UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

Proyecto de Innovación

Convocatoria 2021/2022

Nº de proyecto: 155

Material docente con un enfoque práctico dirigido a la caracterización de compuestos inorgánicos

Responsable del proyecto:

M. Luisa López García

Facultad de Ciencias Químicas

Departamento: Química Inorgánica

1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

El principal objetivo del proyecto es que los estudiantes puedan abordar el estudio de la caracterización de compuestos en Química Inorgánica desde una perspectiva diferente a la clásica para esta materia, realizando el estudio a partir de la discusión de casos prácticos reales. Esto permitirá complementar algunos aspectos poco abordados en los diferentes grados, mediante la interpretación de los datos que surgen de las técnicas de caracterización aplicadas a los diferentes tipos de compuestos inorgánicos.

Para ello, se centrará en la elaboración de un amplio conjunto de casos prácticos que cubran una amplia temática, y que se resuelvan a partir de los datos aportados por distintas técnicas instrumentales. Estos datos pueden ser recopilados desde distintas fuentes teóricas o experimentales o se elaborarán por el grupo de trabajo del proyecto. Así, por un lado, se desarrollará el material correspondiente a diversos casos prácticos y, posteriormente, el resultado de este trabajo se utilizará como material didáctico adicional del que pueda hacerse uso en el planteamiento de cursos o seminarios voluntarios y en los repertorios de cuestiones que puedan resultar útiles en las clases. De esta forma, se proyecta sobre el alumnado una visión más práctica y real de la química inorgánica.

Adicionalmente, otro de los objetivos estará relacionado con la capacitación de los estudiantes a través de la adquisición de los conocimientos necesarios para la adecuada elección entre las diferentes técnicas de caracterización, su viabilidad, la manipulación e interpretación de los datos crudos, y utilizar el software existente para el tratamiento de datos (este último quizás en los cursos más avanzados).

Como objetivo complementario se plantea la elaboración de nuevos recursos didácticos para la enseñanza virtual a partir de las herramientas disponibles en el Campus Virtual (Moodle, Teams). Todo esto conlleva el acercamiento de todos los miembros del equipo del proyecto hacia algunas técnicas más alejadas de su campo de trabajo, lo que permitirá un enriquecimiento colectivo, así como su extensión a toda la comunidad docente.

Por otro lado, la incorporación de nuevos datos experimentales puede servir de base para complementar algunas de las prácticas ya existentes desde hace bastante tiempo en las asignaturas de grado. Además, se podrán informatizar los datos recogidos por las técnicas, ya que en la actualidad la información proporcionada por las técnicas instrumentales incluye un soporte electrónico. En este sentido, la utilización de la plataforma Moodle puede ser de gran interés como vía común de trabajo. No obstante, como ya hemos comentado anteriormente nos planteamos en un futuro, la posibilidad de implementarlo como un recurso educativo en abierto.

Para alcanzar estos objetivos se dividieron en tres etapas:

Etapa 1 Introducción a las técnicas instrumentales de caracterización en Química Inorgánica. En este apartado se incluyen datos de las técnicas instrumentales que van a conducir a respuestas más obvias, sencillas y directas.

Etapa 2: Nivel de conocimiento intermedio.

Utilizar los datos experimentales obtenidos de las técnicas instrumentales para llegar a las conclusiones.

Interpretar los resultados obtenidos a partir de los cálculos y gráficos realizados.

Relacionar la composición, estructura y las propiedades de los compuestos.

Etapa 3. Implementación en el Campus Virtual del material elaborado.

2.- Objetivos alcanzados

Ya en su concepción el proyecto era demasiado ambicioso para llegar a realizarlo en un año. Pero además, la falta de financiación hizo que no se pudieran utilizar las técnicas

instrumentales que dependen de los CASI y por ello nos hemos quedado una primera etapa en la que se cubren el nivel mas básico en algunas de las técnicas. No obstante como luego indicaremos hemos elaborado para técnicas instrumentales, un conjunto de ejercicios, y tutoriales.
Algunos de los objetivos alcanzados divididos por técnicas se indican a continuación:
1.- Espectroscópicas :

FTIR:
- Caracterizar los grupos funcionales representativos presentes en los compuestos.
- Distinguir entre distintos modos de coordinación de los grupos funcionales.

RMN:
- Determinar la presencia de distintos tipos de H en un compuesto.

2.- Análisis químico y térmico: (EDX, ATG, ATD, DSC....).

