



Asignatura: Técnicas de Caracterización Estructural Avanzada
Código: 32968
Centro: Ciencias
Titulación: Máster en Química Aplicada
Nivel: Máster
Tipo: Optativo
Nº de créditos: 4

ASIGNATURA / COURSE TITLE

TÉCNICAS DE CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL AVANZADA/ TECHNIQUES OF ADVANCED STRUCTURAL CHARACTERIZATION.

1.1. Código / Course number

32968

1.2. Materia / Content area

Especialidad Química Ambiental y Metodologías de Análisis.
Especialidad Química Molecular y Química de Materiales.

1.3. Tipo / Course type

Formación optativa / Elective subject

1.4. Nivel / Course level

Máster / Master (second cycle)

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

1º / 1st (Fall semester)

1.7. Idioma / Language

Español. Se emplea también Inglés en material docente / In addition to Spanish, English is also extensively used in teaching material

1.8. Número de créditos / Credit allotment

4 créditos ECTS / 4 ECTS credits

1.9. Requisitos previos / Prerequisites

Es recomendable que el estudiante esté familiarizado con los conceptos adquiridos en asignaturas de caracterización de compuestos químicos.



Asignatura: Técnicas de Caracterización Estructural Avanzada
Código: 32968
Centro: Ciencias
Titulación: Máster en Química Aplicada
Nivel: Máster
Tipo: Optativo
Nº de créditos: 4

1.10. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia es obligatoria / **Attendance is mandatory**

1.11. Datos del equipo docente / **Faculty data**

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Ana Isabel Ruiz García (Coordinadora)
Departamento de Geología y Geoquímica / **Department of Geology and Geochemistry**.
Facultad de Ciencias / **Science Faculty**
Despacho / **Office** Módulo 6-302
Teléfono / **Phone**: 914976862.
Correo electrónico/**Email**: anai.ruiz@uam.es
Página web/**Website**:
Horario de atención al alumnado/**Office hours**:

1.12. Objetivos del curso / **Course objectives**

1.12a. Resultados del aprendizaje

Al finalizar esta asignatura el estudiante será capaz de:

- Identificar los últimos avances en las técnicas de caracterización estructural.
- Analizar la información estructural obtenida mediante técnicas instrumentales avanzadas.
- Identificar los fundamentos, la terminología y la instrumentación inherentes a cada una de las técnicas de caracterización.
- Seleccionar/elegir las técnicas más adecuadas para caracterizar, de la forma más completa posible, un compuesto químico.
- Deducir la estructura de compuestos químicos utilizando las técnicas de caracterización estructural adecuadas.
- Interpretar la información obtenida a partir de los datos recogidos mediante las técnicas de caracterización empleadas.
- Evaluar la importancia de la información obtenida mediante cada técnica.

1.12b. Competencias.

Los estudiantes que superen el curso con éxito deberán haber adquirido las siguientes competencias:

CG1. Ser capaz de reconocer y analizar nuevos problemas químicos y plantear estrategias para solucionarlos.



Asignatura: Técnicas de Caracterización Estructural Avanzada
Código: 32968
Centro: Ciencias
Titulación: Máster en Química Aplicada
Nivel: Máster
Tipo: Optativo
Nº de créditos: 4

CG3. Ser capaz de analizar situaciones complejas, plantear soluciones y emitir valoraciones en algún campo de la Química.

CG4. Ser capaz de juzgar la calidad de la investigación (o trabajo general) en un campo aplicado de la Química.

CG5. Reunir información pertinente sobre los últimos avances científicos y las últimas técnicas relacionadas, tanto con su campo concreto de la Química como de campos afines.

CB6. Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7. Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8. 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.

CB9. 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.

CT2. Conseguir habilidades para relacionar la información experimental con teorías adecuadas.

CT4. Adquirir habilidad para la utilización de las tecnologías de la información y de la comunicación.

CT5. Ser capaz de comunicarse de forma efectiva, utilizando las herramientas de presentación adecuadas, tanto en reuniones, como en presentaciones orales o documentación escrita.

CE1. Identificar y manejar los resultados de las técnicas más recientes y avanzadas aplicadas a la Química.

