



Año académico	2011-12
Asignatura	21415 - Determinación Estructural
Grupo	Grupo 1, 2S, GQUI
Guía docente	B
Idioma	Castellano

## Identificación de la asignatura

<b>Asignatura</b>	21415 - Determinación Estructural
<b>Créditos</b>	2.4 presenciales (60 horas) 3.6 no presenciales (90 horas) 6 totales (150 horas).
<b>Grupo</b>	Grupo 1, 2S, GQUI(Campus Extens)
<b>Período de impartición</b>	Segundo semestre
<b>Idioma de impartición</b>	Castellano

## Profesores

Profesores	Horario de atención al alumnado					
	Hora de inicio	Hora de fin	Día	Fecha inicial	Fecha final	Despacho
Gemma Isabel Turnes Palomino <a href="mailto:g.turnes@uib.es">g.turnes@uib.es</a>				No hay sesiones definidas		
María del Carmen Rotger Pons <a href="mailto:carmen.rotger@uib.es">carmen.rotger@uib.es</a>	16:00h	17:00h	Lunes	26/09/2011	26/12/2011	Q6 Mateu orfila

## Titulaciones donde se imparte la asignatura

Titulación	Carácter	Curso	Estudios
Grado en Química	Obligatoria	Segundo curso	Grado

## 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. Por otra parte esta asignatura está muy relacionada con las asignaturas de química orgánica I, química orgánica II, síntesis orgánica, química inorgánica I, química orgánica II y química inorgánica III.

## Requisitos

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

## Competencias





Año académico	2011-12
Asignatura	21415 - Determinación Estructural
Grupo	Grupo 1, 2S, GQUI
Guía docente	B
Idioma	Castellano

La asignatura de Determinación Estructural tiene el propósito de contribuir a la adquisición de las competencias que se indican a continuación, las cuales forman parte del conjunto de competencias establecidas en el plan de estudios del grado en química y que se traducirá en los siguientes resultados de aprendizaje:

- Conocer el fundamento teórico de las diferentes técnicas instrumentales (difracción, microscopía, espectroscopía de masas y resonancia magnética nuclear) utilizadas en la determinación estructural de compuestos químicos.
- Indexar correctamente patrones de difracción.
- Capacidad de calcular correctamente los parámetros de red de un sistema cristalino.
- Adquirir la formación e instrucción necesaria para aplicarla a la caracterización inequívoca de compuestos inorgánicos y orgánicos a partir de los espectros.
- Ser capaz de relacionar los efectos estereoelectrónicos con la estructura química.
- Comprender las propiedades estructurales y la reactividad de los compuestos y de los grupos funcionales orgánicos e inorgánicos, aplicándolos a la solución de problemas estructurales.

### Específicas

1. CE2-C. Conocimiento de los principios físico-químicos fundamentales que rigen a la Química y sus relaciones entre áreas de la Química.
2. CE2-H. Demostrar habilidades para identificar y resolver problemas cualitativos y cuantitativos con un enfoque estratégico.
3. 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

1. 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.
2. CB-5. Haber desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores en Química con un alto grado de autonomía.

## 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 de absorción de Infrarrojos.
- Espectrometría de masas.
- Resonancia Magnética Nuclear

### Contenidos temáticos

Tema 1. Revisión de la simetría





Año académico	2011-12
Asignatura	21415 - Determinación Estructural
Grupo	Grupo 1, 2S, GQUI
Guía docente	B
Idioma	Castellano

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

Principios de funcionamiento del microscopio electrónico.- Formación de la imagen.- Imagen de red.- Difracción de electrones: SAED, LEED y RHEED.- CBED.- Microscopía electrónica de barrido.- Microsonda electrónica.

#### Tema 4. Espectroscopía de fotoelectrones

Principios elementales.- Espectroscopías XPS, UPS y Auger: Aplicación a la determinación estructural.- Desplazamiento químico.- Estructura fina en UPS.- Técnicas de resolución espacial: ARPES.- 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 a la 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 tendrá a su disposición una comunicación en línea y a distancia con el profesor, un calendario de noticias de interés, documentos electrónicos, enlaces a Internet y propuestas de trabajo autónomo tanto para ser evaluados como para ayudar en las actividades de preparación de los temas.

## Actividades de trabajo presencial





Año académico	2011-12
Asignatura	21415 - Determinación Estructural
Grupo	Grupo 1, 2S, GQUI
Guía docente	B
Idioma	Castellano

Modalidad	Nombre	Tip. agr.	Descripción
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. Las clases magistrales constarán de 44 sesiones de 1 hora cada una.
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 expuestos en las clases teóricas. El alumno resolverá, de forma individual o en grupos reducidos, ejercicios y problemas sobre los contenidos expuestos en clase. Las clases de seminarios constan de 9 sesiones de 1 hora cada una.
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. Cada uno de los exámenes tendrá una duración de 1h. 30 minutos.

### Actividades de trabajo no presencial

Modalidad	Nombre	Descripción
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 habrá de profundizar en la materia. Para facilitar este trabajo, se indicará en cada tema los manuales de referencia que se han de consultar.
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 entregar un informe sobre el trabajo realizado al profesor. Una vez finalizada la actividad, las soluciones a los problemas planteados estarán a disposición del alumnado.

### Estimación del volumen de trabajo

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

Modalidad	Nombre	Horas	ECTS	%
<b>Actividades de trabajo presencial</b>		<b>60</b>	<b>2.4</b>	<b>40</b>
Clases teóricas	Clases Magistrales	47	1.88	31.33
<b>Total</b>		<b>150</b>	<b>6</b>	<b>100</b>



Año académico	2011-12
Asignatura	21415 - Determinación Estructural
Grupo	Grupo 1, 2S, GQUI
Guía docente	B
Idioma	Castellano

Modalidad	Nombre	Horas	ECTS	%
Seminarios y talleres	Resolución de problemas	10	0.4	6.67
Evaluación	Exámen Parcial	3	0.12	2
<b>Actividades de trabajo no presencial</b>		<b>90</b>	<b>3.6</b>	<b>60</b>
Estudio y trabajo autónomo individual	Preparación de las unidades didácticas	50	2	33.33
Estudio y trabajo autónomo individual	Resolución de problemas	40	1.6	26.67
<b>Total</b>		<b>150</b>	<b>6</b>	<b>100</b>

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 Campus Extens.

## Evaluación del aprendizaje del estudiante

Las competencias establecidas en la asignatura serán evaluadas mediante la aplicación de una serie de procedimientos de evaluación. En la tabla del presente apartado se describe para cada procedimiento de evaluación, la tipología (recuperable o no recuperable), los criterios de evaluación y su peso en la calificación de la asignatura según el itinerario evaluativo.

El alumno obtendrá una calificación numérica entre 0 y 10 puntos para cada actividad evaluativa, la cual será ponderada según su peso, a fin de obtener la calificación global de la asignatura. Para superar la asignatura, el alumno ha de obtener un mínimo de 4 puntos sobre 10 en cada una de las actividades evaluables y de 5 puntos sobre 10 mediante la suma ponderada de todas las actividades realizadas.

Finalmente, los estudiantes que no alcancen la calificación mínima de 5 puntos para superar la asignatura, podrán hacer en el periodo de evaluación extraordinaria de septiembre 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 de septiembre.

### Exámen Parcial

Modalidad	Evaluación
Técnica	Pruebas objetivas ( <b>Recuperable</b> )
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 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. Cada uno de los exámenes tendrá una duración de 1h. 30 minutos.
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% para el itinerario A



Año académico	2011-12
Asignatura	21415 - Determinación Estructural
Grupo	Grupo 1, 2S, GQUI
Guía docente	B
Idioma	Castellano

### Resolución de problemas

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo individual
Técnica	Pruebas objetivas ( <b>No recuperable</b> )
Descripción	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 entregar un informe sobre el trabajo realizado al profesor. Una vez finalizada la actividad, las soluciones a los problemas planteados estarán a disposición del alumnado.
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% para el itinerario A

### 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. Harwoog, Timothy D. W: Claridge, Oxford 1997. ISBN 0-19-855755-8.
- Introduccion 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.

