



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				
Departamento	Química inorgánica Química orgánica			
Coordinador/a	Muñoz López, Luís			
Profesorado	Muñoz López, Luís 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
A24	Recoñecer e analizar novos problemas e propor estratexias para solucionarlos
B1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
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
B8	Traballar en equipo
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
Descibir os conceptos fundamentais dos métodos de determinación estrutural	A4 A8 A12

Analizar a información que, sobre a estrutura molecular, proporcionan os distintos métodos e discernir as limitacións básicas que teñen.	A8 A12 A20	B3 B4 B7 B8 B9 B14
Predicir as características básicas dun determinado espectro para unha sustancia determinada	A4 A8 A12 A20	B3 B4 B7 B9 B14
Deseñar o proceso básico para obter unha determinada información estrutural dunha sustancia química.	A4 A8 A24	B3 B4 B7 B9 B13 B14
Resolver a estrutura molecular dun composto sinxelo a partir dos seus espectros (IR, MS, RMN, etc.).	A4 A8 A12 A19 A20	B1 B3 B4 B5 B7 B9 B12 B14 B16
Describir a información que fornecen os distintos métodos de difracción de raios X.	A4 A12	B3 B4 B9 B13 B14 B15 B16

Contidos

Tema		
Tema 1. Obtención de datos xerais dunha sustancia.	Análise de combustión: fórmula empírica. Análise cualitativa. Propiedades ópticas.	
Tema 2. Espectroscopía electrónica e fotoelectrónica.	Determinación de grupos cromóforos. Efecto da conxugación. Estudo dos OM da capa de valencia.	
Tema3. Métodos de difracción.	Aplicacións e limitacións na determinación estrutural. Determinación tridimensional de estrutura molecular.	
Tema 4. Espectroscopía vibracional.	Determinación dalgúns grupos funcionais característicos. Absorcións características. Outras aplicacións en determinación estrutural.	
Tema 5. Espectrometría de masas.	Determinación da masa molecular. Métodos de ionización. Métodos de detección. Reaccións de fragmentación. Patróns isotópicos. Interpretación do espectro de masas.	
Tema 6. Espectroscopía de RMN.	Experimentos monodimensionales. Información estrutural a partir do desprazamento químico. Experimentos de dobre irradiación. RMN dinámica: equilibrios en disolución. Experimentos bidimensionales. Correlacións homonucleares e heteronucleares.	

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

*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 dúbidas 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 dúbidas 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 dúbidas 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	Haberá tres probas curtas ao longo do periodo lectivo de 1 hora de duración nas que se pedirá a obtención de información estrutural a partir de datos experimentais (espectros, reais e/ou simuladas, etc.). A primeira proba abarca os temas 1-3, a segunda proba abarcará os temas 4 e 5 e a terceira proba abarcará o tema 6 xunto cos anteriores. As probas contarán, respectivamente, o 20%, 10% e 15% da cualificación final.	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.
- Todas as probas curtas.
- A memoria do traballo final.

Para superar a materia ao final do cuadrimestre é necesario acadar 5 puntos (sobre 10) na cualificación final. Ademais, é imprescindible obter na avaliación das diferentes partes da materia os seguintes mínimos:

- Un 30% do valor total en cada unha das probas curtas.
- Un 40% do valor total no conxunto dos entregables.
- Un 40% do valor total no traballo final.

No caso de non acadar algún dos mínimos, en acta figurará o resultado ponderado 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 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 terá un valor do 45% da cualificación final e substituirá aos resultados das probas curtas realizadas durante o período lectivo. Será necesario acadar un mínimo dun 30% do valor total da proba para poder superar a materia. A cualificación dos entregables (das actividades presenciais) e o traballo/proxecto non son recuperables. No caso de non ter acadado nalgún deles os mínimos establecidos, a cualificación será de suspenso. Unha vez superados os mínimos será necesario unha cualificación global maior ou igual a 5.0 (sobre 10) para aprobar a materia.

A cualificación final dos alumnos aprobados poderá ser normalizada de xeito que a cualificación mais 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,

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

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
-