

ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

MATERIA: Química Orgánica

MÓDULO: Química

ESTUDIOS: Grado en Química

Página 1 de 6

CARACTERÍSTICAS GENERALES*

Tipo: Formación básica, Obligatoria, Optativa
 Trabajo de fin de grado, Prácticas externas

Duración: Semestral

Semestre/s: 7 u 8

Número de créditos ECTS: 5

Idioma/s: Castellano, Catalán e Inglés

DESCRIPCIÓN

BREVE DESCRIPCIÓN Y JUSTIFICACIÓN

Se presentan las principales técnicas espectroscópicas que se emplean en la actualidad para la determinación de la estructura de los compuestos orgánicos, dedicando especial atención a IR, RMN y EM. Para cada una de las técnicas, se explica el fundamento físico, los tipos de instrumentos empleados y su funcionamiento, la preparación de muestra necesaria y los parámetros espectrales, se detallan las características espectrales de los principales tipos de moléculas orgánicas y se afianzan los conocimientos mediante ejercicios específicos para cada técnica. Finalmente, se discuten y resuelven problemas que precisan el empleo conjunto de varias de estas técnicas, resaltando su carácter complementario.

COMPETENCIAS

- Ser capaz de comprender y aplicar los conocimientos de Química Orgánica (estructura, reactividad, estereoquímica,...) y Determinación Estructural (IR, RMN, UV-Vis, EM) en la práctica de las Ciencias Químicas y Biomoleculares (**E2.1, MECES-1**)
- Ser capaz de utilizar las técnicas de experimentación propias de la Química Orgánica (**E5, MECES-2**)
- Ser capaz de identificar, formular y resolver problemas típicos de Química Orgánica (mecanismos de reacción, predicción de productos de reacción, problemas sintéticos, etc) y de Determinación Estructural (IR, RMN, UV-Vis, EM) (**E7.2, MECES-2**)
- Ser capaz de comunicarse eficientemente tanto de forma oral como escrita (**T1, MECES-4**)

REQUISITOS PREVIOS*

Las competencias propias de las etapas educativas anteriores.

Química, Química Orgánica, Química-Física.

CONOCIMIENTOS PREVIOS: Nociones sobre teoría atómica, mecánica cuántica, hibridaciones del carbono, enlace covalente y método de la resonancia.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

MATERIA: Química Orgánica

MÓDULO: Química

ESTUDIOS: Grado en Química

Página 2 de 6

CONTENIDOS

0.- Espectroscopia.

Definición y Clasificación de las espectroscopias. Radiación electromagnética. Interacción radiación-materia: absorción y emisión estimulada (láser). Coeficientes de Einstein y emisión espontánea. Perturbaciones dependientes del tiempo. Momento dipolar de la transición y reglas de selección. Actividad óptica.

1.- Espectrometría de masas (EM).

Fundamento y técnica. Métodos de ionización. Resolución e instrumentación. Determinación de la fórmula molecular, tipos de iones e isótopos. Marcaje isotópico. Procesos de fragmentación y reordenamiento. Fragmentaciones típicas asociadas a grupos funcionales. Interpretación de espectros.

2.- Espectroscopia UV-Vis.

Espectroscopia electrónica, Fundamento y técnica (instrumentación), reglas de selección, fluorescencia y fosforescencia. Cromóforos y auxocromos, efectos de la conjugación. Absorción característica de grupos funcionales y compuestos.

3.- Espectroscopia Infrarroja (IR).

Fundamento y técnica, oscilador armónico, funciones y valores propios, reglas de selección, (IR y Raman rotovibracional) modos normales de vibración y frecuencias características. Instrumentación y preparación de muestra. Interpretación de espectros, grupos funcionales. IR cuantitativo.

