



GUÍA DOCENTE 2022-2023
Caracterización Estructural en Química Inorgánica

1. Denominación de la asignatura:

Caracterización Estructural en Química Inorgánica

Titulación

Grado en Química

Código

5291

2. Materia o módulo a la que pertenece la asignatura:

Química Inorgánica

3. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:

Departamento de Química

4.a Profesor que imparte la docencia (Si fuese impartida por mas de uno/a incluir todos/as) :

Aránzazu Mendía Jalón y María Asunción Muñoz Santamaría

4.b Coordinador de la asignatura

Aránzazu Mendía Jalón

5. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:

Tercer curso, sexto semestre

6. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)

Obligatoria



7. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:

No se han establecido requisitos previos para esta asignatura, si bien se recomienda haber superado Química Física II: Espectroscopia y Termodinámica; Química Orgánica: Caracterización Estructural; Química Inorgánica I y Química Inorgánica II.

8. Número de créditos ECTS de la asignatura:

6

9. Competencias que debe adquirir el alumno/a al cursar la asignatura

Competencias Básicas: CB1-CB5
Competencias Transversales: T1-T2, T4-T6, T9, T17
Competencias Generales: G1-G5, G7-G9, G11, G12, G14-G16
Competencias Específicas: E1-E2, E6, E11-E13

10. Programa de la asignatura

10.1- Objetivos docentes
Al finalizar esta asignatura los estudiantes deberían ser capaces de: 1.- Identificar la cantidad y la calidad de la información estructural que aporta cada una de las técnicas de caracterización estructural 2.- Explicar las limitaciones más importantes de dichas técnicas 3.- Discriminar en el conjunto de la información estructural obtenida aquella que es relevante 4.- Dar importancia a la información redundante cuando es necesario 5.- Proponer unas técnicas sobre otras teniendo en cuenta la naturaleza química del problema o las características de la muestra. 6.- Proponer estrategias de caracterización estructural adaptadas a problemas comunes y habituales en Química Inorgánica. 7.- Elaborar estrategias de caracterización permitiendo optimizar tiempo y recursos.
10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)
Bloque 1. Introducción Actividades del bloque: Seminario inicial: cómo y por qué determinar estructuras en Química Inorgánica. La importancia de elaborar estrategias de caracterización. Contenidos del bloque Introducción: Utilización de diferentes estrategias de caracterización tanto en estado sólido como en disolución. Aplicaciones del análisis elemental cuantitativo –C,H,N,S,O–, análisis cuantitativo –ICP masas–, análisis termogravimétrico, conductividad iónica molar en disolución, espectroscopia IR, Raman, espectroscopia de absorción Uv-V, espectrometría de masas en general, RMN, RPE, difracción de RX –polvo,



monocristal, etc., y otras.

Bloque 2. Espectroscopia vibracional en Química Inorgánica

Actividades del bloque:

Sesiones Prácticas

Seminario: iniciación a la elaboración de estrategias de caracterización estructural a partir de casos prácticos reales en Química Inorgánica a través de espectros vibracionales—moléculas sencillas como MX₄, MZX₃, etc—. Utilización de la referencia bibliográfica Nakamoto y col. en la comprensión de los modos normales de vibración activos en función de la geometría y simetría y las frecuencias de grupo.

- Interpretación del espectro de IR medio y/o IR lejano de [VO(acac)₂] y [VO(acac)₂(piperidina)]. Estudio del desplazamiento de la frecuencia $\nu(\text{V}=\text{O})$ con la coordinación del ligando N-dador.
- Estudio del espectro de IR medio y/o IR lejano de [Co(NO₂)(NH₃)₅]Cl₂ y [Co(ONO)(NH₃)₅]. Estudio de vibraciones de tensión metal-O, metal N, N-H y N-O.
- Preparación de muestras (pastilla de KBr y Nujol-polietileno), realización y caracterización estructural de complejos de metales de transición a través de sus espectros: cis-[PtCl₂(PPh₃)₂], trans-[PtCl₂(PPh₃)₂] y [PtCl₂(dppm)].

Contenidos del bloque Espectroscopia vibracional en Química Inorgánica:

Aplicaciones a la determinación estructural de compuestos inorgánicos. Relación entre la fuerza de enlace y el desplazamiento de la frecuencia. Cambios en los espectros de los ligandos y por transformación de la simetría del complejo tras la coordinación. Modos normales de vibración de tensión y deformación y su actividad en espectroscopia vibracional: aplicación de las propiedades de simetría. Interpretación de espectros vibracionales de especies con diferentes geometrías y simetrías. Utilización de referencias bibliográficas para el estudio de los modos de vibración, las bandas y las frecuencias a que aparecen —Nakamoto y col.—

Bloque 3. Espectroscopia electrónica en Química Inorgánica

Actividades del bloque:

Sesiones Prácticas

- Utilización de los Diagramas de Tanabe-Sugano así como los diagramas de relación de energías entre transiciones electrónicas en el cálculo del desdoblamiento del campo en diferentes geometrías y simetrías. Correcta asignación de bandas observadas en un espectro y las transiciones electrónica a que se refieren.
- Interpretación de espectros Uv/Vis: transiciones d-d de los complejos en especies complejas con configuraciones desde d¹ a d⁹ con geometrías octaédrica Oh, Tetraédrica Td y plano-Cuadrada D_{4h}. Otras Geometrías y simetrías utilizando las Tablas de Correlación. Utilización de la fuente de referencia bibliográfica "Lever y col.".
- Realización de los espectros Uv/Vis de los complejos [Ni(NH₃)₆]Cl₂, [Ni(H₂O)₆]Cl₂ y [NEt₄]₂[NiCl₄] y análisis de los datos resultantes. Importancia de



los disolventes.

- Observación de transiciones prohibidas por espín y transferencias de carga:

$[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ y $[\text{Fe}(\text{ox})_3]^{3-}$

- Observación de efecto Jahn-Teller: $[\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$

Contenidos del bloque Espectroscopia electrónica en Química Inorgánica:

Tipos de transiciones electrónicas en compuestos inorgánicos y reglas de selección.

Espectros electrónicos de complejos octaédricos y tetraédricos. Diagramas de Orgel y de Tanabe-Sugano. Covalencia. Transiciones prohibidas. El acoplamiento espín-órbita. Influencia del efecto Jahn-Teller. Otras geometrías. Espectros de transferencia de carga (TC) e intervalencia.

Bloque 4. Espectrometría de masas en Química Inorgánica

Actividades del bloque:

Seminario: análisis de la utilización de diferentes técnicas de espectrometría de masas, tomando como ejemplo los ligandos PTA y 2-tiolpiridina, y algunos derivados de Pd(II) y Pt(II) con estos ligandos.

Seminario: análisis de la relación entre las estructuras de diferentes complejos de metales de transición y la información se sus espectros de masas.

Simulación de señales con sus distribuciones isotópicas utilizando aplicaciones sencillas como ChemCalc u otras —gratuitas accesibles a través de direcciones web—.

Contenidos del bloque Espectrometría de masas en Química Inorgánica:

Diferentes métodos de ionización y análisis aplicables a compuestos inorgánicos (EI, FAB, MALDI, ESMS...). Relación entre la información estructural y el espectro de masas que presentan. Relevancia de la distribución isotópica de una señal. Simulación de señales utilizando aplicaciones sencillas como ChemCalc u otras —gratuitas accesibles a través de direcciones web—.

Bloque 5. Métodos de difracción en Química Inorgánica

Actividades del bloque:

Seminario: Utilización de bases de datos cristalográficos (CCDB).

Seminario: Simetría de los cristales. Grupos espaciales.

Sesión de laboratorio difracción de RX:

- Preparación de muestras: polvo y crecimiento de monocristales

Seminario: interpretación de tablas de datos y de patrones de difracción, tanto de monocristal como de polvo.

Contenidos del bloque Métodos de difracción en Química Inorgánica:

Elementos de simetría en estado sólido. Grupos espaciales y representación de la celda unidad. El difractómetro, interacción de los RX con la materia y la ley de Bragg.

Difracción de RX sobre monocristal: etapas en la resolución de una estructura cristalina, información estructural y parámetros cristalográficos.



Bloque 6. Resonancia magnética nuclear en Química Inorgánica (I)

Actividades del bloque:

Sesión de laboratorio RMN básico en Química Inorgánica:

- Preparación y registro de espectros de RMN ^1H , ^{31}P y ^{13}C de los complejos: $\text{cis-}[\text{PtCl}_2(\text{PPh}_3)_2]$, $\text{trans-}[\text{PtCl}_2(\text{PPh}_3)_2]$ y $[\text{PtCl}_2(\text{dppm})]$
- Determinación estructural de complejos de metales de transición: complejos de Ni(II) con distintas bases de Schiff

Seminario: discusión de resultados de experimentos anteriores IR+RMN

Contenidos del bloque Resonancia magnética nuclear en Química Inorgánica (I):

Núcleos activos en RMN de interés en Química Inorgánica. Información relevante obtenida a partir de los desplazamientos químicos (de protón y de otros elementos).

Información relevante obtenida de la intensidad relativa de las señales de RMN.

Sistemas de espín sencillos debidos al acoplamiento: acoplamiento homonuclear y acoplamiento heteronuclear. Acoplamiento a núcleos con momento cuadrupolar.

Información relevante obtenida de los valores de las constantes de acoplamiento.

Bloque 7. Resonancia magnética nuclear en Química Inorgánica (II)

Actividades del bloque:

Sesión de aula RMN avanzado en Química Inorgánica:

- Ejemplos de RMN dinámico de complejos de metales de transición.
- Ejemplos de RMN bi-dimensional de complejos de metales de transición.

Seminario: discusión de casos prácticos de RMN avanzado.

Seminario: resolución de los problemas planteados en RMN avanzado.

Contenidos del bloque Resonancia magnética nuclear en Química Inorgánica (II):

Espectros de mayor complejidad (espectros de segundo orden; inequivalencia quiral y pro-quiral). La aproximación multinuclear. Relajación (fenómenos y experimentos).

Experimentos de resonancia múltiple: doble resonancia y triple resonancia. El efecto NOE. Técnicas de pulsos. Seguimiento de reacciones: medida de la concentración y reacciones de intercambio. Seguimiento de procesos dinámicos mediante RMN.

Compuestos paramagnéticos.

Bloque 8. Estrategias de caracterización estructural en Química Inorgánica.

Actividades del bloque:

Seminario: Estudio de estrategias de caracterización: cómo extraer la información relevante y cómo evitar la información redundante.

Tutoría: Resolución de casos prácticos de forma individual con elaboración de informe.



10.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- A.B.P. Lever, (1997) Inorganic Electronic Spectroscopy, 2nd Edition, 3rd Reprinted, Elsevier,
- D.W.H. Rankin, N.W. Mitzel, C. A. Morrison, (2013) Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry, Wiley,
- E. de Hoffmann, V. Stroobant , (2007) Mass Spectrometry: Principles and Applications, 3rd Edition, Wiley, ISBN: 978-0-470-03310-4,
- E.A.V. Ebsworth, (1992) Solutions Manual for Structural Methods in Inorganic Chemistry, Blackwell,
- E.A.V. Ebsworth, David W. H. Rankin, and Stephen Cradock, (1991) Structural Methods in Inorganic Chemistry, Second Edition, Blackwell,
- F. Wells, (1986) Structural Inorganic Chemistry, 5th Edition, Oxford University Press,
- G. H. Stout, L. H. Jensen, (1989) X-ray Structure Determination. A Practical Guide, 1st Edition, John Wiley & Sons,
- H. Friebolin, (2005) Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, Fourth Edition, Wiley-VCH,
- K. Namamoto, (2009) Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds. Part A, Theory and Applications in Inorganic Chemistry--Part B, Applications in Coordination, Organometallic, and Bioinorganic Chemistry, 6th ed., John Wiley & Sons,
- Peter Atkins, Tina Overton, Jonathan Rourke, Mark Weller, Fraser Armstrong, (2006) Inorganic Chemistry, Fourth Edition, Oxford University Press, 978-0-19-926463-6,
- S.F.A. Kettle, (2007) Symmetry and Structure : Readable Group Theory for Chemists, 3rd Edition, John Wiley & Sons, cop.,
- W. Henderson and J.S. McIndoe, Mass Spectrometry of Inorganic, Coordination and Organometallic Compounds: Tools - Techniques - Tips, John Wiley & Sons,,

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- J. Keeler, (2005 (reprinted 2007)) Understanding NMR Spectroscopy, 1st Edition, Wiley,
- W. Clegg, (1998) Crystal Structure Determination, Oxford Science Publications,

10.4- Acceso a la Bibliografía Recomendada desde Leganto

https://leganto.ubu.es/leganto/public/34BUC_UBU/lists?courseCode=5291&auth=SAML



11. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante:

Clases presenciales en el laboratorio, seminarios evidencias prácticas presenciales en el aula, tutorías, elaboración de informes, examen escrito.

