



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Determinación estructural

|                     |   |            |       |              |
|---------------------|---|------------|-------|--------------|
| Asignatura          | Determinación estructural   |            |       |              |
| Código              | V11G200V01501   |            |       |              |
| Titulación          | Grado en Química  |            |       |              |
| Descriptores        | Creditos ECTS   | Seleccione | Curso | Cuatrimestre |
|                     | 6   | OB         | 3     | 1c           |
| Lengua              | Castellano  |            |       |              |
| Impartición         | Gallego   |            |       |              |
| Departamento        | Química inorgánica<br>Química orgánica  |            |       |              |
| Coordinador/a       | Álvarez Rodríguez, Rosana   |            |       |              |
| Profesorado         | Álvarez Rodríguez, Rosana<br>Castro Fojo, Jesús Antonio<br>Rodríguez de Lera, Angel   |            |       |              |
| Correo-e            | rar@uvigo.es  |            |       |              |
| Web                 |   |            |       |              |
| Descripción general | La materia se dedica al aprendizaje de la aplicación de los métodos mas utilizados en la determinación estructural de sustancias químicas |            |       |              |

## Competencias

|        |  |
|--------|--|
| Código |  |
| A1     | Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio. |
| A2     | Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.   |
| A3     | Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.  |
| A4     | Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.   |
| C4     | Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: fundamentos y herramientas utilizadas en la resolución de problemas analíticos y en la caracterización de sustancias químicas   |
| C8     | Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principales técnicas de investigación estructural, incluyendo la espectroscopia   |
| C12    | Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: rasgos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo la estereoquímica   |
| C19    | Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica  |
| C20    | Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química  |
| C24    | Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos   |
| D1     | Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad   |
| D3     | Aprender de forma autónoma   |
| D4     | Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes   |
| D5     | Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas   |
| D7     | Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica   |
| D8     | Trabajar en equipo   |
| D9     | Trabajar de forma autónoma   |
| D12    | Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo   |
| D13    | Tomar decisiones   |
| D14    | Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones   |
| D15    | Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo   |

| <b>Resultados de aprendizaje</b>  |                                       |                   |   |
|---|---------------------------------------|-------------------|---|
| Resultados previstos en la materia  | Resultados de Formación y Aprendizaje |                   |   |
| Describir los conceptos fundamentales de los métodos de determinación estructural   | A1                                    | C4<br>C8<br>C12   |   |
| Analizar la información que, sobre la estructura molecular, proporcionan los distintos métodos y discernir las limitaciones básicas que tienen. | A2                                    | C8                | D3  |
|   | A3                                    | C12<br>C20        | D4<br>D7<br>D8<br>D9<br>D14               |
| Predecir las características básicas de un determinado espectro para una sustancia determinada  | A2                                    | C4                | D3  |
|   | A3                                    | C8<br>C12<br>C20  | D4<br>D7<br>D9<br>D14                     |
| Diseñar el proceso básico para obtener una determinada información estructural de una sustancia química.  | A2                                    | C4                | D3  |
|   | A3                                    | C8<br>C24         | D4<br>D7<br>D9<br>D13<br>D14              |
| Resolver la estructura molecular de un compuesto sencillo a partir de sus espectros (IR, MS, RMN, etc.).  | A2                                    | C4                | D1  |
|   | A3                                    | C8                | D3  |
|   | A4                                    | C12<br>C19<br>C20 | D4<br>D5<br>D7<br>D9<br>D12<br>D14<br>D16 |
|   |                                       |                   |   |
| Describir la información que suministran los distintos métodos de difracción de rayos X.  | A2                                    | C4                | D3  |
|   | A3                                    | C12               | D4<br>D9<br>D13<br>D14<br>D15<br>D16      |
| Observar la presencia de defectos y desorden en sólidos   | A1                                    | C4                |   |

### Contenidos

| Tema   |   |
|--|---|
| Tema 1. Obtención de datos generales de una sustancia.     | Análisis de combustión: fórmula empírica.<br>Análisis cualitativo.<br>Simetría puntual y espacial<br>Propiedades ópticas.   |
| Tema 2. Espectroscopía electrónica y fotoelectrónica.      | Determinación de grupos cromóforos.<br>Efecto de la conjugación.<br>Estudio de los OM de la capa de valencia.   |
| Tema 3. Determinación estructural de muestras cristalinas. | Aplicaciones y limitaciones de las técnicas difractométricas en la determinación estructural.<br>Determinación tridimensional de la estructura molecular.<br>Defectos y desorden en sólidos cristalinos.  |
| Tema 4. Espectroscopía de RMN.                             | Experimentos monodimensionales de $^1\text{H}$ y $^{13}\text{C}$<br>Información estructural a partir del desplazamiento químico.<br>RMN dinámica: equilibrios en disolución.<br>Experimentos bidimensionales.<br>Correlaciones homonucleares y heteronucleares. |
| Tema 5. Espectroscopía vibracional.                        | Determinación de algunos grupos funcionales característicos.<br>Vibraciones características.<br>Otras aplicaciones en determinación estructural.  |

**Planificación**

|   | Horas en clase | Horas fuera de clase | Horas totales |
|---|----------------|----------------------|---------------|
| Sesión magistral  | 13             | 26                   | 39            |
| Resolución de problemas y/o ejercicios                          | 24             | 48                   | 72            |
| Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas. | 3              | 15                   | 18            |
| Trabajos y proyectos  | 1              | 20                   | 21            |

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

**Metodologías**

|  | Descripción   |
|--|---|
| Sesión magistral                       | Las clases teóricas se dedicarán a presentar aquellos fundamentos de las técnicas que son relevantes para la interpretación de las mediciones desde el punto de vista estructural (relaciones entre los espectros y las estructuras). |
| Resolución de problemas y/o ejercicios | Las clases se dedicarán a resolver ejercicios o problemas que permitan al final de cada tema la obtención de informaciones relevantes de las correspondientes técnicas.   |

**Atención personalizada**

| Metodologías                           | Descripción  |
|--|--|
| Resolución de problemas y/o ejercicios | Durante todo el periodo docente los alumnos pueden consultar todo tipo de dudas con los profesores de la materia en los horarios de tutoría.   |
| Pruebas                                | Descripción  |
| Trabajos y proyectos                   | Durante todo el periodo docente los alumnos pueden consultar todo tipo de dudas con los profesores de la materia en los horarios de tutoría. Los alumnos podrán ser convocados individualmente o en pequeños grupos para la tutorización de los trabajos propuestos. |

**Evaluación**

|   | Descripción   | Calificación | Resultados de Formación y Aprendizaje                       |
|---|---|--------------|---|
| Resolución de problemas y/o ejercicios                          | En las clases presenciales (magistrales, seminarios, aula de informática) se les pedirá a los alumnos entregables con la resolución de problemas y/o ejercicios que servirán para la evaluación de los alumnos. Resultados de aprendizaje: (1). Describir los conceptos fundamentales de los métodos de determinación estructural. (2). Analizar la información que, sobre la estructura molecular proporcionan los distintos métodos y discernir las limitaciones básicas que tienen. (3). Predecir las características básicas de un determinado espectro para una sustancia determinada. (4). Describir la información que suministran los distintos métodos de difracción de rayos X.   | 20           | A1 C4 D7<br>A2 C8 D8<br>A3 C12 D13<br>C19 D15<br>C20<br>C24 |
| Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas. | Habrán dos pruebas cortas a lo largo del periodo lectivo de 2 hora de duración en las que se pedirá la obtención de información estructural a partir de datos experimentales (espectros, etc). La primera prueba abarca los temas 1-3 (10% de la nota final) y la segunda prueba abarcará el tema 4 (20% de la nota final). Resultados de aprendizaje: (1). Analizar la información que, sobre la estructura molecular proporcionan los distintos métodos y discernir las limitaciones básicas que tienen. (2). Predecir las características básicas de un determinado espectro para una sustancia determinada. (3). Diseñar el proceso básico para obtener una determinada información estructural de una sustancia química. (4). Resolver la estructura molecular de un compuesto sencillo a partir de sus espectros (IR, MS, RMN, etc). La nota de las pruebas cortas será el 30% de la nota final de las asignaturas<br>Adicionalmente se hará un examen final que abarcará todos los temas, cuya calificación será el 30% de la nota final | 60           | A1 C8 D3<br>A2 C12 D7<br>A3 C19<br>A4 C20<br>C24            |

|                      |   |    |   |
|----------------------|---|----|---|
| Trabajos y proyectos | Los alumnos tendrán que realizar un pequeño proyecto propuesto por los profesores de tipo multidisciplinar. Los resultados tendrán que ser presentados en una memoria escrita. Resultados de aprendizaje:(1). Resolver la estructura molecular de un compuesto sencillo a partir de sus espectros (IR, MS, RMN, etc). | 20 | A1 C4 D1<br>A2 C8 D4<br>A3 C12 D5<br>A4 C19 D9<br>C20 D12<br>C24 D14<br>D16 |
|----------------------|---|----|---|

### Otros comentarios sobre la Evaluación

Para superar la materia el profesor debe disponer en tiempo y forma de:

- - Un **mínimo del 80% de los entregables propuestos** en las distintas actividades presenciales.
- - **Todas las pruebas cortas.**
- - **La memoria del trabajo final.**

Para superar la materia al final del cuatrimestre es necesario alcanzar 5 puntos (sobre 10) en la calificación final. Además, es imprescindible obtener en la evaluación de las diferentes partes de la materia los siguientes mínimos:

- - Un 30% del valor total en cada una de las pruebas cortas.
- - Un 40% del valor total en el conjunto de los entregables.
- - Un 30% del valor total en el examen final

En el caso de no alcanzar alguno de los mínimos, en acta figurará el resultado del examen final.

Un alumno que realice mas del 20% del trabajo total planificado será calificado de acuerdo con la legislación vigente y, por lo tanto, no podrá figurar en el acta a mención NO PRESENTADO. En cualquiera caso, la realización de una de las pruebas cortas, supondrá la calificación de la materia.

Los alumnos que no superen la materia al final del cuatrimestre deberán hacer una prueba global escrita en el período de cierre de evaluación definitivo en el mes de julio. Dicha prueba sustituirá a los resultados del examen final. Será necesario alcanzar un mínimo de un 30% del valor total de la prueba para poder superar la materia. Las calificaciones de los entregables (de las actividades presenciales) y el trabajo/proyecto no son recuperables. En el caso de no haber alcanzado en alguno de ellos los mínimos establecidos, la calificación será de suspenso. Una vez superados los mínimos será necesario una calificación global mayor o igual a 5.0 (sobre 10) para aprobar la materia.

La calificación final de los alumnos aprobados podrá ser normalizada de manera que la calificación mas alta pueda ser de hasta 10 puntos.

### Fuentes de información

#### Bibliografía Básica

#### Bibliografía Complementaria

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,

### Recomendaciones

#### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Geología: Geología/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

### Otros comentarios

Los alumnos deben recordar que para alcanzar las competencias de la materia es imprescindible tener adquiridos previamente los siguientes resultados de aprendizaje:

- Determinación del estado formal de oxidación de un elemento dentro de un compuesto
  - Estructura de los principales grupos funcionales en química orgánica
  - Representación mediante estructuras de Lewis de sustancias orgánicas
  - Estructura tridimensional de las sustancias orgánicas de acuerdo con el modelo de orbitales híbridos
  - Representación de reacciones mediante diagramas de flechas
  - Conceptos básicos de espectroscopía
-