



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Determinación estructural

Asignatura	Determinación estructural			
Código	V11G200V01501			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	3	1c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego			
Departamento	Química inorgánica Química orgánica			
Coordinador/a	Álvarez Rodríguez, Rosana			
Profesorado	Álvarez Rodríguez, Rosana Castro Fojo, Jesús Antonio Rodríguez de Lera, Angel			
Correo-e	rar@uvigo.es			
Web				
Descripción general	La materia se dedica al aprendizaje de la aplicación de los métodos mas utilizados en la determinación estructural de *substancias químicas			

## Competencias

Código	
A1	Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.
A2	Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.
A3	Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.
A4	Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.
C4	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: fundamentos y herramientas utilizadas en la resolución de problemas analíticos y en la caracterización de sustancias químicas
C8	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principales técnicas de investigación estructural, incluyendo la espectroscopia
C12	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: rasgos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo la estereoquímica
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C24	Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

<b>Resultados de aprendizaje</b>			
Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje		
Describir los conceptos fundamentales de los métodos de determinación estructural	A1	C4 C8 C12	
Analizar la información que, sobre la estructura molecular, proporcionan los distintos métodos y discernir las limitaciones básicas que tienen.	A2	C8	D3
	A3	C12 C20	D4 D7 D8 D9 D14
Predecir las características básicas de un determinado espectro para una sustancia determinada	A2	C4	D3
	A3	C8 C12 C20	D4 D7 D9 D14
Diseñar el proceso básico para obtener una determinada información estructural de una sustancia química.	A2	C4	D3
	A3	C8 C24	D4 D7 D9 D13 D14
Resolver la estructura molecular de un compuesto sencillo a partir de sus espectros (IR, MS, RMN, etc.).	A2	C4	D1
	A3	C8	D3
	A4	C12 C19 C20	D4 D5 D7 D9 D12 D14 D16
Describir la información que suministran los distintos métodos de difracción de rayos X.	A2	C4	D3
	A3	C12	D4 D9 D13 D14 D15 D16
Observar la presencia de defectos y desorden en sólidos	A1	C4	

### Contenidos

Tema	
Tema 1. Obtención de datos generales de una sustancia.	Análisis de combustión: fórmula empírica. Análisis cualitativo. Simetría puntual y espacial Propiedades ópticas.
Tema 2. Espectroscopía electrónica y fotoelectrónica.	Determinación de grupos cromóforos. Efecto de la conjugación. Estudio de los OM de la capa de valencia.
Tema3. Determinación estructural de muestras cristalinas.	Aplicaciones y limitaciones de las técnicas difractométricas en la determinación estructural. Determinación tridimensional de la estructura molecular. Defectos y desorden en sólidos cristalinos.
Tema 4. Espectroscopía vibracional.	Determinación de algunos grupos funcionales característicos. Absorciones características. Otras aplicaciones en determinación estructural.
Tema 5. Espectrometría de masas.	Determinación de la masa molecular. Métodos de ionización. Métodos de detección. Reacciones de fragmentación. Patrones isotópicos. Interpretación del espectro de masas.

**Planificación**

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	13	26	39
Resolución de problemas y/o ejercicios	24	48	72
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	3	15	18
Trabajos y proyectos	1	20	21

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

**Metodologías**

	Descripción
Sesión magistral	Las clases teóricas se dedicarán a presentar aquellos fundamentos de las técnicas que son relevantes para la interpretación de las mediciones desde el punto de vista estructural (relaciones entre los espectros y las estructuras).
Resolución de problemas y/o ejercicios	Las clases de grupo mediano se dedicarán a resolver ejercicios o problemas que permitan al final de cada tema la obtención de informaciones relevantes de las correspondientes técnicas.

**Atención personalizada**

Metodologías	Descripción
Resolución de problemas y/o ejercicios	Durante todo el periodo docente los alumnos pueden consultar todo tipo de dudas con los profesores de la materia en los horarios de tutoría.
Pruebas	Descripción
Trabajos y proyectos	Durante todo el periodo docente los alumnos pueden consultar todo tipo de dudas con los profesores de la materia en los horarios de tutoría. Los alumnos podrán ser convocados individualmente o en pequeños grupos para la tutorización de los trabajos propuestos.

**Evaluación**

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
Resolución de problemas y/o ejercicios	En las clases presenciales (magistrales, seminarios, aula de informática) se les pedirá a los alumnos entregables con la resolución de problemas y/o ejercicios que servirán para la evaluación de los alumnos. Resultados de aprendizaje: (1). Describir los conceptos fundamentales de los métodos de determinación estructural. (2). Analizar la información que, sobre la estructura molecular proporcionan los distintos métodos y discernir las limitaciones básicas que tienen. (3). Predecir las características básicas de un determinado espectro para una sustancia determinada. (4). Describir la información que suministran los distintos métodos de difracción de rayos X. (5). Observar a nivel microscópico la presencia de defectos y desorden en la superficie de sólidos.	20	A1 C4 D7 A2 C8 D8 A3 C12 D13 C19 D15 C20 C24
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	Habrán tres pruebas cortas a lo largo del periodo lectivo de 1 hora de duración en las que se pedirá la obtención de información estructural a partir de datos experimentales (espectros, etc). La primera prueba abarca los temas 1-3, la segunda prueba abarcará los temas 4 e 5 e a tercera abarcará los temas 1-6. Resultados de aprendizaje: (1). Analizar la información que, sobre la estructura molecular proporcionan los distintos métodos y discernir las limitaciones básicas que tienen. (2). Predecir las características básicas de un determinado espectro para una sustancia determinada. (3). Diseñar el proceso básico para obtener una determinada información estructural de una sustancia química. (4). Describir la información que suministran los distintos métodos de difracción de rayos X. (5). Resolver la estructura molecular de un compuesto sencillo a partir de sus espectros (IR, MS, RMN, etc).	45	A1 C8 D3 A2 C12 D7 A3 C19 A4 C20 C24

Trabajos y proyectos	Los alumnos tendrán que realizar un pequeño proyecto propuesto por los profesores de tipo multidisciplinar. Los resultados tendrán que ser presentados en una memoria escrita con formato de artículo científico. Además, se podrá pedir que hagan una exposición oral de los resultados. Resultados de aprendizaje:(1). Resolver la estructura molecular de un compuesto sencillo a partir de sus espectros (IR, MS, RMN, etc).	35	A1 C4 D1 A2 C8 D4 A3 C12 D5 A4 C19 D9 C20 D12 C24 D14 D16
----------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----	-----------------------------------------------------------------------------

### Otros comentarios sobre la Evaluación

Para superar la materia el profesor debe disponer en tiempo y forma de:

- - Un mínimo del 80% de los entregables propuestos en las distintas actividades presenciales.
- - Todas las pruebas cortas.
- - La memoria del trabajo final.

Para superar la materia al final del cuatrimestre es necesario alcanzar 5 puntos (sobre 10) en la calificación final. Además, es imprescindible obtener en la evaluación de las diferentes partes de la materia los siguientes mínimos:

- - Un 30% del valor total en cada una de las pruebas cortas.
- - Un 40% del valor total en el conjunto de los entregables.
- - Un 40% del valor total en el trabajo final.

En el caso de no alcanzar alguno de los mínimos, en acta figurará el resultado ponderado de las pruebas cortas.

Un alumno que realice más del 20% del trabajo total planificado será calificado de acuerdo con la legislación vigente y, por lo tanto, no podrá figurar en el acta a mención NO PRESENTADO. En cualquiera caso, la realización de una de las pruebas cortas, supondrá la calificación de la materia.

Los alumnos que no superen la materia al final del cuatrimestre deberán hacer una prueba global escrita en el período de cierre de evaluación definitivo en el mes de julio. Dicha prueba tendrá un valor del 45% de la calificación final y sustituirá a los resultados de las pruebas cortas realizadas durante el periodo lectivo. Será necesario alcanzar un mínimo de un 30% del valor total de la prueba para poder superar la materia. Las calificaciones de los entregables (de las actividades presenciales) y el trabajo/proyecto no son recuperables. En el caso de no haber alcanzado en alguno de ellos los mínimos establecidos, la calificación será de suspenso. Una vez superados los mínimos será necesario una calificación global mayor o igual a 5.0 (sobre 10) para aprobar la materia.

La calificación final de los alumnos aprobados podrá ser normalizada de manera que la calificación más alta pueda ser de hasta 10 puntos.

### Fuentes de información

Williams, D.H., Fleming, I., **Spectroscopic Methods in Organic Chemistry**, 6ª,

Hammond, Christopher, **The Basics of crystallography and diffraction**,

Pavia, D.L., Lampman, G.M., Kriz, G.S., Vyvyan, J.R., **Introduction to Spectroscopy**, 5ª,

Pretsch, Ernö, **Structure determination of organic compounds : tables of spectral data**, 4a,

Clayden, Jonathan, **Organic Chemistry**, 2a,

Páginas webs:

1. [www.spectroscopynow.com](http://www.spectroscopynow.com)
2. [www.iucr.org/education/pamphlets](http://www.iucr.org/education/pamphlets)
3. [www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/welcome.html](http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/welcome.html)

### Recomendaciones

#### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Geología: Geología/V11G200V01205

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Química física I/V11G200V01303

Química física II/V11G200V01403

Química inorgánica I/V11G200V01404

Química orgánica I/V11G200V01304

---

### **Otros comentarios**

---

Los alumnos deben recordar que para alcanzar las competencias de la materia es imprescindible tener adquiridos previamente los siguientes resultados de aprendizaje:

- Determinación del estado formal de oxidación de un elemento dentro de un compuesto
  - Estructura de los principales grupos funcionales en química orgánica
  - Representación mediante estructuras de Lewis de sustancias orgánicas
  - Estructura tridimensional de las sustancias orgánicas de acuerdo con el modelo de orbitales híbridos
  - Representación de reacciones mediante diagramas de flechas
  - Conceptos básicos de espectroscopía
-