



Guía Docente				
Datos Identificativos				2012/13
Asignatura (*)	Determinación Estructural	Código	610311403	
Titulación	Licenciado en Química			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
1º e 2º Ciclo	1º cuatrimestre	Cuarto	Troncal	6
Idioma	Castelán			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinación	Rodríguez Gonzalez, Jaime	Correo electrónico	jaime.rodriguez@udc.es	
Profesorado	Rodríguez Gonzalez, Jaime	Correo electrónico	jaime.rodriguez@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es			
Descrición xeral	Aplicación das técnicas espectroscópicas na determinación estrutural dos compostos orgánicos e inorgánicos			

Competencias da titulación	
Código	Competencias da titulación
A1	Utilizar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades.
A2	Deducir a variación das propiedades dos elementos químicos segundo a Táboa Periódica.
A4	Coñecer os tipos principais de reacción química e as súas principais características asociadas.
A6	Coñecer os elementos químicos e os seus compostos, as súas formas de obtención, estrutura, propiedades e reactividade.
A7	Coñecer e aplicar as técnicas analíticas.
A9	Coñecer os rasgos estruturais dos compostos químicos, incluíndo a estereoquímica, así como as principais técnicas de investigación estrutural.
A14	Demostrar o coñecemento e comprensión de conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química.
A15	Recoñecer e analizar novos problemas e planear estratexias para solucionarlos.
A16	Adquirir, avaliar e utilizar os datos e información bibliográfica e técnica relacionada coa Química.
A20	Interpretar os datos procedentes de observacións e medidas no laboratorio.
A21	Comprender os aspectos cualitativos e cuantitativos dos problemas químicos.
A22	Planificar, deseñar e desenvolver proxectos e experimentos.
A23	Desenvolver unha actitude crítica de perfeccionamento na labor experimental.
A25	Relacionar a Química con outras disciplinas e recoñecer e valorar os procesos químicos na vida diaria.
B1	Aprender a aprender.
B2	Resolver problemas de forma efectiva.
B3	Aplicar un pensamento crítico, lóxico e creativo.
B4	Traballar de forma autónoma con iniciativa.
B5	Traballar de forma colaborativa.
B6	Comportarse con ética e responsabilidade social como cidadán e como profesional.
B7	Comunicarse de maneira efectiva nun entorno de traballo.
C1	Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.
C2	Dominar a expresión e a comprensión de forma oral e escrita dun idioma estranxeiro.
C3	Utilizar as ferramentas básicas das tecnoloxías da información e as comunicacións (TIC) necesarias para o exercicio da súa profesión e para a aprendizaxe ao longo da súa vida.
C4	Desenvolverse para o exercicio dunha cidadanía aberta, culta, crítica, comprometida, democrática e solidaria, capaz de analizar a realidade, diagnosticar problemas, formular e implantar solucións baseadas no coñecemento e orientadas ao ben común.
C5	Entender a importancia da cultura emprendedora e coñecer os medios ao alcance das persoas emprendedoras.
C6	Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse.
C7	Asumir como profesional e cidadán a importancia da aprendizaxe ao longo da vida.
C8	Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.



Resultados da aprendizaxe

Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)	Competencias da titulación		
	A	B	C
Resolución de problemas estruturais mediante a análise dos espectros de RMN 1D e 2D (experimentos básicos), espectrometría de masas e espectroscopia de infravermello, e a súa utilización no seguimento dunha reacción química ou na elucidación dun composto descoñecido.	A1	B1	C1
	A2	B2	C2
	A4	B3	C3
	A6	B4	C4
	A7	B5	C5
	A14	B6	C6
	A16	B7	C7
	A20		C8
	A21		
	A22		
	A23		
A25			
Destreza na manipulación dos datos de RMN e a súa transformación en espectros mediante a utilización de programas de procesado.	A1	B2	C1
	A9	B3	C2
	A14	B4	C6
	A15		C8
	A16		
	A22		

Contidos

Temas	Subtemas
Tema 1. A utilización dos datos espectroscópicos na determinación estrutural de compostos orgánicos e inorgánicos.	Pureza, análise elemental e grao de insaturación. Os métodos espectroscópicos máis utilizados en química: escalas de tempo. Métodos non espectroscópicos.
Tema 2. Fundamentos e aplicacións da espectrometría de masas.	Instrumentación. A ionización electrónica. Reaccións de fragmentación. Transposicións. Isomerizacións. Determinación da masa molecular. Iões moleculares. Determinación da fórmula molecular. Picos isotópicos. Tipos de fragmentacións: Fragmentación en alfa; Fragmentación en beta; con transferencia de hidróxeno. Fragmentación en beta doutros grupos. Fragmentación con perda de molécula neutra. Fragmentacións máis características dos compostos orgánicos. Introducción a técnicas de ionización química. CI, FAB, APCI, ESI: Aplicacións para a obtención da fórmula molecular dun composto.
Tema 3. Espectroscopia Infravermella.	Introdución, preparación das mostras. Vibracións harmónicas e inarmónicas. Absorción da radiación por medio de vibracións moleculares. Vibracións de moléculas poliatómicas. Simetría dos modos normais de vibración. Factores que afectan á frecuencia. Frecuencias dos grupos funcionais orgánicos: zonas de vibración típicas de enlaces, C-H, C=O, compostos aromáticos, alcanos, alquenos, alquinos, alcois, éteres, compostos nitrogenados, aminas, amidas, nitrilos, nitrocompostos.
Tema 4. O fenómeno da RMN.	O fenómeno físico da RMN, condicións para a RMN. Núcleos máis estudados: ^1H , ^{13}C , outros núcleos. Magnetización macroscópica: principios básicos. Espectros de onda continua. Espectroscopia de pulsos: descrición básica dun experimento de pulsos: a FID.