- Identificar y evaluar las señales representativas de los elementos presentes en los compuestos (EDX)
- Determinar cómo se produce la descomposición térmica de una sustancia (ATG).

3.- Difractométricas: (DRX, De):
- Caracterizar elementos, así como sólidos binarios, a partir de ejemplos sencillos en los que se presentan los diagramas de DRX y De. Complementariedad de ambas técnicas
- Determinar algunos de los conceptos importantes a partir de los datos obtenidos, como son: parámetros de celda, intensidades de los máximos
- Estudiar los factores de los que dependen los parámetros calculados.

4. Técnicas relacionadas con la caracterización de las propiedades eléctricas y magnéticas de los compuestos.

- Estudiar el comportamiento eléctrico (medidas resistividad y permitividad).
- Estudiar el comportamiento magnéticos (medidas de magnetización).

3. Metodología empleada en el proyecto

Todo el material que hemos de elaborar para alcanzar los objetivos se basan en medidas experimentales que teníamos los participantes basados en nuestras propias investigaciones o se han elaborado otra serie de ejemplos basados en datos teóricos que nos permiten tratar algunas de las competencias que deben adquirir los estudiantes en esas técnicas. No obstante, no hemos podido realizar experimentos, en los centros de apoyo de la complutense debido a la ausencia de financiación. En muchas ocasiones se podrían haber obtenidos datos más adecuados para analizar un problema concreto, e incluso en otras podríamos haber completado conceptos que deben ser incorporados en el curricular de los egresados pero que no han sido posibles debido a la ausencia de los datos aportados por las técnicas instrumentales.

La metodología empleada para la elaboración de los ejercicios ha sido la siguiente:

a) Identificar el nivel al que debe ir dirigido el ejercicio.
b) Identificar como se puede abordar el problema.
c) Elaborar un tutorial en el que se transmiten paso a paso lo que el alumno debe ir buscando y como se puede llega a la resolución del problema.

4. Recursos humanos

El equipo de trabajo del PIE esta formado por profesores del Departamento de Química Inorgánica, todos ellos poseen una gran experiencia docente; y una trayectoria investigadora. En su trabajo de investigación diario se han enfrentado a la resolución de problemas y a la interpretación de los datos aportados por las técnicas experimentales. En ese sentido, la mayoría cada uno de nosotros somos especialista y alguna de las técnicas que hemos seleccionado para la elaboración de este PIE. En principio el material elaborado se encuadra dentro de los niveles básicos e intermedios, es decir en esta primera etapa, los expertos han sido capaces de establecer las bases para posteriormente abordar problemas mas complicados en los que se deban utilizar mas de una técnica para llegar a extraer las conclusiones adecuadas. Los componentes del equipo de trabajo de este proyecto son:

- Inmaculada Alvarez Serrano
- Raquel Cortes Gil.
- Miguel Cortijo Montes
- M. Luisa López García
- M. Jose Mayoral Muñoz
- Ana Edilia Sanchez Peláez
- Almudena Torres Pardo
- M. Carmen Torralba Martinez.

5. Desarrollo de las actividades

1.- Espectroscópicas:

FTIR:

- Caracterizar los grupos funcionales representativos presentes en los compuestos.
- Distinguir entre distintos modos de coordinación de los grupos funcionales.

El material elaborado se incluye en el anexo 1.
En esta primera técnica se ha elaborado un tutorial en el que se indica como debe proceder un estudiante para analizar las señales características de un compuesto IR. Se incluyen una los espectros IR de ejemplos en los que se incluyen los mismos grupos funcionales pero en otros compuestos. Se analizan las vibraciones de tensión simétricas y asimétricas, y finalmente se compara el espectro con datos bibliográficos.

RMN:

- Determinar la presencia de distintos tipos de H en un compuesto.
- Deducir el esqueleto estructural de una sustancia .
- Reconocer un compuesto por comparación con datos tabulados.

El material elaborado lo hemos incluido en el anexo 2 y 3: En este caso se elaboran una serie de ejercicios, en el anexo 2 hemos incluido los enunciados y en el anexo 3 se incluye las soluciones con una explicación muy detallada para llegar al reconocimiento de la estructura molecular del compuesto. Hemos incluido 5 ejercicios en los que a medida que avanzamos se deben usar los conocimientos adquirido en los ejercicios anteriores, y además van aumentando en complejidad. De cualquier forma, estos cinco ejercicios constituyen la base del conocimiento aplicado de esta técnica, es decir estamos en un nivel básico. En un segundo proyecto esperamos poder realizar los espectros de RMN de una serie de compuestos seleccionados que nos van a permitir cubrir los objetivos para niveles más avanzados.

2.- Análisis químico y térmico:

- Identificar y evaluar las señales representativas de los elementos presentes en los compuestos (EDS).

Se elabora un pequeño tutorial para que se pueda entender en que se basa el análisis químico que se realiza mediante la técnica de espectroscopia de dispersión de energías. Y se completa el fundamento, mediante la práctica de dos ejercicios muy sencillo. De nuevo, hay un conjunto de materiales seleccionados para realizar espectros EDS y que nos permitirán completar el estudio de la información que nos aporta esta técnica así como analizar los inconvenientes y limitaciones. Tenemos fácil acceso a dicha técnica (CNME ELECMI - Centro Nacional de Microscopía Electrónica), y como hemos puesto en el apartado de recurso de humanos disponemos de una especialista, no obstante al no tener financiación no se realizaron los experimentos necesarios.

Al igual que en el caso anterior hemos separado los enuciados de los ejercicios, anexo 2, de las soluciones anexo 3. Que realmente se puede considerar como un tutorial ya que se indica paso a paso el procedimiento a seguir para resolver el problema.

- Determinar cómo se produce la descomposición térmica de una sustancia (ATG).

Se parten de compuestos reales y se analizan los resultados experimentales obtenidos en un equipo de análisis de termogravimétrico instalado en nuestro departamento. Partimos de una sal (ejercicio 1), y analizamos la variación de masa con la temperatura, se analiza si dicha composición se produce en una sola etapa o en etapas intermedias. También se han incluido el estudio de la estabilidad térmica de compuestos de coordinación. También, se incluye otro ejercicio en el que se analiza como la atmosfera en el que se realiza el tratamiento térmico puede afectar a la estabilidad térmica del compuesto de partida. Tanto los enunciados como las soluciones se encuentran en indicados en los anexos 2 y 3.

3.- Difractométricas: (DRX, De):

- Caracterizar elementos, así como sólidos binarios, a partir de ejemplos sencillos en los que se presentan los diagramas de DRX y De-
- Determinar algunos de los conceptos importantes a partir de los datos obtenidos, como son: parámetros de celda, intensidades de los máximos
- Estudiar los factores de los que dependen los parámetros calculados.

Los ejercicios de estas dos técnicas están basados en simulaciones realizadas a partir de software especializado, debido, a que de nuevo al no disponer de financiación no podidos realizar experimentos, ambas técnicas están disponibles en los centros de apoyo y la mayoría de los integrantes del equipo las utilizamos. En este apartado se analizan ejercicios en los que están implicados el mismo tipo de elementos o compuestos. Así ponemos de manifiesto dos conceptos muy importantes, la complementariedad de ambas técnicas y que en la difracción de electrones se analiza el compuesto a nivel local y en la difracción de rayos X se obtiene una información que sería el promedio de toda la estructura del compuesto.

Se elaboran un conjunto de 7 ejercicio en los que aumenta grado de complejidad. Mediante las técnicas difractométricas se analizan todos los conceptos que hemos mencionado y el nivel alcanzado sería el correspondiente a la etapa 3, nivel avanzado. No obstante, todos los ejercicios se refieren a elementos de la tabla periódica, tan solo hemos incluido una aleación. Consideramos que sería muy interesante completar el repertorio con el empleo de compuestos, e incluso dichos ejercicios se podrían utilizar en algunas de las asignaturas del master de nuestra facultad, ya que hay una asignatura

relacionada con las técnicas experimentales. Toda la colección de casos prácticos, así como sus soluciones se encuentran en los anexos 2 y 3.

5. Técnicas relacionadas con la caracterización de las propiedades eléctricas y magnéticas de los compuestos.

- Estudiar el comportamiento eléctrico (medidas resistividad y permitividad).

- Estudiar el comportamiento magnético (medidas de magnetización).

Se elabora un conjunto de 5 ejercicios que van dirigidos al análisis de las propiedades de los materiales a partir de la información aportada por los datos experimentales (anexo 2). Se analiza el comportamiento magnético y eléctrico de elementos de la tabla periódica, y también se han incluido el análisis tanto de óxidos binarios como de óxidos mixtos. En los tutoriales en los que se presentan la resolución de los ejercicios, anexo 3, se combina la interpretación de los diferentes gráficos con el desarrollo de conceptos teóricos.

6. Anexos 1