

Guía docente

Identificación de la asignatura

Asignatura / Grupo	21415 - Determinación Estructural / 1
Titulación	Grado en Química - Segundo curso
Créditos	6
Período de impartición	Segundo semestre
Idioma de impartición	Castellano

Profesores

Horario de atención a los alumnos

Profesor/a	Hora de inicio	Hora de fin	Día	Fecha inicial	Fecha final	Despacho / Edificio
María de las Nieves Piña Capó	13:00	14:00	Miércoles	09/09/2019	31/07/2020	QO-231/Edifici Mateu Orfila
<i>Responsable</i> neus.pinya@uib.es	15:30	17:30	Martes	09/09/2019	31/07/2020	QO-231/ Edifici Mateu Orfila
Carlos Palomino Cabello carlos.palomino@uib.es	Hay que concertar cita previa con el/la profesor/a para hacer una tutoría					

Contextualización

La asignatura de Determinación Estructural forma parte del módulo "Complementos de Química". Se trata de un módulo de formación fundamental, formado por 24 créditos obligatorios y 30 optativos. Es una asignatura de carácter obligatorio y en ella se proporcionará el conocimiento básico sobre distintas técnicas instrumentales y su aplicación práctica para la obtención de información y determinación de estructuras de los compuestos químicos. La asignatura está muy relacionada con las asignaturas de Química Orgánica I, Química Orgánica II, Síntesis Orgánica, Química Inorgánica I, Química Inorgánica II y Química Inorgánica III.

Requisitos

La asignatura tiene un carácter de formación básica y, por lo tanto, no tiene requisitos.

Competencias

Específicas

- * CE2-C. Conocimiento de los principios físico-químicos fundamentales que rigen a la Química y sus relaciones entre áreas de la Química

Guía docente

- * CE2-H. Demostrar habilidades para identificar y resolver problemas cualitativos y cuantitativos con un enfoque estratégico
- * CE6-H. Demostrar habilidades para los cálculos numéricos y la interpretación de los datos experimentales, con especial énfasis en la precisión y la exactitud

Genéricas

- * CB-3. Tener la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes, dentro del área de la Química, para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética
- * CB-5. Haber desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores en Química con un alto grado de autonomía

Básicas

- * Se pueden consultar las competencias básicas que el estudiante tiene que haber adquirido al finalizar el grado en la siguiente dirección: http://estudis.uib.cat/es/grau/comp_basiques/

Contenidos

La asignatura tratará los siguientes contenidos estructurados en los temas que se detallan a continuación:

- Revisión de la simetría.
- Difracción de rayos X.
- Microscopía electrónica y difracción de electrones.
- Espectroscopía de fotoelectrones.
- Espectroscopía infrarroja.
- Espectrometría de masas.
- Resonancia magnética nuclear

Contenidos temáticos

Tema 1. Revisión de la simetría

Introducción a la simetría. Simetría puntual: Operaciones de simetría y elementos de simetría.- Combinación de elementos: Grupos puntuales.- Determinación del grupo puntual al que pertenece una molécula.- Aplicaciones de la simetría puntual.- Simetría cristalina: Red de puntos y celda unidad.- Parámetros de red.- Sistemas cristalinos.- Elementos y operaciones de simetría.- Ejes helicoidales y planos de deslizamiento: Grupos espaciales.

Tema 2. Difracción de rayos X

Origen y propiedades de los rayos X.- Difracción: Ley de Bragg.- Determinación de la simetría y de los parámetros de red.- Intensidad de difracción: Determinación de las coordenadas atómicas.- Análisis químico mediante difracción de rayos X.- Límite de difracción: tamaño del cristal y ancho de banda.

Tema 3. Microscopía electrónica y difracción de electrones

Introducción a la microscopía electrónica.- El microscopio electrónico.- Difracción de electrones.- Imagen de red.- Microscopía electrónica de barrido.- Microsonda electrónica.

Tema 4. Espectroscopía de fotoelectrones

Guía docente

Principios elementales.- Espectroscopías fotoelectrónica: Aplicación a la determinación estructural.- Desplazamiento químico.- Estructura fina en UPS.- Otras formas de espectroscopía de fotoelectrones y técnicas afines

Tema 5. Espectrometría de absorción de infrarrojo (IR)

Espectros de absorción en infrarrojos.- Frecuencias características.- Regiones del espectro de IR y tipos de enlaces.- Análisis de un espectro de IR.

Tema 6. Espectrometría de Masas (EM)

El espectro de masas.- Procedimiento estándar de interpretación.- Cálculo de la composición elemental.- Mecanismos de fragmentación.- Patrones de fragmentación de los compuestos con grupos funcionales más habituales.- Interpretación de los espectros de masas.

Tema 7. Resonancia Magnética Nuclear

Conceptos teóricos.- El desplazamiento químico.- El espectrómetro de resonancia magnética nuclear de onda continua.- Introducción al RMN de pulsos.- Equivalencia química.- La constante de acoplamiento.- Principios básicos del experimento de RMN.- Espectros de carbono-13 y acoplamiento heteronuclear.- Mecanismos de relajación. Efecto NOE.

Metodología docente

En este apartado se describen las actividades de trabajo presencial y no presencial previstas en la asignatura, con el objeto de poder desarrollar y evaluar las competencias establecidas anteriormente.

Con el objeto de favorecer la autonomía y el trabajo personal del alumno, la asignatura forma parte del proyecto Campus Extens, el cual incorpora el uso de la telemática a la enseñanza universitaria. Mediante la plataforma de teleeducación Moodle el alumno podrá comunicar a distancia con el profesor y tendrá a su disposición documentos electrónicos, enlaces a Internet y propuestas de trabajo autónomo tanto para ser evaluado como para trabajar en la preparación de los temas.

Volumen

En la siguiente tabla se presenta la distribución de horas según las diferentes actividades de trabajo presencial y no presencial planificado.

Actividades de trabajo presencial (2,4 créditos, 60 horas)

Modalidad	Nombre	Tip. agr.	Descripción	Horas
Clases teóricas	Clases Magistrales	Grupo grande (G)	El profesor explicará los contenidos de la materia. Se explicará la base teórica de los diferentes temas, incidiendo en aquellos aspectos o conceptos claves para la comprensión de los mismos y se ejemplificará la práctica de las diferentes técnicas experimentales expuestas. Además, se aportará para cada unidad didáctica información sobre el método de trabajo más aconsejable y el material didáctico que el alumno habrá de utilizar para preparar de forma autónoma los contenidos.	47
Seminarios y talleres	Resolución de problemas	Grupo mediano (M)	Mediante el método de resolución de ejercicios y problemas, el alumno pondrá en práctica los procedimientos y técnicas expuestas en las clases teóricas. El alumno resolverá (de	10

Guía docente

Modalidad	Nombre	Tip. agr.	Descripción	Horas
			forma autónoma) y entregará, o bien presentará durante la sesión, ejercicios y problemas sobre los contenidos expuestos en clase.	
Evaluación	Exámen Parcial	Grupo grande (G)	A lo largo del semestre el alumno realizará dos exámenes parciales. Esta evaluación permitirá valorar si el alumno conoce y sabe aplicar correctamente los procedimientos y las técnicas que forman parte de la materia mediante la realización de forma individual de pruebas escritas en las que se evaluarán los conocimientos adquiridos en relación al temario impartido hasta la realización del examen.	3

Al inicio del semestre estará a disposición de los estudiantes el cronograma de la asignatura a través de la plataforma UIBdigital. Este cronograma incluirá al menos las fechas en las que se realizarán las pruebas de evaluación continua y las fechas de entrega de los trabajos. Asimismo, el profesor o la profesora informará a los estudiantes si el plan de trabajo de la asignatura se realizará a través del cronograma o mediante otra vía, incluida la plataforma Aula Digital.

Actividades de trabajo no presencial (3,6 créditos, 90 horas)

Modalidad	Nombre	Descripción	Horas
Estudio y trabajo autónomo individual	Preparación de las unidades didácticas	Después de la exposición por parte del profesor en las clases magistrales y de la resolución de problemas en los seminarios y talleres, el alumno tendrá que profundizar en la materia. Para facilitar este trabajo, se indicará en cada tema los manuales de referencia que se han de consultar.	50
Estudio y trabajo autónomo individual	Resolución de problemas	Se propondrá una serie de problemas a lo largo del semestre que se deberán resolver de forma individual. El alumno dispondrá de un tiempo limitado para resolverlos y tenerlos preparados para su presentación en clase de problemas o bien para su entrega al profesor.	40

Riesgos específicos y medidas de protección

Las actividades de aprendizaje de esta asignatura no conllevan riesgos específicos para la seguridad y salud de los alumnos y, por tanto, no es necesario adoptar medidas de protección especiales.

Evaluación del aprendizaje del estudiante

Las competencias establecidas en la asignatura serán evaluadas mediante la aplicación de una serie de procedimientos de evaluación. Es obligatoria la asistencia al 100% de las tutorías de la asignatura. Dado el carácter eminentemente práctico de la asignatura, se considera, además, imprescindible, para un correcto seguimiento de la misma, la asistencia a al menos el 80% de las actividades presenciales programadas. En la tabla del presente apartado se describe para cada procedimiento de evaluación, la tipología (recuperable o no), los criterios de evaluación y su peso en la calificación de la asignatura.

El alumno obtendrá una calificación numérica entre 0 y 10 puntos para cada actividad de evaluación, la cual será ponderada según su peso, a fin de obtener la calificación global de la asignatura. Para superar la asignatura,

Guía docente

el alumno ha de obtener un mínimo de 4 puntos sobre 10 de cada uno de los exámenes parciales y de 5 puntos sobre 10 mediante la suma ponderada de todas las actividades realizadas. La nota obtenida deberá estar relacionada con el trabajo personal realizado y, por tanto, se vigilará y, en caso necesario, se aplicará de forma conveniente el artículo 33 del Reglamento Académico de la UIB (Acord normatiu 10959 de 18 de marzo de 2014) que indica "Con independencia del procedimiento disciplinario que se pueda seguir contra el estudiante infractor la realización fraudulenta de alguna de las actividades de evaluación incluida en la evaluación de alguna asignatura comportará, según las circunstancias, una disminución en su calificación que, en los casos más graves, puede llegar a la calificación de suspenso (0,0) de la convocatoria anual".

