



1. DATOS GENERALES

Asignatura: TÉCNICAS AVANZADAS DE CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL

Tipología: OBLIGATORIA

Grado: 2366 - MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA

Centro: 1 - FTAD. CC. Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS CR.

Curso: 1

Lengua principal de impartición: Español

Uso docente de otras lenguas:

Página web: <https://www.uclm.es/es/Estudios/masteres/master-quimica>

Código: 311123

Créditos ECTS: 6

Curso académico: 2023-24

Grupo(s): 20

Duración: Primer cuatrimestre

Segunda lengua: Inglés

English Friendly: S

Bilingüe: 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 miércoles de 17 a 19 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	Martes, miércoles y jueves de 16.30 a 18.30 h

2. REQUISITOS PREVIOS

No se han establecido requisitos previos para cursar la asignatura

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

En esta asignatura se pretende formar al alumno en diferentes técnicas de caracterización para poder determinar las características y propiedades de compuestos moleculares y materiales. Se pretende que adquiera criterio para cómo abordar la caracterización completa del compuesto objeto de estudio.

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

Competencias propias de la asignatura

Código	Descripción
CB08	Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
CB09	Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
CB10	Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
CE04	Evaluar la utilidad de las técnicas de separación, análisis y determinación estructural, para su aplicación conjunta en la resolución de problemas, así como tener destreza en la utilización de dichas técnicas tanto en laboratorios de investigación como de rutina que aplican métodos de análisis y/o de síntesis orgánica e inorgánica.
CE09	Desarrollar experimentos que sirvan de base para las actividades de I+D+i en el ámbito de la Química, facilitando su transferencia al mundo productivo mediante nuevos procedimientos normalizados de trabajo validados para laboratorios de rutina y/o control.
CG02	Alcanzar una formación avanzada en los fundamentos y potencial de las técnicas instrumentales que la Química dispone para el desarrollo de la investigación científica y/o la aplicación en laboratorios especializados de control.
CG03	Alcanzar una formación avanzada en la gestión y el manejo de las técnicas y procedimientos experimentales del laboratorio químico.

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 RX aplicado a la determinación de estructuras a partir de monocristales o de polvo microcristalino.

Conocer el fundamento y la información que suministran técnicas de espectroscopia RAMAN e IR, especialmente aplicadas al estudio de superficies.

Conocer el fundamento y la información que suministran técnicas de Espectroscopías de RX (XRF, XANES, EXAFS) y Espectroscopías de electrones (XPS, Auger)

Conocer el fundamento y la información que suministran técnicas de microscopia electrónica tanto de barrido (SEM), como de transmisión (TEM) y de sonda local (AFM y STM). Utilización de microscopia electrónica para análisis cuantitativo (SEM-EDX).

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

Manejar software de procesado y simulación de diferentes técnicas.

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 mas adecuada para cada tipo de análisis estructural.

Conocer los principales métodos de transferencia de sensibilidad

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

6. TEMARIO

Tema 1: Fundamento y aplicaciones de SEM y TEM estudios cuantitativos (EDX)

Tema 2: Fundamento y aplicaciones de microscopía de sonda local (AFM y STM)

Tema 3: Espectroscopia IR y Raman. Fundamento y aplicaciones especialmente a la determinación de estructuras de superficies

Tema 4: Espectroscopías de electrones (XPS, UPS, Auger). Fundamento y aplicaciones

Tema 5: Espectroscopías de RX (XRF, XANES, EXAFS). Fundamento y aplicaciones

Tema 6: Difracción de RX de monocristal y de polvo. Fundamento y aplicaciones

Tema 7: Aplicaciones dinámicas de la RMN

Tema 8: Experimentos con secuencias de pulso

Tema 9: Resonancia en dos dimensiones

Tema 10: Reactivos de desplazamiento. Agentes de relajación

Tema 11: Otras técnicas y aplicaciones de la RMN

7. ACTIVIDADES O BLOQUES DE ACTIVIDAD Y METODOLOGÍA

Actividad formativa	Metodología	Competencias relacionadas (para títulos anteriores a RD 822/2021)	ECTS	Horas	Ev	Ob	Descripción
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA]	Lectura de artículos científicos y preparación de recensiones	CB08 CB09	1.44	36	S	S	
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL]	Método expositivo/Lección magistral	CB08 CB09 CB10 CE04 CE09 CG02 CG03	1.2	30	S	S	
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA]	Trabajo autónomo	CB08 CB10 CE04 CG02	1.44	36	S	N	
Análisis de artículos y recensión [AUTÓNOMA]	Trabajo autónomo	CB08 CB09	1.2	30	S	S	
Presentación de trabajos o temas [PRESENCIAL]	Aprendizaje basado en problemas (ABP)	CB08 CB09 CB10	0.12	3	S	N	
Foros y debates on-line [AUTÓNOMA]	Aprendizaje cooperativo/colaborativo	CB09 CB10 CE04	0.28	7	S	N	
Prueba final [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	CB09 CG02	0.08	2	S	S	
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL]	Trabajo dirigido o tutorizado	CB08 CB09 CB10 CE04 CE09 CG02	0.24	6	S	S	
Total:			6	150			
Créditos totales de trabajo presencial: 1.64			Horas totales de trabajo presencial: 41				
Créditos totales de trabajo autónomo: 4.36			Horas totales de trabajo autónomo: 109				

