



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

1. ASIGNATURA / COURSE

1.1. Nombre / Course Title

DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL / STRUCTURAL DETERMINATION

1.2. Código / Course Code

12707

1.3. Tipo / Type of course

Troncal / Compulsory

1.4. Nivel / Level of course

Grado / Grade

1.5. Curso / Year of course

Tercero/ Third course

1.6. Semestre / Semester

2º

1.7. Número de créditos / Number of Credits Allocated

7 créditos LRU (4,9 ECTS)

1.8. Requisitos Previos / Prerequisites

Tener aprobada las asignaturas de *Equilibrio Químico, Química Analítica, Química Física, Fundamentos de Química Cuántica, Química Inorgánica y Química Orgánica*



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

1.9. ¿ Es obligatoria la asistencia ? / Is attendance to class mandatory?

SI / Yes

1.10. Datos del profesor/a / profesores / Faculty Data

Grupo: 31

Luis Errea

Departamento: Química
Facultad: Ciencias, Módulo C-IX/ Despacho 603
Teléfono: 91 497 4958
e-mail: lf.errea@uam.es
Página Web:
Horario de Tutorías Generales:

Paloma Calle

Departamento: Química Física Aplicada
Facultad: Ciencias, Despacho C-II, 304
Teléfono: 91 497 8739
e-mail: paloma.calle@uam.es
Página Web:
Horario de Tutorías Generales:

Grupo: 36

M. Carmen Maestro Rubio
(Teoría)

Departamento: Química Orgánica
Facultad: Ciencias Módulo C-I / Despacho 601
Teléfono: 91 497 8636
e-mail: carmen.maestro@uam.es
Página Web: <http://www.uam.es>
Horario de Tutorías Generales: L y X 12:30-13:30 h

Grupo: 36

Christian Claessens
(Seminarios)

Departamento: Química Orgánica
Facultad: Ciencias Módulo C-I Despacho 303
Teléfono: 91 497 4710
e-mail: christian.claessens@uam.es
Página Web:
<http://www.uam.es/phthalocyanines>
Horario de Tutorías Generales: L y M: 15:30-16:30 h



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

Grupo: 36
David Tudela

Departamento: Química Inorgánica
Facultad: Ciencias Módulo C-VIII/Despacho 608
Teléfono: 91 497 4845
e-mail: david.tudela@uam.es
Página Web:
Horario de Tutorías Generales:

1.11. OBJETIVOS DEL CURSO /OBJECTIVE OF THE COURSE

OBJETIVOS

- Reconocer la información que proporciona cada una de las distintas técnicas de IR, RMN y EM para determinar la estructura de los compuestos
- Seleccionar el tipo de técnica a utilizar para resolver un problema relativo a una característica estructural definida de una sustancia
- Deducir estructuras de compuestos sencillos a partir de los datos suministrados por las técnicas estudiadas
- Predecir la información más significativa que proporciona cada una de las técnicas a partir de la estructura del compuesto

COMPETENCIAS A DESARROLLAR

De conocimiento

- Comprender los conceptos, principios y teorías esenciales que relacionan la espectroscopia con las distintas áreas de la Química
- Manejar con precisión los conceptos y fundamentos de las diferentes técnicas.
- Manejar con propiedad la terminología específica
- Relacionar los conocimientos proporcionados por la asignatura con los adquiridos previamente en otras disciplinas relacionadas con ella.

De procedimiento

- Utilizar las técnicas IR, RMN y EM para determinar la estructura de compuestos orgánicos
- Utilizar la espectroscopia de IR para determinar el modo de coordinación de los ligandos en compuestos de coordinación y la geometría de compuestos inorgánicos sencillos
- Capacidad para obtener información de tablas y gráficos



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

- Aplicar las propiedades de simetría de las moléculas para establecer la relación estructura molecular-espectros

De actitud

- Mantener una actitud de curiosidad permanente en el aprendizaje de la asignatura
- Fomentar el espíritu crítico y mejorar la capacidad de síntesis y análisis.
- Fomentar la precisión en el planteamiento de preguntas y aprender a elegir lo esencial de cada técnica.

1.12. Contenidos del Programa / Course Contents

BLOQUES TEMÁTICOS

1. Espectroscopia de Infrarrojo.
2. Resonancia Magnética Nuclear de ^1H y de ^{13}C .
3. Espectrometría de Masas.

Tema 1.- ESPECTROSCOPIA DE INFRAROJO

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 la 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. RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

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

Tema 5. EL DESPLAZAMIENTO QUIMICO

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



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

Tema 6. 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. Técnicas de doble resonancia. Efecto nuclear Overhauser

Tema 7. 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 8.- 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 9.- TIPOS DE IONES Y SU SIGNIFICACIÓN.

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

Tema 10.-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 a los diferentes tipos de compuestos orgánicos.

1.13. Referencias de Consulta Básicas / [Recommended Reading.](#)

Textos generales:

- *"Spectrometric Identification of Organic Compounds"*, R.M. Silverstein, F.X. Webster, D. Kiemle, 7th Ed., John Wiley and Sons, 2004.
- *"Organic Structural Spectroscopy"*. J.B. Lambert, H.F. Shurvell, D.A. Lightner, R.G. Cooks, Prentice-Hall Inc., 1998.
- *"Organic Structure Analysis"*. P. Crews, J. Rodriguez y M. Jaspars, Oxford University Press, 1998.
- *"Organic Structures from Spectra"*, L. D. Field, S. Sternhell, J. R. Kalman, 4rd Ed., John Wiley, 2008.



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

- *“Métodos espectroscópicos en química orgánica”*. M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh. Síntesis, 1997.

Libro de tablas:

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

2 Métodos Docentes / Teaching methods

En el desarrollo de la asignatura se utilizarán una combinación de procedimientos de enseñanza/aprendizaje, abarcando clases magistrales con gran contenido en aspectos teóricos y explicación de conceptos generales, clases de seminario de carácter más aplicado y participación más directa del estudiante, la resolución individual y/o en grupo de problemas concretos y la docencia en red a través de la página web de la asignatura.

Actividades Presenciales

1. Clases teóricas: 33 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 de seminario.
2. Clases prácticas (seminarios): 16 horas.
En ellas el estudiante participará de forma mucho más activa, tanto a nivel individual como en grupo. Preferentemente, en estas clases de seminario 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



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

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.

3. Soporte en red:

Los alumnos podrán descargar de la red los ejercicios que se les propongan con la periodicidad antes mencionada. Así mismo podrá encontrar en la red material suplementario como enunciados de exámenes de convocatorias anteriores, o links de interés...

4. Tutorías:

Es conveniente que los estudiantes asistan al menos a dos tutorías a lo largo del curso, lo que facilitaría detectar las dificultades del aprendizaje. Además las tutorías permitirán el asesoramiento para la realización de las actividades del curso.

3 Tiempo estimado de Trabajo del Estudiante / Estimated workload for the student

El estudiante asistirá a 49 clases presenciales de una hora, incluyendo 33 h de clases teóricas y 16 h de seminarios. Con carácter general, se consideran 2 horas de estudio y la consulta de los libros recomendados para la asimilación de los contenidos de cada clase teórica. Igualmente, se estiman 3 horas de trabajo del alumno para la resolución de los ejercicios propuestos para cada clase de seminario.

Se realizarán un control de 1 h que incluya IR y RMN y un examen final en junio, con una duración aproximada de 3 horas. Las asistencias a tutorías serían por término medio de 1 a 2 horas a lo largo del cuatrimestre. En caso de no superar la asignatura en la convocatoria de junio, el examen correspondiente a la convocatoria de septiembre tendrá también una duración aproximada de 3 horas.



4 Métodos de Evaluación y Porcentaje en la Calificación Final / **Assessment Methods and Percentage in the Final marks**

4.1 DESCRIPCIÓN DETALLADA DEL PROCEDIMIENTO PARA LA EVALUACIÓN

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 asignatura. Para ello se emplearán los siguientes criterios y pruebas objetivas:

a) 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 de seminario. La participación directa de los alumnos en las clases de seminario formará parte igualmente de la calificación por lo que su asistencia es obligatoria. Dado el gran componente de evaluación continua que supone la participación en las clases de seminario y la realización y entrega de las hojas de problemas, conllevará la obtención de un porcentaje del 20% de la calificación final de la asignatura en la convocatoria de junio.

b) En fechas establecidas previamente y conocidas por los alumnos, se realizará un control por escrito de 60 minutos de duración y de forma individual sobre la materia impartida hasta ese momento. Este criterio de evaluación supondrá un 10% de la calificación final.

c) Una vez finalizada la impartición de las clases, se realizará un examen final en Junio de unas 3 horas de duración sobre el conjunto de los contenidos de la asignatura. Este criterio de evaluación supondrá un 70% de la calificación final. El alumno deberá obtener una calificación mínima de 4.0 en este examen para poder aplicar los porcentajes correspondientes a los apartados a), b) del procedimiento de evaluación.

Aplicando los criterios anteriores, en caso de no superar la asignatura en la convocatoria de Junio, la evaluación de la convocatoria de Septiembre se basará exclusivamente en la calificación obtenida en el examen establecido para dicha convocatoria.



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

4.2 PORCENTAJE EN LA CALIFICACIÓN FINAL

Convocatoria ordinaria de Junio:

- a) Evaluación de ejercicios entregados20%
- b) Realización de 1 control breve de 60 min de duración 10%
- c) Examen final de la asignatura.....70%

Convocatoria extraordinaria de septiembre:

Examen100%

5 Cronograma de Actividades (opcional) / Activities Chronogram (optional)

TEMAS	ESTIMACIÓN : HORAS TEÓRICAS	ESTIMACIÓN: HORAS SEMINARIOS
1	2	
2	3	2
3	3	2
4	3	
5	5	3
6	6	3
7	2	1
8	2	
9	2	
10	5	2
		PROBLEMAS COMBINADOS 3
TOTAL	33 HORAS TEÓRICAS Y 1 H.CONTROL	16 HORAS SEMINARIOS