la determinación de estructuras a partir de monocristales.

Conocer el fundamento y la información que suministran diferentes técnicas, tanto de microscopía electrónica como espectroscópicas, de caracterización de superficies y de compuestos de coordinación.

Conocer los principales métodos de transferencia de sensibilidad.

Conocer las técnicas más avanzadas de RMN, resonancia de sólidos, gradientes, resonancia inversa, imagen, difusión, etc.

Manejar software de procesado y simulación de RMN.

Saber manejar bases de datos cristalográficos y programas de tratamiento de datos de estructuras determinadas por difracción de rayos X.

Saber utilizar las técnicas adecuadas y obtener información para la caracterización de catalizadores y precatalizadores.

Ser capaz de analizar la información que suministra una determinada técnica con objeto de deducir la estructura del derivado objeto de estudio y saber seleccionar y aplicar la técnica de caracterización más adecuada para cada tipo de análisis estructural.

Conocer el origen de la información que se transmite en las técnicas mono y bidimensionales.

Conocer las aplicaciones de las principales secuencias de pulsos mono y bidimensionales.

## 6. TEMARIO

**Tema 1: Aplicaciones dinámicas de la RMN**

**Tema 2: Experimentos con secuencias de pulso**

**Tema 3: Resonancia en dos dimensiones**

**Tema 4: Reactivos de desplazamiento. Agentes de relajación.**

**Tema 5: Otras técnicas y aplicaciones de la RMN**

**Tema 6: Estrategias para la elucidación estructural por RMN mono y bidimensional (seminarios)**

**Tema 7: Espectroscopia vibracional. Aplicación a la caracterización de superficies**

**Tema 8: Espectroscopias de rayos X y de electrones para la caracterización de compuestos inorgánicos.**

**Tema 9: Microscopia electrónica. Otras técnicas de caracterización de compuestos inorgánicos.**

**Tema 10: Fundamentos de la caracterización estructural por difracción de rayos X.**

**Tema 11: Bases de datos estructurales**

## 7. ACTIVIDADES O BLOQUES DE ACTIVIDAD Y METODOLOGÍA

Actividad formativa	Metodología	Competencias relacionadas (para títulos anteriores a RD 822/2021)	ECTS	Horas	Ev	Ob	Rec	Descripción
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL]	Método expositivo/Lección magistral	E05 E06 E08 E10 G01 T06	0.92	23	S	S	S	Enseñanza presencial, impartiendo clases teóricas y resolución de ejercicios.
Talleres o seminarios [PRESENCIAL]	Trabajo dirigido o tutorizado	E05 E06 E08 E10 G01 T02 T05 T06	0.64	16	S	S	S	Seminarios de problemas y casos prácticos.
Tutorías de grupo [PRESENCIAL]	Tutorías grupales	E05 E08 E10 G01 T06	0.16	4	S	N	S	Discusión de conceptos y resolución de dudas.
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA]	Trabajo autónomo	E05 E08 E10 G01 T02 T05 T06	3.8	95	S	N	S	Documentación, preparación, aprendizaje y resolución de casos prácticos.
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA]	Trabajo autónomo	E05 E08 E10 G01 T05 T06	0.4	10	S	N	S	
Pruebas de progreso [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	E05 E08 E10 G01 T05 T06	0.08	2	S	N	S	Preparación y realización de evaluaciones
<b>Total:</b>			<b>6</b>	<b>150</b>				
<b>Créditos totales de trabajo presencial: 1.8</b>			<b>Horas totales de trabajo presencial: 45</b>					
<b>Créditos totales de trabajo autónomo: 4.2</b>			<b>Horas totales de trabajo autónomo: 105</b>					

Ev: Actividad formativa evaluable

Ob: Actividad formativa de superación obligatoria

Rec: Actividad formativa recuperable

## 8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y VALORACIONES

Valoraciones	
	Estud.

Sistema de evaluación	Estudiante presencial	semipres.	Descripción
Valoración de la participación con aprovechamiento en clase	10.00%	0.00%	
Resolución de problemas o casos	30.00%	20.00%	
Elaboración de trabajos teóricos	25.00%	20.00%	
Presentación oral de temas	20.00%	10.00%	
Prueba final	15.00%	50.00%	
<b>Total:</b>	<b>100.00%</b>	<b>100.00%</b>	

**Criterios de evaluación de la convocatoria ordinaria:**

- Evaluación continua de las distintas actividades realizadas por el alumno.
- Prueba final

**Particularidades de la convocatoria extraordinaria:**

- Evaluación continua de las distintas actividades realizadas por el alumno.
- Prueba final

9. SECUENCIA DE TRABAJO, CALENDARIO, HITOS IMPORTANTES E INVERSIÓN TEMPORAL	
No asignables a temas	
Horas	Suma horas
<b>Tema 1 (de 11): Aplicaciones dinámicas de la RMN</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	3.1
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	.46
<b>Tema 2 (de 11): Experimentos con secuencias de pulso</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	4
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	6.2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	.92
<b>Tema 3 (de 11): Resonancia en dos dimensiones</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	5
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	7.75
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.15
<b>Tema 4 (de 11): Reactivos de desplazamiento. Agentes de relajación.</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	1
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.55
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	.23
<b>Tema 5 (de 11): Otras técnicas y aplicaciones de la RMN</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	1
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	4.65
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	.69
<b>Tema 6 (de 11): Estrategias para la elucidación estructural por RMN mono y bidimensional (seminarios)</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	12
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	1
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	18.6
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	2.76
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	3
<b>Comentario:</b> Evaluación de los temas 1-6	
<b>Tema 7 (de 11): Espectroscopia vibracional. Aplicación a la caracterización de superficies</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	2
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	6.2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	.92
<b>Tema 8 (de 11): Espectroscopias de rayos X y de electrones para la caracterización de compuestos inorgánicos.</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	4
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	1
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	9.3
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.38
<b>Tema 9 (de 11): Microscopia electrónica. Otras técnicas de caracterización de compuestos inorgánicos.</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	2

Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	1
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	7.75
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.15
<b>Tema 10 (de 11): Fundamentos de la caracterización estructural por difracción de rayos X.</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	2
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	6.2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	.92
<b>Tema 11 (de 11): Bases de datos estructurales</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	1
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	3
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	1
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	6.2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	.92
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	3
<b>Comentario:</b> Evaluación de los temas 7-11	
<b>Actividad global</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Suma horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	25
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	25
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	5
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	77.5
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	11.5
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	6
<b>Total horas: 150</b>	

10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS					
Autor/es	Título/Enlace Web	Editorial	Población	ISBN	Año Descripción
A. K. Cheetham, P. Day	Solid State Chemistry	Oxford University Press		5	1991
A. R. West	Basic Solid State Chemistry	WILEY		0-471-91798-2	1984
F. A. Cotton	La teoría de grupos aplicada a la química	Limusa	Mexico	968-18-1047-3	
H. Friebolin	Basic One- and Two Dimensional NMR Spectroscopy <a href="https://www.wiley.com/en-us/Basic+One+and+Two+Dimensional+NMR+Spectroscopy%2C+5th%2C+Completely+Revised+and+Updated+Edition-p-9783527327829">https://www.wiley.com/en-us/Basic+One+and+Two+Dimensional+NMR+Spectroscopy%2C+5th%2C+Completely+Revised+and+Updated+Edition-p-9783527327829</a>	WILEY		978-3-527-32782-9	2016
H. Günther	NMR Spectroscopy <a href="https://www.wiley.com/en-us/NMR+Spectroscopy%3A+Basic+Principles%2C+Concepts+and+Applications+in+Chemistry%2C+3rd+Edition-p-9783527330003">https://www.wiley.com/en-us/NMR+Spectroscopy%3A+Basic+Principles%2C+Concepts+and+Applications+in+Chemistry%2C+3rd+Edition-p-9783527330003</a>	WILEY		978-3-527-33004-1	2013
J. C. Vickerman, I. S. Gimore, Eds.	Surface Analysis. The Principal Techniques	Wiley	Chichester	9780470017630	2009
J. M. Albella, A. M. Cintas, T. Miranda, J. M. Serratosa	Introducción a la Ciencia de materiales. Técnicas de preparación y caracterización	CSIC		84-00-07343-6	1993
J. M. Thomas, W. J. Thomas	Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis	VCH		3-527-29239-X	1997
Jenny P. Glusker; Mitchell Lewis and Miriam Rossi	Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists	VCH		0-89573-273-4	1994
M. Martínez-Ripoll, F. Hernández-Cano	Cristalografía <a href="http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index.html">http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index.html</a>				2016
R. Freeman	Magnetic Resonance in Chemistry and Medicine <a href="https://global.oup.com/academic/product/magnetic-resonance-in-chemistry-and-medicine-9780199262250?cc=es&amp;lang=en&amp;">https://global.oup.com/academic/product/magnetic-resonance-in-chemistry-and-medicine-9780199262250?cc=es&amp;lang=en&amp;</a>	Oxford University Press		0-19-926225-X	2005
S. Berger, S. Braun	200 and More NMR Experiments: A Practical Course <a href="https://www.wiley.com/en-us/200+and+More+NMR+Experiments%3A+A+Practical+Course-p-9783527310678">https://www.wiley.com/en-us/200+and+More+NMR+Experiments%3A+A+Practical+Course-p-9783527310678</a>	VCH		978-3-527-31067-8	2004