Ev: Actividad formativa evaluable

Ob: Actividad formativa de superación obligatoria (Será imprescindible su superación tanto en evaluación continua como no continua)

8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y VALORACIONES

Sistema de evaluación	Evaluación continua	Evaluación no continua*	Descripción
Trabajo	20.00%	20.00%	
Prueba	40.00%	60.00%	
Resolución de problemas o casos	30.00%	15.00%	
Otro sistema de evaluación	5.00%	5.00%	
Valoración de la participación con aprovechamiento en clase	5.00%	0.00%	
Total:	100.00%	100.00%	

* En **Evaluación no continua** se deben definir los porcentajes de evaluación según lo dispuesto en el art. 4 del Reglamento de Evaluación del Estudiante de la UCLM, que establece que debe facilitarse a los estudiantes que no puedan asistir regularmente a las actividades formativas presenciales la superación de la asignatura, teniendo derecho (art. 12.2) a ser calificado globalmente, en 2 convocatorias anuales por asignatura, una ordinaria y otra extraordinaria (evaluándose el 100% de las competencias).

Criterios de evaluación de la convocatoria ordinaria:

Evaluación continua:

Los alumnos deben realizar todas las actividades programadas y obtener al menos una calificación de 4 en todas ellas.

Para superar la asignatura deben obtener una calificación promedio igual o superior a 5.

Evaluación no continua:

Los alumnos deben realizar todas las actividades programadas y obtener al menos una calificación de 4 en todas ellas.

Para superar la asignatura deben obtener una calificación promedio igual o superior a 5.

9. SECUENCIA DE TRABAJO, CALENDARIO, HITOS IMPORTANTES E INVERSIÓN TEMPORAL

No asignables a temas	
Horas	Suma horas
Tema 1 (de 11): Fundamento y aplicaciones de SEM y TEM estudios cuantitativos (EDX)	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de recensiones]	2
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2.5
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	3
Análisis de artículos y recensión [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	3

Foros y debates on-line [AUTÓNOMA][Aprendizaje cooperativo/colaborativo]	.5
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.15
Tema 2 (de 11): Fundamento y aplicaciones de microscopía de sonda local (AFM y STM)	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de resecciones]	1
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	1.5
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	2
Análisis de artículos y resección [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	2
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.15
Tema 3 (de 11): Espectroscopia IR y Raman. Fundamento y aplicaciones especialmente a la determinación de estructuras de superficies	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de resecciones]	4
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2.5
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	3
Análisis de artículos y resección [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	3
Presentación de trabajos o temas [PRESENCIAL][Aprendizaje basado en problemas (ABP)]	1
Foros y debates on-line [AUTÓNOMA][Aprendizaje cooperativo/colaborativo]	.5
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.15
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	1
Tema 4 (de 11): Espectroscopias de electrones (XPS, UPS, Auger). Fundamento y aplicaciones	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de resecciones]	5
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3.5
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	4
Análisis de artículos y resección [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	4
Presentación de trabajos o temas [PRESENCIAL][Aprendizaje basado en problemas (ABP)]	1
Foros y debates on-line [AUTÓNOMA][Aprendizaje cooperativo/colaborativo]	1
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.15
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	1
Tema 5 (de 11): Espectroscopias de RX (XRF, XANES, EXAFS). Fundamento y aplicaciones	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de resecciones]	2
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	1
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.5
Análisis de artículos y resección [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1
Presentación de trabajos o temas [PRESENCIAL][Aprendizaje basado en problemas (ABP)]	1
Foros y debates on-line [AUTÓNOMA][Aprendizaje cooperativo/colaborativo]	.5
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.15
Tema 6 (de 11): Difracción de RX de monocristal y de polvo. Fundamento y aplicaciones	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de resecciones]	4
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	4
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	4.5
Análisis de artículos y resección [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	2
Foros y debates on-line [AUTÓNOMA][Aprendizaje cooperativo/colaborativo]	.5
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.15
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	.7
Tema 7 (de 11): Aplicaciones dinámicas de la RMN	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de resecciones]	2.4
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	2.4
Análisis de artículos y resección [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	2
Foros y debates on-line [AUTÓNOMA][Aprendizaje cooperativo/colaborativo]	.5
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.2
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	.2
Tema 8 (de 11): Experimentos con secuencias de pulso	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de resecciones]	3.6
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	3.6
Análisis de artículos y resección [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	3
Foros y debates on-line [AUTÓNOMA][Aprendizaje cooperativo/colaborativo]	.8
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.2
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	.7
Tema 9 (de 11): Resonancia en dos dimensiones	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de resecciones]	3.6
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	3.6
Análisis de artículos y resección [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	3

