



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	Castelán Galego			
Departamento	Química inorgánica Química orgánica			
Coordinador/a	Álvarez Rodríguez, Rosana			
Profesorado	Álvarez Rodríguez, Rosana Castro Fojo, Jesús Antonio Rodríguez de Lera, Angel			
Correo-e	rar@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	A materia adícase á aprendizaxe da aplicación dos métodos mais utilizados na determinación estrutural de substancias químicas			

Competencias

Código	
A1	Que os estudantes demostren posuír e comprender coñecementos nunha área de estudo que parte da base da educación secundaria xeral e adoita atoparse a un nivel que, malia se apoiar en libros de texto avanzados, inclúe tamén algúns aspectos que implican coñecementos procedentes da vangarda do seu campo de estudo.
A2	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo.
A3	Que os estudantes teñan a capacidade de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro da súa área de estudo) para emitir xuízos que inclúan unha reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica ou ética.
A4	Que os estudantes poidan transmitir información, ideas, problemas e solución a un público tanto especializado coma non especializado.
C4	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
C8	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a Espectroscopía
C12	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: trazos estruturais dos elementos químicos e os seus compostos, incluíndo a estereoquímica
C19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
C20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
C24	Recoñecer e analizar novos problemas e propor estratexias para solucionarlos
D1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
D5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
D7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
D8	Traballar en equipo
D9	Traballar de forma autónoma
D12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
D13	Tomar decisións
D14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
D15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo
D16	Desenvolver un compromiso ético

Resultados de aprendizaxe			
Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe		
Describir os conceptos fundamentais dos métodos de determinación estrutural	A1	C4 C8 C12	
Analizar a información que, sobre a estrutura molecular, proporcionan os distintos métodos e discernir as limitacións básicas que teñen.	A2 A3	C8 C12 C20	D3 D4 D7 D8 D9 D14
Predicir as características básicas dun determinado espectro para unha sustancia determinada	A2 A3	C4 C8 C12 C20	D3 D4 D7 D9 D14
Deseñar o proceso básico para obter unha determinada información estrutural dunha sustancia química.	A2 A3	C4 C8 C24	D3 D4 D7 D9 D13 D14
Resolver a estrutura molecular dun composto sinxelo a partir dos seus espectros (IR, MS, RMN, etc.).	A2 A3 A4	C4 C8 C12 C19 C20	D1 D3 D4 D5 D7 D9 D12 D14 D16
Describir a información que fornecen os distintos métodos de difracción de raios X.	A2 A3	C4 C12	D3 D4 D9 D13 D14 D15 D16
Observar a presenza de defectos e desorde na superficie de sólidos	A1	C4	

Contidos

Tema	
Tema 1. Obtención de datos xerais dunha sustancia.	Análise de combustión: fórmula empírica. Análise cualitativa. Simetría puntual e espacial Propiedades ópticas.
Tema 2. Espectroscopía electrónica e fotoelectrónica.	Determinación de grupos cromóforos. Efecto da conxugación. Estudo dos OM da capa de valencia.
Tema3. Determinación estrutural de mostras cristalinas.	Aplicacións e limitacións das técnicas difractométricas na determinación estrutural. Determinación tridimensional de estrutura molecular. Defectos e desorde en sólidos cristalinos.
Tema 4. Espectroscopía vibracional.	Determinación dalgúns grupos funcionais característicos. Absorcións características. Outras aplicacións en determinación estrutural.
Tema 5. Espectrometría de masas.	Determinación da masa molecular. Métodos de ionización. Métodos de detección. Reaccións de fragmentación. Patróns isotópicos. Interpretación do espectro de masas.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	13	26	39
Resolución de problemas e/ou exercicios	24	48	72
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	3	15	18
Traballos e proxectos	1	20	21

