



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Determinación estructural

Asignatura	Determinación estructural			
Código	V11G201V01206			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2	2c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego			
Departamento	Química inorgánica Química orgánica			
Coordinador/a	Silva López, Carlos Valencia Matarranz, Laura María			
Profesorado	Pérez Lourido, Paulo Antonio Silva López, Carlos Valencia Matarranz, Laura María			
Correo-e	carlos.silva@uvigo.es qilaura@uvigo.es			
Web				
Descripción general	La materia se dedica al aprendizaje de la aplicación de los métodos mas utilizados en la determinación estructural de sustancias químicas			

## Competencias

Código	
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
A5	Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía
B1	Capacidad de aprendizaje autónomo
B3	Capacidad de gestión de la información
B4	Capacidad de análisis y síntesis
C1	Capacidad para conocer y comprender los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química
C2	Emplear correctamente la terminología química, nomenclatura, conversiones y unidades
C3	Reconocer y analizar problemas químicos, cualitativos y cuantitativos planteando estrategias para solucionarlos a través de la evaluación, interpretación y síntesis de datos e información química
C6	Conocer los fundamentos y herramientas habituales en la resolución de problemas analíticos y en la caracterización de sustancias químicas
C15	Conocer las principales técnicas de investigación estructural, incluyendo la espectroscopia
D1	Capacidad para resolver problemas

## Resultados de aprendizaje

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje		
Nueva	A3 A5	B4	C1 C2 C6 C15
Analizar la información que, sobre la estructura molecular, proporcionan los distintos métodos y conocer las limitaciones básicas que tienen.	A3	B3 B4	C1 C6 C15

Describir la información que suministran los distintos métodos de difracción de rayos X.	A3	B4	C1 C6 C15	
Predecir las características espectroscópicas básicas de un determinado espectro para una sustancia determinada	A3 A5	B3 B4	C2 C3	D1
Diseñar el proceso básico para obtener una determinada información estructural de una sustancia química.	A3 A4	B1 B3 B4	C2 C3	D1
Resolver la estructura molecular de un compuesto sencillo a partir de sus espectros (IR, MS, RMN, etc.).	A3 A4	B1 B3 B4	C2 C3	D1

## 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 $^1\text{H}$ y $^{13}\text{C}$ Información estructural a partir de desplazamiento químico. Experimentos bidimensionales. Correlaciones homonucleares y heteronucleares. Experimento nOe RMN heteronuclear

## Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Lección magistral	12	26	38
Resolución de problemas	24	70	94
Examen de preguntas objetivas	2	16	18

\*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 interpretación 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 tutoría.

## 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 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.	30	A3	D1
Examen de preguntas objetivas	Habrán 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 sustancia 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	70	A3 A4	D1

### 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 de julio. 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, Ernő, **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, Síntesis, 2005

---

**Recomendaciones**

---

**Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente**

---

(\*)/

---

---

**Plan de Contingencias**

---