



Guía Docente				
Datos Identificativos			2014/15	
Asignatura (*)	Determinación Estrutural		Código	610311403
Titulación	Licenciado en Química			
Descriptor				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
1º e 2º Ciclo	1º cuatrimestre	Cuarto	Troncal	6
Idioma	Castelán			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinación	Rodriguez Gonzalez, Jaime	Correo electrónico	jaime.rodriguez@udc.es	
Profesorado	Rodriguez 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.
A6	Coñecer os elementos químicos e os seus compostos, as súas formas de obtención, estrutura, propiedades e reactividade.
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.
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.
B2	Resolver problemas de forma efectiva.
B4	Traballar de forma autónoma con iniciativa.
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.
C6	Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse.
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



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	B2	C1
	A2	B4	C2
	A6		C6
	A9		C8
	A14		
	A15		
	A20		
	A21		
	A22		
	A23		
	A25		

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.
Tema 5. Desprazamento químico e constantes de acoplamento.	A resonancia magnética nuclear de protón e de carbono ^{13}C . 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}C . Acoplamiento espín-espín. A regra N+1, espectros de primeira orde. Constantes de acoplamiento xeminais, veciñais e a longa distancia. Ecuación de Karplus. Constantes de acoplamiento carbono- ^{13}C -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 diastereotópicos. Equivalencia química e magnética, introdución aos espectros de orde superior. Nomenclatura dos sistemas de espines.



Tema 6. Fenómenos de relaxación na RMN.	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.
Tema 7. Introducción á resonancia magnética nuclear de multipulsos.	Técnicas de pulsos monodimensionales. Experimentos APT, DEPT e INEPT. Técnica de pulsos bidimensionales. Experimentos homonucleares: COSY e NOESY. Experimentos heteronucleares: correlacións carbono-protón ^1H - ^{13}C - directa e a longa distancia. Espectroscopia inversa: HMQC, HSQC e HMBC.

Planificación			
Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Proba obxectiva	4	0	4
Atención personalizada	4	0	4
*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado			

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Proba obxectiva	Formúlanse 5 problemas nos que se combinan datos de RMN, espectrometría de masas e Infravermello.

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

Avaliación		
Metodoloxías	Descrición	Cualificación
Proba obxectiva	Exame	0
Outros		

Observacións avaliación
A nota da asignatura vendrá determinada só por unha proba escrita mediante exame de 4 horas (competencias A1, A2, A6, A9, A14, A15, A20, B2, C1 e C3). É necesario a lo menos un 50% desta proba para aprobar a asignatura No exame 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	- 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 Martinez, 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	- George, B.; McInTyre (1987). Infrared Spectroscopy. John Wiley - Derome, A. E. (1987). Modern NMR Tecniques 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

Introducción 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