



Guía docente				
Datos Identificativos				2015/16
Asignatura (*)	Análisis Estructural Avanzado	Código	610509005	
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial			
Descriptorios				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	1º cuatrimestre	Primero	Obligatoria	3
Idioma	CastellanoGallegoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinador/a		Correo electrónico		
Profesorado	Rodriguez Gonzalez, Jaime Sanchez Andujar, Manuel	Correo electrónico	jaime.rodriguez@udc.es m.andujar@udc.es	
Web				
Descripción general	En este módulo se estudian los aspectos avanzados de la Química que son imprescindibles para cursar con las debidas garantías las materias de especialidad, de nivel mas avanzado, así como para llevar a cabo tareas de iniciación á la investigación interdisciplinar. El alumnado cursará obligatoriamente las cinco materias del módulo (15 ECTS), que serán impartidas por las tres universidades del consorcio y serán desarrolladas de manera intensiva a lo largo del primer cuatrimestre.			

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A2	Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
A4	Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
B1	Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
B2	Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
B4	Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
B5	Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
B7	Identificar información de la bibliografía utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
B10	Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
B11	Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional

Resultados de aprendizaje		
Resultados de aprendizaje	Competencias del título	
Ser capaz de proponer estructuras moleculares de compuestos tanto orgánicos como inorgánicos mediante el uso de técnicas espectroscópicas y de espectrometría de masas.	AM1 AM2 AM4	BM1 BM2 BM4 BM5 BM7 BM10 BM11



Ser capaces de identificar nun espectro o pico basee, o ión molecular (pico principal e picos isotópicos) e os picos de fragmentación.	AM1	BM1
Ser capaces de identificar os acrónimos das técnicas máis habituais de ionización e detección.	AM2	BM2
Ser capaces de determinar manualmente a composición isotópica de moléculas distinguindo entre isotopómeros e isotopólogos.	AM4	BM4
Ser capaces de identificar a presenza dalgúns elementos comúns (S, Cl, Br) en base ao patrón isotópico.		BM5
Ser capaces de estimar o número máximo de carbonos en función do pico M 1.		BM7
Ser capaz de obter posibles fórmulas para un determinado valor de masa utilizando a regra do 13.		BM10
Ser capaz de utilizar a regra do nitróxeno para restrinxir o número de fórmulas posibles.		BM11
Ser capaz de determinar o grado de insaturación dunha determinada fórmula empírica (DBE)		
Ser capaz de interpretar a que se chama magnetización en RMN e como se manipula a través de pulsos.		
Ser capaz de interpretar a nivel básico como se produce a relajación en RMN.		
Ser capaz de describir o esquema do experimento de pulsos básico de RMN xunto cos parámetros de adquisición que interveñen (SI, O1, SW, AQ, DW, FIDRES, P1, D1...).		
Ser capaz de interpretar os tipos de liña habituais nos espectros: absorción e dispersión.		
Ser capaz de distinguir os espectros en escala de tempo (FID) e en escala de frecuencia (espectro propiamente devandito) e describir como se converte un noutro a través da Transformada de Fourier.		
Ser capaz de describir en termos xerais como se adquire e como se procesa un experimento bidimensional.		
Ser capaz de identificar a través dun experimento heteronuclear (HSQC/HMQC) os protones unidos a cada carbono. Explicar HSQC-Editado a través do DEPT-135		
Ser capaz de obter información sobre a estrutura tridimensional dunha molécula a través do NOE.		
Demostrar coñecementos das bases teóricas e prácticas das técnicas difrantométricas, fundamentalmente de monocristal, e ou seu uso na determinación estrutural de moléculas pequenas.		

Contenidos	
Tema	Subtema
Tema 1.- La espectrometría de masas	Principios básicos. Patrones isotópicos. Espectrometría de masas de alta resolución.
Tema 2.- Experimentos de RMN monodimensionais. RMN de outros núcleos.	RMN monodimensional: modelo vectorial de experimentos de pulsos. Obtención de los parámetros espectrales y su interpretación (1): integral y desplazamientos químicos. Obtención de los parámetros espectrales y su interpretación (2). RMN monodimensional: experimentos de doble irradiación. Secuencias de pulso en RMN monodimensional (1). Secuencias de pulso en RMN monodimensional (2).
Tema 3.- Experimentos de RMN bidimensionais	RMN bidimensional: correlaciones heteronucleares. RMN bidimensional: Principios generales: COSY. RMN bidimensional: correlaciones a través de NOE.
Tema 4.- Difracción de rayos X de monocristal	
Tema 5.- Otras técnicas de análisis estrutural	

Planificación				
Metodoloxías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / traballo autónomo	Horas totales
Seminario	B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11	12	30	42
Trabajos tutelados	B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11	1	4	5



Prueba mixta	A1 A2 A4 B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11	1	7	8
Sesión magistral	A1 A2 A4	10	10	20
Atención personalizada		0		0

(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Seminario	Se propone llevar a cabo 12 sesiones de seminarios de problemas de grupo reducido en donde el alumnado resolverá los problemas propuestos por el profesorado en los boletines correspondientes. El alumnado dispondrá con suficiente antelación de dichos boletines en la plataforma virtual de la materia para que los elabore individualmente antes de la realización de las clases. También se emplearán para la resolución de dudas que surjan del temario. La asistencia será obligatoria.
Trabajos tutelados	Se propone esta actividad como la supervisión de trabajos dirigidos, aclaración de dudas sobre la teoría o las prácticas, problemas, ejercicios, lecturas o otras tareas propuestas, así como la presentación, exposición, debate o comentario de trabajos individuales o realizados en pequeños grupos. En muchos casos el profesorado exigirá al alumnado la entrega previa de ejercicios. La asistencia a estas clases es obligatoria.
Prueba mixta	Prueba final que contribuirá a la evaluación del nivel de conocimientos y competencias adquiridas por el alumnado.
Sesión magistral	En estas sesiones de grupo grande se desarrollarán los contenidos teóricos de la materia acompañados de los correspondientes ejemplos ilustrativos. El alumnado dispondrá del material que se va a impartir, antes de la realización de la actividad. Se fomentará en todo momento la participación activa del alumnado.

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción
Trabajos tutelados Seminario	Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con cualquier aspecto de la materia deberán contactar en el horario de tutorías con el profesor para recibir el apoyo necesario.

Evaluación			
Metodologías	Competencias	Descripción	Calificación
Trabajos tutelados	B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11		0
Prueba mixta	A1 A2 A4 B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11		0
Seminario	B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11		0

Observaciones evaluación
<p>La evaluación de esta materia se hará mediante control continuo y con la realización de una prueba final, estando condicionado el acceso a dicha prueba a la participación como mínimo del 80% de las actividades docentes presenciales obligatorias (seminarios y trabajos tutelados).</p> <p>La evaluación continua (N1) tiene un peso del 40% en la calificación de la materia y constará de dos componentes: seminarios y trabajos tutelados. Los aspectos de evaluación serán: resolución de problemas y casos prácticos (15%), realización de trabajo e informes escritos (10%), exposición oral (10%) y cuestiones orales durante el curso (5%). El examen final (N2) versará sobre la totalidad de los contenidos de la materia. La calificación del alumno se obtendrá como resultado de aplicar la siguiente fórmula:</p> <p>Nota final= 0.4*N1 + 0.6*N2</p> <p>N1 es la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 es la nota numérica del examen final (escala 0-10). Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la materia por primera vez.</p>

Fuentes de información



Básica	<ul style="list-style-type: none">- Clegg, William (1998). Crystal Structure Determination. Oxford University Press- Lifshin, Eric (1999). X-ray Characterization of Materials. Wiley-VCH- Crews, P, Rodríguez, J., Jaspers, M. (2010). Organic Structure Analysis. 2nd Ed. Oxford University Press; New York- Günther, H. (1995). NMR Spectroscopy, Basic principles, concepts, and applications in Chemistry. 2nd Ed. John Wiley- Gross, J. H. (2004). Mass Spectrometry. Springer
Complementaria	<ul style="list-style-type: none">- Smart, Lesley and Moore, Elaine A. (2012). Solid state chemistry : an introduction. CRC Press, (4 ed.).- Hesse, M. (1995). Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica. Madrid, Síntesis- Silvestein R. M.; Webster, F. X., Kiemle, D. J. (2005). Spectrometric Identification of Organic Compounds. 7th Ed. Wiley- Donald E. Sands (1988). Introducción a la cristalografía. Ed. Reverté- Glusker, Jenny P. and Trueblood, Kenneth N. (1985). Crystal Structure Analysis, a Primer. Oxford University Press, (2 ed.)

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Asignaturas que continúan el temario

Otros comentarios

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías