



GUÍA DOCENTE 2022-2023

**Técnicas avanzadas II: resonancia magnética multinuclear,
resonancia paramagnética electrónica y magnetismo
molecular**

1. Denominación de la asignatura:

Técnicas avanzadas II: resonancia magnética multinuclear, resonancia paramagnética electrónica y magnetismo molecular

Titulación

Máster en Química Avanzada

Código

7468

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

Técnicas avanzadas II: resonancia magnética multinuclear, resonancia paramagnética electrónica y magnetismo molecular

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

Química

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

Aránzazu Mendía Jalón, Jose Vicente Cuevas Vicario, Luis Lezama Diago
(Universidad del País Vasco) y Javier García Tojal

4.b Coordinador de la asignatura

Javier García Tojal

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

MASTER EN QUÍMICA AVANZADA, 2º semestre



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

Optativa

7. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:

Se recomiendan conocimientos básicos de física y química a nivel de grado.

8. Número de créditos ECTS de la asignatura:

5

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

COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES

BÁSICAS

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.

GENERALES

CG1.- Tener capacidad para organizar, planificar y ejecutar una idea o proyecto.

CG2.- Tener conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio incluyendo las habilidades básicas en Tecnologías de la Información y Comunicación.

CG3.- Tener un alto grado de sensibilización y compromiso activo con temas socioeconómicos y con temas vinculados con el medio ambiente.

CG4.- Poseer la capacidad de comprender el inglés, siendo capaz de utilizarle para expresar conceptos relacionados con el ámbito de estudio.

CG5.- Tener habilidades en las relaciones interpersonales, demostrando iniciativa, liderazgo y motivación por la calidad, de modo que pueda desarrollar trabajos en



equipo.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE1- Haber adquirido conocimientos avanzados de Química demostrando, en un contexto altamente especializado, una comprensión detallada y fundamentada de los aspectos teóricos y prácticos y de la metodología de trabajo en Química.

CE4.- Ser capaces de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas en Química mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo.

CE5.- Tener la capacidad para proyectar y optimizar experimentos, disminuyendo costes y tiempo, manteniendo la calidad de la información, el respeto al medio ambiente y a las normativas de calidad y seguridad.

CE8.- Saber aplicar sus conocimientos de los procesos químicos tanto en las actividades industriales, como en el laboratorio a problemas nuevos de carácter multidisciplinar.

10. Programa de la asignatura

10.1- Objetivos docentes

Generales

Conocer los fundamentos, conceptos, límites e ideas esenciales de las técnicas. Saber cómo diseñar sistemas y experimentos apropiados para que el alumno pueda aplicar lo aprendido a su campo de investigación. Aprender a interpretar los resultados obtenidos y, si fuera necesario, a rediseñar a partir de ellos nuevos sistemas y/o experimentos que transmitan una mayor información.

Específicos

Conocer las distintas técnicas al alcance del alumno y los experimentos susceptibles de ser realizados, sabiendo la información que cada uno de ellos puede proporcionarle. Asimismo, comprender los factores que afectan a las propiedades magnéticas de los sistemas. Adquirir los conocimientos que le permitan seleccionar qué experimento o conjunto de experimentos son los más adecuados para obtener la información deseada, así como diseñar sistemas que presenten determinadas propiedades. Y, por último, interpretar y analizar los resultados obtenidos. En base a ello, rediseñar nuevos experimentos o sistemas para obtener información adicional o realizar las modificaciones oportunas.



10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)

Unidad 1

Bases de la Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear (RMN)

- 1.- Introducción.
- 2.- Principios físicos de la RMN.
- 3.- Relajación de espín.
- 4.- Técnicas de pulsos.

Parámetros espectroscópicos en Resonancia Magnética Nuclear

- 1.- Desplazamiento químico e intensidad de señal
- 2.- Acoplamiento escalar
- 3.- Efecto NOE

Experimentos básicos de RMN

- 1.- RMN 1D
- 2.- RMN multidimensional
- 3.- Correlaciones homonucleares a través de enlaces químicos (COSY, TOCSY, INADEQUATE)
- 4.- Correlaciones heteronucleares a través de enlaces químicos (SPT, INEPT, HSQC, HMQC).
- 5.- Correlaciones a través del espacio.