Finalmente, los estudiantes que no alcancen la calificación mínima de 5 puntos para superar la asignatura, podrán hacer en el periodo de evaluación extraordinaria un examen de aquella parte o partes de la materia que compone la asignatura que no haya superado en los exámenes parciales. La puntuación obtenida por el alumno en este examen se conmutará por la puntuación obtenida en el examen o exámenes parciales realizados durante el curso. La calificación global de la asignatura, se obtendrá ponderando según su peso las distintas notas obtenidas durante el periodo lectivo y el periodo de evaluación extraordinario.

Fraude en elementos de evaluación

De acuerdo con el artículo 33 del Reglamento Académico, "con independencia del procedimiento disciplinario que se pueda seguir contra el estudiante infractor, la realización demostrablemente fraudulenta de alguno de los elementos de evaluación incluidos en guías docentes de las asignaturas comportará, a criterio del profesor, una minusvaloración en su calificación que puede suponer la calificación de «suspenso 0» en la evaluación anual de la asignatura".

Resolución de problemas

Modalidad	Seminarios y talleres
Técnica	Pruebas objetivas (no recuperable)
Descripción	Mediante el método de resolución de ejercicios y problemas, el alumno pondrá en práctica los procedimientos y técnicas expuestos en las clases teóricas. El alumno resolverá (de forma autónoma) y entregará, o bien presentará durante la sesión, ejercicios y problemas sobre los contenidos expuestos en clase.
Criterios de evaluación	Exactitud de los resultados obtenidos- Adecuación de las interpretaciones y conclusiones establecidas en función de los resultados obtenidos. Los problemas resueltos que sean entregados después de la fecha límite establecida por el profesor no serán evaluados.

Porcentaje de la calificación final: 20%

Exámen Parcial

Modalidad	Evaluación
Técnica	Pruebas objetivas (recuperable)
Descripción	A lo largo del semestre el alumno realizará dos exámenes parciales. Esta evaluación permitirá valorar si el alumno conoce y sabe aplicar correctamente los procedimientos y las técnicas que forman parte de la materia

Guía docente

mediante la realización de forma individual de pruebas escritas en las que se evaluarán los conocimientos adquiridos en relación al temario impartido hasta la realización del examen.

Criterios de evaluación Adecuación de los procedimientos aplicados para resolver los ejercicios propuestos y exactitud de los resultados obtenidos. Exactitud en la respuestas sobre cuestiones teóricas. Formato de prueba: se simultanearán cuestiones teóricas con el planteamiento de problemas.

Porcentaje de la calificación final: 80%

Recursos, bibliografía y documentación complementaria

Bibliografía básica

- Structural Methods in Inorganic Chemistry. E.A.V. Ebsworth, D.W.H. Rankin, S. Craddock. Ed. Blackwell, 1991. ISBN 0-632-02963-3.
- Crystallography and Crystal Chemistry. F.D. Bloss. Ed. Rinehart, 1971. ISBN: 03-085155-6.
- Introduction to X-ray Powder Diffractometry. R. Jenkins and R.L. Snyder. Ed. John Wiley and Sons, 1996.
- Introducción a la Cristalografía Práctica. S. Ordoñez, J. C. Cañaveras, A. Bernabéu, D. Benavente. Ed. Universidad de Alicante, 2000. ISBN: 84-7908-503-7.
- Electron Diffraction and Optical Diffraction Techniques. B.E.P. Beeston, R.W. Horne, R. Markham. North-Holland, 1973
- Transmission Electron Microscopy. Williams, C. Barry Carter. Ed. Plenum Press, 1996. ISBN: 0-306-45324-X D. B.
- Photoelectron Spectroscopy. A.D. Beaker, D. Betteridge. Ed. Pergamon.
- Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica. Manfred Hesse, Herbert Meier, Bernd Zeeh. Síntesis 1997. ISBN 84-7738-552-X.

Bibliografía complementaria

- Introduction to organic spectroscopy. Lawrence M. Harwood, Timothy D. W. Claridge, Oxford 1997. ISBN 0-19-855755-8.
- Introducción to Spectroscopy. A Guide for Students of Organic Chemistry. Donald L. Pavia, Gary M. Lapman, George S. Kriz Saunders College, 1996. ISBN 0-03-058427-2.
- Spectrometric Identification of Organic Compounds. Robert M Silverstein, Francis X. Webster, 6th Edition, John Wiley and Sons, 1997. ISBN 0-472-23457-0

Otros recursos

Mediante la plataforma de teleeducación Moodle, el alumno tendrá a su disposición una serie de recursos de interés para su formación, como documentos electrónicos sobre la materia y enlaces a Internet.