

DATOS DE LA ASIGNATURA							
Titulación:	Licenciatura en Química				Plan:	2004	
Asignatura:	Determinación estructural				Código:	8034	
Créditos Totales LRU:	6	Teóricos:	4	Prácticos:	2		
Créditos Totales ECTS	5.5	Teóricos:	3.6	Prácticos:	1.8		
Descriptor (BOE):	Aplicación de las técnicas espectroscópicas a la determinación de la estructura de los compuestos químicos						
Departamento:	Ing. Química	Área de Conocimiento:			Química Orgánica		
Tipo: (troncal/obligatoria/optativa)	T	Curso:	4	Cuatrimestre:	1	Ciclo:	2

	PROFESOR/ES	E-mail	Ubicación	Teléfono
Responsable:	M ^a Auxiliadora Prieto Cárdenas	maria.prieto@diq.uhu.es	P.3 N.6-23	959218206
Otros:				
Dirección página WEB de la asignatura				

DOCENCIA EN EL CURSO 2008-2009	
Contexto de la asignatura	<p><u>En el Plan de Estudios:</u> Una de las tareas más importantes de la química orgánica es la determinación de las estructuras de las moléculas orgánicas. Cuando se aísla un compuesto a partir de un producto natural, se debe determinar su estructura antes de sintetizarlo. Siempre que se lleva a cabo una reacción, se ha de determinar si el producto tiene la estructura deseada. En las asignaturas del área del Química Orgánica estudiadas hasta ahora se ha hecho especial hincapié en la reactividad y síntesis orgánicas, esta asignatura complementa los conocimientos de química orgánica que un químico debe poseer.</p> <p><u>Repercusión en el perfil profesional:</u> En el ejercicio profesional del Licenciado en Química es necesario el conocimiento de las técnicas necesarias para la determinación de las estructuras de los compuestos químicos. Como se ha comentado siempre que se lleva a cabo una reacción, se ha de determinar la estructura del compuesto obtenido y también es necesario conocer la estructura de un producto no deseado para poder alterar las condiciones de reacción y obtener el compuesto de interés.</p>

Objetivo General de la Asignatura:	Se pretende que los alumnos adquieran los conocimientos básicos de las técnicas de caracterización de uso más general en Química Orgánica.
Competencias y destrezas teórico-prácticas a adquirir por el alumno:	Desarrollar su capacidad de comprensión de la estructura espacial y los métodos instrumentales que se utilizan para determinar la estructura de los compuestos orgánicos.
Contribución al desarrollo de habilidades y destrezas Genéricas:	Desarrollar la capacidad de trabajo en equipo, búsqueda de información y sistematización de la información. Capacidad para la resolución de problemas.
Prerrequisitos:	No existen
Recomendaciones	Haber cursado la asignatura de Química Orgánica de segundo curso

Bloques Temáticos:	Bloque I. Espectroscopia UV e IR Bloque II. Espectrometría de masas. Bloque III. Resonancia Magnética Nuclear
Competencias a adquirir por Bloques Temáticos	(Anexo 1)

<p>Temario Teórico y Planificación Temporal:</p>	<p>Bloque I. Espectroscopia UV e IR Tema 1. Métodos generales de determinación de estructuras: métodos químicos y métodos físicos. (2 horas) Introducción.- Métodos espectroscópicos.- El espectro electromagnético.- Absorción de la luz: Ley de Beer-Lambert.- Espectroscopia UV-Visible Tema 2. Espectroscopia Infrarroja. (3 horas) Introducción.- El oscilador armónico.- Tipos de vibraciones.- Moléculas poliatómicas.- Espectrofotómetro de FTIR.- Preparación de muestras.- Interpretación de espectros de IR.</p> <p>Bloque II. Espectrometría de masas. Tema 3. Espectrometría de masas. (4 horas) Introducción.- Teoría e instrumentación.- Producción de iones.- Tipos de iones. Alta resolución: determinación de masas moleculares. Fragmentación de iones positivos.- Reglas generales de fragmentación de moléculas orgánicas.- Análisis del espectro de masas.- Ejemplos representativos.</p> <p>Bloque III. Resonancia Magnética Nuclear. Tema 4. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear I. (4 horas) Introducción.- Principios básicos de la resonancia magnética nuclear.- Momento angular y momento magnético.- Poblaciones de los niveles de energía.- Descripción del método de pulsos.- Espectrómetros. Desplazamiento químico.- Efectos de pantalla.- Efecto inductivo y efecto mesómero.- Efecto del grupo vecino: Anisotropía magnética.- Intensidades de las bandas.- Sustancias de referencia.- Disolventes. Tema 5. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear II. (4 horas) Acoplamiento spin-spin. Constante de acoplamiento.- Espectros de primer orden. Reglas de desdoblamiento.- Equivalencia química y equivalencia magnética.- Sistemas de spin.- Factores que influyen en la constante de acoplamiento. Correlaciones desplazamiento químico-estructura molecular.- Espectros complejos. Efecto tejado.- Grupos homotópicos, enantiotópicos y diastereotópicos.- Estereoisomería y RMN. Protones unidos a heteroátomos. Intercambio químico.- Acoplamientos de protones con otros núcleos.- Experimentos de doble resonancia. Desacoplamiento de spin.- Proximidad en el espacio ^1H-^1H: NOE (Nuclear Overhauser Effect). Tema 6. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear III. (4 horas) Resonancia magnética de ^{13}C.- Desacoplamiento en banda ancha, "off resonance" y desacoplamiento selectivo de protones.- Experimentos DEPT.- Correlaciones espectrales.- Resonancia de otros núcleos (^{31}P, ^{15}N, ^{19}F). Tema 7. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear IV. (4 horas) Experimentos de doble dimensión: COSY, HETCOR, TOCSY, NOESY y HMBC.- Resonancia magnética de imagen.</p> <p>Tema 8. Utilización de las técnicas espectroscópicas combinadas en la resolución de problemas de determinación estructural. (3 horas)</p>
<p>Temario Práctico y Planificación Temporal:</p>	

<p>Metodología Docente Empleada:</p>	<ul style="list-style-type: none"> - Sesiones académicas teórico-prácticas. Dirigidas a estructurar los contenidos y clarificar los conceptos. Se realizarán en el aula y en ellas se abordarán los contenidos desde una perspectiva comunicativa, fomentando la participación de los alumnos y la realización de ejercicios como instrumentos para mejorar la significatividad de los conocimientos conseguidos. El trabajo realizado en el aula estará apoyado con diversos recursos educativos como presentaciones en powerpoint, modelos moleculares, etc. - Sesiones académicas prácticas Los seminarios monográficos están orientados al desarrollo de procedimientos, entre ellos la resolución de problemas, la simulación mediada por ordenador, el uso de Internet para buscar información, la utilización de los equipos estudiados en las sesiones teóricas, etc. Estas sesiones están enfocadas, para que el profesor ejerza el papel de mediador u orientador y sea el alumno quien protagonice y desarrolle la tarea, tomando conciencia de las dificultades y estableciendo estrategias dirigidas a buscar soluciones. Estas actividades complementan los tratamientos teóricos que, planteados en un contexto práctico, adquieren interés y, sobre todo, permiten ser contextualizados. A través de ella se potenciarán habilidades relacionadas con el trabajo científico: acotación de problemas desestructurados, diseño de estrategias, planteamiento de hipótesis, diseño de experiencias, análisis de resultados, elaboración de informes, etc. - Actividades académicamente dirigidas: <ol style="list-style-type: none"> a) Seminarios monográficos dirigidos al uso de las NTIC. Internet pone a disposición de los alumnos información y recursos (aplicaciones) fundamentales en su formación. Este trabajo personal de los alumnos será apoyado por la adecuada formación inicial, autorizado a lo largo del tiempo por el profesor y evaluado por los informes y pruebas necesarias. b) Resolución de problemas por equipos. 		
<p>Técnicas Docentes: (marcar con X lo que proceda)</p>	<p>Sesiones teóricas X</p>	<p>Presentaciones PC X</p>	<p>Diapositivas</p>
	<p>Transparencias</p>	<p>Sesiones prácticas</p>	<p>Lectura de artículos</p>
	<p>Visitas / excursiones X</p>	<p>Web específicas X</p>	<p>Otras (indicar)</p>
<p>Criterios de Evaluación: (detallar)</p>	<ol style="list-style-type: none"> a) Relativos al conocimiento de los contenidos conceptuales tratados en la asignatura y a su uso en la resolución de problemas. <ul style="list-style-type: none"> - Conocimiento de las diferentes técnicas. - Conocimiento de la utilización de las tablas de elucidación estructural. - Aplicar los conocimientos adquiridos en la resolución de la estructura de compuestos orgánicos. b) Relativos a la realización de actividades académicamente dirigidas. <ul style="list-style-type: none"> - Conocimiento de los contenidos abordados. - Asistencia y participación en las actividades. - Calidad de los informes redactados y de la exposición del trabajo. <p>La calificación de la asignatura será obtenida del siguiente modo:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Examen global: 70% de la calificación total. - Resolución de problemas, informes redactados y exposiciones: 30% de la calificación total. <p>Para superar la asignatura los alumnos deben sacar un 5.0 en el examen global.</p> 		

<p>Bibliografía Fundamental:</p> <p>(indicar las 5 más significativas)</p>	<p>“Spectrometric identification of organic compounds” R.M. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle. (Wiley)</p> <p>“Organic Structures from Spectra” L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman (Wiley)</p> <p>“Introduction to Organic Spectroscopy”, L. M. Harwood, T. D. W. Claridge (Oxford Chemistry Primers, Ed. Oxford University Press).</p> <p>“Organic Spectroscopic Analysis”, R. J. Anderson, D. J. Bendell, P. W. Groundwater (Tutorial Chemistry Texts, Ed. RSC).</p> <p>“Spectroscopic Methods in Organic Chemistry”, 5th Ed. D. H. Williams, I. Fleming (Ed. McGraw-Hill).</p> <p>“Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos”, E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon (Ed. Springer-Verlag).</p> <p>“Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy”, H. Friebolin (Ed. Wiley-VCH).</p> <p>“Spectroscopic Methods in Organic Chemistry”, M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh (Ed. Thieme).</p> <p>“Modern NMR Spectroscopy. A workbook of Chemical Problems”, J. K. M. Sanders, E. C. Constable, B. K. Hunter, C. M. Pearce (Ed. Oxford University Press).</p>
<p>Bibliografía Complementaria:</p> <p>(incluir, si procede páginas Web)</p>	<p>Problemas de RMN e IR:</p> <p>http://www.nd.edu/~smithgrp/structure/workbook.html</p> <p>http://wulfenite.fandm.edu/NMRspectroscopy/SpecProblems/index.html</p> <p>http://w3.chem.ucla.edu/~webspectra/</p> <p>http://www.chem.uic.edu/web1/OCOL-II/WIN/SPEC.HTM</p> <p>Bases de datos de espectros:</p> <p>http://spectra.galactic.com/SpectraOnline/Default_ie.htm</p> <p>http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/menu-e.html</p> <p>Teoría en la web:</p> <p>http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/</p>

Horas de trabajo del alumno (ver tabla ECTS)									
Presencial			Estudio			AAD (especificar)	Otros Trabajos	Examen incluyendo preparación	TOTAL
Teoría	Problemas	Prácticas	Teoría	Problemas	Prácticas				
28	20		30	15		12 (Anexo 2)	11.1	30	146.0 5

(AAD = Actividades Académicas Dirigidas)

CRONOGRAMA	(Anexo 3)
------------	-----------

ANEXO 1

Competencias a adquirir por Bloques Temáticos

La siguiente Tabla recoge las capacidades (columna primera) a adquirir por el estudiante en las distintas unidades temáticas (fila primera) de la asignatura. En cada una de las unidades temáticas se entienden incluidas todas las actividades derivadas de la docencia teórica, práctica y dirigida.

