



Asignatura: DETERMINACION ESTRUCTURAL
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

ASIGNATURA / COURSE TITLE

DETERMINACION ESTRUCTURAL / STRUCTURAL DETERMINATION

1.1. Código / Course number

16367

1.2. Materia / Content area

DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL / STRUCTURAL DETERMINATION

1.3. Tipo / Course type

Formación obligatoria / Compulsory subject

1.4. Nivel / Course level

Grado / Grade

1.5. Curso / Year

3º / 3rd

1.6. Semestre / Semester

Primero / First (Fall semester)

1.7. Idioma / language

Español. Se emplea también Inglés en material docente / In addition to Spanish, some teaching material is given in English.

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Se recomienda haber superado las asignaturas Química General I y II, Química Inorgánica I y II y Química Orgánica I y II. Los estudiantes deben tener un nivel de inglés que les permita comprender la bibliografía de consulta en dicha lengua. / It is recommended that students have passed the courses General Chemistry I and II, Inorganic Chemistry I and II and Organic Chemistry I and II. Students must have a suitable level of English to read references in this language.



Asignatura: DETERMINACION ESTRUCTURAL
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las actividades presenciales es obligatoria. En particular, se controlará sistemáticamente la asistencia a las clases prácticas en aula. / **Attendance is mandatory.**

1.10. Datos del equipo docente / **Faculty data**

Coordinador:

David Tudela Moreno

Departamento de: Química Inorgánica / **Department of Inorganic Chemistry**

Facultad / **Faculty:** Ciencias

Despacho - Módulo / **Office - Module** 07-608

Teléfono / **Phone:** +34 91 497 4845

Correo electrónico/**Email:** david.tudela@uam.es

Página web/Website: http://www.uam.es/grado_quimica

Horario de atención al alumnado/**Office hours:** En cualquier horario previa petición de hora.

Enlace al profesorado del Grado en Química de la web:

<http://www.uam.es/ss/Satellite/Ciencias/es/1242671472425/listadoCombo/Profesorado.htm>

1.11. Objetivos del curso / **Course objectives**

El objetivo de la asignatura es conseguir, a través de la metodología docente empleada y las actividades formativas desarrolladas a lo largo del curso, que el estudiante, al superar la asignatura, sea capaz de:

- Asignar las bandas más importantes del espectro IR de compuestos orgánicos, identificando los grupos funcionales y otros detalles estructurales compatibles con el espectro.
- Utilizar los espectros IR y Raman de compuestos inorgánicos para deducir detalles estructurales como su geometría y el modo de coordinación de ligandos.
- Identificar el método de ionización más apropiado para determinar el peso molecular de diferentes compuestos orgánicos mediante espectrometría de masas y obtener información sobre su composición a partir del ion molecular y sus picos isotópicos.
- Interpretar los espectros de masas (impacto electrónico) de compuestos orgánicos en base a las rupturas y transposiciones más importantes,



identificando los fragmentos compatibles con un compuesto determinado.

- Determinar los parámetros correspondientes a las señales de los espectros de RMN (^1H y ^{13}C) y predecir sus valores en aparatos de diferente campo magnético.
- Justificar y predecir el número de señales, su desplazamiento químico, multiplicidad y constantes de acoplamiento en el espectro de ^1H -RMN de un compuesto químico, asignando las señales del espectro y distinguiendo entre posibles estructuras.
- Justificar y predecir el número de señales y su desplazamiento químico, en el espectro de ^{13}C -RMN de un compuesto químico, asignando las señales del espectro y distinguiendo entre posibles estructuras.
- Deducir la estructura de compuestos químicos sencillos utilizando la espectrometría de masas y las espectroscopias IR y RMN (^1H y ^{13}C).

Estos resultados de aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del título:

Básicas y generales

CB1.- Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio

CB2.- Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio

CG1.- Aplicar los principios del método científico

CG2.- Buscar información en las fuentes bibliográficas adecuadas

Transversales

CT1.- Poseer capacidad para analizar información y sintetizar conceptos

CT2.- Ser capaz de adaptarse a nuevas situaciones y tomar decisiones

CT3.- Demostrar autonomía y capacidad para gestionar el tiempo y la información

Específicas

CE3.- Utilizar los principios y procedimientos habituales en el análisis y caracterización de compuestos químicos

CE4.- Obtener información estructural de los compuestos químicos mediante las técnicas espectroscópicas y estructurales adecuadas

CE10.- Reconocer las características específicas de la estructura y propiedades de los compuestos de coordinación



Asignatura: DETERMINACION ESTRUCTURAL
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

CE11.- Reconocer las propiedades de compuestos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos y organometálicos

CE16.- Reconocer y analizar nuevos problemas químicos, planteando estrategias para solucionarlos: evaluación, interpretación y síntesis de datos

CE21.- Interpretar los hechos experimentales, relacionándolos con la teoría adecuada

CE23.- Realizar cálculos numéricos, con el uso correcto de unidades y análisis de errores

1.12. Contenidos del programa / **Course contents**

Tema 1.- ESPECTROSCOPIA DE INFRARROJO Y RAMAN

Procesos vibracionales. Moléculas diatómicas y poliatómicas. Modos de vibración molecular. Grupos puntuales de simetría. Reglas de selección. Instrumentación y preparación de muestras. Aplicaciones.

Tema 2.- ESPECTROS DE IR DE COMPUESTOS ORGANICOS

Zonas de vibración características. Factores que influyen sobre las frecuencias de grupo. Principales grupos funcionales y frecuencias características. Enlace de hidrógeno.

Tema 3.- ESPECTROS DE IR Y RAMAN DE COMPUESTOS INORGANICOS

Frecuencias características de compuestos de coordinación y organometálicos. Modo de coordinación de ligandos. Estereoquímica en torno al átomo central.

Tema 4.- ESPECTROMETRÍA DE MASAS

Fundamentos. Técnicas experimentales en espectrometría de masas. Métodos de producción de iones: Impacto electrónico. Ionización química. Ionización por desorción. Ionización por pulverización. Métodos de separación de iones. Apariencia de los espectros de masas: Influencia del método de ionización.

Tema 5.- TIPOS DE IONES Y SU SIGNIFICACIÓN

El ion molecular. Picos isotópicos. Masa exacta. Determinación de la fórmula molecular y composición elemental. Iones fragmento.

Tema 6.-MECANISMOS DE FRAGMENTACIÓN INDUCIDOS POR IMPACTO ELECTRÓNICO

Tipos de fragmentación: homolítica y heterolítica. Fragmentaciones concertadas: retro Diels-Alder, migraciones de hidrógeno y otros grupos. Factores que influyen en la fragmentación. Interpretación de espectros: Fragmentaciones genéricas de los diferentes tipos de compuestos orgánicos.



Asignatura: DETERMINACION ESTRUCTURAL
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

Tema 7.- RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

Aspectos generales. Descripción básica del fenómeno de la RMN. Aspectos experimentales. Instrumentación. Frecuencias de resonancia de los núcleos más importantes. Pulsos de radiofrecuencia y Transformada de Fourier.

Tema 8.- EL DESPLAZAMIENTO QUIMICO

Origen del desplazamiento químico. Apantallamiento. Escala de desplazamiento químico. Factores que influyen sobre el desplazamiento químico de los núcleos más importantes. Estimación de los desplazamientos: Reglas empíricas. Número de señales: Equivalencia de núcleos.

Tema 9.- ACOPLAMIENTOS ESPIN-ESPIN

Origen del acoplamiento. Reglas de desdoblamiento simple. Sistemas complejos de espín. Transmisión del acoplamiento. Factores que influyen sobre las constantes de acoplamiento. Constantes de acoplamiento geminal, vecinal y de largo alcance. Acoplamiento de ^1H con otros núcleos magnéticos. Acoplamiento de ^1H intercambiables. Equivalencia química y equivalencia magnética. Ayudas en el análisis de los espectros: Sustitución isotópica. Técnicas de doble resonancia. Cambio de disolvente y/o temperatura. Efecto nuclear Overhauser.

Tema 10.- RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR DE ^{13}C -RMN

Comparación cualitativa de los desplazamientos químicos de ^1H y ^{13}C . Tipos de espectros de ^{13}C -RMN. Efectos que influyen en el desplazamiento químico de ^{13}C .

Tema 11.- RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR BIDIMENSIONAL

Introducción a la RMN bidimensional y técnicas bidimensionales más comunes. Correlaciones homonucleares proton-proton y heteronucleares proton-heteronúcleo. Problemas y casos prácticos.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Textos:

- “*Spectrometric Identification of Organic Compounds*”, R.M. Silverstein, F.X. Webster y D. Kiemle, 7th Ed., John Wiley and Sons, 2004.
- “*Organic Structural Spectroscopy*”, J.B. Lambert, H.F. Shurvell, D.A. Lightner y R.G. Cooks, Prentice-Hall Inc., 1998.
- “*Organic Structure Analysis*”, P. Crews, J. Rodriguez y M. Jaspars, Oxford University Press, 1998.
- “*NMR and Chemistry: An introduction to modern NMR spectroscopy*”, J.W. Akitt y B.E. Mann, 4th Ed. Stanley Thornes, 2000.



