

## GRADO EN QUÍMICA

### DATOS DE LA ASIGNATURA

ASIGNATURA	STRUCTURAL METHODS IN INORGANIC CHEMISTRY	CÓDIGO	757509218
MÓDULO	FUNDAMENTAL	MATERIA	Q. INORGÁNICA
CURSO	4.º	CUATRIMESTRE	1.º
DEPARTAMENTO	QUÍMICA PROFESOR JOSÉ CARLOS VÍLCHEZ MARTÍN	ÁREA DE CONOCIMIENTO	QUÍMICA INORGÁNICA
CARÁCTER	OBLIGATORIA	CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

### DISTRIBUCIÓN DE CRÉDITOS

	TOTAL	TEÓRICOS GRUPO GRANDE	TEÓRICOS GRUPO REDUCIDO	PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA	PRÁCTICAS DE LABORATORIO	PRÁCTICAS DE CAMPO
ECTS	6	2.84	1.67	0	1.5	0

### DATOS DEL PROFESORADO

#### COORDINADOR

NOMBRE TOMÁS RODRÍGUEZ BELDERRAIN

DEPARTAMENTO QUÍMICA PROFESOR JOSÉ CARLOS VÍLCHEZ MARTÍN

ÁREA DE CONOCIMIENTO QUÍMICA INORGÁNICA

UBICACIÓN MÓDULO 5. FACULTAD DE CC. EXPERIMENTALES

CORREO ELECTRÓNICO trodri@dqcm.uhu.es

TELÉFONO 959219955

URL WEB

CAMPUS VIRTUAL MOODLE

### HORARIO DE TUTORÍAS

#### PRIMER SEMESTRE

LUNES	MARTES	MIÉRCOLES	JUEVES	VIERNES
		18:00 - 20:00	18:00 - 20:00	18:00 - 20:00

#### SEGUNDO SEMESTRE

LUNES	MARTES	MIÉRCOLES	JUEVES	VIERNES
-------	--------	-----------	--------	---------

### DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA ASIGNATURA

#### DESCRIPCIÓN GENERAL

This subject provides the student a fundamental knowledge about structural characterization of inorganic compounds and the application of different spectroscopic methods commonly used in Inorganic Chemistry.

#### ABSTRACT

#### OBJETIVOS: RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

The subject has been designed by a practical approach in order to provide the student a solid formation on the experimental methods of structural determination and their uses, which is very important for the formation of a Graduate in Chemistry.

### REPERCUSIÓN EN EL PERFIL PROFESIONAL

This subject will develop the knowledge that the student has previously acquired on the structural determination of chemical compounds.

### RECOMENDACIONES AL ALUMNADO

In order to join this course, it is highly recommended to have previously passed all the previous years subjects of Inorganic Chemistry, as well as "Structural Determination of Organic Compounds"

### COMPETENCIAS

#### COMPETENCIAS BÁSICAS

CB1 - Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

CB2 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.

CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.

CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

B1 - Capacidad de análisis y síntesis.

B2 - Capacidad de organización y planificación.

B3 - Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.

B5 - Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/conocimiento.

B6 - Resolución de problemas.

B8 - Trabajo en equipo.

B9 - Razonamiento crítico.

B11 - Sensibilidad hacia temas medioambientales.

#### COMPETENCIAS GENERALES

CG1 - Que los estudiantes hayan desarrollado y demostrado poseer habilidades de aprendizaje y conocimientos procedentes de su campo de estudio, siendo capaces de aplicarlos en su trabajo, interpretando datos relevantes para emitir juicios de temas de diversa índole pudiendo transmitirlos a un público tanto especializado como no especializado.

#### COMPETENCIAS TRANSVERSALES

#### COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

C2 - Conocer los tipos principales de reacción 4 y las principales características asociadas a cada una de ellas.

C4 - Conocer las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo espectroscopía.

C10 - Conocer los aspectos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo estereoquímica.

C16 - Conocer las técnicas instrumentales y sus aplicaciones.

Q1 - Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías

relacionadas con la química.

Q2 - Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

Q3 - Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química.

Q4 - Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico y profesional.

Q6 - Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.

P1 - Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.

P2 - Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.

P4 - Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para estudios estructurales y separaciones.

P5 - Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

### TEMARIO Y DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

#### TEORÍA

**Unit 1.** Determining Structures. How and why?. Introduction to Spectroscopy: The electromagnetic spectrum. Interaction of matter with electromagnetic radiation: General characteristics. Time scales. Selection rules. The absorption and emission spectra. Spectrometers and Resolution.

**Unit 2.** Electronic Spectroscopy. Basic Concepts. The technique: ultraviolet-visible spectrophotometry. Spectrophotometers. Cells. Spectrophotometric method. Electronic spectra. Overview. Ligand field transitions. Orgel diagrams. Tanabe-Sugano diagrams. Selection rules. Charge transfer bands.

**Unit 3.** Vibrational Spectroscopy. Introduction: Molecular vibrations. IR and Raman spectrophotometers. Selection rules. Symmetry and vibrational spectroscopy. Frequency of functional groups and ligands.

**Unit 4.** The Basics of NMR (I). Atomic nucleus and nuclear spin. Magnetic alignment. Transitions. Sensitivity. The origin of the NMR signal. The precession of the nuclear spin. System perturbation. Detection of the NMR signal. Pulse sequence. Free Induction Decay (FID). Signal/noise ratio. NMR spectrometers: CW spectrometers and FT-NMR spectrometers.

**Unit 5.** The Basics of NMR (II). Scalar coupling. Types of scalar coupling. First order systems. Spin decoupling. Examples with heteronuclei. Chemical and magnetic equivalence. Second order systems. Coupling constants. Carbon -13 NMR.

**Unit 6.** Two Dimensions Nuclear Magnetic Resonance (2D NMR). 2D experiments. Introduction. Representation of 2D NMR spectra. Types of 2D NMR experiments: COSY, TOCSY, HETCOR, HSQC, HMQC and HMBC, INADEQUATE, 2DJ Experiments. The "NOE" effect. 2D Experiments based in the NOE effect: NOESY.

**Unit 7.** Dynamic NMR Spectroscopy. Dynamic Process Exchange. Fluxionality. Variable temperature spectra. The Eyring equation. Examples.

**Unit 8.** Relaxation and NMR of nuclei with  $I > \frac{1}{2}$ . Relaxation Phenomena. T1 and T2. Measurement of T1. Metal hydrides. NMR of nuclei with  $I > \frac{1}{2}$ . Spin coupling.

**Unit 9.** Electronic Spin Resonance. Basics of ESR. Proportionality factor. Hyperfine interaction. Relative intensity. Examples. Summary

**Unit 10.** Practical Examples.

#### PRÁCTICAS DE LABORATORIO

The lab classes will consist of the structural characterization of three organometallics compounds.

## PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA

## PRÁCTICAS DE CAMPO

## METODOLOGÍA DOCENTE

Grupo grande

- Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos.
- Prácticas de laboratorio con grupos reducidos manejo de técnicas experimentales, discusión de resultados, obtención de conclusiones, presentación de una memoria final.
- Seminarios tutorizados de resolución de problemas y de supuestos prácticos.
- Test y resolución de cuestiones teórico-prácticas.
- Ejercicios de autoevaluación sobre los contenidos de la materia.
- Empleo de páginas Web como apoyo a la docencia de la materia.

## CRONOGRAMA ORIENTATIVO

SEMANAS (S):	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
GRUPO GRANDE															
GRUPO REDUCIDO															
PRÁCTICAS DE LABORATORIO															
PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA															
PRÁCTICAS DE CAMPO															

## EVALUACIÓN DE LA ASIGNATURA

### PRIMERA EVALUACIÓN ORDINARIA (FEBRERO/JUNIO)

#### EVALUACIÓN CONTINUA

#### PORCENTAJE

20 %

10% corresponds to the laboratory practices, and the other 10% to the academically directed activities. Both Lab-practices and academically directed activities are mandatory. The lack of assistance involves failure in those parts.

Existe opción alternativa a la evaluación continua arriba contemplada

NO

#### EVALUACIÓN FINAL

#### PORCENTAJE

80 %

A theoretical exam will be of the written type and take place in the date provided by the Experimental Sciences Faculty. The mark of the exam will correspond to the 80% of the final qualification if the mark is 4 or higher, otherwise, the qualification of the subject will be the one of the exam.

¿Contempla una evaluación parcial voluntaria?

SÍ

A consensus with the students is needed.

### SEGUNDA EVALUACIÓN ORDINARIA (SEPTIEMBRE) Y OTRAS EVALUACIONES

A lab practices and the academically directed activities test will be carried out.

### OTROS CRITERIOS DE EVALUACIÓN

¿Contempla la posibilidad de subir nota una vez realizadas las pruebas?

NO

Requisitos para la concesión de matrícula de honor

The highest mark in the final qualification.

### REFERENCIAS

#### BÁSICAS

- 1) E. A. V. EBSWORTH, D. W. H. RANKIN, S. CRADOCK, "Structural Methods in Inorganic Chemistry", Blackwell Scientific Publications, 1987.
- 2) D. W. H. Rankin, Norbert Mitzel, Carole Morrison "Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry" Wiley; 1 edition (April 1, 2013)
- 3) R. Macomber "A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy" John Wiley & Sons Inc (Jan 8, 1998)
- 4) J. W. AKITT, "NMR and Chemistry", 2nd Ed., Chapman and Hall, 1983.
- 5) A. K. Brisdon "Inorganic Spectroscopic Methods (Oxford Chemistry Primers)" Oxford University Press (Jun 18, 1998)
- 6) Housecroft, Catherine, "Inorganic Chemistry" Oxford University Press, 1999. ISBN:0-19-850103-X
- 7) "Inorganic Chemistry, 5th ed.", Duward F. Shriver, Peter W. Atkins, Tina Overton, Jonathan Rourke; W. H. Freeman, 2009
- 8) Joseph P. Hornak, "The Basics of NMR" <https://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/bnmr.htm>.

#### ESPECÍFICAS

### OTROS RECURSOS

Paul Callaghan lectures on the principles of NMR and MRI: <http://www.magritek.com/support/videos/>

Introduction to NMR Spectroscopy <https://www.youtube.com/watch?v=TJhVotrZt9I>

Organometallic HyperTextBook <http://www.ilpi.com/organomet/>