Capacidad	Bloque I (UV e IR)	Bloque II (RMN)	Bloque III (EM) (identificar)
Conocimiento y comprensión de conceptos básicos	X	X	X	
Planificación del trabajo			X	
Análisis y discusión de bibliografía				
Análisis y discusión de datos	X	X	X	
Resolución de problemas	X	X	X	
Trabajo en equipo	X	X	X	
Compromiso ético y/o ambiental			X	
Destreza técnica	X	X	X	
Otras				

Anexo 2 (ejemplo)

Relación de Actividades Académicas Dirigidas para la asignatura de Determinación Estructural, de 4º. curso de Ldo. en Ciencias Químicas

Se realizarán según el cronograma, para las distintas sesiones. Las AAD se realizarán sobre los distintos bloques temáticos de la asignatura, y lógicamente contribuirán de manera significativa a alcanzar las competencias indicadas en los bloques temáticos.

Actividad Dirigida 1. Resolución de boletín de ejercicios. Bloque I.

Actividad Dirigida 2. Resolución de boletín de ejercicios. Bloque II.

Actividad Dirigida 3. Determinación estructural de un compuesto orgánico todas las técnicas estudiadas.

Actividad Dirigida 4. Determinación estructural de un compuesto orgánico todas las técnicas estudiadas.

D1. Resolución de problemas por equipos. Se organizarán grupos de trabajo donde los compañeros se prestarán ayuda a la hora de resolver los problemas planteados, de esta manera los alumnos se ayudaran a superar las dificultades que se encuentren en la resolución de los mismos.

D2. Utilización de recursos de la web. La actividad se desarrollará en el aula de informática.

ANEXO 3

Cronograma orientativo (se indica la temporización de la asignatura por semanas)

Unidades temáticas:

(B1) Bloque 1: **Espectroscopia UV e IR**: 5h(T) + 2h(P)

(B2) Bloque 2: **Espectrometría de masas..**: 4h(T) + 1h(P)

(B3) Bloque 3: **Resonancia Magnética Nuclear**: 16h(T) + 1h(P)

(

Dedicación presencial (incluye actividades dirigidas)

Actividad	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
Clases de teoría	B1(3T)	B1(2T) B2(1T)	B2(3T)	B3(3T)	B3(2T)	B3(2T)	B3(2T)	B3(2T)	B3(2T)	B3(2T)	B3(1T)				
Clases prácticas	B1(1P)	B1(1P)	B2(1P)	B3(1P)	B3(1P)	B3(2P)	B3(2P)	B3(2P)	B3(2P)	B3(1P)	B3(1P)	B3(1P)	B3(2P)	B3(2P)	
Clases de problemas															
Actividades dirigidas			AD1 G1,G2	AD1 G3,G4		AD2 G1,G2	AD1 G3,G4			AD3 G1,G2	AD3 G3,G4			AD4 G1,G2	AD4 G3,G4

Según consta en la tabla de adaptación ECTS de cuarto curso:

(S1, S2, S3... : semana 1, semana 2, semana 3...)

Clases teóricas: 25 horas

Clase de problema: 20 horas

Clases laboratorio: Actividades Académicas Dirigidas: 12 horas. Cada grupo de Teoría (25) se dividirá en 4 grupos (G1, G2, G3 y G4) de 6 alumnos

Dedicación no presencial (según consta en la tabla de adaptación ECTS de cuarto curso)

Actividad	Horas Totales	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14
Estudio de teoría	42	2	2	2	2	2	2	2	3	3	4	4	4	5	5
Estudio de problemas	15	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Estudios de prácticas		VER CUADRANTE DE PRÁCTICAS DE LA TITULACIÓN													
Exámenes incluyendo preparación	30					2	2	2	2	3	4	4	4	4	4