

Grado en Química

27219 - Determinación estructural

Guía docente para el curso 2015 - 2016

Curso: , Semestre: , 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
- **Raquel Andreu Solano** randreu@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

Los horarios de las clases y las fechas del examen global se podrán consultar en la página web de la universidad:
<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

Habrá dos exámenes parciales, cuyas fechas se comunicarán con suficiente antelación en el tablón de anuncios y a través del ADD.

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

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

- 1:** Conoce los fundamentos físicos y la información que proporcionan las distintas técnicas espectroscópicas (espectroscopía de masas, IR, RMN y v-uv) para la determinación estructural de compuestos orgánicos e inorgánicos.

- 2:** Calcula, deduce y compara los valores de los principales parámetros de cada técnica espectroscópica.
- 3:** Determina la estructura de las moléculas a partir de la interpretación de los datos espectroscópicos experimentales.
- 4:** Predice razonadamente las características espectroscópicas de una determinada molécula conociendo su estructura.
- 5:** Selecciona y relaciona las técnicas más adecuadas para la obtención de datos experimentales que permitan la determinación estructural de un compuesto.
- 6:** Reconoce la importancia las distintas técnicas de determinación estructural y que la información que proporciona cada una de ellas se puede complementar con las demás.
- 7:** Comprende, interpreta y utiliza la información espectroscópica que se recoge en la bibliografía.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

En la asignatura se estudian las técnicas más importantes de determinación estructural que se manejan habitualmente en un laboratorio de química orgánica o inorgánica, con un enfoque eminentemente práctico y aplicado.

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 estudiante los conocimientos y herramientas adecuadas para poder determinar la estructura molecular de compuestos químicos, tanto orgánicos como inorgánicos, a partir de datos espectroscópicos.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

Se encuadra en el Módulo Avanzado, se imparte en el primer semestre del cuarto curso y tiene carácter obligatorio. Complementa a las asignaturas Química Orgánica II y Química Inorgánica II, pero a su vez es una asignatura muy importante en sí misma, ya que conocer y saber aplicar las distintas técnicas de determinación estructural es fundamental en la formación de un químico.

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

- 1:** Conocer los principios básicos y aspectos fundamentales de las técnicas estudiadas para la determinación estructural de los compuestos orgánicos o inorgánicos.
- 2:** Analizar, interpretar y sintetizar información espectroscópica con objeto de proponer razonadamente la estructura de un determinado compuesto
- 3:** Describir las propiedades espectroscópicas de un compuesto orgánico o inorgánico conociendo su estructura.

- 4:** Aplicar conocimientos teóricos y prácticos a la resolución de problemas en Química y seleccionar el método más adecuado para resolverlos.
- 5:** Comprender e interpretar la información espectroscópica y estructural que se recoge en la bibliografía científica.
- 6:** Desarrollar habilidades para el aprendizaje crítico y autónomo en áreas especializadas de la Química y en áreas multidisciplinares.

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

El conocimiento de los fundamentos y aplicaciones de las técnicas de determinación estructural son parte de la formación básica de un químico. Tanto si el estudiante quiere continuar su formación (máster y doctorado), especializarse en un campo determinado o incorporarse al mercado laboral, las técnicas de determinación estructural van a serle útiles, si no imprescindibles. Se emplean ampliamente en todas las áreas de la química y también en disciplinas relacionadas como bioquímica, geología, ciencia e ingeniería de materiales, investigación médica y farmacéutica, etc. La identificación de compuestos, nuevos o ya conocidos, el seguimiento de reacciones químicas, la determinación del grado de pureza de una sustancia o el diseño de nuevos materiales, cuyas propiedades se relacionan con su estructura, son algunos campos en los que se aplican los conocimientos y habilidades que se adquieren en esta asignatura.

Evaluación

Actividades de evaluación

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

- 1:**
Evaluación continua

Se realizarán dos pruebas parciales escritas de contenido teórico-práctico. La calificación final de la asignatura se obtendrá como la media aritmética de las calificaciones de cada una de las pruebas parciales. Para promediar será necesario alcanzar un mínimo de 4 puntos (sobre 10) en cada una de las pruebas parciales. La asignatura se considerará aprobada si se obtiene una calificación mínima de 5 puntos (sobre 10) en el promedio de los dos exámenes parciales.
- 2:**
Prueba global

Los alumnos que no se acojan al sistema de evaluación continua, que no superen la asignatura por este procedimiento o que quieran mejorar su calificación, tendrán derecho a presentarse a una prueba global que 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](#) 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.html>

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

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

- 1.- Clases magistrales, en las que se expondrán los fundamentos teóricos de las distintas técnicas y cómo se aplican a la determinación estructural.
- 2.- Resolución de problemas y cuestiones aplicadas. Discusión colectiva de la resolución de los problemas y cuestiones, de complejidad creciente.
- 3.- Demostraciones relacionadas con la preparación de muestras y la medida de las propiedades espectroscópicas de compuestos seleccionados.

La asignatura tiene 6 créditos ECTS, que serán impartidas por profesorado del Departamento de Química Orgánica (3 créditos ECTS) y del Departamento de Química Inorgánica (3 créditos ECTS).

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: 3 ECTS.

Clases de resolución de problemas y cuestiones aplicadas y demostraciones: 3 ECTS.

Las sesiones serán de 1 hora y se impartirán 4 sesiones por semana durante todo el semestre. Las clases de resolución de problemas y demostraciones se irán intercalando entre las clases magistrales, de modo que, tras presentar los fundamentos y características de cada técnica, se pasará a presentar ejemplos prácticos de aplicación y resolución de problemas relacionados.

2:

Programa de Contenidos

1. Generalidades de análisis y caracterización de compuestos químicos.
2. Espectroscopia 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 y apantallamiento. Equivalencia química. Integración. Acoplamiento spin-spin. Estudio de grupos funcionales de interés. Manejo de tablas. 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. 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. Núcleos con diferentes valores de espín nuclear y

- diferentes abundancias isotópicas. Satélites. Sistemas de spin. Problemas y casos prácticos.
- 8. Espectros de RMN de primer y segundo orden. Inequivalencia química y magnética. Simplificación de espectros. Fluxionalidad en compuestos químicos. Problemas y casos prácticos.
 - 9. Espectroscopia ultravioleta-visible. Cromóforos de interés general. Espectros electrónicos: tipos de transiciones. Situación en el ión libre y en el ión complejo. Desdoblamientos de los orbitales d: aproximaciones de campo fuerte y campo débil. Diagramas de correlación. Diagramas de Tanabe-Sugano. Reglas de selección. Efecto Jahn-Teller. Problemas y casos prácticos.
 - 10. Susceptibilidades magnéticas en complejos de metales de transición. Momento magnético efectivo. Contribución orbital. Problemas y casos prácticos.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Los horarios de las clases y las fechas del examen global se podrán consultar en la página web de la universidad:
<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

Habrá dos exámenes parciales, a mediados y al final del semestre. Las fechas exactas se comunicarán con suficiente antelación en el tablón de anuncios y a través del ADD.

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Determinación estructural de compuestos orgánicos / E. Pretsche ... [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 2^a edición, Antonio Herrera Fernández, Roberto Martínez Álvarez . 2^a ed. act. y amp. Madrid : Síntesis, D.L. 2005
- Pretsche, E.. Structure determination of organic compounds. Tables of spectral data.. 4th revised and enlarged Springer 2001.
- 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