



DATOS IDENTIFICATIVOS

Determinación estrutural

Materia	Determinación estrutural			
Código	V11G200V01501			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	1c
Lingua de impartición				
Departamento	Química inorgánica Química orgánica			
Coordinador/a	Muñoz López, Luis			
Profesorado	Bravo Bernardez, Jorge Muñoz López, Luis Vazquez Lopez, Ezequiel Manuel			
Correo-e	lmuñoz@uvigo.es			
Web				
Descrición	A materia adícase á aprendizaxe da aplicación dos métodos mais utilizados na determinación estrutural de xeral substancias químicas			

Competencias de titulación

Código	
A3	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios da Mecánica Cuántica e a súa aplicación na descrición da estrutura e as propiedades de átomos e moléculas
A4	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: fundamentos e ferramentas utilizadas na resolución de problemas analíticos e na caracterización de sustancias químicas
A8	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a Espectroscopía
A10	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: propiedades dos compostos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos e organometálicos
A11	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: natureza e comportamento dos grupos funcionais en moléculas orgánicas
A12	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: trazos estruturais dos elementos químicos e os seus compostos, incluíndo a estereoquímica
A14	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: relación entre propiedades macroscópicas e propiedades de átomos e moléculas individuais, incluíndo as macromoléculas
A19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
A20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A21	Recoñecer e implementar boas prácticas científicas de medida e experimentación
A22	Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos
A28	Interpretar datos derivados das observacións e medicións do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
B5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
B7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
B9	Traballar de forma autónoma
B12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
B13	Tomar decisións
B14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
B15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo
B16	Desenvolver un compromiso ético
B18	Xerar novas ideas e demostrar iniciativa

Competencias de materia		
Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Describir os conceptos fundamentais dos métodos de determinación estrutural	A3 A4 A8 A12	
Analizar a información que, sobre a estrutura molecular, proporcionan os distintos métodos e discernir as limitacións básicas que teñen.	A8 A12 A20 A22 A28	B3 B4 B7 B9 B14
Predicir as características básicas dun determinado espectro para unha sustancia determinada	A3 A4 A8 A10 A11 A12 A20	B3 B4 B7 B9 B14
Deseñar o proceso básico para obter unha determinada información estrutural dunha sustancia química.	A4 A8 A10 A11 A21	B3 B4 B7 B9 B13 B14 B18
Resolver a estrutura molecular dun composto sinxelo a partir dos seus espectros (IR, MS, RMN, etc.).	A3 A4 A8 A10 A11 A12 A19 A20 A28	B3 B4 B5 B7 B9 B12 B14 B16 B18
Observar a nivel microscópico a presenza de defectos e desorde na superficie de sólidos.	A4 A14	B3 B7 B9
Describir a información que fornecen os distintos métodos de difracción de raios X.	A3 A4 A12	B3 B4 B9 B13 B14 B15 B16 B18

Contidos

Tema	
Tema 1. Obtención de datos xerais dunha sustancia.	Análise de combustión: fórmula empírica. Análise cualitativa. Propiedades ópticas.
Tema 2. Espectroscopía electrónica e fotoelectrónica.	Determinación de grupos cromóforos. Efecto da conxugación. Estudo dos OM da capa de valencia.
Tema 3. Espectroscopía vibracional.	Determinación dalgúns grupos funcionais característicos. Absorcións características. Outras aplicacións en determinación estrutural.
Tema 4. Espectrometría de masas.	Determinación da masa molecular. Métodos de ionización. Métodos de detección. Reaccións de fragmentación. Patróns isotópicos. Interpretación do espectro de masas.

Tema 5. Espectroscopía de RMN.	Experimentos monodimensionales. Información estrutural a partir do desprazamento químico. Experimentos de dobre irradiación. RMN dinámica: equilibrios en disolución. Experimentos bidimensionales. Correlacións homonucleares e heteronucleares.
Tema 6. Introducción á microscopía electrónica.	TEM SEM HREM
Tema 7. Métodos de difracción.	Aplicacións e limitacións na determinación estrutural. Determinación tridimensional de estrutura molecular.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	13	26	39
Prácticas en aulas de informática	2	4	6
Resolución de problemas e/ou exercicios	24	48	72
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	3	12	15
Traballos e proxectos	1	17	18

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	As clases teóricas adicaranse a presentar aqueles fundamentos das técnicas que son relevantes para a interpretación das medicións dende o punto de vista estrutural (relacións entre os espectros e as estruturas).
Prácticas en aulas de informática	Os alumnos en grupo mediano utilizarán datos experimentais de difracción de raios X de monocristal para a determinación da estrutura molecular.
Resolución de problemas e/ou exercicios	As clases de grupo mediano adicaranse a resolver exercicios ou problemas que permitan ao final de cada tema a obtención de informacións relevantes das correspondentes técnicas.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Resolución de problemas e/ou exercicios	Durante todo o periodo docente os alumnos poderán consultar todo tipo de dudas e cuestións cos profesores da materia nos horarios de tutoría. Ademais, os alumnos poderán ser convocados individualmente ou en pequenos grupos para a titorización dos traballos propostos.
Prácticas en aulas de informática	Durante todo o periodo docente os alumnos poderán consultar todo tipo de dudas e cuestións cos profesores da materia nos horarios de tutoría. Ademais, os alumnos poderán ser convocados individualmente ou en pequenos grupos para a titorización dos traballos propostos.
Probas	Descrición
Traballos e proxectos	Durante todo o periodo docente os alumnos poderán consultar todo tipo de dudas e cuestións cos profesores da materia nos horarios de tutoría. Ademais, os alumnos poderán ser convocados individualmente ou en pequenos grupos para a titorización dos traballos propostos.

Avaliación

	Descrición	Cualificación
Sesión maxistral	Nas sesións maxistrals poderáselles pedir aos alumnos a resolución de cuestións sinxelas que deberán entregar e serviran para a avaliación.	5
Prácticas en aulas de informática	Na aula de informática pediráselles aos alumnos que resolvan unha estrutura problema e que presenten os datos de forma adecuada.	5
Resolución de problemas e/ou exercicios	Nas clases presenciais pediráselles aos alumnos entregables coa resolución de problemas e/ou exercicios que servirán para a avaliación dos alumnos	20
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	Haberá dúas probas curtas ao longo do periodo lectivo de 1-1'5 horas de duración nas que se pedirá a obtención de información estrutural a partires de un ou mais espectros. Cada proba conta a metade do total.	45
Traballos e proxectos	Os alumnos terán que realizar un pequeno proxecto proposto polos profesores de tipo multidisciplinar. Os resultados terán que ser presentados nunha memoria escrita con formato de artigo científico. Ademais, poderase pedir que fagan unha exposición oral dos resultados.	25

Outros comentarios sobre a Avaliación

Para superar a materia o profesor debe dispor en tempo e forma dun mínimo do 80% dos entregables propostos nas distintas actividades presenciais.

Sera necesario sacar 3 puntos sobre 10 nas probas curtas para poder ter en conta na cualificación final o resto de elementos de avaliación. No caso de non acadalo, en acta figurará o resultado das probas curtas.

Un alumno que realice mais do 20% do traballo total planificado será cualificado de acordo coa lexislación vixente e, polo tanto, non poderá figurar na acta NON PRESENTADO. En calquera caso, a realización dunha das probas curtas, suporá a cualificación da materia.

Os alumnos que non superen a materia ao final do cuadrimestre deberán facer unha proba escrita no periodo de peche de avaliación definitivo no mes de xullo. Dita proba terá un valor do 45% da nota e substituirá aos resultados das dúas probas curtas realizadas durante o periodo lectivo. A cualificación dos entregables (das actividades presenciais) e o traballo/proxecto non son recuperables.

A cualificación final dos alumnos poderá ser normalizada de xeito que a cualificación mais alta sexan 10 puntos.

Bibliografía. Fontes de información

Vollhardt, K.P.C., Schore, N.E., **Química Orgánica**, 5ª,

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

Watt, Ian M., **The principles and practice of electron microscopy**,

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

Pavia, D.L., Lampman, G.M., Kriz, G.S., Vyvyan, J.R., **Introduction to Spectroscopy**, 4ª,

Páxina web: www.spectroscopynow.com

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Xeoloxía: Xeoloxía/V11G200V01205

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Química física I/V11G200V01303

Química física II/V11G200V01403
