



## Grado en Química 27219 - Determinación estructural

Guía docente para el curso 2013 - 2014

Curso: 4, Semestre: 1, Créditos: 6.0

---

### Información básica

---

#### Profesores

- Irene Victoria Ara Laplana irene.ara@unizar.es
- Santiago Franco Ontaneda sfranco@unizar.es
- Rafael Navarro Martín rafanava@unizar.es

#### Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se recomienda haber superado las materias de Química Orgánica y Química Inorgánica.

#### Actividades y fechas clave de la asignatura

Se realizarán dos pruebas parciales. Las fechas se anunciarán debidamente a lo largo del curso.

Las fechas del examen global y horarios se podrán consultar en la página web de la universidad:

<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

---

### Inicio

---

#### Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

**El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...**

- 1:** Determina la estructura de compuestos orgánicos e inorgánicos a partir de datos experimentales.
- 2:** Selecciona la(s) técnica(s) adecuada(s) para la obtención de datos experimentales que permita la determinación estructural de un compuesto químico.
- 3:** Predice razonadamente las características espectroscópicas esperadas en el caso de que se conozca la estructura de una determinada molécula.
- 4:**

Maneja el software adecuado para el estudio de los datos experimentales que sirva de apoyo para la determinación de la estructura de los compuestos orgánicos e inorgánicos.

## Introducción

### Breve presentación de la asignatura

En la asignatura se estudian las técnicas más importantes que se manejan habitualmente en un laboratorio de química orgánica o inorgánica para la determinación estructural de los compuestos químicos.

---

## Contexto y competencias

---

### Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

#### La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

Proporcionar al alumno los conocimientos y herramientas para poder determinar la estructura molecular de compuestos químicos tanto orgánicos como inorgánicos.

#### Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

Asignatura incluida en el Módulo Avanzado, cuarto curso, primer semestre

Sirve de complemento a las asignaturas de Química Orgánica II y Química Inorgánica II y tiene un enfoque práctico y aplicado a la elucidación estructural en el ámbito de estas materias.

#### Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

- 1:** Capacidad de aplicar conocimientos teóricos y prácticos a la resolución de problemas en Química y seleccionar el método más adecuado para resolverlos.
- 2:** Reconocer la importancia de las técnicas de determinación estructural en el contexto de la Química Orgánica y Química Inorgánica.
- 3:** Desarrollo de habilidades para el aprendizaje crítico y autónomo en áreas especializadas de la Química o en áreas multidisciplinares.
- 4:** Capacidad de síntesis, para relacionar datos de distintas fuentes.
- 5:** Capacidad para comunicar ideas y expresarse correctamente de forma oral y escrita.
- 6:** Desarrollo de la capacidad de trabajo en equipo.
- 7:** Aprender a tomar decisiones ante un problema real práctico.
- 7:** Conocer los aspectos fundamentales o principios básicos de las técnicas estudiadas para la determinación estructural de los compuestos químicos orgánicos o inorgánicos.

**7:**

Conocer las propiedades espectroscópicas más importantes de los compuestos químicos orgánicos o inorgánicos.

- 7:** Desarrollo de habilidades para proponer la estructura química de un compuesto químico desconocido a partir de datos espectroscópicos y otros datos experimentales.
- 7:** Ser capaz de analizar, interpretar y sintetizar información estructural con objeto de proponer razonadamente que técnicas serían las más adecuadas para elucidar la estructura de un determinado compuesto químico.
- 7:** Ser capaz de manejar el software de uso habitual para el procesado de datos químicos y espectroscópicos.

### **Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:**

Los conocimientos adquiridos permitirán completar, desde un punto de vista práctico, la formación adquirida en el módulo fundamental, ya que se revisarán las técnicas que se emplean habitualmente para la determinación de la estructura de compuestos orgánicos e inorgánicos a partir de datos experimentales.

---

## **Evaluación**

---

### **Actividades de evaluación**

#### **El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación**

- 1:** Existen dos modalidades de evaluación para esta asignatura. Por una parte, los alumnos pueden acogerse al sistema de **evaluación continua**, que consistirá en la realización de **dos pruebas escritas parciales**, cuyas fechas se anunciarán convenientemente al inicio del curso. Cada una de las pruebas se calificará de manera independiente. La calificación final de la asignatura se obtendrá como la media aritmética de las notas finales de cada una de ellas. Para aprobar será necesario haber alcanzado una calificación mínima de 5 puntos (sobre 10). Para que pueda realizarse dicho promedio, el alumno deberá obtener un mínimo de 4 puntos (sobre 10) en cada uno de las pruebas parciales.
- 2:** Por otro lado, aquellos alumnos que decidan no acogerse al sistema de evaluación continua, que no superen la asignatura por este procedimiento o que quieran mejorar su calificación, tendrán derecho a presentarse a la **prueba global**, que se realizará de acuerdo con el calendario de exámenes de la Facultad de Ciencias. Dicha prueba global consistirá en un único examen escrito de contenido teórico-práctico. Para aprobar será necesario alcanzar una calificación mínima de 5 puntos (sobre 10).

La calificación final del alumno será la mejor de las calificaciones obtenidas entre la evaluación continua y la prueba global.

- 3:** El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho (2 por matrícula) así como el consumo de dichas convocatorias se ajustará a la Normativa de Permanencia en Estudios de Grado ([http://www.unizar.es/sg/doc/BOUZ10-10\\_001.pdf](http://www.unizar.es/sg/doc/BOUZ10-10_001.pdf)) y Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje. A este último reglamento, también se ajustarán los criterios generales de diseño de las pruebas y sistema de calificación, y de acuerdo a la misma se hará público el horario, lugar y fecha en que se celebrará la revisión al publicar las calificaciones. Dicha normativa puede consultarse en:

<http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>

---

## Actividades y recursos

---

### Presentación metodológica general

#### El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

Clases de teoría, resolución de problemas y prácticas (6 créditos ECTS totales) que serán impartidas por profesorado del Departamento de Química Orgánica (3 créditos ECTS) y del Departamento de Química Inorgánica (3 créditos ECTS). Se podrán llevar a cabo también sesiones prácticas para la medida de las propiedades espectroscópicas de compuestos químicos seleccionados.

### Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

#### El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

##### 1:

Clases magistrales en las que se expondrán los fundamentos teórico-prácticos. (3 ECTS)

Clases de resolución de problemas y cuestiones aplicadas. Discusión colectiva de la resolución de los problemas y cuestiones aplicadas. (2,5 ECTS)

Realización de clases prácticas en las que el alumno aprenderá a preparar muestras para la medida de sus propiedades espectroscópicas (UV, IR, RMN, masas). 0,5 ECTS

##### 2:

#### Programa de Contenidos

1. Generalidades de análisis y caracterización de compuestos químicos.
2. Espectroscopía Infrarroja: Fundamentos y aplicaciones. Tipos de vibraciones. Zonas del espectro de infrarrojo. Estudio de grupos funcionales de interés. Interpretación de espectros. Problemas y casos prácticos. Instrumentación. Preparación de muestras.
3. Espectrometría de masas: Fundamentos y aplicaciones. Métodos de ionización y análisis de iones. Ion molecular. Picos isotópicos. Masa exacta. Fragmentaciones. Problemas y casos prácticos. Instrumentación. Preparación de muestras.
4. Resonancia Magnética Nuclear de protón: Fundamentos y aplicaciones. Instrumentación. Desplazamiento químico. Equivalencia química. Integración. Acoplamiento spin-spin. Estudio de grupos funcionales de interés en Química. Manejo de tablas. Software y simulación de espectros. Problemas y casos prácticos. Preparación de muestras.
5. Resonancia Magnética Nuclear de carbono. Fundamentos y aplicaciones. Estudio de grupos funcionales de interés en Química. Manejo de tablas. RMN bidimensional y técnicas bidimensionales más comunes. Problemas y casos prácticos.
6. Estrategias para la asignación de la estructura de un compuesto a partir de los correspondientes espectros.
7. Resonancia Magnética Nuclear de otros núcleos: Introducción. Presencia de núcleos con diferentes valores de spin nuclear y diferentes abundancias isotópicas. Apantallamiento. Desplazamientos químicos. Constantes de acoplamiento. Satélites. Sistemas de spin.
8. Espectros de RMN de primer y segundo orden. Inequivalencia química y magnética. Simplificación de espectros. Fluxionalidad en compuestos químicos. Resolución de problemas de RMN.
9. Espectroscopía Ultravioleta-Visible. Cromóforos de interés general. Espectros electrónicos. Transiciones d-d. Situación en el ión libre y en el ión complejo. Desdoblamiento de los orbitales d. Complejos octaédricos y tetraédricos. Aproximaciones de campo fuerte y campo débil. Diagramas de correlación. Diagramas de Tanabe y Sugano. Reglas de selección. Efecto Jahn-Teller. Ejemplos prácticos.
10. Susceptibilidades magnéticas en complejos de metales de transición. Momento magnético efectivo. Contribución orbital. Ejemplos prácticos.

# Planificación y calendario

## Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Los horarios de la asignatura y fechas de exámenes se publican en el tablón de anuncios y página web de la Facultad de Ciencias.

## Bibliografía

### La bibliografía recomendada será la siguiente:

#### 1:

##### BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- 1.- Métodos espectroscópicos en química orgánica (7ª Ed. Revisada. Adaptación española 2ª Edición). Hesse, M.; Meier, H.; Zeeh, B. Ed. Síntesis, 2005 .
- 2.- Determinación estructural de compuestos orgánicos. Pretsch, E.; Bühlmann, P.; Affolter, C.; Herrera, A.; Martínez, R. Ed. Springer 2001.
- 3.- Spectrometric Identification of Organic Compounds (7ª Edición). Silverstein, R.M.; Webster, F.X. Wiley, 2005
- 4.- Espectroscopía, Ed. Pearson Educación, Madrid- 2004, Alberto Requena y José Zuñiga.
- 5.- ABCs of FT-NMR, Ed. University Science Books, Sausalito-2000, John D. Roberts

#### 2:

##### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- 1.- Foundations of Spectroscopy. Duckett, S.; Gilbert, B. Ed. Oxford University Press. 2000
- 2.- Introduction to Organic Spectroscopy. Harwood, L.M.; Claridge, T.D.W. Ed. Oxford University Press, 1997
- 3.-Structural Methods in Inorganic Chemistry. E.A.V. Ebsworth, D.W.H. Rankin, S.Cradock

#### 3:

##### SITIOS WEB

1. <http://www.chem.ucla.edu/~webspectra/>
2. <http://www3.nd.edu/~smithgrp/structure/workbook.html>
3. <http://www.desoft03.usc.es/rmnweb/rmnespect2.html>

## Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Determinación estructural de compuestos orgánicos / E. Pretsch ... [et al.] . - Reimp. Barcelona [etc.] : Masson, 2005
- Duckett, Simon. Foundations of spectroscopy / Simon Duckett and Bruce Gilbert . - 1st published, repr. Oxford [etc.] : Oxford University Press, 2004
- Ebsworth, E. A. V. Structural methods in inorganic chemistry / E.A.V. Ebsworth, David W.H. Rankin, Stephen Cradock ; foreword by Kenneth Raymond . - 2nd ed. Oxford [etc.] : Blackwell, 1991
- Harwood, Laurence M.. Introduction to organic spectroscopy / Laurence M. Harwood, Timothy D. W. Claridge . - 1st publi., repr. Oxford : Oxford University Press, 2007
- Hesse, Manfred. Métodos espectroscópicos en química orgánica / Manfred Hesse, Herbert Meier, Bernd Zeeh ; adaptación española 2ª edición, Antonio Herrera Fernández, Roberto Martínez Álvarez . 2ª ed. act. y amp. Madrid : Síntesis, D.L. 2005
- Requena Rodríguez, Alberto. Espectroscopía / Alberto Requena Rodríguez, José Zúñiga Román Madrid [etc.] : Pearson/Prentice Hall, cop. 2004
- Roberts, John D.. ABCs of FT-NMR / John D. Roberts Sausalito, California : University Science Books, cop. 2000
- Silverstein, Robert M.. Spectrometric identification of organic compounds / Robert M. Silverstein, G. Clayton Bassler, Terence C. Morrill . - 4th ed. New York [etc.] : Wiley, cop. 1981