



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Determinación estructural

Asignatura	Determinación estructural			
Código	V11G201V01206			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2	2c
Lengua	#EnglishFriendly			
Impartición	Castellano 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. Materia del programa *English *Friendly. Los/ las estudiantes internacionales podrán solicitar al profesorado: la) materiales y referencias bibliografías para el seguimiento de la materia en inglés, *b) atender las *titorías en inglés, *c) pruebas y evaluaciones en inglés.
---------------------	--

## Resultados de Formación y Aprendizaje

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 previstos en la materia

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje
------------------------------------	---------------------------------------

Describir los conceptos fundamentales de los métodos de determinación estructural.	A3 A5	B3	C1 C2 C6 C15	
Analizar la información que, sobre la estructura molecular, proporcionan los distintos métodos y discernir las limitaciones básicas que tienen.	A3	B1 B3 B4	C1 C6 C15	
Describir la información que suministran los distintos métodos de difracción de rayos X.	A3	B3	C1 C6 C15	
Predecir las características 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	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 una sustancia.	Análisis de combustión. Fórmula empírica. Análisis cualitativo. Propiedades ópticas.
Tema 2. Métodos de difracción.	Aplicaciones y limitaciones en la determinación estructural.
Tema 3. Espectroscopía electrónica y fotoelectrónica.	Determinación de grupos cromóforos.
Tema 4. Espectroscopía vibracional.	Determinación de algunos grupos funcionales característicos. Absorciones características.
Tema 5. Espectrometría de masas.	Determinación de la masa molecular. Métodos de ionización. 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 del desplazamiento químico. RMN dinámica: equilibrios en disolución. 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	7	9
Examen de preguntas objetivas	2	7	9

\*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 informaciones relevantes de las correspondientes técnicas.

## Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Resolución de problemas	Durante todo el periodo docente los alumnos podrán consultar todo tipo de dudas y cuestiones con los profesores de la materia nos horarios de tutoría.

## Evaluación

Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
Resolución de problemas	20	A3 D1
Examen de preguntas objetivas	40	A3 A4 D1
Examen de preguntas objetivas	40	A3 A4 D1

### Otros comentarios sobre la Evaluación

Para superar la materia el estudiante debe:

- Conseguir un 5 (sobre 10) de nota media de las actividades de evaluación.
- Conseguir una nota mínima de 4 en cada una de las pruebas de examen de preguntas objetivas.

En el caso de no conseguir alguna de estas dos condiciones en acta figurará el resultado ponderado de las pruebas de examen.

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 a los resultados de las pruebas escritas. La calificación de las pruebas de seminario, entregables (de las actividades presenciales) y el trabajo/proyecto, etc., no son recuperables.

Para los alumnos que renuncien a la evaluación continua y opten por una evaluación global, la primera de las pruebas cortas equivaldrá al 40% de la nota final, y la segunda al 60% restante. Los alumnos que no superen una o las dos pruebas cortas que se realizan durante el cuatrimestre, deberán presentarse a la parte correspondiente en la convocatoria de Julio. **Con el fin de garantizar una evaluación de calidad e individualizada, cualquier competencia certificable en esta asignatura es susceptible de ser verificada mediante una prueba oral, en cualquier momento antes del cierre definitivo de las actas.**

### 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, Síntesis, 2005

### Recomendaciones