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clases de aula colectivas	CB1-CB3,T1-T4,T6, T8, T9,T11,T12,T17-T22,G1-G4,G14-G16, E1-E5,E9,E11,E12	10	30	40
Seminarios/laboratorio/ evidencias prácticas	CB3-CB5, T1-T4,T6, T8,T10-T12, T17-T22 ,G1-G4,G14-G16, E1-E5,E9,E11,E12	37	20	57
Elaboración de informes	CB3,CB4,T1,T3,T4,T6,T8,T9,T11, T17-T18,T21,T22,G1-G4, G14-G16,E1-E5,E9,E11, E12	0	15	15
Tutorías colectivas	GB4,T1-T4,T6,T8, T10-T12,T17-T22,G1-G4,G14-G16,E1-E5,E9,E11,E12	4	16	20
Examen escrito	GB1-GB5,T1,T2,T5, T6,T8,T11,T12,T17-T22,G1-G4,G14-G16	3	15	18
Total		54	96	150



12. Sistemas de evaluación:

La asignatura será evaluada de forma continua considerando: los resultados del Trabajo en el laboratorio y en seminarios mediante la resolución de casos prácticos (denominado actividades personales A1 y A2); la Evaluación de destrezas prácticas adquiridas: "propuesta de una práctica de caracterización utilizando al menos 3 de las técnicas estudiadas y su solución" (A3); y el Examen escrito (prueba final escrita en la que el/la profesor/a valorará el grado en que el/la estudiante ha adquirido las competencias abordadas a lo largo de la asignatura).

La CALIFICACIÓN FINAL de esta asignatura se calculará como la MEDIA PONDERADA de las calificaciones obtenidas en los procedimientos de evaluación recogidos en la tabla inferior.

Para superar la asignatura, ninguno de los procedimientos podrá tener una calificación inferior al 40% de dicho apartado.

La segunda convocatoria incluye la evaluación de cualquiera de los procedimientos del sistema de evaluación de la asignatura que no han sido superadas en la primera convocatoria con la misma ponderación en el total de la evaluación.

El sistema de evaluación para estudiantes de intercambio deberá ser modificado en el supuesto de que los calendarios académicos de las universidades de origen y de destino no sean coincidentes.

NOTA. En la segunda convocatoria la/os estudiantes podrán siempre tener la oportunidad de mejorar la calificación obtenida en la primera convocatoria para cada uno de los procedimientos del sistema de evaluación, siempre atendiendo a la normativa vigente al respecto.

MEDIDAS ANTI-FRAUDE:

Los estudiantes que fueran sorprendidos copiando o plagiando en cualquiera de los procedimientos de evaluación de la asignatura tendrán una calificación de cero en la nota global de la asignatura, de acuerdo con el artículo 17.2 del Reglamento de Evaluación de la Universidad de Burgos.

El profesorado encargado de la asignatura podrá utilizar cualquier herramienta antiplagio que la Universidad de Burgos ponga a su disposición para asegurar que no ha habido copia o plagio en ninguna de las pruebas/procedimientos de evaluación realizadas por la/os estudiantes. Si la/os estudiantes no autorizaran su uso no podrán tener ese procedimiento evaluado y se le calificará con cero puntos sobre 10.



Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
Trabajo en el laboratorio y en seminarios: resolución de casos prácticos (actividades personales A1 + A2)	35 %	35 %
Evaluación de una "propuesta de una práctica de caracterización utilizando al menos 3 de las técnicas estudiadas y su solución" (A3)	25 %	25 %
Examen escrito	40 %	40 %
Total	100 %	100 %

Evaluación excepcional:

En atención al reglamento vigente en la UBU se considerará la excepcionalidad para aquellos casos que se ajusten al mencionado reglamento y se propone un sistema de evaluación, también ajustado a él, que incluye el siguiente procedimiento para evaluar de igual manera los resultados de aprendizaje:

- Examen escrito que aborda cualquiera de los contenidos incluidos en la guía docente de la asignatura, con un peso del 40 %, y un 30% en una prueba escrita de cuestiones sobre la materia. Se deberá obtener un 5/10 en esta prueba de evaluación para realizar la media correspondiente con el resto de procedimientos.
- Evaluación de una propuesta de una práctica de caracterización utilizando al menos tres de las técnicas que incluye la asignatura, con un peso del 30%.

13. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

La docencia presencial se desarrolla en el aula/laboratorios con apoyo de los recursos materiales que la Facultad de Ciencias y la UBU proporciona —proyección audiovisual, conexión a internet, recursos bibliográficos, plataforma de recursos de aprendizaje UBUVirtual, instrumentación y equipos para la caracterización, etc.—.

Los materiales de apoyo para el aprendizaje, incluidas referencias externas, se encuentran en la plataforma moodle UBUVirtual.

El apoyo tutorial se lleva a cabo por los procedimientos establecidos en la UBU (<http://www.ubu.es/quimica>).

14. Calendarios y horarios:

Los establecidos por la Facultad y publicados en la página web del título (<http://www.ubu.es/quimica>)



UNIVERSIDAD DE BURGOS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

15. Idioma en que se imparte:

Castellano