

### DATOS DE LA ASIGNATURA

**Denominación:** AMPLIACIÓN DE QUÍMICA INORGÁNICA

**Código:** 100457

**Plan de estudios:** GRADO DE QUÍMICA

**Curso:** 3

**Denominación del módulo al que pertenece:** FUNDAMENTAL

**Materia:** QUÍMICA INORGÁNICA

**Carácter:** OBLIGATORIA

**Duración:** PRIMER CUATRIMESTRE

**Créditos ECTS:** 6

**Horas de trabajo presencial:** 60

**Porcentaje de presencialidad:** 40%

**Horas de trabajo no presencial:** 90

**Plataforma virtual:** <http://www.uco.es/moodle>

### DATOS DEL PROFESORADO

**Nombre:** TIRADO COELLO, JOSE LUIS (Coordinador/a)

**Centro:** FACULTAD DE CIENCIAS

**Departamento:** QUÍMICA INORGÁNICA E INGENIERÍA QUÍMICA

**área:** QUÍMICA INORGÁNICA

**Ubicación del despacho:** Edificio Marie Curie, primera planta

**E-Mail:** [iq1ticoj@uco.es](mailto:iq1ticoj@uco.es)

**Teléfono:** 957218637

**URL web:** <http://moodle.uco.es/m1617/>

**Nombre:** ORTIZ JIMÉNEZ, GREGORIO FRANCISCO MARIO

**Centro:** FACULTAD DE CIENCIAS

**Departamento:** QUÍMICA INORGÁNICA E INGENIERÍA QUÍMICA

**área:** QUÍMICA INORGÁNICA

**Ubicación del despacho:** Edificio Marie Curie, primera planta

**E-Mail:** [q72maorg@uco.es](mailto:q72maorg@uco.es)

**Teléfono:** 957218663

**URL web:** <http://moodle.uco.es/m1617/>

### DATOS ESPECÍFICOS DE LA ASIGNATURA

#### REQUISITOS Y RECOMENDACIONES

**Requisitos previos establecidos en el plan de estudios**

Ninguno.

**Recomendaciones**

Ninguna especificada.

CB4	Conocimiento de una lengua extranjera.
CB6	Resolución de problemas.
CB10	Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
CE3	Principios y procedimientos usados en el análisis químico y en la caracterización de los compuestos químicos.
CE4	Las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo la espectroscopía.
CE10	Aspectos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo estereoquímica.
CE20	Estudio, propiedades y aplicaciones de los materiales.
CE21	Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
CE22	Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
CE23	Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
CE24	Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
CE28	Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
CE31	Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

## OBJETIVOS

- Conocer y saber utilizar las técnicas experimentales empleadas habitualmente en la determinación estructural de compuestos inorgánicos.
- Conocer cómo es el enlace, la estructura, reactividad y las propiedades de los sólidos inorgánicos.

## CONTENIDOS

### 1. Contenidos teóricos

#### 1. Contenidos teóricos

#### ***Sección 1. Métodos experimentales para la determinación de la estructura de los compuestos inorgánicos***

**Tema 1.** Teoría de grupos puntuales de operaciones de simetría. Representaciones y tablas de caracteres. Transformación de representaciones reducibles en irreducibles. El producto directo. Aplicación de la teoría de grupos al estudio de la espectroscopía vibracional. Simetría de los modos normales. Niveles y transiciones fundamentales. Actividad IR y Raman.

**Tema 2.** Espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN). Espín nuclear y niveles en presencia de un campo magnético. Condición de resonancia e instrumentación. Aspectos dinámicos. Aplicaciones al estudio estructural de moléculas inorgánicas. RMN de sólidos. Giro en ángulo mágico. Aplicaciones al estudio de sólidos inorgánicos.

**Tema 3.** Espectroscopías de fotoelectrones. Instrumentación y radiaciones utilizadas. Espectroscopía Auger. Calibrado. Información química obtenida. Intensidad de los fotoelectrones. Estudios de niveles de energía de valencia. Estructura fina de los espectros. Estudios de los niveles profundos. Desplazamiento químico, acoplamiento espín-órbita y satélites.

**Tema 4.** Sistemas cristalinos. Redes de Bravais. Los 32 grupos puntuales cristalográficos. Grupos espaciales de simetría. Grupos simórficos. Tablas Internacionales de Cristalografía. Difracción de rayos X. Métodos de cristal único. Método de polvo. Determinaciones estructurales por el método de polvo de difracción de rayos X y neutrones. Análisis de Rietveld.

**Tema 5.** Técnicas de microscopía. El microscopio electrónico de transmisión. Preparación de muestras.

Fundamentos de la formación e interpretación de imágenes. Microscopía electrónica de alta resolución. Difracción de electrones. Microscopía de barrido de efecto túnel: instrumental y aplicaciones. Microscopía de fuerza atómica.

## **Sección 2. Sólidos inorgánicos**

**Tema 6.** Descripción y predicción de estructuras cristalinas en base al empaquetamiento. Empaquetamientos compactos. Estructuras relacionadas: sustituciones, posiciones intersticiales, distorsiones e iones complejos. Poliedros de coordinación y conectividad. Relaciones con la descripción cristalográfica.

**Tema 7.** Relaciones enlace-estructura. Sólidos iónicos. Postulados de Pauling. Direccionalidad de enlace. Diagramas de Mooser-Pearson. La ecuación de Phillips y Van Vechten. Sólidos covalentes y dimensionalidad. Vidrios: reglas de Zachariasen. Metales: teoría de bandas y estructuras. Sólidos moleculares. Teoría de Kitaigorodskii. Puentes de hidrógeno y estructura cristalina. Agua en cristales: teoría de Baur.

**Tema 8.** Defectos en sólidos. Defectos puntuales. Termodinámica de los defectos Shottky y Frenkel. Defectos unidimensionales: Dislocaciones en arista y helicoidales. Vector de Burgers. Densidad de dislocaciones. Defectos bidimensionales: fronteras de fase. Fronteras de grano de alto y bajo ángulo. Defectos de apilamiento. Defectos tridimensionales: inclusiones y poros. Sólidos no estequiométricos. Vacantes e intersticios. Asimilación de defectos: ordenamiento de vacantes y clusters. Eliminación de defectos: planos CS. Estructuras desajustadas.

**Tema 9.** Reactividad de sólidos. Diagramas de fases y regla de las fases. Transformaciones polimórficas por reconstrucción o desplazamiento atómico. Reacciones entre sólidos. Interdifusión. Efecto Kirkendall. Reacciones sólido-gas. Oxidación. Descomposición térmica.

**Tema 10.** Propiedades de sólidos inorgánicos. Propiedades mecánicas. Dureza y microestructura. Propiedades magnéticas. Ferro-, ferri- y antiferromagnetismo. Leyes de Curie-Weiss y de Néel. Propiedades eléctricas. Superconductores. Propiedades ópticas. Láser de estado sólido.

## **2. Contenidos prácticos**

Se dispondrá de una colección de Ejercicios y Problemas en unidades relacionadas los contenidos teóricos, siendo su discusión y resolución la base de las Actividades Dirigidas recogidas en el apartado de Seminarios. A cada unidad le corresponden tres horas en total, 2 h de problemas y tutorías. La siguiente lista muestra un resumen de los contenidos de dichas unidades:

- Elementos de simetría y grupos puntuales
- Tablas de caracteres y espectroscopías IR y Raman
- RMN y XPS
- Grupos espaciales
- Difracción de rayos X
- Visita y uso de instrumentos científicos
- Relaciones enlace-estructura
- Defectos en sólidos
- Reactividad y propiedades de sólidos

### Aclaraciones generales sobre la metodología (opcional)

Las clases dedicadas al Grupo Completo desarrollan la lección magistral como actividad principal, mediante la exposición de los contenidos de teoría especificados en el programa de la asignatura incluido en esta Guía Docente. El objetivo fundamental de la clase expositiva es la presentación al alumno de una serie de conocimientos estructurados de forma adecuada para que constituyan la base necesaria para el posterior estudio de cada uno de los temas del programa docente. Este instrumento de enseñanza no pretende establecer límites fijos para cada tema ni la exposición de forma única de su contenido. Antes bien, debe potenciar y facilitar la labor posterior del alumno, indicando las líneas principales a seguir en la comprensión de la materia del tema y mostrando las conexiones más destacadas entre las distintas lecciones del temario. Adicionalmente, una aportación destacada de la clase expositiva debe ser el señalar la bibliografía de mayor interés para cada una de las secciones del programa a seguir. El empleo de técnicas auxiliares en la exposición, como presentaciones y modelos tridimensionales de orbitales, moléculas y redes cristalinas, serán de gran utilidad para facilitar la comprensión.

Las clases dedicadas a los Grupos Medianos suponen el desarrollo de actividades de Seminario y Tutorías. El seminario permite superar las limitaciones inherentes a la clase expositiva, pudiéndose desarrollar una nueva aproximación al tema objeto de estudio de forma más interactiva. Al mismo tiempo, pueden pormenorizarse determinados detalles no incluidos en la clase expositiva para no ocultar los principios fundamentales que deben ser transmitidos. También puede procederse a la aplicación de dichos principios a un amplio conjunto de problemas reales. Por otra parte, la tutoría brinda la oportunidad al alumno de resolver dudas, que no haya podido solucionar en base a la bibliografía asignada al tema, mediante el contacto directo con el profesor.

### Adaptaciones metodológicas para alumnado a tiempo parcial

Las adaptaciones metodológicas para los alumnos a tiempo parcial a seguir se realizarán de acuerdo con la normativa del centro y la casuística de los estudiantes.

Los criterios para alumnos de segunda y sucesivas matrículas en lo referente a realización de actividades prácticas y metodología de evaluación serán los mismos que para los alumnos de primera matrícula.

### Actividades presenciales

Actividad	Grupo completo	Grupo mediano	Total
<i>Actividades de evaluación</i>	5	-	5
<i>Lección magistral</i>	28	-	28
<i>Seminario</i>	-	18	18
<i>Tutorías</i>	-	9	9
<b>Total horas:</b>	<b>33</b>	<b>27</b>	<b>60</b>

### Actividades no presenciales

Actividad	Total
<i>Búsqueda de información</i>	10
<i>Consultas bibliográficas</i>	10
<i>Ejercicios</i>	15
<i>Estudio</i>	40
<i>Problemas</i>	15
<b>Total horas:</b>	<b>90</b>

**Aclaraciones:**

La plataforma e-learning contendrá la guía docente, así como información detallada sobre los temas de teoría, presentaciones, enlaces a páginas de interés, ejercicios y problemas y sus soluciones, y resultados de las pruebas de evaluación. Así mismo, será una herramienta valiosa de comunicación entre alumnos y profesorado.

**EVALUACIÓN**

Competencias	Instrumentos		
	Pruebas de respuesta corta	Pruebas orales	Resolución de problemas
CB10		X	
CB4	X		X
CB6	X		
CE10		X	X
CE20	X	X	
CE21	X		X
CE22	X	X	X
CE23			X
CE24	X	X	
CE28	X	X	
CE3	X	X	
CE31	X	X	X
CE4			X
<b>Total (100%)</b>	60%	20%	20%
<b>Nota mínima.(*)</b>	4	4	4

(\*) Nota mínima para aprobar la asignatura.

**Método de valoración de la asistencia:**

Active attendance in seminars problems = 1

**Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación:**

El Grupo Completo se evaluará con el Examen tipo test, que constituirá el 60 % de la nota final. Los Grupos Medianos se evaluarán de forma continuada durante el desarrollo de las sesiones de Seminarios, puntuando resolución de problemas en PEC y examen (20 %), y asistencia (10 %) y pruebas orales (10 %) en seminarios. A este último efecto se hará uso de la siguiente rúbrica:

**Participación**

*Avanzado:* El alumno se ofrece voluntario a resolver el ejercicio en la pizarra.

*Competente:* El alumno participa cuando se le solicita por parte del profesor.

*Insatisfactorio:* El alumno ofrece resistencia a participar en el seminario.

## Comportamiento

*Avanzado:* El alumno muestra interés y se comporta activamente en el seminario.

*Competente:* El alumno permanece en silencio, muestra interés aunque no participa.

*Insatisfactorio:* El alumno está ausente y/o molesta al desarrollo del seminario.

## Desarrollo del ejercicio

*Avanzado:* El alumno expone con claridad el ejercicio.

*Competente:* El alumno se limita a escribir el resultado de forma mecánica.

*Insatisfactorio:* El alumno duda y balbucea durante el desarrollo del ejercicio.

## Validez del resultado

*Avanzado:* El alumno llega al resultado correcto.

*Competente:* El alumno necesita una pequeña ayuda, pero resuelve correctamente el ejercicio.

*Insatisfactorio:* El alumno no termina el ejercicio y/o llega a resultados incorrectos.

## Discusión

*Avanzado:* El alumno responde con decisión a las preguntas que se le hacen.

*Competente:* El alumno duda pero finalmente responde adecuadamente.