RMN de núcleos activos diferentes a ^1H y ^{13}C

- 1.- Desplazamientos químicos y acoplamientos.
- 2.- Desacoplamiento de núcleos.
- 3.- Espectros mono- y bidimensionales.
- 4.- Aplicación en diferentes áreas de la Química y afines.

Ejercicios prácticos

Transformación e Interpretación de espectros de Resonancia Magnética Multinuclear mono- y bidimensionales: ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P , ^{77}Se , ^{95}Mo , ^{195}Pt , etc

Unidad 2

Magnetismo molecular.

Teóricos:

Introducción al magnetismo molecular (magnetización y susceptibilidad magnética). Moléculas con un único centro magnético (sin momento orbital, con momento orbital, transiciones de espín). Compuestos dinucleares (interacción isotrópica –radicales, iones CuII , otros compuestos homodinucleares–; compuestos heteronucleares; modelos orbitales; correlaciones magneto-estructurales; influencia de interacciones dipolares, anisotrópicas y antisimétricas). Compuestos oligonucleares (tri-, tetra-, etc.). Sistemas 1D, 2D, 3D. Compuestos de valencia mixta.

Prácticos:

Análisis de curvas χ_M vs T y deducción de las fórmulas para la obtención del valor de J en sistemas dinucleares.



Unidad 3

Espectroscopia de resonancia paramagnética electrónica (RPE).

Teóricos:

Introducción a la resonancia paramagnética electrónica (fundamentos de la técnica, compuestos que permite estudiar, tipos de señales y cómo se miden). El tensor g (significado, origen de su anisotropía, casuística de radicales e iones paramagnéticos). Acoplamiento hiperfino y superhiperfino. Estructura fina (desdoblamiento a campo nulo). Sistemas de cromóforos con espines electrónicos acoplados. Aspectos experimentales, limitaciones, campos de aplicación y nuevas tendencias.

Prácticos:

Medidas de diferentes muestras en el espectrómetro de EPR. Simulaciones de espectros de muestras en polvo policristalino y disolución (a temperatura ambiente y bajas temperaturas): obtención de los parámetros g y A y detección de desdoblamientos a campo nulo.

10.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- A. Bencini, D. Gatteschi, (1990) Electron paramagnetic resonance of exchange coupled systems, Springer-Verlag, Nueva York (EE. UU.),
- F. E. Mabbs, D. Collison, (1992) Electron Paramagnetic Resonance of d Transition Metal Compounds, Elsevier, Amsterdam (Holanda),
- H. Friebolin, (1998) Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, 3, Wiley, Nueva York (EE. UU.),
- H. Gunther, (1996) NMR Spectroscopy. Basic principles, concepts, and applications in chemistry, 2ª, Wiley, Nueva York (EE. UU.),
- J. A. Weil, (1998) Electron paramagnetic resonance: elementary theory and practical applications, John Wiley & Sons, 2ª Edición como recurso electrónico con el mismo título (2007),
- J. J. Giménez Martínez, J. M. Expósito López, (1998) RMN para químicos orgánicos, Servicio de Publicaciones de la Universidad de Almería, Almería,
- J. R. Pilbrow, (1991) Transition ion electron paramagnetic resonance, Oxford University Press, Oxford (Reino Unido),
- K. Itoh, M. Kinoshita, (2000) Molecular Magnetism: New Magnetic Materials, Kodansha and Gordon & Breach, Tokio - Amsterdam,
- O. Kahn, (1993) Molecular Magnetism, VCH Publishers, Weinheim (Alemania),
- R. L. Carlin, (1986) Magnetochemistry, Springer-Verlag, Berlín (Alemania),
- S. Berger, S. Braun, (1998) 200 and More NMR Experiments. A Practical Course, 2ª, Wiley, Nueva York (EE. UU.),



BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

C. P. Poole, (1997) Electron spin resonance: a comprehensive treatise on experimental techniques, 2ª, Dover Publications, Nueva York (EE. UU.),
C. P. Poole, H. A. Farach, (1994-1999 (Vols. I-II)) Handbook of electron spin resonance, Springer-Verlag, Nueva York (EE. UU.),
F. Gerson, (2003) Electron spin resonance spectroscopy for organic radicals, Wiley-VCH, Weinheim (Alemania),
J. S. Miller, M. Drillon (Ed.), (2001-2004. (Vols. I-V)) Magnetism: Molecules to Materials, Wiley-VCH, Weinheim (Alemania),
P. Day, A. E. Underhill (Ed.), (2000) Metal-Organic and Organic Molecular Magnets, Royal Society of Chemistry, Londres (Reino Unido),
P. H. Rieger, (2007) Electron spin resonance : analysis and interpretation, Royal Society of Chemistry, Cambridge (Reino Unido),
W. Linert, M. Verdaguer (Ed.), (2003) Molecular magnets: recent highlights, Springer-Verlag, Viena (Austria),

10.4- Acceso a la Bibliografía Recomendada desde Leganto

https://leganto.ubu.es/leganto/public/34BUC_UBU/lists?courseCode=7468&auth=SAML

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

Los conceptos e ideas teóricos se simultanearán con ejemplos prácticos. El curso incluirá algunas sesiones prácticas a realizar tanto en los equipos instrumentales disponibles con la ayuda del técnico encargado como en ordenadores destinados a tal efecto utilizando los paquetes de software habituales.

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clases teóricas	CB6-CB10, CG1-CG4, CE1, CE4, CE5, CE8	31	52	83
Seminarios, debates y prácticas de laboratorio	CB6-CB10, CG1-CG5, CE1, CE4, CE5, CE8	10	17	27
Exámenes y pruebas escritas	CB6-CB10, CG1, CG3, CG4, CE1, CE4, CE5, CE8	4	11	15
Total		45	80	125



12. Sistemas de evaluación:

Se llevará a cabo un seguimiento individualizado de cada alumno, controlando su progresión a lo largo del curso, el nivel de asimilación de los conceptos expuestos, y su capacidad para ponerlos en práctica de modo efectivo. Para ello se recurrirá a la resolución de ejercicios, supuestos prácticos, seminarios, tutorías, simulaciones y ajustes, sesiones teórico-prácticas de manipulación de los equipos, y otras actividades.

A este fin se evaluará el trabajo del alumno durante la parte teórica (30 %). Este porcentaje incluirá: participación activa (20 %), preguntas formuladas y respuestas emitidas (10%). Asimismo, se contabilizarán los supuestos teórico-prácticos (30 %) propuestos, amén del rendimiento del alumno durante el desarrollo de la parte práctica del curso (10 %). Finalmente, los resultados de las pruebas de evaluación contribuirán con un 30 % a la nota global.

Para superar la asignatura será necesario alcanzar en cada uno de los bloques de procedimientos de evaluación una calificación mínima del 30 % y un mínimo de 5 puntos sobre 10 en la nota ponderada que incluye todos los procedimientos anteriores.

Se considerarán como recuperables las pruebas escritas, el trabajo de los y las estudiantes durante la parte teórica y contenidos relacionados con lo impartido en prácticas. Es por ello que, para la segunda convocatoria, la prueba de evaluación y los supuestos teórico-prácticos mantienen su peso de 30 % en ambos casos, y se plantean la realización de un trabajo a determinar por los profesores con una contribución del 30 % a la calificación final y de una tarea relacionada con la parte práctica del curso (10 %).

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.

Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
Trabajo del alumno durante la parte teórica	30 %	0 %
Supuestos teórico-prácticos	30 %	30 %
Rendimiento del alumno durante el desarrollo de la parte práctica del curso y tarea relacionada	10 %	10 %
Pruebas de evaluación	30 %	30 %
Realización de un trabajo	0 %	30 %
Total	100 %	100 %



Evaluación excepcional:

Entrega de un trabajo individual sobre los temas desarrollados (30%), resolución de cuestiones (30%), examen final de conocimientos que será presencial (40%).

13. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

La docencia se desarrolla en el aula con apoyo de pizarra, recursos de red (plataforma UBUVirtual y contenidos de internet), medios de proyección audiovisual y acceso a grandes equipos del Parque Científico-Tecnológico de la UBU y de la Facultad de Ciencias.

El apoyo tutorial se lleva acabo por los procedimientos establecidos en la UBU.

14. Calendarios y horarios:

Los establecidos por la Facultad y publicados en la página web del título.

15. Idioma en que se imparte:

Español (posibilidad de materiales en inglés).