

Plan 435 MÁSTER EN TÉCNICAS AVANZADAS EN QUÍMICA

Asignatura 52200 ESPECTROSCOPIAS DE ALTA RESOLUCIÓN Y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL

Tipo de asignatura (básica, obligatoria u optativa)

 Espectroscopias de alta resolución y modelización computacional
 MATERIA OBLIGATORIA AVANZADA

Créditos ECTS

3

Competencias que contribuye a desarrollar

COMPETENCIAS GENERALES

G1.- Conocimiento del método científico.

Conocer el método científico dentro de las ciencias experimentales, en particular en el ámbito de la Química, formulando modelos e hipótesis de trabajo relevantes y planificando el análisis en relación con dichas hipótesis y la discusión de las conclusiones, de modo que se pueda avanzar en el conocimiento científico.

G2.- Competencia para aplicar los conocimientos adquiridos.

Es la capacidad para aplicar los conocimientos técnicos adquiridos, de forma coherente y profesional, sobre todo en contextos novedosos o en constante renovación, que impliquen la realización de una actividad química

G3.- Capacidad crítica, de análisis y síntesis, y capacidad de interpretación.

Ser capaz de emitir juicios críticos sobre propuestas, hipótesis y validez científica de las conclusiones, así como sintetizar propuestas y resultados dentro del ámbito de la química.

G4.- Competencias metodológicas.

Es la capacidad para elegir la metodología más adecuada para el desarrollo de la investigación y resolución de un problema concreto, adaptándola al contexto en el que se éste se ha originado.

G5.- Capacidad para valorar la originalidad y creatividad.

Es la competencia para reconocer la originalidad en la concepción, formulación y resolución de problemas, en el ámbito de la investigación química y científico-tecnológica en general.

G6.- Capacidades de comunicación.

Ser capaz de presentar de forma oral y escrita, ante públicos especializados o no, resultados avanzados de investigación química, considerando antecedentes, hipótesis de trabajo, resultados y conclusiones

G7.- Capacidad de trabajo en equipo.

Capacidad para el desarrollo de actividades químicas, supervisadas o autónomas, al servicio de un proyecto de trabajo común, que puede ser multidisciplinar.

G8.- Capacidad para el uso de las nuevas tecnologías.

Adquirir destrezas generales en el uso de las nuevas tecnologías en el ámbito de la química, que le permiten la utilización de las herramientas informáticas disponibles más importantes en el campo científico-tecnológico.

G9.- Desarrollar el interés por la formación permanente.

Promover un interés permanente para ampliar conocimientos y el desarrollo de un perfil profesional específico, mediante el estudio, la reflexión y la investigación.

G10.- Capacidad de aprendizaje autónomo.

Adquirir las destrezas necesarias para el aprendizaje autónomo en el ámbito de la Química, reconociendo las fuentes de conocimiento para dicho aprendizaje y su utilización, y motivando el aprendizaje a lo largo de la vida, en el ámbito de la química.

COMPETENCIAS ESPECIFICAS

E1.- Adquisición de destrezas técnicas generales en el ámbito de una o varias disciplinas químicas.

Comprende esta competencia la capacidad de utilización de forma profesional del lenguaje y de las técnicas avanzadas propias de algunas de las especialidades de la Química, para favorecer la interpretación fluida de las fuentes especializadas de dichas disciplinas y la formulación adecuada de nuevos problemas.

E2.- Adquisición de destrezas técnicas generales para el estudio y resolución de problemas medio-ambientales.

Comprende esta competencia la capacidad de elección y utilización de forma profesional de las técnicas avanzadas propias de algunas de las especialidades de la Química, para favorecer el estudio y en su caso resolución de

problemas medio-ambientales.

E3.- Capacidad para iniciarse en la investigación en Química.

El alumno del Máster adquirirá competencias suficientes que le permitan iniciar un proyecto de investigación en alguna de las áreas de conocimiento de la Química, de forma que pueda integrarse en las líneas de investigación de un Programa de Doctorado de la Universidad de Valladolid., o en un departamento de I+D+i de una empresa pública o privada

E4.- Capacidad y destrezas para la gestión de las fuentes de la investigación en Química.

Comprende esta competencia la capacidad del estudiante para la búsqueda y gestión de documentación y bibliografía especializada química, el uso racional y crítico de ésta para determinar el estado del arte en un determinado problema, y el dominio de los recursos bibliográficos pertinentes.

