



Guía Docente				
Datos Identificativos				2016/17
Asignatura (*)	Análise Estrutural Avanzado	Código	610509005	
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial (plan 2016)			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	Anual	Primeiro	Obrigatoria	3
Idioma	CastelánGalegoInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinación	Rodriguez Gonzalez, Jaime	Correo electrónico	jaime.rodriguez@udc.es	
Profesorado	Rodriguez Gonzalez, Jaime Sanchez Andujar, Manuel	Correo electrónico	jaime.rodriguez@udc.es m.andujar@udc.es	
Web				
Descrición xeral	Neste módulo estúdanse aspectos avanzados da Química que son imprescindibles para cursar coas debidas garantías as materias de especialidade, de nivel máis elevado, así como para levar a cabo tarefas de iniciación á investigación interdisciplinar. O alumnado cursará obrigatoriamente as cinco materias do módulo (15 ECTS), que serán impartidas polas tres universidades do consorcio e serán desenvolvidas de maneira intensiva ao longo do primeiro cuadrimestre. Estas materias serán impartidas en modalidade presencial y de maneira simultánea polas tres universidades durante os meses de setembro e outubro de cada curso académico.			

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título
A1	Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química
A2	Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas
A4	Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química.
B1	Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación
B2	Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo.
B4	Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades.
B5	Que os estudantes posúan as habilidades de aprendizaxe que lles permitan continuar estudando dun modo que haberá de ser en gran medida autodirixido ou autónomo.
B7	Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación.
B10	Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química
B11	Aplicar correctamente as novas tecnoloxías de capturar e organizar a información para resolver problemas na actividade profesional

Resultados da aprendizaxe		
Resultados de aprendizaxe	Competencias / Resultados do título	
Ser capaz de propoñer a estrutura molecular de compostos tanto orgánicos como inorgánicos mediante o uso de técnicas espectroscópicas e a espectrometría de masas.	AM1 AM2 AM4	BM1 BM2 BM4 BM5 BM7 BM10 BM11



<p>Ser capaces de identificar nun espectro o pico basee, o ión molecular (pico principal e picos isotópicos) e os picos de fragmentación.</p> <p>Ser capaces de identificar os acrónimos das técnicas máis habituais de ionización e detección.</p> <p>Ser capaces de determinar manualmente a composición isotópica de moléculas distinguindo entre isotopómeros e isotopólogos.</p> <p>Ser capaces de identificar a presenza dalgúns elementos comúns (S, Cl, Br) en base ao patrón isotópico.</p> <p>Ser capaces de estimar o número máximo de carbonos en función do pico M 1.</p> <p>Ser capaz de obter posibles fórmulas para un determinado valor de masa utilizando a regra do 13.</p> <p>Ser capaz de utilizar a regra do nitróxeno para restrinxir o número de fórmulas posibles.</p> <p>Ser capaz de determinar o grado de insaturación dunha determinada fórmula empírica (DBE)</p> <p>Ser capaz de interpretar a que se chama magnetización en RMN e como se manipula a través de pulsos.</p> <p>Ser capaz de interpretar a nivel básico como se produce a relajación en RMN.</p> <p>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...).</p> <p>Ser capaz de interpretar os tipos de liña habituais nos espectros: absorción e dispersión.</p> <p>- 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.</p> <p>Ser capaz de describir en termos xerais como se adquire e como se procesa un experimento bidimensional.</p> <p>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</p> <p>Ser capaz de obter información sobre a estrutura tridimensional dunha molécula a través do NOE.</p> <p>Demostrar coñecementos das bases teóricas e prácticas das técnicas difraccións, fundamentalmente de monocristal, e ou seu uso na determinación estrutural de moléculas pequenas.</p>	<p>AM1</p> <p>AM2</p> <p>AM4</p>	<p>BM1</p> <p>BM2</p> <p>BM4</p> <p>BM5</p> <p>BM7</p> <p>BM10</p> <p>BM11</p>
--	----------------------------------	--

Contidos	
Temas	Subtemas
Tema 1.- A 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.- Outras técnicas de análise estrutural	

Planificación				
Metodoloxías / probas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciais e virtuais)	Horas traballo autónomo	Horas totais
Seminario	B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11	12	30	42
Traballos tutelados	B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11	1	4	5



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

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

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Seminario	Proponse levar a cabo 12 sesións de seminarios de problemas de grupo reducido onde o alumnado resolverá os problemas propostos polo profesorado nos boletíns correspondentes. O alumnado disporá con suficiente antelación de ditos boletíns na plataforma virtual da materia para que os elabore individualmente ante da realización das clases. Tamén se empregarán para a resolución de dúbidas que xurdan do temario. A asistencia será obrigatoria.
Traballos tutelados	Proponse esta actividade como a supervisión de traballos dirixidos, aclaración de dúbidas sobre a teoría ou as prácticas, problemas, exercicios, lecturas ou outras tarefas propostas; así como a presentación, exposición, debate ou comentario de traballos individuais ou realizados en pequenos grupos. En moitos casos o profesorado esixirá ao alumnado a entrega previa de exercicios. A asistencia a estas clases é obrigatoria.
Proba mixta	Proba final que contribuirá a avaliación do nivel de coñecementos e competencias adquiridas polo alumnado.
Sesión maxistral	Nestas sesións de grupo grande desenvolverase os contidos teóricos da materia acompañados dos correspondentes exemplos ilustrativos. O alumnado disporá do material que se vai a impartir, antes da realización da actividade. Fomentarse en todo momento a participación activa do alumnado.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Traballos tutelados Seminario	Aqueles alumnos que teñan especial dificultade con calquera aspecto da materia deberán contactar no horario de tutorías co profesor para recibir o apoio necesario.

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descrición	Cualificación
Traballos tutelados	B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11		0
Proba mixta	A1 A2 A4 B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11		0
Seminario	B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11		0

Observacións avaliación
<p>A avaliación desta materia farase mediante avaliación continua y a realización dun proba final, estando condicionado o acceso a dita proba á participación como mínimo do 80% das actividades docentes presenciais obrigatorias (seminarios e traballos tutelados).</p> <p>A avaliación continua (N1) ten un peso do 40% na cualificación da materia e constará de dous compoñentes: seminarios e traballos tutelados. Os aspectos de avaliación serán: resolución de problemas e casos prácticos (15%), realización de traballos e informes escritos (10%), exposición oral (10%) e cuestións orais durante o curso (5%). O exame final (N2) versará sobre a totalidade dos contidos da materia. A cualificación do alumno obterase como resultado de aplicar a seguinte fórmula: <math>\text{Nota final} = 0.4 \cdot N1 + 0.6 \cdot N2</math> Sendo N1 a nota numérica correspondente a avaliación continua (escala 0-10) e N2 a nota numérica do exame final (escala 0-10). Os alumnos repetidores terán o mesmo réxime de asistencia ás clases que os que cursan a materia por primeira vez.</p>

Fontes de información



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

## Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Materias que continúan o temario

Observacións

(\*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías