



## 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<br>Galego                                                                                                            |        |       |              |
| Departamento          | Química inorgánica<br>Química orgánica                                                                                        |        |       |              |
| Coordinador/a         | Muñoz López, Luís                                                                                                             |        |       |              |
| Profesorado           | Lago Blanco, Ana Belén<br>Muñoz López, Luís<br>Vázquez López, Ezequiel Manuel                                                 |        |       |              |
| Correo-e              | lmunoz@uvigo.es                                                                                                               |        |       |              |
| Web                   |                                                                                                                               |        |       |              |
| Descrición xeral      | A materia adícase á aprendizaxe da aplicación dos métodos mais utilizados na determinación estrutural de substancias químicas |        |       |              |

### Competencias de titulación

|        |                                                                                                                                                                                                                     |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Código |                                                                                                                                                                                                                     |
| 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                                            |
| 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                              |
| 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                                                                                                                                                       |
| 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                                                                                                                                                                                     |

### Competencias de materia

| Resultados previstos na materia                                                                                                          | Resultados de Formación e Aprendizaxe |                             |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------|-----------------------------|
| Describir os conceptos fundamentais dos métodos de determinación estrutural                                                              | A4<br>A8<br>A12                       |                             |
| Analizar a información que, sobre a estrutura molecular, proporcionan os distintos métodos e discernir as limitacións básicas que teñen. | A8<br>A12<br>A20                      | B3<br>B4<br>B7<br>B9<br>B14 |

|                                                                                                      |                               |                                                 |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------------------------|
| Predicir as características básicas dun determinado espectro para unha sustancia determinada         | A4<br>A8<br>A12<br>A20        | B3<br>B4<br>B7<br>B9<br>B14                     |
| Deseñar o proceso básico para obter unha determinada información estrutural dunha sustancia química. | A4<br>A8                      | B3<br>B4<br>B7<br>B9<br>B13<br>B14              |
| Resolver a estrutura molecular dun composto sinxelo a partir dos seus espectros (IR, MS, RMN, etc.). | A4<br>A8<br>A12<br>A19<br>A20 | B3<br>B4<br>B5<br>B7<br>B9<br>B12<br>B14<br>B16 |
| Observar a nivel microscópico a presenza de defectos e desorde na superficie de sólidos.             | A4                            | B3<br>B7<br>B9                                  |
| Describir a información que fornecen os distintos métodos de difracción de raios X.                  | A4<br>A12                     | B3<br>B4<br>B9<br>B13<br>B14<br>B15<br>B16      |

## Contidos

### Tema

|                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|-------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Tema 1. Obtención de datos xerais dunha sustancia.    | Análise de combustión: fórmula empírica.<br>Análise cualitativa.<br>Propiedades ópticas.                                                                                                                                                                         |
| Tema 2. Espectroscopía electrónica e fotoelectrónica. | Determinación de grupos cromóforos.<br>Efecto da conxugación.<br>Estudo dos OM da capa de valencia.                                                                                                                                                              |
| Tema 3. Espectroscopía vibracional.                   | Determinación dalgúns grupos funcionais característicos.<br>Absorcións características.<br>Outras aplicacións en determinación estrutural.                                                                                                                       |
| Tema 4. Espectrometría de masas.                      | Determinación da masa molecular.<br>Métodos de ionización.<br>Métodos de detección.<br>Reaccións de fragmentación.<br>Patróns isotópicos.<br>Interpretación do espectro de masas.                                                                                |
| Tema 5. Espectroscopía de RMN.                        | Experimentos monodimensionales.<br>Información estrutural a partir do desprazamento químico.<br>Experimentos de dobre irradiación.<br>RMN dinámica: equilibrios en disolución.<br>Experimentos bidimensionales.<br>Correlacións homonucleares e heteronucleares. |
| Tema 6. Métodos de difracción.                        | Aplicacións e limitacións na determinación estrutural.<br>Determinación tridimensional de estrutura molecular.                                                                                                                                                   |
| Tema 7. Introducción á microscopía electrónica.       | TEM<br>SEM<br>HREM                                                                                                                                                                                                                                               |

## 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 tutorización 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 tutorización 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 tutorización dos traballos propostos. |

### Avaliación

|                                                                 | Descrición                                                                                                                                                                                                                                                                   | Cualificación |
|-----------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| 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                                                                             | 30            |
| 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 dispoñer en tempo e forma de:

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

Sera necesario obter un mínimo de 3 puntos sobre 10 en cada unha das 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 máis 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 aprobados poderá ser normalizada de xeito que a cualificación máis alta poda ser de ata 10 puntos.

A partir dos resultados dos diferentes problemas, exercicios e traballos propostos avaliaranse as competencias específicas da titulación A8, A19, A20, e A24 de maneira explícita e as competencias específicas A4 e A12 de maneira implícita.

A partir do traballo final do curso xunto con outro material escrito entregado avaliaranse explícitamente as competencias B1, B4, B5, B9, B12, B14 e B16. Acompañando á documentación do curso na plataforma Tem@, poñerase a disposición dos alumnos un documento cos criterios que se utilizarán para avaliar as devanditas competencias.

---

#### **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](http://www.spectroscopynow.com)

---

#### **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