



Guía docente				
Datos Identificativos				2023/24
Asignatura (*)	Determinación Estructural Avanzada		Código	610509103
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020)			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	1º cuatrimestre	Primero	Obligatoria	3
Idioma	CastellanoGallegoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	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>			
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	CE1 - Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A2	CE2 -Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
A3	CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
A7	CE7 - Operar con instrumentación avanzada para el análisis químico y la determinación estructural
A8	CE8 - Analizar y utilizar los datos obtenidos de manera autónoma en los experimentos complejos de laboratorio relacionándolos con las técnicas químicas, físicas o biológicas apropiadas, e incluyendo el uso de fuentes bibliográficas primarias
A9	CE9 - Valorar, promover y practicar la innovación y el emprendimiento en la industria y en la investigación química.
B1	CB6 - 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	CB7 - 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	CB9 - 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	CB10 - 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	CG2 - Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación
B10	CG5 - Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
B11	CG6 - Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional
C1	CT1 - Elaborar, escribir y defender públicamente informes de carácter científico y técnico.
C2	CT2 - Trabajar en equipo y adaptarse a equipos multidisciplinares.
C3	CT3 - Trabajar con autonomía y eficiencia en la práctica diaria de la investigación o de la actividad profesional.
C4	CT4 - Apreciar el valor de la calidad y la mejora continua, actuando con rigor, responsabilidad y ética profesional.

Resultados de aprendizaje
---------------------------



Resultados de aprendizaxe	Competencias del título		
Ser capaz de proponer estruturas moleculares de compuestos tanto orgánicos como inorgánicos mediante el uso de técnicas espectroscópicas y de 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 difractivas, fundamentalmente de monocristal, e ou seu uso na determinación estrutural de moléculas pequenas.	AM8	BM1 BM2 BM4 BM7	

Contenidos	
Tema	Subtema
Tema 1.- La espectrometría de masas	Métodos de ionización: ESI, APCI e MALDI. Grupos isotópicos y fórmulas Moleculares. Espectrometría de masas de alta resolución. Fragmentaciones en espectrometría de masas.
Tema 2.- Experimentos de RMN monodimensionais. RMN de outros núcleos.	Experimentos de irradiación selectiva, 1D-NOE y 1D-TOCSY. Experimentos heteronucleares editados: INEPT y DEPT. Aplicaciones en la resolución de problemas estereoquímicos. Experimentos con otros núcleos: RMN de nitróxeno-15 y flúor-19.
Tema 3.- Experimentos de RMN bidimensionais	RMN bidimensional: correlaciones heteronucleares. Exp. HSQC, HMBC RMN bidimensional: Principios generales: COSY, TOCSY RMN bidimensional: correlaciones a través de NOE y ROE.
Tema 4.- Difracción de rayos X de monocristal	Bases teóricas del método. Métodos de resolución y refinamiento de los modelos estructurales: ejemplos prácticos. Criterios de calidad del modelo. Uso de herramientas informáticas para representación de las estructuras y cálculo.



Planificación				
Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / traballo autónomo	Horas totales
Seminario	A2 A3 A7 A8 A9 B2 B4 B5 B7 B11 C1 C3 C4	12	30	42
Trabaios tutelados	A8 B1 B7 B10 C2 C3 C4	1	4	5
Proba mixta	A1 A8 B7 B10	1	7	8
Sesión magistral	A1 A8 B1 B11 C1	9	9	18
Atención personalizada		2	0	2

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

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Seminario	Se propone llevar a cabo 12 sesións de seminarios de problemas de grupo reducido en donde el alumnado resolverá los problemas propostos por el profesorado en los boletines correspondentes. 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 dúbidas que surjan del temario. La asistencia será obligatoria.
Trabaios tutelados	Se propone esta actividada como la supervisión de traballos dirigidos, aclaración de dúbidas sobre la teoría o las prácticas, problemas, exercicios, lecturas o outras tarefas propostas, así como la presentación, exposición, debate o comentario de traballos individuais o realizados en pequenos grupos. En muchos casos el profesorado exigirá al alumnado la entrega previa de exercicios. La asistencia a estas clases es obligatoria.
Proba mixta	Proba final que contribuirá a la evaluación del nivel de conocimientos y competencias adquiridas por el alumnado.
Sesión magistral	En estas sesións de grupo grande se desenvolverán los contenidos teóricos de la materia acompañados de los correspondientes exemplos ilustrativos. El alumnado dispondrá del material que se va a impartir, antes de la realización de la actividada. Se fomentará en todo momento la participación activa del alumnado.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Trabaios 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			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Calificación
Trabaios tutelados	A8 B1 B7 B10 C2 C3 C4	Se valorará la evaluación continua del alumno mediante preguntas y problemas, además de la asistencia y participación en la clase	20
Proba mixta	A1 A8 B7 B10	Written test with integrated problems of the different techniques of NMR, Mass Spectrometry and X-ray explained in the classroom.	55
Seminario	A2 A3 A7 A8 A9 B2 B4 B5 B7 B11 C1 C3 C4	Resolución de problemas, casos prácticos y exposiciones que serán entregados al alumno/a previamente. Se seguirán las explicaciones y ejemplos explicados en la clase.	25

Observaciones evaluación



La realización del conjunto de actividades del bloque relacionado con seminarios y trabajos tutelados por parte del alumnado es fundamental para superar con éxito la asignatura. En las clases de seminario se trabajará sobre todo la resolución de problemas. Los problemas y el calendario de clases en que se resolverán dichos problemas estarán a disposición del alumnado en el aula virtual de la asignatura. Los alumnos deberán intentar resolverlos de forma autónoma, entregando la solución en el aula virtual con antelación a las clases. Posteriormente, las soluciones se analizarán en las clases. En los seminarios también se propondrán ejercicios breves para resolver en el momento, que servirán para focalizar los temas discutidos y que se tendrán en cuenta en la evaluación.

Se aconseja que el alumnado utilice la bibliografía recomendada. El profesorado les aconsejará las secciones de cada libro que sean más adecuadas para cada tema. En caso de encontrar dificultades, los alumnos podrán plantear sus dudas tanto en las clases como en las tutorías.

La realización fraudulenta de las pruebas o actividades de evaluación, una vez comprobada, implicará directamente la cualificación de suspenso (0) en la materia y en la convocatoria correspondiente, tanto se la comisión de la falta se produce en la primera oportunidad como en la segunda. Para esto, se modificará su cualificación en el acta de la primera oportunidad, se fuese necesario.

## Fuentes de información

<b>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>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>

## Recomendaciones

**Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente**

**Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente**

**Asignaturas que continúan el temario**

## Otros comentarios

La realización del conjunto de actividades del bloque a) de evaluación por parte del alumnado es fundamental para superar con éxito la asignatura. En las clases de seminario se trabajará sobre todo la resolución de problemas. Los problemas y el calendario de clases en que se resolverán dichos problemas estarán a disposición del alumnado en el aula virtual de la asignatura. Los alumnos deberán intentar resolverlos de forma autónoma, entregando la solución en el aula virtual con antelación a las clases. Posteriormente, las soluciones se analizarán en las clases. En los seminarios también se propondrán ejercicios breves para resolver en el momento, que servirán para focalizar los temas discutidos y que se tendrán en cuenta en la evaluación. Se aconseja que el alumnado utilice la bibliografía recomendada. El profesorado les aconsejará las secciones de cada libro que sean más adecuadas para cada tema. En caso de encontrar dificultades, los alumnos podrán plantear sus dudas tanto en las clases como en las tutorías.

**(\*) 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**