*Insatisfactorio:* El alumno no sabe responder a las preguntas.

### **Aclaraciones de evaluación para el alumnado a tiempo parcial:**

Las adaptaciones de evaluación para los alumnos a tiempo parcial a seguir se realizarán de acuerdo con la normativa del centro y la casuística de los estudiantes.

Los criterios para alumnos de segunda y sucesivas matrículas en lo referente a realización de actividades prácticas y metodología de evaluación serán los mismos que para los alumnos de primera matrícula.

**Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor:** *Según normativa de la UCO*

## **Aclaraciones generales sobre las evaluaciones parciales, calificación mínima para eliminar materia y período de validez:**

General clarification of the partial evaluations, to remove material and minimum period of validity rating:

Three Continuous Evaluation Tests (CET) of certain groups of subjects of theory and seminars related problems will be carried out through the term:

CET1: Items 1 and 2

CET2: Issues 3-5

CET3: Issues 6-8

Students who pass some of these CET need not being reconsidered for those parts at the end of the course in January.

The examination of the teaching unit in January must be done by all students to grade lessons 9 and 10 and any CET that was not passed.

The following calls will have a single agenda for items 1 to 10 for all participants.

## **BIBLIOGRAFÍA**

### **1. Bibliografía básica:**

Adams, D.M. *Sólidos inorgánicos: introducción a los conceptos de la química estructural en estado sólido*, Alhambra, (1986).

Callister, W.D. *Introducción a la ciencia e ingeniería de los materiales*, Reverté (2007).

Cotton, F.A. *La teoría de grupos aplicada a la química*. Limusa Mexico (1991).

Housecroft, C.E. *Química Inorgánica*. Pearson-Prentice Hall (2006).

Shriver, D.F., Atkins, P.W. y C.H. Langford *Química Inorgánica*. Reverté (2004).

### **2. Bibliografía complementaria:**

Akitt, J.W. *NMR and Chemistry*. Chapman. N.Y: (1992).

Bermudez Polonio, J. *Métodos de difracción de rayos X. Ciencia y Técnica* (1981).

Burns, G. y Glazer A.M. *Space groups for solid state scientists*. Academic (1978).

Cox, P.A., *The Electronic Structure and Chemistry of Solids*. Oxford Univ. Press. Oxford. (1987).

Drago, R.S. *Physical methods for Chemists*. Saunders N.Y. (1992).

Hull, D. *Introduction to Dislocations*. Pergamon. N.Y. (1975).

Hyde, B.G. y Andersson, S. *Inorganic Crystal Structures*. Wiley. N.Y. (1989).

O'Keefe, M. y Navrotsky, A. (eds.). *Structure and Bonding in Crystals*. Academic. N.Y. (1981).

Rao, C.N.R. y Gopalakrishnan, J. *New directions in solid state chemistry*. Cambridge Univ. Press. Londres (1986).

Schmalzried, H. *Solid State Reactions*. Verlag. N.Y. (1971).

Tilley, R.J.D. *Defect Crystal Chemistry*. Blackie. N.Y. (1987).

Tilley, R. *Understanding Solids*. Wiley, N.Y. (2004).

Wells, A.F. *Structural Inorganic Chemistry*. Clarendon. Oxford. (1975). 4 ed.

West, A.R. *Solid State Chemistry and Its Applications*. Wiley. N.Y. (1984).

### CRITERIOS DE COORDINACIÓN

- Realización de actividades

#### Aclaraciones:

Visitas a sistemas instrumentales avanzados (SCAI)

### CRONOGRAMA

Periodo	Actividad				Comentarios
	Actividades de evaluación	Lección magistral	Seminario	Tutorías	
1ª Semana	0	2	0	0	
2ª Semana	0	2	0	0	
3ª Semana	0	2	2	1	
4ª Semana	0	2	0	0	
5ª Semana	0	0	2	1	Fiesta Nacional de España
6ª Semana	0	2	2	1	
7ª Semana	0	2	2	1	
8ª Semana	2	2	0	0	
9ª Semana	0	2	2	1	
10ª Semana	0	2	2	1	
11ª Semana	0	2	2	1	
12ª Semana	2	2	0	0	
13ª Semana	0	2	2	1	
14ª Semana	0	2	2	1	
15ª Semana	1	2	0	0	
<b>Total horas:</b>	<b>5</b>	<b>28</b>	<b>18</b>	<b>9</b>	