



Proyecto/Guía docente de la asignatura

Se debe indicar de forma fiel como va a ser desarrollada la docencia en la Nueva Normalidad. Esta guía debe ser elaborada teniendo en cuenta todos los profesores de la asignatura. Conocidos los espacios y profesorado disponible, se debe buscar la máxima presencialidad posible del estudiante siempre respetando las capacidades de los espacios asignados por el centro y justificando todas las adaptaciones que se realicen respecto a la memoria de verificación Si la docencia de alguna asignatura fuese en parte online, deben respetarse los horarios tanto de clase como de tutorías).

Asignatura	MÉTODOS DE DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL		
Materia			
Módulo			
Titulación	Grado en Química		
Plan	611	Código	
Periodo de impartición		Tipo/Carácter	Optativa
Nivel/Ciclo		Curso	4º
Créditos ECTS	6		
Lengua en que se imparte	Español		
Profesor/es responsable/s	Juan A. Casares González, Camino Bartolomé Albistegui		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	juanangel.casares@uva.es; camino.bartolome@uva.es		
Departamento	Química Física y Química Inorgánica		
Fecha de revisión por el Comité de Título	17/07/2023		



1. Situación / Sentido de la Asignatura

Conocer los métodos de caracterización molecular básicos. Esto es necesario para cualquier actividad profesional que tenga que ver con la investigación científica, con la síntesis industrial de productos químicos y con el control de calidad.

1.1 Contextualización

La asignatura se imparte en cuarto curso, una vez que el alumno ha superado las asignaturas básicas de Química y conoce los aspectos básicos de enlace y estructura molecular.

1.2 Relación con otras materias

La asignatura está relacionada con todas las asignaturas que incluyan aspectos de espectroscopia, química orgánica y química inorgánica.

1.3 Prerrequisitos

Es muy recomendable haber superado las asignaturas:

Química Inorgánica I, Química Inorgánica II, y Química Inorgánica III

Química Orgánica I y II



2. Competencias

Las que aparecen definidas en el plan de estudios

2.1 Generales

- G1 Ser capaz de comunicarse con corrección tanto de forma oral como escrita.
- G2 Ser capaz de resolver problemas tanto de naturaleza cualitativa como cuantitativa y de tomar decisiones.
- G3 Ser capaz de encontrar y manejar información, tanto de fuentes primarias como secundarias.
- G4 Ser capaz de trabajar de forma eficaz y autónoma mediante la planificación y la organización de su trabajo y de su tiempo.
- G6 Conseguir usar con destreza las tecnologías de la información, en lo que se refiere al software más habitual, recursos audiovisuales e Internet.
- G7 Alcanzar un manejo del idioma inglés suficiente para leer y comunicarse, en aspectos generales y también específicos de su campo científico.
- G8 Poseer los hábitos, capacidad de aprendizaje y autonomía necesarios para proseguir su formación posterior.
- G9 Conocer y apreciar las responsabilidades éticas y profesionales

2.2 Específicas

- EC7 Conocer los métodos fundamentales de análisis y caracterización estructural de compuestos químicos.
- EC8 Reconocer aquellos aspectos dentro de la química que son interdisciplinares o que suponen una frontera en el conocimiento.
- EH1 Ser capaz de demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías esenciales en relación con la química.
- EH2 Ser capaz de aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.
- EH3 Ser capaz de reconocer y analizar un problema y plantear estrategias para su resolución.
- EH4 Ser capaz de analizar, interpretar y evaluar información química y datos químicos.
- EH5 Ser capaz de comunicar información química y argumentar sobre ella.
- EH6 Manejar las herramientas computacionales y de tecnología de la información básicas para el procesamiento de datos e información química.



3. Objetivos

Tras cursar la asignatura los alumnos han de:

Conocer los conceptos básicos de caracterización estructural y de estudio del comportamiento molecular en disolución, así como los fundamentos teóricos de las técnicas más importantes. Conocer y saber aplicar a la resolución de problemas concretos las técnicas espectroscópicas y no espectroscópicas que permitan establecer todos los parámetros estructurales de moléculas discretas, entre los que destacan: peso molecular, geometría, estereoquímica y conformación. Además deben saber el efecto que los fenómenos que se producen en disolución (de asociación, equilibrios, cambios geométricos y conformacionales, etc.) tienen en los resultados de la aplicación de las distintas técnicas.