<p>Tema 5. Desprazamento químico e constantes de acoplamento.</p>	<p>A resonancia magnética nuclear de protón e de carbono 13. O desprazamento químico. Constantes de apantallamento: contribucións diamagnéticas, paramagnéticas e non locais. Desprazamento químico de protón. Orixe dos diferentes desprazamentos químicos. Desprazamento de carbono-13. Acoplamiento espín-espín. A regra N+1, espectros de primeira orde. Constantes de acoplamiento xeminaies, veciñais e a longa distancia. Ecuación de Karplus. Constantes de acoplamiento carbono-13-protón. Formas de simplificar espectros: dobre resonancia. Desacoplamiento homonuclear: Desacoplamiento total. Desacoplamiento heteronuclear. Desacoplamiento de banda ancha (Noise decoupling). Desprazamentos químicos de diversos grupos funcionais protonados, regras de aditividade. Grupos homotópicos, enantiotópicos e diasterotópicos. Equivalencia química e magnética, introdución aos espectros de orde superior. Nomenclatura dos sistemas de espines.</p>
<p>Tema 6. Fenómenos de relaxación na RMN.</p>	<p>Magnetización longitudinal e Magnetización transversal. Mecanismos de relaxación T1, experimento Inversión-Recuperación. Efecto nuclear Overhäuser, aplicacións. Momento cuadrupolar. Outros núcleos de interese en RMN, resonancia heteronuclear.</p>
<p>Tema 7. Introdución á resonancia magnética nuclear de multipulsos.</p>	<p>Técnicas de pulsos monodimensionales. Experimentos APT, DEPT e INEPT. Técnica de pulsos bidimensionales. Experimentos homonucleares: COSY e NOESY. Experimentos heteronucleares: correlacións carbono-protón 1H-13C- directa e a longa distancia. Espectroscopia inversa: HMQC, HSQC e HMBC.</p>

Planificación			
Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Proba obxectiva	4	0	4
Atención personalizada	0	0	0

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Proba obxectiva	Exáme en aula

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
	<p>Nos seminarios serán resoltos problemas prácticos por parte do alumnado ca axuda do profesor.</p> <p>El alumno deberá saber manipular datos de RMN mediante o programa MESTRENOVA.</p> <p>Resolución por parte do alumnado de problemas similares os tratados nas clases de seminarios.</p> <p>O alumno tendrá unha atención personalizada nas horas de tutorías, mércores, xoves e vernes de 9 a 11 da mañá.</p>

Avaliación		
Metodoloxías	Descrición	Cualificación



Proba obxectiva	Exáme final	100
Outros		

Observacións avaliación

A nota da asignatura vendrá determinada só por unha proba obxectiva escrita mediante exáme de 4 horas. É necesario a lo menos un 50% desta proba para aprobar a asignatura.

No exáme plantexaranse 5 problemas nos que, a través de datos espectroscópicos de RMN, espectrometría de masas e infravermello, o alumno terá que determinar as estruturas-problema propostas.

Fontes de información

Bibliografía básica	<ul style="list-style-type: none">- McLafferty, F. W.; Turecek, F. (1993). Interpretation of Mass Spectra. . University Science Books- Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz G. S. (2001). Introddction to Spectroscopy: A guide for students of Organic Chemistry 3a Edición. Brooks/Cole- Lambert, J. B.; Shurvell, H. F.; Lightner, D.; Cooks, R. G. (1987). Introduction to Organic Spectroscopy. McMillan- De Hoffman, E.; Stroobant, V. (2002). Mass Spectrometry. Principles and Applications. John Wiley and Sons- Hesse M.; Meier, H.; Zeeh, B. (Traducido por Herrera Fernández, A.; Martinez Alvarez, R.; Söllhube) (1995). Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica. Síntesis- Crews, P.; Rodríguez, J.; Jaspars, M. (2009). Organic Structure Analysis. New York. Oxford Univ.Press- Giménez Martínez, J. J.; Expósito López, J. M. (1998). RMN para químicos orgánicos.. Monografías de la Universidad de Almería. Servicio de Publicaciones e Instituto Almerienses, Almería- Silverstein, R. M.; Bassler, G. C.; Morrill, T. C. (1998). Spectrometric Identification of Organic Compounds, 6th Ed.. John Wiley- Williams, D. H.; Fleming, I. (1995). Spectroscopic methods in Organic Chemistry. McGrawHill- Pretch, Cleks, Seibl, Simon: (2000). Tablas para la determinación estructural por métodos espectroscópicos. Traducción 3ª Edición por Antonio Herrera y Roberto Martinez,. Springer Verlag Ibérica
Bibliografía complementaria	<ul style="list-style-type: none">- George, B.; McInTyre (1987). Infrared Spectroscopy. John Wiley- Derome, A. E. (1987). Modern NMR Techniques for Chemistry Research. Pergamon Press

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Química Física Avanzada/610311501
Determinación Estrutural e Síntese en Quím. Org./610311603
Métodos Estruturais en Química Inorgánica/610311614

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Química Orgánica Avanzada/610311401
Química Inorgánica Avanzada/610311402

Materias que continúan o temario

Química Inorgánica II/610311204
Química Inorgánica I/610311105
Ampliación Química Orgánica/610311302
Introdución a Espectroscopia/610311304
Química Analítica Avanzada/610311502

Observacións

(*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías