



DATOS IDENTIFICATIVOS

Determinación estrutural

Materia	Determinación estrutural			
Código	V11G201V01206			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	2	2c
Lingua de impartición	Castelán Galego			
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				
Descrición xeral	A materia adícase á aprendizaxe da aplicación dos métodos mais utilizados na determinación estrutural de substancias químicas			

Competencias

Código	
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
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía
B1	Capacidade de aprendizaxe autónoma
B3	Capacidade de xestión da información
B4	Capacidade de análise e síntese
C1	Capacidade para coñecer e comprender os feitos esenciais, conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química
C2	Empregar correctamente a terminoloxía química, nomenclatura, conversións e unidades
C3	Recoñecer e analizar problemas químicos, cualitativos e cuantitativos, presentando estratexias para solucionarlos a través da avaliación, interpretación e síntese de datos e información química
C6	Coñecer os fundamentos e ferramentas habituais na resolución de problemas analíticos e na caracterización de substancias químicas
C15	Coñecer as principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a espectroscopia
D1	Capacidade para resolver problemas

Resultados de aprendizaxe

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe		
Descibir los conceptos fundamentales de los métodos de determinación estructural	A3 A5	B4	C1 C2 C6 C15
Analizar a información que, sobre a estrutura molecular, proporcionan os distintos métodos e discernir as limitacións básicas que teñen.	A3	B3 B4	C1 C6 C15
Descibir a información que fornecen os distintos métodos de difracción de raios X.	A3	B4	C1 C6 C15

Predicir as características básicas dun determinado espectro para unha sustancia determinada	A3 A5	B3 B4	C2 C3	D1
Deseñar o proceso básico para obter unha determinada información estrutural dunha sustancia química.	A3 A4	B1 B3 B4	C2 C3	D1
Resolver a estrutura molecular dun composto sinxelo a partir dos seus espectros (IR, MS, RMN, etc.).	A3 A4	B1 B3 B4	C2 C3	D1

Contidos

Tema	
Tema 1. Obtención de datos xerais dunha sustancia.	Análise de combustión: Fórmula empírica. Análise cualitativa. Propiedades ópticas.
Tema 2. Métodos de difracción.	Aplicacións e limitacións na determinación estrutural.
Tema 3. Espectroscopía electrónica e fotoelectrónica.	Determinación de grupos cromóforos.
Tema 4. Espectroscopía vibracional.	Determinación dalgúns grupos funcionais característicos. Absorcións características.
Tema 5. Espectrometría de masas.	Determinación da masa molecular. Métodos de ionización. Patróns isotópicos. Interpretación do espectro de masas.
Tema 6. Espectroscopía de RMN.	Experimentos monodimensionais de ¹ H e ¹³ C Información estrutural a partir do desprazamento químico. RMN dinámica: equilibrios en disolución. Experimento Noe RMN heteronuclear

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	12	26	38
Resolución de problemas	24	70	94
Exame de preguntas obxectivas	2	16	18

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

Metodoloxía docente

	Descrición
Lección 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	As clases 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	Durante todo o periodo docente os alumnos poderán consultar todo tipo de dudas e cuestións cos profesores da materia nos horarios de titoría.

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Resolución de problemas	Nas clases presenciais (maxistras, seminarios) 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 sustancia determinada.	30	A3 D1

Exame de preguntas obxectivas	Haberá unha proba curta ao longo do periodo lectivo de 2 horas de duración nas que se pedirá a obtención de información estrutural a partires de datos experimentais (espectros, etc, 20% da nota final) Ademais, farase un exame final que abarcará todos os temas e a sua calificación será o 50% da nota da materia.	70	A3 A4	D1
-------------------------------	--	----	----------	----

Outros comentarios sobre a Avaliación

Para superar a materia o estudante debe:

- Acadar un 5 (sobre 10) de nota media das actividades de avaliación
- Acadar unha nota mínima de 4 en cada unha das probas escritas

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 substituirá aos resultados das probas escritas. A cualificación dos entregables (das actividades presenciais) e o traballo/proxecto non son recuperables.

Bibliografía. Fontes 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

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

(*)/

Outros comentarios

Plan de Continxencias

Descrición

Todas as actividades e as metodoloxías docentes propostas nesta asignatura son adaptables sen cambios o uso do campus remoto. Por este motivo non se precisan cambios na guía docente para axustarse a posibles continxencias. Ós contidos, metodoloxías e a avaliación executaranse nos mesmos termos se a docencia practícase de modo presencial, mixto ou non-presencial.