



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	#EnglishFriendly 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. Materia do programa English Friendly. Os/ as estudantes internacionais poderán solicitar ao profesorado: a) materiais e referencias bibliográficas para o seguimento da materia en inglés, b) atender as titorías en inglés, c) probas e avaliacións en inglés.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

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 autónomo
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 previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe		
Describir os conceptos fundamentais dos métodos de determinación estrutural.	A3	B3	C1
	A5		C2
			C6
			C15

Analizar a información que, sobre a estrutura molecular, proporcionan os distintos métodos e discernir as limitacións básicas que teñen.	A3	B1 B3 B4	C1 C6 C15	
Describir a información que fornecen os distintos métodos de difracción de raios X.	A3	B3	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	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 foteoelectrónica.	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	7	9
Exame de preguntas obxectivas	2	7	9

*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 tutoría.

Avaliación

Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
------------	---------------	---------------------------------------

Resolución de problemas	Nas clases presenciais (maxistrais, 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 substancia determinada.	20	A3	D1
Exame de preguntas obxectivas	Haberá unha proba escrita ao longo do período lectivo de 2 h. de duración que incluíra os Temas 1-4.	40	A3 A4	D1
Exame de preguntas obxectivas	Haberá unha segunda proba escrita enfocada na espectrometría de masas e espectroscopías de IR e RMN aplicadas á determinación estrutural dos compostos orgánicos	40	A3 A4	D1

Outros comentarios sobre a Avaliación

Para superar a materia o estudante debe:

- Consegir un 5 (sobre 10) de nota media das actividades de avaliación
- Consegir unha nota mínima de 4 en cada unha das probas de exame de preguntas obxectivas.

No caso de non conseguir algunha destas dúas condicións en acta figurará o resultado ponderado das probas de exame. Un alumno que realice máis do 20% do traballo total planificado será cualificado de acordo coa lexislación vixente e, por tanto, non poderá figurar na Acta a mención de NON PRESENTADO. En calquera caso, a realización dunha das probas curtas, suporá a calificación 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 *sustituirá* aos resultados das probas escritas. A calificación das probas de seminario, entregables (das actividades presenciais) e o traballo/proxecto, etc., non son recuperables.

Para os alumnos que renuncien á avaliación continua e opten por unha avaliación global, a primeira das probas curtas computará por un 40% da nota final, e a segunda o 60% restante. Os alumnos que non superen unha ou as dúas probas curtas que se realizan durante o cuadrimestre, deberán presentarse á parte correspondente na convocatoria de Xullo. **Co fin de garantir unha avaliación de calidade e individualizada, calquera competencia *certificable nesta materia é susceptible de ser verificada mediante unha proba oral, en calquera momento antes do peche definitivo das actas.**

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, Ernő, **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

Outros comentarios