E5.- Capacidad de aplicar y adaptar los modelos teóricos y las técnicas específicas tanto a problemas abiertos en su línea de especialización, como a problemas provenientes de otros ámbitos ya sean científicos o técnicos.

Competencia para adaptar los modelos teóricos químicos para el estudio de problemas relacionados con la química o provenientes de otros campos científico-tecnológicos.

E6.- Capacidad de analizar problemas, detectando la posible utilización de herramientas químicas para contribuir a su comprensión y resolución.

Comprende esta competencia la capacidad analítica frente a nuevas situaciones para identificar la aplicación de herramientas químicas, existentes o de nuevo diseño, que contribuyan a la comprensión y solución de los problemas planteados tanto en el campo de la química en general, como dentro del medio-ambiente en particular.

E7.- Capacidad de defender trabajos de investigación avanzados en el ámbito de sus líneas de especialización así como de mantener debates científicos sobre los mismos, ya sean estos propios o adquiridos.

Capacidad estrechamente vinculada a la competencia de una buena comunicación científica, en el ámbito propio de la especialización adquirida, tanto para defender las tesis propias como para debatir con juicio crítico con terceros, en una relación entre pares.

E8.- Capacidad de comprender nuevos avances y perspectivas científicas en el ámbito de la investigación en las líneas de su especialización.

Competencia para comprender la formulación de nuevos avances, en el ámbito de la investigación propio de cada disciplina de la química, y las perspectivas que plantean.

E9.- Capacidad de detectar líneas de trabajo e investigación emergentes en el ámbito de la química o de sus aplicaciones.

Competencia para reconocer líneas de investigación emergentes en el ámbito de las Matemáticas o de sus aplicaciones, identificando las interrelaciones existentes con cada una de las especialidades.

E11.-Capacidad de relacionar las características espectroscópicas con la estructura molecular.

Esta competencia implica ser capaz de relacionar las características espectroscópicas experimentales, con la estructura molecular de los diferentes compuestos, así como la de predecir, a partir de esta última, las posibles características espectroscópicas que pueden ser esperadas.

E15.- Capacidad de conocer, elegir y aplicar nuevas técnicas instrumentales para la resolución de problemas químicos o medio-ambientales

Esta competencia implica el conocimiento de técnicas instrumentales avanzadas, que permita la elección de la más adecuada para la resolución de un problema químico o medio-ambiental concreto.

Objetivos/Resultados de aprendizaje

El principal objetivo de esta asignatura es mostrar a los alumnos la potencialidad de las Técnicas Espectroscópicas en Alta Resolución en la investigación de la estructura y dinámica molecular. Los objetivos de aprendizaje se pueden concretar en:

- 1.- Capacidad de manejar las técnicas experimentales avanzadas para la investigación de la estructura, propiedades y reactividad de los sistemas químicos.
- 2.- Conocer las técnicas espectroscópicas de alta resolución.
- 3.- Adquirir los conocimientos necesarios para aplicar las técnicas computacionales en la predicción de espectros moleculares.
- 4.- Aplicar las técnicas computacionales para la simulación de espectros.
- 5.- Saber aplicar las técnicas de análisis y ajuste en espectroscopía molecular.
- 6.- Aprender a extraer información sobre la estructura y propiedades moleculares a partir de los parámetros espectroscópicos

Contenidos

En esta asignatura se desarrollarán los siguientes contenidos:

- 1.- Estudio de las diferentes técnicas espectroscópicas y sus aplicaciones.
- 2.- Predicción y simulación de espectros: parámetros espectroscópicos. En este apartado se repasan los fundamentos teóricos de las diferentes técnicas espectroscópicas y se definen en cada caso los diferentes parámetros espectroscópicos necesarios para una correcta predicción de los espectros.
- 3.- Aplicación de la Química Computacional en Espectroscopia. Se describe la utilización de los paquetes de la Química Computacional para el cálculo de los diferentes parámetros espectroscópicos moleculares.
- 4.- Predicción y simulación de espectros. Se describen las diferentes herramientas y paquetes de cálculo disponibles para la predicción de los espectros moleculares y su posterior simulación.

Principios Metodológicos/Métodos Docentes

Buena parte de esta asignatura se centrará en el desarrollo de casos prácticos por parte del alumno. Para ello, disponemos de ordenadores con el software computacional necesario instalado con el que puedan desarrollar las simulaciones más avanzadas. Asimismo se realizarán prácticas de laboratorio donde se manejen diferentes espectrómetros en función de las necesidades de investigación requeridas por las moléculas propuestas para su estudio.

