

DATOS DE LA ASIGNATURA					
Asignatura:	Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos			Código:	757509210
Módulo:	Fundamental			Materia:	Química Orgánica
Carácter:	Obligatorio	Curso:	3º	Cuatrimestre:	1
Créditos ECTS	6.0	Teóricos:	6.0	Prácticos:	
Departamento/s:	Ingeniería Química, Química Física y Química Orgánica		Área/s de Conocimiento:	Química Orgánica	

PROFESOR/A		E-mail	Ubicación	Teléfono
Prof 1: Jesús Fernández Arteaga		<a href="mailto:jesus.fernandez@diq.uhu.es">jesus.fernandez@diq.uhu.es</a>	P3-N6-11	959219999
Prof 2:				
Prof 3:				
Horario Tutorías	Prof. 1	J, 11:30-14:30; V 9:00-12:00		
	Prof. 2			
	Prof. 3			
Campus Virtual	<input checked="" type="checkbox"/> Web CT <input type="checkbox"/> Página web:			

<b>Contexto de la asignatura</b>	<p><b>Encuadre en el Plan de Estudios</b></p> <p>En las asignaturas previas impartidas pertenecientes al Área de Química Orgánica se ha estudiado la diferente funcionalización de las moléculas orgánicas así como su reactividad y síntesis. En el ámbito de la Química Orgánica la determinación de la estructura de las moléculas orgánicas ocupa un lugar determinante ya que se emplea tanto para la identificación de compuestos aislados a partir de fuentes naturales, como en el trabajo de síntesis de laboratorio para comprobar si el producto obtenido posee la estructura deseada.</p> <p><b>Repercusión en el perfil profesional</b></p> <p>El conocimiento tanto teórico como práctico de las diferentes técnicas empleadas para la caracterización de estructuras es indispensable para el correcto desempeño profesional de un Químico.</p>
<b>Objetivo General de la Asignatura:</b>	<p>El objetivo fundamental es que el alumno sea capaz de determinar la estructura de un compuesto desconocido, sobre la base de la información espectroscópica obtenida a partir de los espectros de UV-Vis., IR, RMN y Masas. El alumno deberá comprender los principios físicos sobre los que se basa cada técnica, los aspectos experimentales e instrumentales, la información estructural que proporciona cada método y finalmente el alumno deberá hacer uso de la información estructural que le ha proporcionado cada método, para proponer la estructura del compuesto.</p>
<b>Competencias básicas o transversales</b>	<p>B1. Capacidad de análisis y síntesis.          B6. Resolución de problemas.          B8. Trabajo en equipo.          B9. Razonamiento crítico.</p>

<p><b>Competencias específicas</b></p>	<p>C3. Conocer los principios y procedimientos usados en el análisis químico y en la caracterización de los compuestos químicos. C4. Conocer las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo Espectroscopía. C10. Conocer los aspectos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo estereoquímica. C16. Conocer las técnicas instrumentales y sus aplicaciones Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico y profesional.</p>
<p><b>Recomendaciones</b></p>	<p>Haber cursado las asignaturas de Conceptos Básicos de Química Orgánica y Química Orgánica de segundo curso.</p>
<p><b>BLOQUES TEMÁTICOS</b></p>	<p><b>Bloque I.</b> Espectrometría de masas. <b>Bloque II.</b> Espectroscopía UV e IR. <b>Bloque III.</b> Resonancia Magnética Nuclear. <b>Bloque IV.</b> Resolución de ejercicios complejos.</p>
<p><b>Temario Teórico y Planificación Temporal:</b></p>	<p><b>Bloque I. Espectrometría de masas.</b> (5 horas) -Tema 1. Introducción a la de determinación de estructuras: (2 horas) Métodos químicos y métodos físicos. Métodos espectroscópicos. -Tema2. Espectrometría de masas: (3 horas) Introducción. Instrumentación. Métodos de ionización. Tipos de iones. Determinación de masas moleculares. Fragmentación de iones positivos. Reglas generales de fragmentación de moléculas orgánicas. Análisis del espectro de masas. Ejemplos representativos</p> <p><b>Bloque II. Espectroscopía UV e IR.</b> (7 horas) -Tema 3. Espectroscopía Ultravioleta: (3 horas) El espectro electromagnético. Absorción de la luz: Ley de Beer-Lambert. Espectroscopía UV-Visible. -Tema 4. Espectroscopía Infrarroja: (4 horas) Introducción. Tipos de vibraciones. Enlace de hidrógeno. Moléculas poliatómicas. Absorción característica de distintos grupos funcionales. Espectrofotómetro de FTIR. Preparación de muestras. Interpretación de espectros de IR.</p> <p><b>Bloque III. Resonancia Magnética Nuclear.</b> (24 horas) -Tema 5. Magnetismo Nuclear, RMN: (4 horas) Principios básicos de la resonancia magnética nuclear. Espectrómetros. Desplazamiento químico. Efectos que influyen en RMN. Intensidades de las bandas. Sustancias de referencia. Disolventes. -Tema 6. Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear de <math>^1\text{H}</math>: (8 horas) Acoplamiento spin-spin. La Constante de acoplamiento. Correlaciones desplazamiento químico-estructura molecular. Espectros complejos. Grupos homotópicos, enantiotópicos y diastereotópicos. Estereoisomería y RMN. Acoplamientos de protones con otros núcleos. Experimentos de doble resonancia. Desacoplamiento de spin. Efecto NOE (Nuclear Overhauser Effect): Proximidad en el espacio <math>^1\text{H}</math>-<math>^1\text{H}</math>. -Tema 6. Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear de <math>^{13}\text{C}</math>: (6 horas) Resonancia magnética de <math>^{13}\text{C}</math>. Técnicas de desacoplamiento. Análisis cuantitativo <math>^{13}\text{C}</math>. Experimentos DEPT. Correlaciones espectrales. -Tema 7. Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear 2D: (5 horas) COSY, HETCOR, TOCSY, NOESY y HMBC. Resonancia magnética de imagen. -Tema 8. RMN con otros núcleos importantes: (1 hora) <math>^{31}\text{P}</math>, <math>^{15}\text{N}</math>, <math>^{19}\text{F}</math>.</p> <p><b>Bloque IV. Resolución de ejercicios complejos.</b> (9 horas)</p>

<b>Temario Práctico y Planificación Temporal:</b>	
<b>Actividades Dirigidas y Planificación Temporal</b>	<b>AD 1.</b> Resolución de cuestiones y problemas del bloque I y bloque II (semanas 1-6). <b>AD 2.</b> Resolución de cuestiones y problemas del bloque III (semanas 7-13). <b>AD 3.</b> Resolución de cuestiones y problemas del bloque IV (semanas 13-15).
<b>Metodología Docente Empleada:</b>	<p><b>1. Sesiones académicas teórico-prácticas.</b></p> <p>Dirigidas a estructurar los contenidos y clarificar los conceptos teóricos. Se apoyan en el empleo de diversos recursos educativos como presentaciones en PowerPoint, modelos moleculares, simulaciones virtuales, etc., para exponer los fundamentos teóricos de la asignatura. Las clases se desarrollan de manera interactiva con los alumnos, discutiendo con ellos los aspectos que resultan más dificultosos o especialmente interesantes de cada tema.</p> <p><b>2. Sesiones académicas prácticas.</b></p> <p>Los <u>seminarios monográficos</u> 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. Los <u>seminarios de problemas</u> pretenden potenciar la resolución de ejercicios y discusiones con objeto de reforzar los aspectos teóricos, aplicando los conocimientos previamente adquiridos. Se hará hincapié en la comprensión del mecanismo de resolución y resaltando la relación de los problemas con aplicaciones prácticas. 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.</p> <p><b>3. Actividades académicamente dirigidas.</b></p> <p>a) Seminarios monográficos dirigidos al uso de las TIC. 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.</p> <p>b) Resolución de problemas por equipos.</p>

**Criterios de Evaluación:**

-Las competencias adquiridas en cada unidad temática se evaluarán conjuntamente con las distintas actividades de la asignatura, es decir, con las calificaciones de la docencia teórica, práctica y de las actividades académicas dirigidas.

-Criterios de evaluación:

a) Relativos al conocimiento de los contenidos conceptuales tratados en la asignatura y a su uso en la resolución de problemas.

- 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.

- Conocimiento de los contenidos abordados.

- Asistencia y participación en las actividades.

- Calidad de los informes redactados y de la exposición del trabajo.

-La calificación final de la asignatura se obtendrá con los siguientes sumandos:

1. Calificación obtenida en el examen final de la asignatura. Supondrá el 75% de la calificación de la asignatura. El examen constará de preguntas teóricas y problemas. Para superar la asignatura habrá que obtener 5 puntos sobre 10 en el examen.

2. Calificación obtenida por la realización y/o exposición de trabajos realizados (bibliográficos, problemas, cuestiones), individualmente o en equipo y otras actividades académicas dirigidas (supondrá el 25% de la calificación de la asignatura).

**Distribución Horas Presenciales**

**Grupo Grande**

**Grupo Pequeño**

**Laboratorio**

**Lab. Informática**

**Campo**

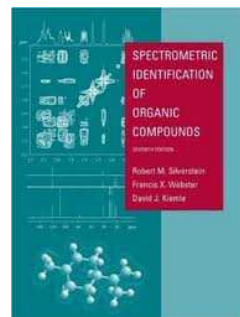
3.78

2.22

**Bibliografía:**

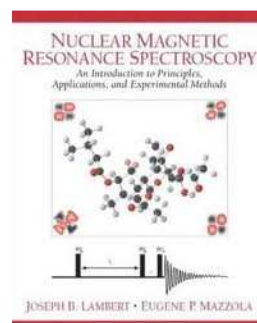
**- Bibliografía de Referencia:**

- "Spectrometric identification of organic compounds" R.M. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle. (Wiley, 7th Edition).

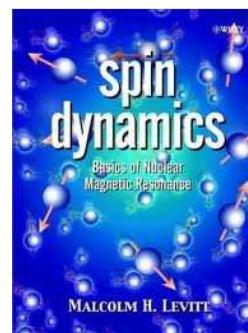


**- Bibliografía complementaria:**

- "Nuclear Magnetic Resonance and Spectroscopy" J. B. Lambert, E. P. Mazzola (Pearson)



- "Spin Dynamics, Basics of Nuclear Magnetic Resonance" M. H. Levitt (Wiley, 2nd Edition 2008).



- "Organic Structures from Spectra" L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman (Wiley)
- "Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos", E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon (Ed. Springer-Verlag).
- "Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy", H. Friebolin (Ed. Wiley-VCH).

**- Bibliografía on-line**

Problemas de RMN e IR:

- <http://www.nd.edu/~smithgrp/structure/workbook.html>
- <http://www.chem.ucalgary.ca/courses/351/spectroscopy/index.html>
- <http://wulfenite.fandm.edu/NMRspectroscopy/SpecProblems/index.html>
- <http://w3.chem.ucla.edu/~webspectra/>
- <http://www.chem.uic.edu/web1/OCOL-II/WIN/SPEC.HTM>

Bases de datos de espectros:

- [http://spectra.galactic.com/SpectraOnline/Default\\_ie.htm](http://spectra.galactic.com/SpectraOnline/Default_ie.htm)
- <http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/menu-e.html>

Teoría en la web:

<http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/>

Libro virtual de Química Orgánica. Parte III Espectroscopía

<http://www.cem.msu.edu/~reusch/VirtualText/Spectrpy/spectro.htm>