

Determinación Estructural

Código: 102532
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	3	1

Contacto

Nombre: Ona Illa Soler

Correo electrónico: Ona.Illa@uab.cat

Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: inglés (eng)

Algún grupo íntegramente en inglés: Sí

Algún grupo íntegramente en catalán: No

Algún grupo íntegramente en español: No

Equipo docente

Roger Bofill Arasa

Ona Illa Soler

Prerequisitos

- Toda la docencia, incluyendo los materiales que se ponen a disposición de los alumnos, estarán en inglés. Por lo tanto, se necesita un buen nivel de comunicación en inglés.
- Se recomienda que solo aquellos estudiantes que hayan superado la asignatura "Espectroscopia" de 2o curso se matriculen en la asignatura.
- Se asume que el estudiante está familiarizado con los conceptos básicos de la química orgánica e inorgánica. Por lo tanto, se espera que los estudiantes hayan cursado las asignaturas de 2o curso "Estructura i Reactivitat dels Compostos Orgànics" y "Química dels Elements".

Objetivos y contextualización

Este curso pretende proporcionar a los estudiantes herramientas básicas para el análisis de los datos espectroscópicos de compuestos moleculares orgánicos e inorgánicos, permitiendo así a los alumnos resolver su estructura. Se consideran diversas técnicas espectroscópicas y espectrométricas (espectrometría de masas y espectroscopía UV-vis, IR y resonancia magnética nuclear), aunque la mayor parte de los esfuerzos se dedicarán al análisis de datos de RMN.

Los objetivos específicos de esta asignatura son:

- Introducir la técnica de espectrometría de masas y revisar los conceptos básicos de espectroscopía UV-vis, IR y RMN vistas en la asignatura "Espectroscòpia" de 2º curso.
- Introducir conceptos avanzados en espectroscopía de RMN.
- Utilizar este conocimiento para llevar a cabo el análisis de los espectros de masas, UV-vis, IR y 1D de RMN de compuestos moleculares orgánicos e inorgánicos.
- Detallar la estructura de estos compuestos a partir de sus datos espectroscópicos.

Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones
- Aplicar los conocimientos químicos a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en ámbitos familiares y profesionales
- Aprender de forma autónoma
- Comunicarse con claridad en inglés
- Demostrar motivación por la calidad
- Gestionar la organización y planificación de tareas
- Gestionar, analizar y sintetizar información
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiadas
- Manejar instrumentos y material estándares en laboratorios químicos de análisis y síntesis
- Mantener un compromiso ético
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos
- Proponer ideas y soluciones creativas
- Razonar de forma crítica
- Reconocer y analizar problemas químicos y plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas
- Resolver problemas y tomar decisiones
- Utilizar correctamente la lengua inglesa en el ámbito de la Química
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información

Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones
2. Analizar problemas químicos y planear a nivel espectroscópico respuestas o trabajos adecuados para su resolución, utilizando modelos moleculares y fuentes bibliográficas
3. Aprender de forma autónoma
4. Comunicarse con claridad en inglés
5. Demostrar motivación por la calidad
6. Evaluar la mejor metodología espectroscópica para la resolución de un problema estructural
7. Evaluar las capacidades de la información contenida en las redes on line
8. Examinar bases de datos espectroscópicas y otros datos bibliográficos relacionados
9. Gestionar la organización y planificación de tareas
10. Gestionar, analizar y sintetizar información
11. Innovar métodos para adecuarlos a la interpretación de una estructura molecular concreta
12. Interpretar los datos obtenidos en las medidas experimentales para expresar una estructura química
13. Interrelacionar bases de datos y programas de cálculo para determinar una estructura
14. Manejar los términos químicos más habituales en inglés
15. Mantener un compromiso ético
16. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos
17. Proponer ideas y soluciones creativas
18. Razonar de forma crítica
19. Reconocer la terminología inglesa en las bases de datos bibliográficos e información on line
20. Reconocer y analizar problemas químicos estructurales en compuestos orgánicos e inorgánicos
21. Resolver problemas y tomar decisiones
22. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información
23. Utilizar los métodos espectroscópicos [IR, UV-VIS, RMN (^1H , ^{13}C) y EM] para la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en el ámbito de la estructura y relaciones intra- e intermoleculares

Contenido

1. Introducción a la espectrometría de masas (MS)

Antecedentes y método experimental. Resolución espectral. Análisis de isótopos. Procesos de fragmentación: rotura de enlace homolítica y heterolítica. Patrones de fragmentación asociados a grupos funcionales específicos. Ejemplos.

2. Conceptos básicos en espectroscopia electrónica (UV-Vis), Infrarrojo (IR) y Resonancia Magnética Nuclear (RMN).

Los métodos experimentales. Cromóforos UV-vis en moléculas orgánicas. IR: absorciones de grupos funcionales orgánicos e interpretación de espectros IR. Tablas de grupos funcionales (IR). Aspectos básicos de los espectros de RMN: desplazamientos químicos, rangos espectrales y referencias.

3. ¹H RMN: el desplazamiento químico.

Mecanismos de apantallamiento. Relaciones tópicas y simetría molecular. Otros factores que influyen en el desplazamiento químico: anisotropía magnética, efectos de los disolventes. Correlaciones: hidrógenos enlazados al carbono, hidrógenos enlazados a otros núcleos. Simulaciones espectrales. Ejemplos.

4. ¹H RMN: acoplamiento spin-spin.

Conceptos básicos sobre interacción spin-spin, constantes de acoplamiento y patrones de multiplicidad. La ecuación de Karplus. Sistemas de spin: relación $\Delta\nu / J$, espectros de primer y segundo orden. Acoplamientos heteronucleares. Ejemplos.

5. ¹H RMN: análisis de los espectros.

Fenómenos dependientes del tiempo. Métodos de análisis. Simplificación de espectros: cambio de campo magnético, desacoplamiento de spin, reactivos de desplazamiento. La relajación cruzada y el efecto nuclear de Overhauser (NOE). Introducción a la espectroscopia RMN 2D. Ejemplos.

6. ¹³C RMN.

Visión general. Métodos de registro (banda ancha, off-resonance, DEPT). Desplazamientos químicos: aditividad y simulaciones espectrales. Acoplamientos spin-spin. Análisis de los espectros. Ejemplos

7. RMN de otros núcleos.

¹H RMN en compuestos inorgánicos, incluidos los complejos metálicos. RMN ³¹P, RMN ¹⁹F, RMN ¹⁴N y ¹⁵N. Complejos metálicos: RMN multinuclear.

8. Determinación estructural.

Aplicación combinada de las técnicas espectroscópicas. Ejemplos.

Metodología

Se desarrollarán dos tipos de actividades diferentes en el aula:

Clases teóricas

El profesor explicará los contenidos del curso en el aula con pizarra y material multimedia, que se pondrán a disposición de los alumnos al "Moodle". Después de un conjunto de sesiones magistrales que tendrán lugar durante las primeras semanas para introducir conceptos básicos, el resto de las clases teóricas se basarán en un enfoque de "aprendizaje basado en problemas".

Sesiones de resolución de problemas

Se colgarán en "Moodle" un conjunto de ejercicios al principio del curso. Varios de ellos serán tratados durante las sesiones de resolución de problemas. Por otra parte, en algunas de estas sesiones los estudiantes deberán resolver ejercicios (evidencias) para las que se dará una nota.

Nota importante

La enseñanza, incluidos todos los materiales y evaluación (por ejemplo, diapositivas, problemas, exámenes) se realizarán en inglés. Se recomienda a los estudiantes que utilicen el inglés al responder los ejercicios de evaluación o comunicarse con los profesores. A pesar de ello, el uso del catalán y del castellano también será aceptado.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases teóricas	38	1,52	6, 7, 4, 5, 8, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 20, 21, 23
Seminarios	2	0,08	1, 2, 6, 7, 4, 5, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 17, 18, 19, 21, 23, 22
Sesiones de resolución de problemas	12	0,48	6, 4, 5, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 20, 21, 23
Tipo: Autónomas			
Estudio personal	40	1,6	3, 7, 5, 9, 10, 14, 15, 16, 18, 20, 19
Resolució de problemas	46	1,84	1, 3, 6, 7, 5, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 20, 19, 21, 23, 22

Evaluación

1. La nota global se desglosará de la siguiente manera:

Resolución de problemas (15%) + 1er examen parcial (35%) + 2º examen parcial (50%) = 100%

La evaluación de los estudiantes incluirá los siguientes elementos:

Resolución de problemas: se entregará periódicamente un número de ejercicios cortos a los estudiantes. Se realizarán durante la clase. Se dará una nota a cada ejercicio, y la nota más baja quedará excluida de la evaluación. La nota media de los ejercicios y las preguntas de clase supondrán el 15% de la nota global del curso.

Exámenes escritos: se realizarán dos exámenes parciales durante el curso que representarán el 35% y el

50% de la nota global del curso, respectivamente.

Para aprobar la asignatura, los estudiantes deben cumplir con los dos requisitos siguientes:

A) La nota media ponderada de los dos exámenes parciales debe ser como mínimo 5/10.

B) La nota global (problemas + P1 + P2) debe ser al menos 5/10.

2. También se programará un examen final y será obligatorio para aquellos con una nota media ponderada de los dos exámenes parciales inferior a 5/10. Los que tengan una nota superior a 5 pero que quieran mejorar su nota también pueden hacer el examen final.

Sólo aquellos estudiantes que han realizado los dos exámenes parciales pueden presentarse al examen final.

Para aquellos alumnos que realicen el examen final, la nota global se computará de la siguiente manera:

Resolución de problemas (15%) + 1er examen parcial (10%) + 2º examen parcial (15%) + examen final (60%)
= 100%

La fórmula se aplicará a todos los alumnos que hayan realizado el examen final, independientemente de si la nueva nota es superior o inferior a la original.

Para aprobar la asignatura, los estudiantes deben cumplir con los dos requisitos siguientes:

A) La nota media ponderada de los tres exámenes debe ser como mínimo 5/10.

B) La nota global (problemas + P1 + P2 + Examen Final) debe ser como mínimo 5/10

Los estudiantes que realicen menos de un tercio de los ítems de evaluación se clasificarán como "no presentado".

Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Exámenes	85%	8	0,32	1, 3, 6, 4, 5, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 20, 19, 21, 23
Resolución de problemas	15%	4	0,16	1, 2, 3, 6, 7, 4, 5, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 20, 19, 21, 23, 22

Bibliografía

a) Libros de texto

- D.H. Williams, I. Fleming, *Spectroscopic Methods in Organic Chemistry*, McGraw-Hill, London, 2007.
- R. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, Wiley, New York, 2005.
- P. Crews, J. Rodriguez, M. Jaspars, *Organic Structure Analysis*, Oxford University Press, New York, 2009.

b) Problemas

- L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, *Organic Structures from Spectra*, Wiley, Chichester, 2008.
- J. R. Pedro, G. Blay, 200 Problemas de Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos, Vision Libros, Madrid 2010. ISBN 978-84-9983-993-6

c) Tablas

- E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera, R. Martínez, *Determinación estructural de compuestos orgánicos*, Springer, Barcelona, 2002.
- E. Pretsch, P. Bühlmann, M. Badertscher, *Structure Determination of Organic Compounds*, Springer, Berlin, 2009.