

## 60458 - Técnicas de caracterización estructural avanzadas

### Información del Plan Docente

|                               |   |
|-------------------------------|---|
| <b>Año académico</b>          | 2017/18   |
| <b>Centro académico</b>       | 100 - Facultad de Ciencias  |
| <b>Titulación</b>             | 543 - Máster Universitario en Química Molecular y Catálisis Homogénea |
| <b>Créditos</b>               | 4.0   |
| <b>Curso</b>                  | 1   |
| <b>Periodo de impartición</b> | Segundo Semestre  |
| <b>Clase de asignatura</b>    | Optativa  |
| <b>Módulo</b>                 | ---   |

### 1. Información Básica

#### 1.1. Introducción

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.

#### 1.2. Recomendaciones para cursar la 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.

#### 1.3. 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

## 60458 - Técnicas de caracterización estructural avanzadas

este tipo de técnicas instrumentales avanzadas.

### 1.4. 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/calendario-y-horarios>, así como en la propia web del máster: <http://masterqmch.unizar.es>.

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

## 2. Resultados de aprendizaje

### 2.1. Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

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.

Conocer el campo de aplicación de cada técnica y de sus distintas modalidades, así como su interrelación y complementariedad.

Ser capaz de seleccionar las técnicas, diseñar los experimentos y evaluar métodos de caracterización en cada caso, en función del problema a resolver.

### 2.2. Importancia de los resultados de aprendizaje

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).

## 3. Objetivos y competencias

### 3.1. 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.

### 3.2. Competencias

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

## 60458 - Técnicas de caracterización estructural avanzadas

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.

Seleccionar la técnica o técnicas adecuadas para resolver un determinado problema conociendo los fundamentos de las técnicas aprendidas y su complementariedad.

Validar e interpretar los resultados obtenidos cada técnica.

Integrar los datos obtenidos de las distintas técnicas seleccionadas para resolver un determinado problema.

Presentar de forma adecuada los resultados obtenidos a partir de las distintas técnicas utilizadas.

### 4.Evaluación

#### 4.1.Tipo de pruebas, criterios de evaluación y niveles de exigencia

La evaluación continua de esta asignatura está basada en las siguientes actividades con la ponderación que se indica:

- 1.- Trabajo en clase basado en resolución de problemas y cuestiones teórico-prácticas (20 %).
- 2.- Realización de trabajos dirigidos de carácter práctico de forma individual o en grupo (25 %).
- 3.- Prueba escrita a realizar en el periodo de evaluación global consistente en la resolución de problemas y cuestiones teórico-prácticas (55 %).

La asignatura se considerará superada si la media ponderada de las tres calificaciones según los porcentajes indicados es igual o mayor de 5.

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 un 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.

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 al *Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje* (<http://www.unizar.es/ice/images/stories/calidad/Reglamento%20Evaluacion.pdf>). 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.

### 5.Metodología, actividades, programa y recursos

#### 5.1.Presentación metodológica general

## 60458 - Técnicas de caracterización estructural avanzadas

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 ejemplos 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.

### 5.2.Actividades de aprendizaje

Clases expositivo-participativas (2.4 ECTS)

Resolución de problemas, desarrollo de seminarios, casos prácticos (1 ECTS)

Prácticas con grandes equipos (0.6 ECTS)

Tutorías en grupo reducido o personalizadas.

### 5.3.Programa

Los contenidos del curso se dividen en los siguientes módulos:

#### 1. Técnicas de caracterización estructural.

Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de estado sólido y materia blanda; técnicas de caracterización superficial como la espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS); espectroscopia de absorción de rayos X; dicroísmo circular.

#### 2. Técnicas de caracterización morfológica y de composición.

Microscopías avanzadas: microscopías electrónicas (TEM, SEM), microscopías de proximidad (AFM, STM).

#### 3. Técnicas de caracterización térmica.

Calorimetría diferencial de barrido (DSC); análisis termogravimétrico (TGA).

#### 4. Técnicas de caracterización magnética.

Resonancia paramagnética de electrónica (EPR); propiedades magnéticas.

### 5.4.Planificación y calendario

## 60458 - Técnicas de caracterización estructural avanzadas

Los horarios de la asignatura y fechas de exámenes se publican en la página web de la Facultad de Ciencias: <https://ciencias.unizar.es/calendario-y-horarios>. La presentación de trabajos se realizará de acuerdo al calendario que se anunciará oportunamente con la suficiente antelación.

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/>).

### 5.5. Bibliografía y recursos recomendados

**BB** 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

**BB** X-ray absorption: principles, applications, techniques of EXAFS, SEXAFS, and XANES / edited by D.C. Koningsberger and R. Prins New York: Wiley, cop. 1988

**BC** Berova, Nina; Nakanishi, Koji. Circular Dichroism: Principles and Applications. Wiley. 2000

**BC** Clarke, A.; Eberhardt, C. Microscopy Techniques for Materials Science. CRC Press. 2002

**BC** Haynes, P. J. Principles of Thermal Analysis and Calorimetry. Royal Society of Chemistry. 2002

**BC** Levitt, M. H. Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance. 2nd. ed. Wiley. 2008