4.- Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear (RMN)

Fundamento y técnica. Parámetros espectrales, acoplamiento, reglas de selección, perturbaciones de primer orden, equivalencia química y magnética (quiralidad), espectros de segundo orden, multipletes (diagramas de Karplus), protones en heteroátomos, desacoplamientos, tiempo de relajación y efecto NOE. Interpretación de espectros ^1H -RMN y ^{13}C -RMN, efectos de los sustituyentes y tablas. Introducción a la 2D-RMN: correlación homonuclear a través de enlaces (COSY) y a través del espacio (NOESY), correlación heteronuclear a través de un enlace (HSQC, HMQC).

5.- Ejercicios de Elucidación estructural por métodos espectroscópicos.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

MATERIA: Química Orgánica

MÓDULO: Química

ESTUDIOS: Grado en Química

Página 3 de 6

METODOLOGÍA

ACTIVIDADES FORMATIVAS* (Completar la tabla relacionando actividades, carga de trabajo, en créditos ECTS, y competencias.)

Actividades formativas	ECTS	Competencias
Sesiones de exposición de conceptos	0,7	E2.1, E7.2
Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos	0,7	E2.1, E7.2
Seminarios	0,2	E2.1, E7.2
Trabajo práctico / laboratorio	0,9	E5, T1
Actividades de estudio personal por parte de los estudiantes, que incluyen también la preparación de tareas relacionadas con las otras actividades, y la preparación de exámenes.	2.4	E2.1, E7.2
Actividades de evaluación (exámenes, controles de seguimiento...)	0,1	E2.1, E5, E7.2, T1
TOTAL	5	

EXPLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA

Sesiones de exposición de conceptos: Exposición de contenidos mediante presentación o explicación (posiblemente incluyendo demostraciones) por parte de un profesor

Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos: Resolución de ejercicios, planteamiento/resolución de problemas y exposición/discusión de casos por parte de un profesor con la participación activa de los estudiantes.

Seminarios: Instrucción realizada por un profesor con el objetivo de revisar, discutir y resolver dudas sobre los materiales y temas presentados en las sesiones de exposición de conceptos y sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos.

Trabajo práctico / laboratorio: Periodo de realización de actividades de laboratorio o similar (prácticas con ordenador, proyectos, talleres, etc.) por parte del estudiante, bajo la supervisión directa de un profesor.

Actividades de estudio personal: Trabajo personal del estudiante necesario para adquirir las competencias de cada Materia y asimilar los conocimientos expuestos en las sesiones de exposición de conceptos y sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos, utilizando, cuando sea necesario, el material recomendado de consulta.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

MATERIA: Química Orgánica

MÓDULO: Química

ESTUDIOS: Grado en Química

Página 4 de 6

Actividades de evaluación (exámenes, controles de seguimiento): Pruebas orales y / o escritas realizadas durante el periodo lectivo de una asignatura o una vez finalizada la misma.

EVALUACIÓN

MÉTODOS DE EVALUACIÓN* (Completar la tabla relacionando métodos de evaluación, competencias y peso en la calificación de la asignatura.)

Métodos de evaluación	%	Competencias
Exámenes Finales	50	E2.1, E7.2
Trabajo experimental o de campo	20	E5, T1
Actividades de seguimiento del aprendizaje	25	E2.1, E7.2
Participación	5	

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- 1. Demostrar comprensión y capacidad de aplicación** de los conocimientos de Química Orgánica (estructura, reactividad, estereoquímica,...) y Determinación Estructural (IR, RMN, UV-Vis, EM) en la práctica de las Ciencias Químicas y Biomoleculares (**E2.1, MECES-1**)
- Saber utilizar las técnicas de experimentación propias de la Química Orgánica (**E5, MECES-2**)
- Identificar, formular y resolver problemas** típicos de Química Orgánica (mecanismos de reacción, predicción de productos de reacción, problemas sintéticos, etc) y de Determinación Estructural (IR, RMN, UV-Vis, EM) (**E7.2, MECES-2**)
- Saber de comunicarse eficientemente tanto de forma oral como escrita (**T1, MECES-4**)