CE2. Ser capaz de interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas realizadas en laboratorios avanzados y de investigación en términos de su significación y de las teorías que las sustentan.

CE3. Diseñar y planificar la aplicación de procesos y técnicas que permitan la resolución de problemas de índole químico.

1.13. Contenidos del programa / **Course contents**

Los contenidos de la asignatura se desglosarán en los siguientes bloques temáticos:



Asignatura: Técnicas de Caracterización Estructural Avanzada
Código: 32968
Centro: Ciencias
Titulación: Máster en Química Aplicada
Nivel: Máster
Tipo: Optativo
Nº de créditos: 4

1. **Espectroscopia de vibración.** Información estructural a partir de los espectros vibracionales. Utilización de la simetría molecular y la teoría de grupos para elucidar la estructura/geometría de un compuesto.
2. **Espectrometría de masas.** Elementos poliisotópicos. Espectros FAB, MALDI y ESI. Aplicaciones de los espectros de masas al análisis de compuestos de coordinación y organometálicos.
3. **Espectroscopia de resonancia magnética multinuclear.** Aplicaciones de la resonancia magnética nuclear de protón y carbono a compuestos inorgánicos. Otros núcleos de interés en química inorgánica. Resonancia magnética nuclear en estado sólido. Aplicación conjunta de las técnicas descritas en los Temas 1 a 3.
4. **Técnicas espectroscópicas basadas en rayos X, electrones y rayos γ .** Interacción radiación de alta energía y materia. Espectroscopia de rayos X: Técnicas de absorción (EXAFS y XANES); Técnicas de emisión: Fluorescencia de rayos-X (XRF), EDX y PIXE; Espectroscopia Mössbauer.
5. **Técnicas de difracción:** Fundamentos de la difracción de rayos X. Métodos de difracción en el estudio de materiales mono y policristalinos. Análisis cuali y cuantitativo de las fases cristalinas. Introducción al análisis estructural mediante el Método Rietveld.
6. **Técnicas para el análisis de superficies:** Concepto de superficie. Tecnologías de vacío. Clasificación de los métodos de análisis de superficies. Técnicas microscópicas basadas en sondas de electrones (SEM y TEM) y en sondas de barrido (STM, AFM y SECM): fundamentos, instrumentación y aplicaciones. Técnicas espectroscópicas basadas en rayos X (XPS y Auger): fundamentos, interpretación de espectros, aplicaciones.

1.14. Referencias de consulta / Course bibliography

- *NMR Spectroscopy in Inorganic Chemistry*, J. A. Isgo. Oxford Primers, Oxford Science, 1999.
- *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*, 6th Ed., K. Nakamoto, Wiley, 2009.
- *Mass Spectrometry of Inorganic and Organometallic Compounds*, W. Henderson, J. Scott, Wiley, 2005.
- *Inorganic Spectroscopic Methods*, A.K. Brisdon, Oxford Primers, Oxford Science Publications, 1998.
- *NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts and Applications*, 3rd ed., H. Günther, Wiley, 2013.
- *Elements of X-ray diffraction*, B.D. Cullity, Addison-Wesley, 1978.
- *X-ray Characterization of Materials*, E. Lifshin, Wiley-VCH, 1999.
- *Mössbauer Spectroscopy Applied to Inorganic Chemistry*, Ed. G.J. Long, Plenum Press, 1989.
- *Fundamentals of Crystallography*, C. Giacovazzo, IUCr/Oxford University Press, 1992.



Asignatura: Técnicas de Caracterización Estructural Avanzada
Código: 32968
Centro: Ciencias
Titulación: Máster en Química Aplicada
Nivel: Máster
Tipo: Optativo
Nº de créditos: 4

- *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials*, 2nd Ed., V.K. Pecharsky, P.Y y Zavalij, Springer, 2009.
- *Surface Characterization: A user's sourcebook*, Eds. D. Brune, R. Hellborg, H. J. Whitlow, O. Hunderi, Wiley-VCH, 1997.
- *Practical surface analysis: Auger and X-ray Photoelectron Spectroscopy*, Vol 1. Eds. D. Briggs and M.P. Sheah, John Wiley & Sons, 1994.
- *Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis*, I. Goldstein, Springer, 2003.

