



Guía docente				
Datos Identificativos				2014/15
Asignatura (*)	Determinación Estructural	Código	610311403	
Titulación	Licenciado en Química			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
1º y 2º Ciclo	1º cuatrimestre	Cuarto	Troncal	6
Idioma	Castellano			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinador/a	Rodríguez Gonzalez, Jaime	Correo electrónico	jaime.rodriguez@udc.es	
Profesorado	Rodríguez Gonzalez, Jaime	Correo electrónico	jaime.rodriguez@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es			
Descripción general	Aplicación das técnicas espectroscópicas na determinación estrutural dos compostos orgánicos e inorgánicos			

Competencias de la titulación	
Código	Competencias de la titulación
A1	Utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
A2	Deducir la variación de las propiedades de los elementos químicos según la Tabla Periódica.
A6	Conocer los elementos químicos y sus compuestos, sus formas de obtención, estructura, propiedades y reactividad.
A9	Conocer los rasgos estructurales de los compuestos químicos, incluyendo la estereoquímica, así como las principales técnicas de investigación estructural.
A14	Demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
A15	Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
A20	Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio.
A21	Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.
A22	Planificar, diseñar y desarrollar proyectos y experimentos.
A23	Desarrollar una actitud crítica de perfeccionamiento en la labor experimental.
A25	Relacionar la Química con otras disciplinas y reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
B2	Resolver un problema de forma efectiva.
B4	Trabajar de forma autónoma con iniciativa.
C1	Expresarse correctamente, tanto de forma oral como escrita, en las lenguas oficiales de la comunidad autónoma.
C2	Dominar la expresión y la comprensión de forma oral y escrita de un idioma extranjero.
C6	Valorar críticamente el conocimiento, la tecnología y la información disponible para resolver los problemas con los que deben enfrentarse.
C8	Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad.

Resultados de aprendizaje	
Competencias de materia (Resultados de aprendizaje)	Competencias de la 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		

Contenidos	
Tema	Subtema
Tema 1. La utilización de los datos espectroscópicos en la determinación estructural de compuestos orgánicos e inorgánicos.	Pureza, análisis elemental y grado de insaturación. Los métodos espectroscópicos más utilizados en química: escalas de tiempo. Métodos no espectroscópicos.
Tema 2. Fundamentos y aplicaciones de la espectrometría de masas.	Instrumentación. La ionización electrónica. Reacciones de fragmentación. Transposiciones. Isomerizaciones. Determinación de la masa molecular. Iones moleculares. Determinación de la fórmula molecular. Picos isotópicos. Tipos de fragmentaciones: Fragmentación en alfa; Fragmentación en beta; con transferencia de hidrógeno. Fragmentación en beta de otros grupos. Fragmentación con pérdida de molécula neutra. Fragmentaciones más características de los compuestos orgánicos. Introducción a técnicas de ionización química. CI, FAB, APCI, ESI: Aplicaciones para la obtención de la fórmula molecular de un compuesto.
Tema 3. Espectroscopia de IR	Introducción, preparación de las muestras. Vibraciones armónicas y inarmónicas. Absorción de la radiación por medio de vibraciones moleculares. Vibraciones de moléculas poliatómicas. Simetría de los modos normales de vibración. Factores que afectan a la frecuencia. Frecuencias de los grupos funcionales orgánicos: zonas de vibración típicas de los enlaces, C-H, C=O, compuestos aromáticos, alcanos, alquenos, alquinos, alcoholes, éteres, compuestos nitrogenados, aminas, amidas, nitrilos, nitrocompuestos.
Tema 4. El fenómeno de la RMN.	El fenómeno físico de la RMN, condiciones para la RMN. Núcleos más estudiados: $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , otros núcleos. Magnetización onda contua. Espectroscopia de pulso: descripción básica de un experimento de pulsos: la FID
Tema 5. Desplazamiento químico y constantes de acoplamiento.	La resonancia magnética nuclear de protón y de carbono $^{13}\text{C}$ . El desplazamiento químico. Constantes de apantallamiento: contribuciones diamagnéticas, paramagnéticas y no locales. Desplazamiento químico de protón. Origen de los diferentes desplazamientos químicos. Desplazamiento de carbono- $^{13}\text{C}$ . Acoplamiento desnudé-desnudé. La regla N+1, espectros de primera orden. Constantes de acoplamiento xeminaies, vecinales y la larga distancia. Ecuación de Karplus. Constantes de acoplamiento carbono- $^{13}\text{C}$ -protón. Formas de simplificar espectros: doble resonancia. Desacoplamiento homonuclear: Desacoplamiento total. Desacoplamiento heteronuclear. Desacoplamiento de banda ancha (Noise decoupling). Desplazamientos químicos de diversos grupos funcionales protonados, reglas de aditividad. Grupos homotópicos, enantiotópicos y diasterotópicos. Equivalencia química y magnética, introducción a los espectros de orden superior. Nomenclatura de los sistemas de espines.



Tema 6. Fenómenos de relajación en la RMN.	Magnetización longitudinal y Magnetización transversal. Mecanismos de relajación T1, experimento Inversión-Recuperación. Efecto nuclear Overhäuser, aplicaciones. Momento cuadrupolar. Otros núcleos de interés en RMN, resonancia heteronuclear.
Tema 7. Introducción a la resonancia magnética nuclear de multipulsos.	Técnicas de pulsos monodimensionales. Experimentos APT, DEPT e INEPT. Técnica de pulsos bidimensionales. Experimentos homonucleares: COSY y NOESY. Experimentos heteronucleares: correlaciones carbono-protón 1H-13C- directa y a larga distancia. Espectroscopia inversa: HMQC, HSQC y HMBC.

### Planificación

Metodologías / pruebas	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Prueba objetiva	4	0	4
Atención personalizada	4	0	4

(\*) Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos

### Metodologías

Metodologías	Descripción
Prueba objetiva	Se plantean 5 problemas en los que se combinan datos de RMN, espectrometría de masas e IR.

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
	Nos seminarios serán resoltos problemas prácticos por parte do alumnado ca 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 vernes de 9 a 11 da mañá.

### Evaluación

Metodologías	Descripción	Calificación
Prueba objetiva	Exame	0
Otros		

### Observaciones evaluación

La nota de la asignatura vendrá determinada sólo por una prueba escrita mediante exámen de 4 horas (se examinarán las competencias A1, A2, A6, A9, A14, A15, A20, B2, C1 y C3). Es necesario al menos un 50% de esta prueba para aprobar asignatura.  
En el examen se plantean 5 problemas en los que, a través de datos espectroscópicos de RMN, espectrometría de masas e infrarrojo, el alumno tendrá que determinar las estructuras-problema propuestas.

### Fuentes de información



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

## Recomendaciones

### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Química Física Avanzada/610311501

Determinación Estructural y Síntesis en Quím. Org./610311603

Métodos Estructurales en Química Inorgánica/610311614

### Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Química Orgánica Avanzada/610311401

Química Inorgánica Avanzada/610311402

### Asignaturas que continúan el temario

Química Inorgánica II/610311204

Química Inorgánica I/610311105

Ampliación Química Orgánica/610311302

Introducción a Espectroscopia/610311304

Química Analítica Avanzada/610311502

### Otros comentarios

(\*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías