



# Máster en Química Molecular y Catálisis Homogénea 60458 - Técnicas de caracterización estructural avanzada

Guía docente para el curso 2015 - 2016

Curso: , Semestre: , Créditos: 4.0

---

## Información básica

---

### Profesores

- **Javier Blasco Carral** jbc@unizar.es
- **Milagros Piñol Lacambra** mpinol@unizar.es
- **María Pilar Romero Soria** promero@unizar.es
- **Maria Teresa Sierra Tavieso** tsierra@unizar.es
- **Pablo Javier Alonso Gascón** alonso@unizar.es

### Recomendaciones para cursar esta asignatura

Son recomendables conocimientos previos de métodos instrumentales y espectroscópicos. También es deseable la comprensión de textos en inglés científico. La asistencia a clase y el estudio continuado facilita la superación de la asignatura.

### Actividades y fechas clave de la asignatura

Las actividades programadas se realizarán durante el segundo semestre en sesiones de cuatro horas semanales. Los horarios de la asignatura y fechas de exámenes se publican en la página web de la Facultad de Ciencias:

<https://ciencias.unizar.es/>

La presentación de trabajos se realizará de acuerdo al calendario que se anunciará oportunamente con suficiente antelación.

---

## Inicio

---

### Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

**El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...**

- 1:** Conocer y aplicar conceptos avanzados relativos a técnicas espectroscópicas e instrumentales de gran utilidad en la caracterización (estructural, térmica, óptica, magnética, eléctrica) de compuestos y materiales orgánicos, inorgánicos y organometálicos.

- 2: Conocer el campo de aplicación de cada técnica y de sus distintas modalidades, así como su interrelación y complementariedad.
- 3: Ser capaz de seleccionar las técnicas, diseñar los experimentos y evaluar métodos de caracterización en cada caso, en función del problema a resolver.

## Introducción

### Breve presentación de la asignatura

En la asignatura se estudian técnicas específicas para la caracterización de materiales y que se consideran complementarias a las técnicas de caracterización estructural básica de compuestos orgánicos u organometálicos. Se pretende que los estudiantes adquieran los conocimientos suficientes para poder abordar la caracterización estructural, morfológica y funcional de nuevos compuestos y materiales, utilizando las técnicas más apropiadas, seleccionadas de forma razonada.

---

## Contexto y competencias

---

### Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

#### La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

En la asignatura se estudian técnicas específicas para la caracterización de materiales y que se consideran complementarias a las técnicas de caracterización estructural básica de compuestos orgánicos u organometálicos. Se pretende que los estudiantes adquieran los conocimientos suficientes para poder abordar la caracterización estructural, morfológica y funcional de nuevos compuestos y materiales, utilizando las técnicas más apropiadas, seleccionadas de forma razonada.

#### Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura *Técnicas de caracterización estructural avanzadas* es una asignatura optativa de 4 ECTS que se imparte en el segundo cuatrimestre. La caracterización de una molécula o un material es un ejercicio esencial para conocer su composición química y estructura así como sus propiedades térmicas, ópticas, magnéticas y eléctricas. La asignatura se encuadra dentro del módulo *Caracterización Estructural*. En este módulo, el alumno aborda de forma obligatoria una asignatura de técnicas de caracterización estructural que le permitirá llevar a cabo una primera identificación de la composición química y de la estructura de las moléculas preparadas.

En esta asignatura, el alumno recibirá información necesaria sobre otras técnicas instrumentales, más avanzadas o específicas, que se están utilizando en la actualidad para conocer la estructura de moléculas y materiales desde la escala nanoscópica hasta la macroscópica. Los conocimientos que el alumno adquiere en la asignatura obligatoria *Técnicas de Caracterización Estructural*, así como en otras asignaturas optativas como *Cristalografía* y *Técnicas de Difracción* constituyen, sin duda, una sólida base para afrontar los contenidos de esta asignatura. Así mismo, esta asignatura es un complemento esencial para los temas abordados en varias de las asignaturas optativas del módulo *Horizontes en Química Molecular y Catálisis*.

Los Institutos de Síntesis Química y Catálisis Homogénea y de Ciencia de Materiales de Aragón ponen a disposición de los estudiantes del máster equipamiento de última generación lo que permitirá al alumno acercarse de forma práctica a este tipo de técnicas instrumentales avanzadas.

#### Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

- 1: Conocer el fundamento de distintas técnicas instrumentales de caracterización estructural y evaluación de propiedades (térmicas, ópticas, magnéticas, eléctricas) de moléculas y materiales.
- 2:

Conocer el tipo de molécula o material que se puede estudiar con las técnicas aprendidas y la forma de preparación de la muestra adecuada a cada caso.

- 3:** Seleccionar la técnica o técnicas adecuadas para resolver un determinado problema conociendo los fundamentos de las técnicas aprendidas y su complementariedad.
- 4:** Validar e interpretar los resultados obtenidos cada técnica.
- 5:** Integrar los datos obtenidos de las distintas técnicas seleccionadas para resolver un determinado problema.
- 6:** Presentar de forma adecuada los resultados obtenidos a partir de las distintas técnicas utilizadas.

### **Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:**

Los conocimientos adquiridos en esta asignatura permitirán al alumno abordar la caracterización estructural y la evaluación de propiedades de las moléculas y materiales preparados, utilizando técnicas instrumentales avanzadas y específicas del problema a resolver. El alumno será capaz de seleccionar la técnica o técnicas más adecuadas para el material a estudiar, desde su estructura molecular y/o supramolecular y dimensiones (de la nanoescala a la macroescala) hasta sus propiedades más características (térmicas, ópticas, magnéticas, eléctricas).

---

## **Evaluación**

---

### **Actividades de evaluación**

#### **El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación**

- 1:** La evaluación continua de esta asignatura está basada en las siguientes actividades con la ponderación que se indica:
- 2:** Trabajo en clase basado en resolución de problemas y cuestiones teórico-prácticas (20 %)
- 3:** Realización de trabajos dirigidos de carácter práctico de forma individual o en grupo (25 %)
- 4:** Prueba escrita a realizar en el periodo de evaluación global consistente en la resolución de problemas y cuestiones teórico-prácticas (55 %).
- 5:** La asignatura se considerará superada si la media ponderada de las tres calificaciones según los porcentajes indicados es igual o mayor de 5.
- 6:** Los alumnos que no opten por la evaluación continua o que no superen la asignatura por dicho procedimiento podrán realizar una prueba global de evaluación, que supondrá el 100% de la calificación final, tanto en la primera como en la segunda convocatoria. Esta prueba consistirá en una prueba escrita sobre todos los contenidos abordados en el desarrollo de la asignatura, incluidos seminarios. Los alumnos que quieran mejorar su calificación de evaluación continua también podrán realizar la prueba global en la primera convocatoria, manteniendo la mejor de las calificaciones obtenidas.

**7:** El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho (2 por matrícula) así como el consumo de dichas convocatorias se ajustará a la Normativa de Permanencia en Estudios de Máster y Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje. A este último reglamento, también se ajustarán los criterios generales de diseño de las pruebas y sistema de calificación, y de acuerdo a la misma se hará público el horario, lugar y fecha en que se celebrará la revisión al publicar las calificaciones. Dicha normativa puede consultarse en: <http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/norma.pdf>.

---

## Actividades y recursos

---

### Presentación metodológica general

#### El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

El proceso de aprendizaje diseñado para la asignatura está basado esencialmente en clases expositivas de carácter participativo que se complementarán con clases de problemas, seminarios y tutorías. En las clases de teoría se expondrán los fundamentos de las técnicas, su aplicabilidad y el tipo de información que se puede extraer de cada una de ellas. En las clases de problemas se plantearán prácticos enfocados a extraer datos sobre determinados sistemas químicos a partir de resultados provenientes de distintas técnicas instrumentales de entre las revisadas en la asignatura. Ambos tipos de clases se podrán ilustrar con seminarios prácticos ante el equipamiento correspondiente.

Además, se diseñarán casos prácticos, que el profesor propondrá para realizar de forma individual o en grupo, enfocadas al planteamiento de un protocolo de estudio de una muestra problema o a la interpretación de datos obtenidos a partir de las técnicas estudiadas accesibles en nuestros institutos.

### Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

#### El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

- 1:** Clases expositivo-participativas (2.4 ECTS)
- 2:** Resolución de problemas y desarrollo de seminarios (1 ECTS)
- 3:** Prácticas con grandes equipos (0.6 ECTS)
- 4:** Tutorías en grupo reducido o personalizadas.
- 5:** Las actividades de aprendizaje están basadas en los siguientes contenidos:
  - 1.- **Técnicas de caracterización estructural.** RMN de sólidos y fases blandas; técnicas de caracterización superficial (XPS); espectroscopia de absorción de rayos x; difracción circular.
  - 2.- **Técnicas de caracterización morfológica y composicional.** Microscopias avanzadas: TEM, SEM, AFM, STM.
  - 3.- **Técnicas de caracterización térmica.** Calorimetría diferencial de barrido; análisis termogravimétrico
  - 4.- **Técnicas de caracterización magnética.** EPR, propiedades magnéticas.
  - 5.- **Técnicas de caracterización electroquímica.** Voltametría, oxidación electroquímica.

# Planificación y calendario

## Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Los horarios de la asignatura y fechas de exámenes se publican en la página web de la Facultad de Ciencias:  
<https://ciencias.unizar.es/>

La presentación de trabajos se realizará de acuerdo al calendario que se anunciará oportunamente con la suficiente antelación.

## Material Docente

En reprografía y/o a través del Anillo Digital Docente se proporcionará al alumno diverso material docente preparado por los profesores de la asignatura (<https://moodle2.unizar.es/add/>).

## Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Berova, Nina; Nakanishi, Koji. Circular Dichroism: Principles and Applications. Wiley. 2000
- Clarke, A.; Eberhardt, C.. Microscopy Techniques for Materials Science. CRC Press. 2002
- Haynes, P. J.. Principles of Thermal Analysis and Calorimetry. Royal Society of Chemistry. 2002
- Levitt, M. H.. Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance. 2nd. ed. Wiley. 2008
- Solid-State NMR Spectroscopic Methods in Chemistry. D. D. Laws, H.-M. L. Bitter, A. Jerschow. En: Angewandte chemie. International edition Weinheim : Wiley-VCH, 1998- [Publicación periódica]. Año 2002, v. 41, pp. 3096-3129
- X-ray absorption : principles, applications, techniques of EXAFS, SEXAFS, and XANES / edited by D.C. Koningsberger and R. Prins New York : Wiley, cop. 1988