En Moodle de la asignatura se incluirá distinto material bibliográfico, así como presentaciones, para el seguimiento adecuado de la asignatura.

2. Métodos docentes / Teaching methodology

La metodología a seguir consta de dos tipos de actividades:

A) Actividades presenciales:

Las actividades presenciales se distribuirán entre clases teóricas en aula, que se expondrán oralmente, apoyadas con material audiovisual, los principales conceptos teóricos que conforman los temas abarcados; clases prácticas en aula, donde se resolverán cuestiones, ejercicios y problemas prácticos a partir de análisis de datos (espectros, difractogramas...) y visitas a instalaciones en las que se disponga de las técnicas estudiadas.

Además, los estudiantes realizarán individualmente una presentación sobre trabajos asignados por los profesores para su debate posterior.

B) Actividades no presenciales:

Consistirán en trabajos y/o resolución de problemas realizados individualmente para el estudio de los contenidos de la asignatura. También incluirá el estudio del trabajo asignado por los profesores y la preparación de su presentación correspondiente.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

		Nº de horas	Porcentaje
Presencial	Clases teóricas	35	40%
	Clases prácticas en aula		
	Presentación de trabajos. Realización del examen final	5	
No	Estudio y trabajo autónomo individual	60	60%



Asignatura: Técnicas de Caracterización Estructural Avanzada
Código: 32968
Centro: Ciencias
Titulación: Máster en Química Aplicada
Nivel: Máster
Tipo: Optativo
Nº de créditos: 4

presencial	Elaboración de memorias/resolución de problemas		
Carga total de horas de trabajo		100	100%

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Se llevará a cabo la evaluación continua del progreso de los estudiantes. Para ello se propondrán trabajos y/o problemas evaluables y se realizará la presentación y defensa de un trabajo. Se realizará una evaluación final sobre los contenidos del curso, mediante una prueba objetiva global.

Convocatoria ordinaria:

Los porcentajes de los distintos ítems que intervienen en la evaluación serán

- Participación en las actividades presenciales, entrega y valoración de ejercicios propuestos por los profesores a lo largo de la asignatura (competencias: CG1, CG3, CE1, CE3), junto con el trabajo final de la asignatura, que podrá ser presentado en público (competencias: CG3, CG4, CB9, CT2, CT5, CE1) corresponderá al 70% de la calificación final.
- Prueba individual objetiva global (30% de la calificación final). Esta prueba consistirá en la realización de un examen sobre aspectos generales de la asignatura y sobre los contenidos de los trabajos presentados en público. Permitirá estimar la progresión de los estudiantes en la adquisición de las competencias: CG1, CG3, CG4, CG5, CB6, CB7, CB8, CB10, CT2, CT4, CE1, CE3.

Los alumnos que no hayan participado en al menos un 20% de las actividades de la asignatura, serán calificados como no evaluados.

Convocatoria extraordinaria:

Se tendrá en cuenta las actividades y los trabajos realizados a lo largo de la asignatura (40%) y se realizará una prueba objetiva global individual sobre los contenidos de la asignatura cuyo porcentaje en la calificación global será del 60%.

5. Cronograma* / Course calendar



Asignatura: Técnicas de Caracterización Estructural Avanzada
Código: 32968
Centro: Ciencias
Titulación: Máster en Química Aplicada
Nivel: Máster
Tipo: Optativo
Nº de créditos: 4

Semana Week	Contenido Contents	Horas presenciales Contact hours
1	Espectroscopia de Vibración	3
2	Espectroscopia de Masas	3
3 y 4	Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear	7
5-7	Técnicas espectroscópicas basadas en rayos X, electrones y rayos γ	6
7-9	Técnicas de difracción	7
9-13	Técnicas para el estudio de superficies	13
13-15	Evaluación	3

Las visitas a las instalaciones se realizarán por la mañana y se anunciarán una vez que estén fijadas en Moodle con suficiente antelación.

*Es un cronograma orientativo, depende de cada curso académico