



Asignatura: Determinación Estructural
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Nivel: Grado
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

ASIGNATURA / COURSE TITLE

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 / Bachelor (second cycle)

1.5. Curso / Year

4º / 4th

1.6. Semestre / Semester

Primero / First

1.7. Idioma / language

Español. Se emplea también Inglés en material docente / In addition to Spanish, English is also extensively used in teaching material

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

El alumno debe haber superado las asignaturas de Química General y Experimentación Básica en Química y también debe estar familiarizado con las asignaturas de las áreas de Química Física, Química Inorgánica y Química Orgánica de los cursos anteriores. Los estudiantes deben tener un nivel de inglés que les permita comprender la bibliografía de consulta en dicha lengua. / Should have passed the courses General Chemistry and Initial Experimental Work in Chemistry and be familiar with the courses belonging to the fields of



Asignatura: Determinación Estructural
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Nivel: Grado
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

Physical Chemistry, Inorganic Chemistry and Organic Chemistry. Students must have a suitable level of English to read references in this language.

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. / **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

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

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

OBJETIVOS

- Reconocer la información que proporcionan las principales técnicas de determinación estructural.
- 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 de IR-Raman, RMN y EM.
- Predecir, a partir de la estructura del compuesto, los datos más significativos que proporcionaría cada una de las técnicas.

COMPETENCIAS A DESARROLLAR

De conocimiento

- Comprender los conceptos, principios y teorías esenciales que relacionan la espectroscopia con las distintas áreas de la Química.



Asignatura: Determinación Estructural
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Nivel: Grado
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

- 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.
- Elegir la técnica más conveniente para resolver un determinado problema estructural, teniendo en cuenta la información esencial que cada técnica puede proporcionar.

De procedimiento

- Utilizar la información obtenida mediante XRD para la determinación estructural.
- Utilizar las técnicas IR, RMN y EM para determinar la estructura de compuestos orgánicos.
- Utilizar la espectroscopia de IR y Raman para determinar el modo de coordinación de los ligandos en compuestos de coordinación y la geometría de compuestos inorgánicos sencillos.
- Obtener información de tablas y gráficos.
- Aplicar las propiedades de simetría de las moléculas para establecer la relación estructura molecular-espectros.
- Relacionar los espectros de un compuesto con la disposición espacial de sus átomos (estereoquímica).

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 acerca de la estructura de un compuesto.

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

Tema 1.- DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Información estructural a partir de datos de difracción de rayos X en polvo y en monocristal. Tablas internacionales de cristalografía y bases de datos estructurales. Parámetros de red. Posiciones atómicas. Distancias y ángulos de enlace.



Asignatura: Determinación Estructural
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Nivel: Grado
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

Tema 2.- 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 3.- 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 4.- 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 5. 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 6. 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 7. 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 8. 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 9.- ESPECTROMETRÍA DE MASAS

Fundamentos. Técnicas experimentales en espectrometría de masas. Métodos de producción de iones: Impacto electrónico. Ionización química. Ionización



Asignatura: Determinación Estructural
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Nivel: Grado
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

por desorción. Ionización por pulverización. Métodos de separación de iones. Apariencia de los espectros de masas: Influencia del método de ionización.

Tema 10.- TIPOS DE IONES Y SU SIGNIFICACIÓN.

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

Tema 11.-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.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Textos:

- *"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.
- *"Métodos espectroscópicos en química orgánica"*. M. Hesse, H. Meier, 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, R. Martínez, Editorial Masson, Barcelona, 2004.

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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 de la asignatura (Moodle).



Asignatura: Determinación Estructural
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Nivel: Grado
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

1. Clases teórico-prácticas: 34 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, si bien se trabajará también en la resolución de problemas en las propias clases teóricas.

2. Clases de seminario: 18 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 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.

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, links de interés, etc.

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.



Asignatura: Determinación Estructural
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Nivel: Grado
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

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

El estudiante asistirá a 52 clases presenciales de cincuenta minutos de duración, incluyendo 34 de clases teórico-prácticas y 18 de seminarios. Con carácter general, se consideran aproximadamente de 1 a 1,5 horas de estudio, y consulta de los libros recomendados, para la asimilación de los contenidos de cada clase teórico-práctica. Igualmente, se estiman de 2 a 2,5 horas de trabajo del alumno para la resolución de los ejercicios propuestos para cada clase de seminario.

Se espera la asistencia del alumno a tutorías, que serían por término medio de 2 horas a lo largo del semestre, de forma que el profesor pueda detectar posibles carencias en su formación que puedan ser convenientemente corregidas. Con el mismo propósito, es decir para evaluar el seguimiento individual de la asignatura por parte del alumno, se realizarán también dos controles de 50 minutos de duración que incluirán cuestiones y/o problemas sobre la materia impartida hasta ese momento.

Los alumnos realizarán un examen final de la asignatura, con una duración aproximada de 3 horas. En caso de no superar la asignatura en la convocatoria ordinaria, el examen correspondiente a la convocatoria extraordinaria tendrá también una duración aproximada de 3 horas.

		Nº de horas	Porcentaje
Presencial	Clases teórico- prácticas	34h (22,5%)	59 horas (39 %)
	Seminarios	18 h (12%)	
	Otros: Controles Tutorías individuales	2 h 2 h (2,5%)	
	Realización del examen final	3 h (2%)	
No presencial	Estudio semanal incluida realización de actividades prácticas (7h x 12 semanas)	84 h (56%)	91 horas (61 %)
	Preparación del examen	7 h (5%)	
Carga total de horas de trabajo: 25 horas x 6 ECTS		150 h	



Asignatura: Determinación Estructural
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Nivel: Grado
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

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

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 ordinaria.

b) En fechas establecidas previamente y conocidas por los alumnos, se realizarán dos controles por escrito de 50 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 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) y b) del procedimiento de evaluación.

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

Aplicando los criterios anteriores, en caso de no superar la asignatura en la convocatoria ordinaria, la evaluación de la convocatoria extraordinaria se basará en el examen establecido para dicha convocatoria que supondrá el 70% de la calificación (siempre que se haya obtenido una calificación mínima de 4,0), y en la calificación obtenida en la evaluación continua de los problemas planteados durante el curso que supondrá el 30% de la evaluación.



Asignatura: Determinación Estructural
Código: 16367
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Química
Nivel: Grado
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

4.2 PORCENTAJE EN LA CALIFICACIÓN FINAL

Convocatoria ordinaria:

- a) Evaluación de ejercicios entregados y participación.....20%
- b) Realización de 2 controles, cada uno de 50 min de duración 10%
- c) Examen final de la asignatura..... 70%

Convocatoria extraordinaria:

- a) Evaluación de ejercicios entregados y participación.....30%
- b) Examen final de la asignatura..... 70%

5. Cronograma* / Course calendar

TEMAS	ESTIMACIÓN : HORAS TEÓRICO-PRÁCTICAS	ESTIMACIÓN: HORAS SEMINARIOS
1	4	
2	2	
3	3	2
4	3	2
5	3	1
6	3	1
7	7	5
8	2,5	2
9	2,5	
10	2	
11	2	2
	PROBLEMAS COMBINADOS 3	
TOTAL	34 HORAS TEÓRICO- PRÁCTICAS	18 HORAS SEMINARIOS