Foros y debates on-line [AUTÓNOMA][Aprendizaje cooperativo/colaborativo]	.8
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.2
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	.7
Tema 10 (de 11): Reactivos de desplazamiento. Agentes de relajación	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de resecciones]	1.2
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	1
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.2
Análisis de artículos y recensión [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1
Foros y debates on-line [AUTÓNOMA][Aprendizaje cooperativo/colaborativo]	.4
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.1
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	.2
Tema 11 (de 11): Otras técnicas y aplicaciones de la RMN	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de resecciones]	7.2
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	6
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	7.2
Análisis de artículos y recensión [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	6
Foros y debates on-line [AUTÓNOMA][Aprendizaje cooperativo/colaborativo]	1.5
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.4
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	1.5
Actividad global	
Actividades formativas	Suma horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	30
Análisis de artículos y recensión [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	30
Foros y debates on-line [AUTÓNOMA][Aprendizaje cooperativo/colaborativo]	7
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Lectura de artículos científicos y preparación de resecciones]	36
Presentación de trabajos o temas [PRESENCIAL][Aprendizaje basado en problemas (ABP)]	3
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	36
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	2
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]	6
Total horas: 150	

10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS					
Autor/es	Título/Enlace Web	Editorial	Población	ISBN	Año Descripción
S. L. Flegler, J. W. Heckman, Jr., Klomparens, K. L.	Scanning and Transmission Electron Microscopy. An Introduction	Oxford University Press			1993 Libro que profundiza en las técnicas de SEM y TEM y en mic. electrónica par análisis
J. M. Albella, A. M. Cintas, T. Miranda, J. M. Serratosa	Introducción a la Ciencia de materiales. Técnicas de preparación y caracterización	CSIC	Madrid	84-00-07343-6	1993 Libro de ciencia de materiales. Incluye técnicas de rayos X, de microscopia electrónica y esp. vibracional.
J. C. Vickerman, I. S. Gimore, Eds.	Surface Analysis. The Principal Techniques	Wiley	Chichester	9780470017630	2009 Libro sobre diferentes técnicas de caracterización de superficies. Muy bueno el capítulo de XPS
A. R. West	Basic Solid State Chemistry	WILEY		0-471-91798-2	1984 Libro básico de Química del estado sólido pero que incluye también técnicas de caracterización
G. Ertl	Reaction at Solid Surfaces	Wiley	Hoboken	9780470535295	2009 Estudio detallado de las superficies de sólidos y reacciones sobre ellas
J. M. Thomas, W. J. Thomas	Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis	VCH	Weinheim	3-527-29239-X	1997 Libro sobre catálisis heterogénea. Incluye un capítulo de caracterización de las superficies de catalizadores, con muchas técnicas a un nivel relativamente básico.
H. Günther	NMR Spectroscopy	WILEY	Weinheim	978-3-527-33004-1	2013 Libro avanzado de RMN con bastantes aspectos teóricos
H. Friebolin	Basic One- and Two Dimensional NMR Spectroscopy	WILEY	Manheim	978-3-527-32782-9	2010 Texto básico y muy didaction sobre RMN en una y dos dimensiones
R. Freeman	Magnetic Resonance in Chemistry and Medicine	Oxford University Press	Oxford	0-19-926225-X	2005 libro práctico y didáctico que enlaza la RMN clásica y la imagen por RMN

S. Berger, S. Braun	200 and More NMR Experiments: A Practical Course https://www.wiley.com/en-us/200+and+More+NMR+Experiments%3A+A+Practical+Course-p-9783527310678	VCH	Weinheim	978-3-527-31067-8	2004	Libro práctico sobre secuencias de pulso mono y bidimensionales
A. K. Cheetham, P. Day	Solid State Chemistry. Techniques https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.560340110	Oxford University Press	Oxford	0-19-855165-7	1991	Incluye la mayoría de las técnicas vistas en la asignatura, en algunos casos a un nivel más elevado
Jenny P. Glusker; Mitchell Lewis and Miriam Rossi	Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/crat.2170310212	VCH		0-89573-273-4	1994	
M. Martínez-Ripoll, F. Hernández-Cano	Cristalografía https://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index.html	WILEY			2016	Una buena parte de los contenidos se encuentran también en: http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/