Criterios y sistemas de evaluación

La evaluación de los alumnos se realizará:

- Seguimiento continuo a través de controles periódicos o evaluación de problemas, trabajos u otras actividades;
- Examen final. Ambas actividades tendrán un peso similar en la nota final.

Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial

La Facultad de Ciencias de la Universidad de Valladolid dispone de los ordenadores y el software científico necesario para el desarrollo de este bloque de la asignatura.

Los profesores tienen gran disponibilidad para atender a los alumnos.

Bibliografía:

Hollas J.M, "Modern Spectroscopy", John Wiley & Sons (1998).

Bernath P. "Spectra of Atoms and Molecules", Oxford University Press (1995).

Banwell C.N., McCash E. M. "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", McGraw-Hill, (1994).

Steinfeld J.I. "Molecules and Radiation", MIT Press (1985).

Requena A., Zúñiga J. "Espectroscopía", Person-Prentice Hall (2003).

J. Cramer Essentials of Computational Chemistry, John Wiley & Sons (2002).

F. Jensen Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons (1999).

D.W. Rogers Computational Chemistry Using the PC, 3rd Edition, John Wiley & Sons (2003)

D. Young Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems, John Wiley & Sons (2001).

Calendario y horario

Segundo cuatrimestre: Febrero - Marzo - 16.30-18.30 h

Tabla de Dedicación del Estudiante a la Asignatura/Plan de Trabajo

ACTIVIDADES PRESENCIALES

HORAS

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

HORAS

Clases teóricas

15

Estudio y trabajo autónomo individual

45

Clases prácticas

10

Estudio y trabajo autónomo grupal

Laboratorios

Prácticas externas, clínicas o de campo

Seminarios

Otras actividades

5

Total presencial

30

Total no presencial

Responsable de la docencia (recomendable que se incluya información de contacto y breve CV en el que aparezcan sus líneas de investigación y alguna publicación relevante)

Susana Blanco : sblanco@qf.uva.es; 983423272; Despacho C233 Facultad de Ciencias.
 Juan Carlos López : jclopez@qf.uva.es; 983423264; Despacho C235 Facultad de Ciencias.

Líneas de investigación recientes (ambos profesores trabajan en el mismo grupo de investigación):
 - GENERACIÓN Y CARACTERIZACIÓN EN JETS SUPERSÓNICOS DE SISTEMAS MOLECULARES DE INTERÉS BIOLÓGICO
 - ESPECTROSCOPIA DE MICROONDAS DE BANDA ANCHA (CHIRP PULSED) EN JETS SUPERSÓNICOS. ESTUDIO DE COMPLEJOS INTERMOLECULARES.
 - ESPECTRÓMETRO DE RESONANCIA DE ROTACIÓN MOLECULAR QUIRAL.

Publicaciones relevantes (3):

“HYDROGEN-BOND COOPERATIVITY IN FORMAMIDE2-WATER: A MODEL FOR WATER – MEDIATED INTERACTIONS”

S. Blanco, P. Pinacho and J.C. López
 Angewandte Chemie International Edition, 55, 9331-9335 (2016).
 (Universidad de Valladolid)
Índice de impacto año 2016: 11.994
Categoría: Chemistry, Multidisciplinary Posición: Q1 (13/163)

“WATER-INDUCED STRUCTURAL CHANGES IN CROWN ETHERS FROM BROADBAND ROTATIONAL SPECTROSCOPY”

C. Pérez, J.C. López, S. Blanco and M. Schnell
 The Journal of Physical Chemistry Letters, 7, 4053-4058 (2016).
 (Universidad de Valladolid – Spain, Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Hamburg – Germany)
Índice de impacto año 2016: 9.353
Categoría: Physics, Atomic, Molecular & Chem Posición: Q1 (1/35)

“MICROSOLVATION OF 2-AZETIDINONE: A MODEL FOR THE PEPTIDE GROUP–WATER INTERACTIONS”

J.C. López, R. Sánchez, S. Blanco y J.L. Alonso
 Physical Chemistry Chemical Physics, 17, 2054–2066 (2015).
 (Universidad de Valladolid)
Índice de impacto año 2015: 4.449
Categoría: Chemistry, Physical Posición: Q1 (33/144)

Idioma en que se imparte

Español.
 Se necesita inglés para lectura y escritura.