



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Determinación Estructural Avanzada

Materia	Determinación Estructural Avanzada			
Código	V11M029V01130			
Titulación	Máster Universitario en Química Avanzada. RD. 1393/2007			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	4	OP	1	1c
Lingua de impartición				
Departamento	Química inorgánica Química orgánica			
Coordinador/a	Vazquez Lopez, Ezequiel Manuel			
Profesorado	Muñoz López, Luis Tojo Suarez, Emilia Vazquez Lopez, Ezequiel Manuel			
Correo-e	ezequiel@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral				

## Competencias de titulación

Código	
A2	Coñecemento dos principios físico-químicos fundamentais que regulan os aspectos máis avanzados da Química
A3	Coñecemento dos aspectos máis avanzados dos elementos e compostos inorgánicos e orgánicos, así como biomoléculas, as rutas sintéticas e a súa caracterización estrutural
A4	Habilidade para facer uso de instrumentación química estándar e avanzada e a súa monitorización
A5	Demostración avanzada de habilidades para planificar, diseñar e executar experimentos químicos
A6	Demostración de habilidades para o traballo no laboratorio á hora de realizar procedimentos químicos documentados, monitorización de propiedades químicas, eventos e documentación de todo o traballo realizado.
B1	Capacidade para deseñar, coordinar e realizar proxectos de investigación científica
B4	Capacidade para a xestión e tratamento de datos e xeración de información e coñecemento
B5	Capacidade de resolución eficaz e eficiente de problemas demostrando principios de orixinalidade e auto-dirección
B6	Capacidade de aprendizaxe autónomo para o desenvolvemento continuo

## Competencias de materia

Resultados previstos na materia	Tipoloxía	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Descibir os experimentos monodimensionais con secuencias de pulsos simples empregando o modelo vectorial: secuencia de eco de espín en sistemas non acoplados, edición de espectros facendo uso da constante de acoplamento, experimento 'inversion-recovery', etc.	saber facer	A2 A4 A5
Descibir o mecanismo de relaxación de espíns a través da constante de acoplamento dipolar e a orixe do efecto nuclear Overhauser.	saber saber facer	A2 A4 A5
Descibir o mecanismo de relaxación de espíns a través da constante de acoplamento dipolar e a orixe do efecto nuclear Overhauser.	saber saber facer	A2 A4 A5
Descibir a información que se pode obter dos experimentos HSQC, TOCSY e ROESY.	saber facer	A3 A5

Describir os experimentos (tipos de picos, forma dos picos, información que proporcionan) COSY, HMQC, HMBC e NOESY mediante o formalismo do produto de operadores para un sistema sinxelo de dous núcleos acoplados.	saber facer	A2 A4 A5 B1 B4
Describir os experimentos (tipos de picos, forma dos picos, información que proporcionan) COSY, HMQC, HMBC e NOESY mediante o formalismo do produto de operadores para un sistema sinxelo de dous núcleos acoplados.	saber facer	A2 A4 A5
Describir os experimentos INEPT e DEPT mediante o formalismo do produto de operadores para un sistema sinxelo de dous núcleos acoplados (metino) e xeneralizalos a metilenos e metilos.	saber facer	A2 A3 B4
Describir os experimentos INEPT e DEPT mediante o formalismo do produto de operadores para un sistema sinxelo de dous núcleos acoplados (metino) e xeneralizalos a metilenos e metilos.	saber facer	A2 A3
Describir a información que se pode obter dos experimentos HSQC, TOCSY e ROESY.	saber facer Saber estar / ser	A2 A4 A5 B6
Describir os parámetros espectrais asociados á adquisición de datos de cada experimento: anchura espectral, dixitalización, resolución, pulsos e tempos de espera.	saber saber facer	A2 A3 A4 A6
Seleccionar os experimentos axeitados para a resolución dun determinado problema estrutural e establecer os parámetros necesarios para a adquisición de datos correspondente.	saber saber facer	A2 A4 A6
Describir os elementos de simetría principais dun grupo espacial.	saber	A3 B6
Deducir os elementos de simetría presentes nun cristal a partir das condicións de reflexión.	saber saber facer	A2 A3
Describir as etapas de toma de datos nun experimento de difracción de raios X de monocristal (= DRXm).	saber	A2 A6 B5
Seleccionar o método axeitado de resolución de estruturas a partir da composición e as características configuracionais.	saber saber facer	A2 A3 A4 A6
Determinar, a partir de parámetros de resolución estrutural por DRXm, a calidade dos datos estruturais.	saber saber facer	A3 A4 A6
Enumerar as posibles fontes de erro na determinación estrutural por DRXm.	saber saber facer	A3 A4 A6

## Contidos

Tema

## Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Prácticas de laboratorio	10	10	20
Sesión maxistral	15	30	45

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

## Metodoloxía docente

	Descrición
Prácticas de laboratorio	- Determinación de estruturas moleculares mediante exemplos prácticos de experimentos de RMN y difracción de rayos X de monocristal
Sesión maxistral	Impartición en aula de los aspectos teóricos y resolución de ejercicios.

## Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	En cualquier momento el alumno puede solicitar del profesor la resolución de problemas específicos o dudas.

Prácticas de laboratorio En cualquier momento el alumno puede solicitar del profesor la resolución de problemas específicos o dudas.

---

### **Avaliación**

Descripción	Cualificación
Prácticas de laboratorio- Resolución de estructuras por difracción de rayos X de monocristal apartires de datos experimentais - Determinación da estrutura molecular mediante técnicas espectroscópicas	100

---

### **Outros comentarios sobre a Avaliación**

---

### **Bibliografía. Fontes de información**

Sands, Donald E., **Introducción a la cristalografía / Donald E. Sands ; [versión del inglés por G. Martín Guzmán]**, Barcelona [etc.] : Reverté, D.L. 1971,

Phillips, F. C., **Introducción a la cristalografía**, Madrid : Paraninfo, 1972,

Hammond, Christopher, **The Basics of crystallography and diffraction**, New York ; Oxford : Oxford University Press, 2009,

---

### **Recomendacións**

---