*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).
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.
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	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Resolución de problemas e/ou exercicios	Nas clases presenciais (maxistrais, seminarios, aula de informática) pediráselles aos alumnos entregables coa resolución de problemas e/ou exercicios que servirán para a avaliación dos alumnos. Resultados de aprendizaxe: (1). Describir os conceptos fundamentais dos métodos de determinación estrutural. (2). Analizar a información que, sobre a estrutura molecular proporcionan os distintos métodos e discernir as limitacións básicas que teñen. (3). Predicir as características básicas dun determinado espectro para unha substancia determinada. (4). Describir a información que suministran os distintos métodos de difracción de raios X. (5). Observar a nivel microscópico a presenza de defectos e desorden na superficie de sólidos.	20	A1 C4 D7 A2 C8 D8 A3 C12 D13 C19 D15 C20 C24
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	Haberá tres probas curtas ao longo do periodo lectivo de 1 hora de duración nas que se pedirá a obtención de información estrutural a partires de datos experimentais (espectros, etc). A primeira proba abarca os temas 1-3, a segunda proba abarcará os temas 4 e5 e a terceira proba abarcará os temas 1-6 Resultados de aprendizaxe: (1). Analizar a información que, sobre a estrutura molecular proporcionan os distintos métodos e discernir as limitacións básicas que teñen. (2). Predicir as características básicas dun determinado espectro para unha substancia determinada. (3). Deseñar o proceso básico para obter unha determinada información estrutural dunha substancia química. (4). Describir a información que suministran os distintos métodos de difracción de raios X. (5). Resolver a estrutura molecular dun composto sinxelo a partir dos seus espectros (IR, MS, RMN, etc).	45	A1 C8 D3 A2 C12 D7 A3 C19 A4 C20 C24

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. Resultados de aprendizaxe:(1). Resolver a estrutura molecular dun composto sinxelo a partir dos seus espectros (IR, MS, RMN, etc).	35	A1 C4 D1 A2 C8 D4 A3 C12 D5 A4 C19 D9 C20 D12 C24 D14 D16
-----------------------	---	----	---

Outros comentarios sobre a Avaliación

Para superar a materia o profesor debe dispoñer en tempo e forma de:

- Un mínimo do 80% dos entregables propostos nas distintas actividades presenciais.
- Todas as probas curtas.
- A memoria do traballo final.

Para superar a materia ao final do cuadrimestre é necesario acadar 5 puntos (sobre 10) na cualificación final. Ademais, é imprescindible obter na avaliación das diferentes partes da materia os seguintes mínimos:

- Un 30% do valor total en cada unha das probas curtas.
- Un 40% do valor total no conxunto dos entregables.
- Un 40% do valor total no traballo final.

No caso de non acadar algún dos mínimos, en acta figurará o resultado ponderado 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 a mención 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 global escrita no período de peche de avaliación definitivo no mes de xullo. Dita proba terá un valor do 45% da cualificación final e substituirá aos resultados das probas curtas realizadas durante o período lectivo. Será necesario acadar un mínimo dun 30% do valor total da proba para poder superar a materia. A cualificación dos entregables (das actividades presenciais) e o traballo/proxecto non son recuperables. No caso de non ter acadado nalgún deles os mínimos establecidos, a cualificación será de suspenso. Unha vez superados os mínimos será necesario unha cualificación global maior ou igual a 5.0 (sobre 10) para aprobar a materia.

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

Bibliografía. Fontes de información

Williams, D.H., Fleming, I., **Spectroscopic Methods in Organic Chemistry**, 6ª,
Hammond, Christopher, **The Basics of crystallography and diffraction**,
Pavia, D.L., Lampman, G.M., Kriz, G.S., Vyvyan, J.R., **Introduction to Spectroscopy**, 5ª,
Pretsch, Ernő, **Structure determination of organic compounds : tables of spectral data**, 4a,
Clayden, Jonathan, **Organic Chemistry**, 2a,

Páxinas webs:

1. www.spectroscopynow.com
2. www.iucr.org/education/pamphlets
3. www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/welcome.html

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Xeoloxía: Xeoloxía/V11G200V01205
Química: Química I/V11G200V01105
Química: Química II/V11G200V01204

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Química física I/V11G200V01303

Química física II/V11G200V01403

Química inorgánica I/V11G200V01404

Química orgánica I/V11G200V01304

Outros comentarios

Os alumnos deben lembrar que para acadar as competencias da materia é imprescindible ter adquiridos previamente os seguintes resultados de aprendizaxe:

- ☐ Determinación do estado formal de oxidación dun átomo dentro dun composto
 - ☐ Estrutura dos principais grupos funcionais en química orgánica
 - ☐ Representación mediante estruturas de Lewis de sustancias orgánicas
 - ☐ Estrutura tridimensional das sustancias orgánicas de acordo co modelo de orbitais híbridos
 - ☐ Representación de reaccións mediante diagramas de frechas
 - ☐ Conceptos básicos de espectroscopía
 - ☐ Simetría de redes
 - ☐ Grupos espaciais
 - ☐ Fundamentos da cristalografía de raios X
-