Ser capaces de plantear la resolución de problemas prácticos, seleccionar los métodos más adecuados a cada caso, aplicarlos e interpretar los resultados de su aplicación. Saber compilar, comprender y utilizar la información bibliográfica, reciente y antigua, referida a la caracterización estructural de moléculas problema o de técnicas concretas.





4. Contenidos y/o bloques temáticos

Técnicas de caracterización espectroscópicas

- a) IR
- b) RMN
- c) RSE
- e) Otras técnicas espectroscópicas

Técnicas de caracterización no espectroscópicas.

Aplicación individualizada de técnicas a la resolución de problemas sencillos.

Uso combinado de técnicas de caracterización para la resolución de problemas complejos.

Métodos docentes

Actividades presenciales

Clases expositivas:

Aproximadamente la mitad de la asignatura se emplea en repasar y profundizar en los aspectos teóricos de las técnicas de caracterización.

Seminarios de resolución de problemas:

Se dedica aproximadamente un 50% del tiempo a resolver, en el aula, problemas de determinación estructural aplicando las técnicas estudiadas en el curso. Los alumnos, en pequeños grupos, resuelven los problemas propuestos guiados por los profesores hasta alcanzar la destreza necesaria para resolverlos de forma autónoma. Los alumnos desarrollan la habilidad de resolver, por sí, mismos problemas estructurales complejos.

Actividades no presenciales

Los alumnos han de complementar de forma no presencial la resolución de algunos casos de determinación estructural.

Evaluación

La evaluación consistirá en un examen final en que tendrán que responder algunas preguntas (30%) y resolver problemas de determinación estructural (70%)

g. Bibliografía básica

Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry. D. W. H. Rankin /N. W. Mitzel, C. Morrison
Nmr And Chemistry : An Introduction To Modern Nmr Spectroscopy / J.W. Akitt, B.E. Mann
Nmr In Organometallic Chemistry / Paul S. Pregosin

h. Bibliografía complementaria

Multidimensional NMR Methods For The Solution State / Editors: Gareth A. Morris, James W. Emsley
Nuclear Magnetic Resonance / P.J. Hore
Modern Nmr Spectroscopy : A Guide For Chemists / Jeremy K.M. Sanders And Brian K. Hunter

Acceso a bibliografía completa en:

https://buc-uva.alma.exlibrisgroup.com/leganto/public/34BUC_UVA/lists?courseCode=45968&auth=SAML

i. Recursos necesarios

La asignatura se desarrolla de forma eminentemente práctica. Por ello todos los recursos están orientados a ayudar al estudiante a resolver los problemas propuestos.

Apuntes



Se ha preparado una completa colección de apuntes de la asignatura que se pone a disposición de los alumnos (reprografía) al comenzar el curso.

Temas preparados en presentación (PowerPoint)

La presentación de los distintos temas a los estudiantes en el aula se realiza mediante presentaciones con diapositivas en formato electrónico. Estas diapositivas están directamente extraídas de los apuntes (más completos) que se entregan a los alumnos.

Colecciones de problemas

Se pone a disposición de los alumnos (reprografía) una serie de colecciones de problemas relativos a uso, por separado o combinado, de las distintas técnicas estudiadas en el curso.

Exámenes de años anteriores

En la última parte del curso se pone a disposición de los alumnos, y se resuelven en clase, algunos exámenes de la asignatura de cursos anteriores.

j. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
6 ECTS	Semanas 1 a 15

Añada tantas páginas como bloques temáticos considere realizar.

6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teóricas	30	Estudio y trabajo autónomo individual	70
Clases prácticas 30	30		
Seminarios	10		
Otras actividades	10		
Total presencial	80	Total no presencial	70



7. Sistema y características de la evaluación

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Examen escrito	100%	

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:**
 - Obtener al menos una calificación de 5 sobre 10 en el examen
- **Convocatoria extraordinaria:**
 - Obtener al menos una calificación de 5 sobre 10 en el examen

8. Consideraciones finales

