



Guía Docente				
Datos Identificativos				2021/22
Asignatura (*)	Determinación Estructural Avanzada		Código	610509103
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020)			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	1º cuatrimestre	Primeiro	Obrigatoria	3
Idioma	CastelánGalegoInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
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	<a href="http://www.usc.es/gl/centros/quimica/curso/master.html">http://www.usc.es/gl/centros/quimica/curso/master.html</a>			
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 cuatrimestre. 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.			
Plan de continxencia	1. Modificacións nos contidos Non habrá modificación 2. Metodoloxías *Metodoloxías docentes que se manteñen  *Metodoloxías docentes que se modifican Todas as metodoloxías pasan a non presencial con seguemento en plataforma virtual tipo Teams. 3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado Teams e correo electrónico. 4. Modificacións na avaliación  *Observacións de avaliación:  5. Modificacións da bibliografía ou webgrafía			

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título
A1	CE1 - Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química
A2	CE2 - Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas
A3	CE4 - Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química.
A7	CE7 - Operar con instrumentación avanzada para análise química e a determinación estrutural
A8	CE8 - Analizar e utilizar os datos obtidos de forma independente en experimentos de laboratorio complexos relacionándoos coas técnicas químicas, físicas ou biolóxicas axeitadas, incluíndo o uso de fontes bibliográficas primarias
A9	CE9 - Valorar, promover e practicar a innovación e o emprendemento na industria e na investigación química.
B1	CB6 ? 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	CB7 - 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	CB9 - 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	CB10 - 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	CG2 - Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación.
B10	CG5 - Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química
B11	CG6 - Aplicar correctamente as novas tecnoloxías de capturar e organizar a información para resolver problemas na actividade profesional
C1	CT1 - Elaborar, escribir e defender publicamente informes de carácter científico e técnico
C2	CT2 - Traballar en equipo e adaptarse a equipos multidisciplinares.
C3	CT3 - Traballar con autonomía e eficiencia na práctica diaria da investigación ou da actividade profesional.
C4	CT4 - Apreciar o valor da calidade e mellora continua, actuando con rigor, responsabilidade e ética 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 AM3 AM7 AM8 AM9	BM1 BM2 BM4 BM5 BM10 BM11	CM1 CM2 CM3 CM4
Ser capaces de identificar nun espectro o pico basee, o ión molecular (pico principal e picos isotópicos) e os picos de fragmentación. Ser capaces de identificar os acrónimos das técnicas máis habituais de ionización e detección. Ser capaces de determinar manualmente a composición isotópica de moléculas distinguindo entre isotopómeros e isotopólogos. Ser capaces de identificar a presenza dalgúns elementos comúns (S, Cl, Br) en base ao patrón isotópico. Ser capaces de estimar o número máximo de carbonos en función do pico M 1. Ser capaz de obter posibles fórmulas para un determinado valor de masa utilizando a regra do 13. Ser capaz de utilizar a regra do nitróxeno para restrinxir o número de fórmulas posibles. 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 difractométricas, fundamentalmente de monocristal, e ou seu uso na determinación estrutural de moléculas pequenas.	AM8	BM1 BM2 BM4 BM7	

## Contidos

Temas	Subtemas
-------	----------



Tema 1.- A espectrometría de masas	Métodos de ionización: ESI, APCI e MALDI. Grupos isotópicos e fórmulas Moleculares. Espectrometría de masas de alta resolución. Fragmentacións en espectrometría de masas.
Tema 2.- Experimentos de RMN monodimensionais. RMN de outros núcleos.	Experimentos de irradiación selectiva, 1D-NOE e 1D-TOCSY. Experimentos heteronucleares editados: INEPT e DEPT. Aplicacións na resolución de problemas estereoquímicos. Experimentos con outros núcleos: RMN de nitróxeno-15 e flúor-19. irradiación.
Tema 3.- Experimentos de RMN bidimensionais	RMN bidimensional: correlacións heteronucleares. Exp. HSQC, HMBC RMN bidimensional: Principios xerais: COSY, TOCSY RMN bidimensional: correlacións a través de NOE e ROE.
Tema 4.- Difracción de rayos X de monocristal	Bases teóricas do método. Métodos de resolución e refinamento dos modelos estruturais: exemplos prácticos.  Criterios de calidade do modelo.  Uso das ferramentas informáticas para representación de las estruturas y cálculo.

Planificación				
Metodoloxías / probas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciais e virtuais)	Horas traballo autónomo	Horas totais
Seminario	A2 A3 A7 A8 A9 B2 B4 B5 B7 B11 C1 C3 C4	12	30	42
Traballos tutelados	A8 B1 B7 B10 C2 C3 C4	1	4	5
Proba mixta	A1 A8 B7 B10	1	7	8
Sesión maxistral	A1 A8 B1 B11 C1	9	9	18
Atención personalizada		2	0	2

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

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Seminario	Propónse 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	Propónse 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. Fomentárase 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	A8 B1 B7 B10 C2 C3 C4	Valórase e avaliación continua do alumno mediante preguntas e cuestións, asemade a asistencia e participación	20
Proba mixta	A1 A8 B7 B10	Exame escrito con exercicios integrados das diferentes técnicas de RMN, masas e RX explicadas nas clases presenciais.	55
Seminario	A2 A3 A7 A8 A9 B2 B4 B5 B7 B11 C1 C3 C4	Contarásese resolución de problemas, casos prácticos e exposicións que serán entregados o alumno/a previamente. Seguirásese as explicacións e os exemplos explicados na clase, para resolver este tipo de exercicios.	25

### Observacións avaliación

A realización do conxunto de actividades do bloque relacionado cos seminarios e traballos tutelados por parte do alumnado é fundamental para superar con éxito a asignatura. Nas clases de seminario traballárase sobre todo a resolución de problemas. Os problemas e o calendario de clases en que se resolverán devanditos problemas estarán a disposición do alumnado no aula virtual da asignatura. Os alumnos deberán intentar resolvelos de forma autónoma, entregando a solución no aula virtual con antelación ás clases. Posteriormente, as solucións analizaranse nas clases. Nos seminarios tamén se propoñerán exercicios breves para resolver no momento, que servirán para focalizar os temas discutidos e que se terán en conta na avaliación.

Aconséllase que o alumnado utilice a bibliografía recomendada. O profesorado aconsellaralles as seccións de cada libro que sexan máis adecuadas para cada tema. En caso de atopar dificultades, os alumnos poderán suscitar as súas dúbidas tanto nas clases como nas tutorías.

A realización fraudulenta das probas ou actividades de avaliación implicará directamente a cualificación de suspenso (0) na materia na convocatoria correspondente, invalidando así calquera cualificación obtida en todas as actividades de avaliación de cara a convocatoria extraordinaria.

### Fontes de información

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

### Recomendacións

**Materias que se recomenda ter cursado previamente**

**Materias que se recomenda cursar simultaneamente**



## Materias que continúan o temario

### Observacións

A realización do conxunto de actividades do bloque a) de avaliación por parte do alumnado é fundamental para superar con éxito a asignatura. Nas clases de seminario traballárase sobre todo a resolución de problemas. Os problemas e o calendario de clases en que se resolverán devanditos problemas estarán a disposición do alumnado no aula virtual da asignatura. Os alumnos deberán intentar resolvelos de forma autónoma, entregando a solución no aula virtual con antelación ás clases. Posteriormente, as solucións analizaranse nas clases. Nos seminarios tamén se propoñerán exercicios breves para resolver no momento, que servirán para focalizar os temas discutidos e que se terán en conta na avaliación. Aconséllase que o alumnado utilice a bibliografía recomendada. O profesorado aconsellaralles as seccións de cada libro que sexan máis adecuadas para cada tema. En caso de atopar dificultades, os alumnos poderán suscitar as súas dúbidas tanto nas clases como nas tutorías.

(\*)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