



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Determinación Estructural Avanzada

|                       |                                                                            |        |       |              |
|-----------------------|----------------------------------------------------------------------------|--------|-------|--------------|
| Materia               | Determinación Estructural Avanzada                                         |        |       |              |
| Código                | V11M029V01130                                                              |        |       |              |
| Titulación            | Máster Universitario en Química Avanzada. RD. 1393/2007                    |        |       |              |
| Descritores           | Creditos ECTS                                                              | Sinale | Curso | Cuadrimestre |
|                       | 4                                                                          | OP     | 1     | 1c           |
| Lingua de impartición |                                                                            |        |       |              |
| Departamento          | Química inorgánica<br>Química orgánica                                     |        |       |              |
| Coordinador/a         | Vázquez López, Ezequiel Manuel                                             |        |       |              |
| Profesorado           | Muñoz López, Luis<br>Tojo Suárez, Emilia<br>Vázquez López, Ezequiel Manuel |        |       |              |
| Correo-e              | ezequiel@uvigo.es                                                          |        |       |              |
| Web                   |                                                                            |        |       |              |
| Descrición xeral      |                                                                            |        |       |              |

## Competencias de titulación

|        |                                                                                                                                                                                                                  |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Código |                                                                                                                                                                                                                  |
| A2     | Coñecemento dos principios físico-químicos fundamentais que regulan os aspectos máis avanzados da Química                                                                                                        |
| A3     | Coñecemento dos aspectos máis avanzados dos elementos e compostos inorgánicos e orgánicos, así como biomoléculas, as rutas sintéticas e a súa caracterización estrutural                                         |
| A4     | Habilidade para facer uso de instrumentación química estándar e avanzada e a súa monitorización                                                                                                                  |
| A5     | Demostración avanzada de habilidades para planificar, diseñar e executar experimentos químicos                                                                                                                   |
| A6     | Demostración de habilidades para o traballo no laboratorio á hora de realizar procedementos químicos documentados, monitorización de propiedades químicas, eventos e documentación de todo o traballo realizado. |
| B1     | Capacidade para deseñar, coordinar e realizar proxectos de investigación científica                                                                                                                              |
| B4     | Capacidade para a xestión e tratamento de datos e xeración de información e coñecemento                                                                                                                          |
| B5     | Capacidade de resolución eficaz e eficiente de problemas demostrando principios de orixinalidade e auto-dirección                                                                                                |
| B6     | Capacidade de aprendizaxe autónomo para o desenvolvemento continuo                                                                                                                                               |

## Competencias de materia

| Resultados previstos na materia                                                                                                                                                                                                                                      | Tipoloxía            | Resultados de Formación e Aprendizaxe |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|---------------------------------------|
| Describir os experimentos monodimensionais con secuencias de pulsos simples empregando o modelo vectorial: secuencia de eco de espín en sistemas non acoplados, edición de espectros facendo uso da constante de acoplamento, experimento 'inversion-recovery', etc. | saber facer          | A2<br>A4<br>A5                        |
| Describir o mecanismo de relaxación de espíns a través da constante de acoplamento dipolar e a orixe do efecto nuclear Overhauser.                                                                                                                                   | saber<br>saber facer | A2<br>A4<br>A5                        |
| Describir o mecanismo de relaxación de espíns a través da constante de acoplamento dipolar e a orixe do efecto nuclear Overhauser.                                                                                                                                   | saber<br>saber facer | A2<br>A4<br>A5                        |
| Describir a información que se pode obter dos experimentos HSQC, TOCSY e ROESY.                                                                                                                                                                                      | saber facer          | A3<br>A5                              |

|                                                                                                                                                                                                                      |                                  |                            |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------|----------------------------|
| Describir os experimentos (tipos de picos, forma dos picos, información que proporcionan) COSY, HMQC, HMBC e NOESY mediante o formalismo do produto de operadores para un sistema sinxelo de dous núcleos acoplados. | saber facer                      | A2<br>A4<br>A5<br>B1<br>B4 |
| Describir os experimentos (tipos de picos, forma dos picos, información que proporcionan) COSY, HMQC, HMBC e NOESY mediante o formalismo do produto de operadores para un sistema sinxelo de dous núcleos acoplados. | saber facer                      | A2<br>A4<br>A5             |
| Describir os experimentos INEPT e DEPT mediante o formalismo do produto de operadores para un sistema sinxelo de dous núcleos acoplados (metino) e xeneralizalos a metilenos e metilos.                              | saber facer                      | A2<br>A3<br>B4             |
| Describir os experimentos INEPT e DEPT mediante o formalismo do produto de operadores para un sistema sinxelo de dous núcleos acoplados (metino) e xeneralizalos a metilenos e metilos.                              | saber facer                      | A2<br>A3                   |
| Describir a información que se pode obter dos experimentos HSQC, TOCSY e ROESY.                                                                                                                                      | saber facer<br>Saber estar / ser | A2<br>A4<br>A5<br>B6       |
| Describir os parámetros espectrais asociados á adquisición de datos de cada experimento: anchura espectral, dixitalización, resolución, pulsos e tempos de espera.                                                   | saber<br>saber facer             | A2<br>A3<br>A4<br>A6       |
| Seleccionar os experimentos axeitados para a resolución dun determinado problema estrutural e establecer os parámetros necesarios para a adquisición de datos correspondente.                                        | saber<br>saber facer             | A2<br>A4<br>A6             |
| Describir os elementos de simetría principais dun grupo espacial.                                                                                                                                                    | saber                            | A3<br>B6                   |
| Deducir os elementos de simetría presentes nun cristal a partir das condicións de reflexión.                                                                                                                         | saber<br>saber facer             | A2<br>A3                   |
| Describir as etapas de toma de datos nun experimento de difracción de raios X de monocristal (= DRXm).                                                                                                               | saber                            | A2<br>A6<br>B5             |
| Seleccionar o método axeitado de resolución de estruturas a partir da composición e as características configuracionais.                                                                                             | saber<br>saber facer             | A2<br>A3<br>A4<br>A6       |
| Determinar, a partir de parámetros de resolución estrutural por DRXm, a calidade dos datos estruturais.                                                                                                              | saber<br>saber facer             | A3<br>A4<br>A6             |
| Enumerar as posibles fontes de erro na determinación estrutural por DRXm.                                                                                                                                            | saber<br>saber facer             | A3<br>A4<br>A6             |

## Contidos

Tema

## Planificación

|                          | Horas na aula | Horas fóra da aula | Horas totais |
|--------------------------|---------------|--------------------|--------------|
| Prácticas de laboratorio | 10            | 45                 | 55           |
| Sesión maxistral         | 15            | 30                 | 45           |

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

## Metodoloxía docente

|                          | Descrición                                                                                                                          |
|--------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Prácticas de laboratorio | - Determinación de estruturas moleculares mediante exemplos prácticos de experimentos de RMN y difracción de rayos X de monocristal |
| Sesión maxistral         | Impartición en aula de los aspectos teóricos y resolución de ejercicios.                                                            |

## Atención personalizada

| Metodoloxías     | Descrición                                                                                                  |
|------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Sesión maxistral | En cualquier momento el alumno puede solicitar del profesor la resolución de problemas específicos o dudas. |

Prácticas de laboratorio En cualquier momento el alumno puede solicitar del profesor la resolución de problemas específicos o dudas.

---

#### **Avaliación**

| Descripción                                                                                                                                                                                                | Cualificación |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| Prácticas de laboratorio- Resolución de estructuras por difracción de rayos X de monocristal apartires de datos experimentais<br>- Determinación da estrutura molecular mediante técnicas espectroscópicas | 100           |

---

#### **Outros comentarios sobre a Avaliación**

---

---

#### **Bibliografía. Fontes de información**

Sands, Donald E., **Introducción a la cristalografía** / Donald E. Sands ; [versión del inglés por G. Martín Guzmán], Barcelona [etc.] : Reverté, D.L. 1971,

Phillips, F. C., **Introducción a la cristalografía**, Madrid : Paraninfo, 1972,

Hammond, Christopher, **The Basics of crystallography and diffraction**, New York ; Oxford : Oxford University Press, 2009,

---

#### **Recomendacións**

---