Asignatura: DETERMINACION ESTRUCTURAL
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

- “*Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*”, H. Friebolin, 5th Ed., Wiley-VCH, 2010.
- “*Problems in Organic Structure Determination: A Practical Approach to NMR Spectroscopy*”, R. G. Linington, P. G. Williams y J. B. MacMillan, CRC Press, 2016.
- “*Interpreting Organic Spectra*”, D. Whittaker, Royal Society of Chemistry, 2000.
- “*Organic Structures from Spectra*”, L. D. Field, S. Sternhell y J. R. Kalman, 4rd Ed., John Wiley, 2008.
- “*Métodos espectroscópicos en química orgánica*”, M. Hesse, H. Meier y B. Zeeh, Síntesis, 1997.
- “*Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*”, K. Nakamoto, 6th Ed., John Wiley and Sons, 2009.

Libro de tablas:

- “*Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos*”. E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera y R. Martínez, Editorial Masson, Barcelona, 2004.

2. Métodos docentes / Teaching methodology

2a. Actividades Formativas

Presenciales:

Clases teóricas participativas, clases prácticas en aula y tutorías individuales y/o en grupos reducidos.

No presenciales:

Estudio y trabajo autónomo individual.

2b. Metodologías Docentes

Método expositivo y resolución de cuestiones, ejercicios y problemas.

2c. Desarrollo de la dinámica docente

En el desarrollo de la asignatura se utilizarán una combinación de procedimientos de enseñanza/aprendizaje, abarcando clases teóricas participativas con gran contenido en aspectos teóricos y explicación de conceptos generales, aunque incluyendo su aplicación a casos concretos, clases prácticas en aula de carácter esencialmente aplicado y participación más



directa del estudiante, la resolución de problemas específicos y la docencia en red a través de la página de la asignatura (Moodle).

1. Clases teóricas participativas: Aproximadamente 32 horas.

En ellas se introducirán los principales conceptos y contenidos teóricos de la asignatura. El contenido de cada tema estará bien planificado en cuanto a extensión y grado de profundidad, de modo que se pueda fomentar la interacción con el estudiante mediante la formulación de preguntas de aplicación directa de los conceptos explicados y la resolución de dudas. La asimilación de estas clases permitirá disponer de los conocimientos necesarios para abordar su aplicación a la resolución de problemas concretos en las clases prácticas en aula, si bien se trabajará también en la resolución de problemas en las propias clases teóricas. El objetivo será contribuir a que los alumnos adquieran las competencias **CB1, CE3, CE4, CE10 y CE11**.

2. Clases prácticas en aula: Aproximadamente 18 horas.

En ellas el estudiante participará de forma mucho más activa, tanto a nivel individual como en grupo. Preferentemente, en estas clases prácticas se resolverán cuestiones y problemas propuestos por el profesor que contribuirán de forma decisiva a la consolidación e integración de los conceptos y conocimientos impartidos en las clases teóricas. Los ejercicios propuestos y cualquier otro material necesario se entregarán con la suficiente antelación a la clase de seminario. Se propondrán ejercicios que faciliten la aplicación de los conocimientos adquiridos y ayuden a resolver las dudas que se le puedan plantear al alumno al avanzar en la asignatura. Se fomentará que el alumno relacione de forma integrada los datos proporcionados por cada una de las técnicas y que aprenda a elegir la técnica más adecuada para la resolución de un problema estructural concreto. El objetivo será contribuir a que los alumnos adquieran las competencias **CB2, CG1, CT1, CT2, CT3, CE3, CE4, CE10, CE11, CE16, CE21 y CE23**.

3. Realización de trabajos individuales o en grupo:

Con anterioridad a las clases prácticas en aula, los estudiantes realizarán una serie de ejercicios que deberá entregar para su evaluación. Los ejercicios serán corregidos en las clases prácticas en aula, formando parte de la dinámica de las mismas. El objetivo será contribuir a que los alumnos adquieran las competencias **CB2, CG1, CG2, CT1, CT2, CT3, CE3, CE4, CE10, CE11, CE16, CE21 y CE23**.

4. Soporte en red:



Los alumnos podrán descargar de la página de Moodle las transparencias utilizadas en clase, así como los ejercicios que se les propongan con la periodicidad antes mencionada. Además, estará disponible en la red material suplementario como enunciados de exámenes de convocatorias anteriores, links de interés, etc.

5. Control:

Hacia la mitad del semestre los alumnos realizarán una breve prueba de conocimiento (1 h) para evaluar el grado de aprendizaje de la materia. Esta prueba de evaluación tendrá finalidad tanto formativa como sumativa y tendrá como consecuencia un incremento de las tutorías para resolver las dificultades de aprendizaje detectadas. El objetivo será contribuir a que los alumnos adquieran las competencias **CB1, CB2, CT3, CE3, CE4, CE10, CE11, CE16, CE21 y CE23.**

6. Tutorías:

Las tutorías se realizarán de forma individual o en grupos pequeños, a lo largo del curso con la finalidad de detectar y resolver las dificultades de aprendizaje. Además las tutorías permitirán el asesoramiento para la realización de las actividades del curso. El objetivo será contribuir a que los alumnos adquieran las competencias **CE3, CE4, CE16 y CE21.**

3. Tiempo de trabajo del estudiante / **Student workload**

Con carácter aproximado y dependiendo del calendario de cada curso académico, el tiempo dedicado por los estudiantes a las diferentes actividades formativas será el siguiente:

		Nº de horas	Porcentaje
Presencial	Clases teóricas	32 h (21,5 %)	37,5 %
	Clases prácticas en aula	18 h (12 %)	
	Tutorías	2 h (1,5 %)	
	Realización de pruebas de evaluación	4 h (2,5 %)	
	Total presencial	56 horas	
No presencial	Estudio semanal incluida realización de actividades prácticas	85 h (56,5 %)	62,5 %
	Preparación de pruebas de evaluación	9 h (6 %)	
	Total no presencial	94 h	
TOTAL		150 h	100 %



4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

El aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la materia. No obstante, teniendo en cuenta las características de la asignatura, cuyo objetivo final es que los estudiantes sean capaces de deducir estructuras, utilizando de forma integrada todas las técnicas estudiadas, el examen final debe tener el mayor peso en la calificación final. Por tanto, los métodos de evaluación utilizados y su contribución a la calificación final son los siguientes:

Sistema de Evaluación	Ponderación Convocatoria Ordinaria	Ponderación Convocatoria Extraordinaria
Evaluación de ejercicios entregados y participación	20 %	20 %
Control intermedio	10 %	-
Examen final	70 %	80 %

Evaluación de ejercicios entregados y participación: A lo largo de todo el curso se repartirán una serie de hojas de problemas que, con carácter obligatorio, el alumno deberá resolver fuera del horario de clase y entregar a su profesor en los plazos convenidos. Estos ejercicios serán calificados y se resolverán y discutirán con todo detalle durante las clases prácticas en aula. La participación directa de los alumnos en las clases de seminario formará parte igualmente de la calificación, por lo que su asistencia es obligatoria. Este componente de la calificación permite una evaluación continua de los estudiantes a lo largo del curso.

Control intermedio: En la fecha establecida antes del comienzo del curso y conocida por los alumnos, se realizará un control escrito de 50 minutos de duración, de forma individual, sobre la materia impartida hasta ese momento. Además de su contribución a la calificación de la convocatoria ordinaria, este control contribuirá a la evaluación formativa de los estudiantes, con tiempo suficiente para remediar posibles deficiencias de cara al examen final.

Examen final: Una vez finalizada la impartición de las clases, se realizará un examen final de unas 3 horas de duración sobre el conjunto de los contenidos de la asignatura. De esta manera se podrá evaluar la capacidad del estudiante



Asignatura: DETERMINACION ESTRUCTURAL
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

para aplicar, de manera integrada, las diferentes técnicas estructurales estudiadas. El alumno deberá obtener una calificación mínima de 4,0 en este examen para poder aplicar los otros procedimientos de evaluación indicados en la tabla.

El estudiante que haya participado en menos de un 15% de las actividades de evaluación, será calificado en la convocatoria ordinaria como “no evaluado”.

5. Cronograma* / Course calendar

BLOQUE TEMÁTICO	ESTIMACIÓN SEMANAS / BLOQUE
1-3 Espectroscopia IR y Raman	4
4-6 Espectrometría de Masas	2,5
7-11 Espectroscopia de RMN	7
Ejercicios combinados	1,5
TOTAL	15 SEMANAS

*Este cronograma tiene carácter orientativo.