DATOS IDENTIFICATIVOS

Determinación estructural

Asignatura	Determinación estructural			
Código	V11G200V01501			
Titulacion	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	3	1c
Lengua Impartición	Castellano Gallego			
Departamento	Química inorgánica Química orgánica			
Coordinador/a	Álvarez Rodríguez, Rosana			
Profesorado	Álvarez Rodríguez, Rosana Castro Fojo, Jesús Antonio Vaz Araújo, Belén			
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

D16 Desarrollar un compromiso ético

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

Contenidos	
Tema	
Tema 1. Obtención de datos generales de un compuesto químico	Análisis de combustión: fórmula empírica. Análisis cualitativo. Propiedades ópticas.
Tema 2. 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 3. Espectroscopía electrónica y fotoelectrónica.	Determinación de grupos cromóforos. Efecto de la conjugación. Estudio de los OM de la capa de valencia.
Tema 4. Espectroscopía vibracional.	Vibraciones características. de algunos grupos funcionales. 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.

Tema 6. Espectroscopía de RMN.	Experimentos monodimensionales de 1H y 13C Información estructural a partir de desplazamient químio. Experimentos bidimensionales. Correlaciones homonucleares y heteronucleares. Experimento nOe RMN heteronuclear

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Lección magistral	13	26	39
Resolución de problemas	24	48	72
Práctica de laboratorio	3	15	18
Trabajo	1	20	21

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

Metodologías

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

Atención personalizada

Metodologías	**Descripción**
Resolución de problemas	Durante todo el periodo docente los alumnos pueden consultar todo tipo de dudas con los profesores de la materia en los horarios de tutoria.
Pruebas	**Descripción**
Trabajo	Durante todo el periodo docente los alumnos pueden consultar todo tipo de dudas con los profesores de la materia en los horarios de tutoria. 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	En las clases presenciales (magistrales, seminarios) se les pedirá a los alumnos entregables con la resolución de problemas y/o ejercicios que servirán para evaluación. Resultados de aprendizaje: (1). Describir los conceptos fundamentales de los métodos de determinación estructural. (2). Analizar la información que, sobre la estructura molecula,r proporcionan los distintos métodos y discernir las limitaciones básicas que tienen. (3). Predecir las características básicas de un determinado espectro para una substancia determinada.	20	A1 A2 A3	C4 C8 C12 C19 C20 C24	D7 D8 D13 D15
Práctica de laboratorio	Habrá dos pruebas cortas a lo largo del periodo lectivo de 2-3 horas 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 (10% de la nota final) y la segunda prueba abarcará el tema 4 (20% de la nota final). 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 substancia determinada. (3). Diseñar el proceso básico para obtener una determinada información estructural de una sustancia química. (4). Resolver la estructura molecular de un compuesto sencillo a partir de sus espectros (IR, MS, RMN, etc). La nota de las pruebas cortas será el 30% de la nota final de las asignaturas Adicionalmente se hará un examen final que abarcará todos los temas, cuya calificación será el 30% de la nota final	60	A1 A2 A3 A4	C8 C12 C19 C20 C24	D3 D7
Trabajo	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. Resultados de aprendizaje:(1). Resolver la estructura molecular de un compuesto sencillo a partir de sus espectros (IR, MS, RMN, etc).	20	A1 A2 A3 A4	C4 C8 C12 C19 C20 C24	D1 D4 D5 D9 D12 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 30% del valor total en el examen final

En caso de no alcanzar alguno de los mínimos, en el acta figurará el resultado del examen final.

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 la 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 deJjulio. Dicha prueba sustituirá los resultados del examen final. 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 caso de no haber alcanzado en alguno de ellos los mínimos establecidos, la calificación será de suspenso. Una vez superados los mínimos, será necesario obtener una calificación global mayor o igual a 5.0 (sobre 10) para aprobar la materia.

Alternativamente, los alumnos pueden elegir ser evaluados mediante la realización de una única prueba. Para ello, tendrán que comunicárselo, por escrito, al coordinador de la materia, al inicio del cuatrimestre.

Fuentes de información

Bibliografía Básica

Bibliografía Complementaria

Williams, D.H., Fleming, I., **Spectroscopic Methods in Organic Chemistry**, 6ª, 2007

Hammond, Christopher, **The Basics of crystallography and diffraction**, 2009

Pavia, D.L., Lampman, G.M., Kriz, G.S., Vyvyan, J.R., **Introduction to Spectroscopy**, 5ª, 2014

Pretsch, Ernö, **Structure determination of organic compounds : tables of spectral data**, 4a, Springer, 2009

Clayden, Jonathan, **Organic Chemistry**, 2a, 2012

Hesse, M, Meier, H, Zeeh, B., **Métodos espectroscópicos en Química orgánica**, 2a, Sintesis, 2005

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Métodos numéricos en química/V11G200V01402
Química física I/V11G200V01303
Química física II/V11G200V01403
Química inorgánica I/V11G200V01404
Química orgánica I/V11G200V01304