CALIFICACIÓN

La primera calificación del alumno, siempre en evaluación continua, se obtiene mediante la media ponderada de los distintos métodos de evaluación reflejados en la tabla anterior:

50% Examen final (teoría + problemas)

25% promedio de los exámenes y actividades de seguimiento realizados en hora de clase

20% Trabajo experimental

5% Participación en clase

Para la recuperación de la asignatura en convocatorias posteriores, la mejor calificación entre i) la obtenida en el examen de recuperación (teórico-práctico) y ii) su inclusión como sustituto del examen final en el baremo anterior.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

MATERIA: Química Orgánica

MÓDULO: Química

ESTUDIOS: Grado en Química

Página 5 de 6

EVALUACIÓN DE LAS COMPETENCIAS

Para la evaluación de las competencias E2.1 y E7.2 se usará como indicador la nota de los exámenes y actividades de seguimiento.

Para la evaluación de las competencias E5 y T1 se usará como indicador la nota del trabajo experimental

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA:

- M. Hesse, H. Meier y B. Zeeh, *Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica*, 2ª edición, Ed. Síntesis, Madrid, 2005. ISBN: 9788477385226

BIBLIOGRAFÍA o MATERIAL COMPLEMENTARIO:

- E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Afholter, A. Herrera y R. Martínez, *Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos*, Springer-Verlag Ibérica, Barcelona, 2001.
- R.M. Silverstein y G.C. Clayton, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 5ª edición, John Wiley & Sons, New York, 1991.
- J.B. Lambert, H.F. Shurvell, D.A. Lightner y R.G. Cooks, *Introduction to Organic Spectroscopy*, Macmillan, New York, 1987.
- N.B. Colthup, L.H. Daly y S.E. Wiberley, *Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy*, 3ª edición, Academic Press, San Diego, 1990.
- S.A. Richards & J.C. Hollerton, *Essential Practical NMR for Organic Chemistry*, Wiley, 2011. ISBN: 978-0-470-71092
- H. Friebolin, *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, 2ª edición, VCH, Weinheim, 1993.
- P.J. Hore, *Nuclear Magnetic Resonance (Oxford chemistry primers; 32)*, Oxford University Press, Oxford, 1995.
- J.K.M. Sanders y B.K. Hunter, *Modern NMR Spectroscopy – A Guide for Chemists*, 2ª edición, Oxford University Press, Oxford, 1993.
- E. Breitmaier, *Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. A Practical Guide*, John Wiley & Sons, Chichester, 1993.
- W. Borchardt-Ott, *Crystallography*, 2ª edición, Springer Verlag, 1995
- M.F.C. Ladd y R.A. Palmer, *Structure Determination by X-Ray Crystallography*, 3ª edición, Plenum Press, New York, 1994.
- M. Van Meerssche, M. y J. Feneau-Dupont, *Introduction à la cristallographie et à la chimie structurale*, 3ª edición, Peeters, Leuven, 1984.
- L.D. Field, S. Sternhell y J.R. Kalman, *Organic Structures from Spectra*, 2ª edición, John Wiley & Sons, Chichester, 1995.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

MATERIA: Química Orgánica

MÓDULO: Química

ESTUDIOS: Grado en Química

Página 6 de 6

BASES de DATOS:

- Spectral Database for Organic Compounds, SDBS. National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Japan. http://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi?lang=eng
- NIST Chemistry WebBook. National Institute of Standards and Technology, U.S. Department of Commerce. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

HISTÓRICO DEL DOCUMENTO

MODIFICACIONES ANTERIORES (Indicar fecha y autor/es, las más recientes primero)

7 de Julio de 2015, Dr. Jordi Teixidó i Closa, Dr. Jordi Diaz Ferrero

26 de Julio de 2011, Dr. Jordi Teixidó i Closa, Dr. José I. Borrell Bilbao

ÚLTIMA REVISIÓN (Indicar fecha y autor/es.)

25 de Agosto de 2017, Dr. Jordi Teixidó i Closa, Dr. Jordi Diaz Ferrero

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).