

Determinació Estructural

Codi: 102532
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	3	1

La metodologia docent i l'avaluació proposades a la guia poden experimentar alguna modificació en funció de les restriccions a la presencialitat que imposin les autoritats sanitàries.

Professor/a de contacte

Nom: Ona Illa Soler

Correu electrònic: Ona.Illa@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: anglès (eng)

Grup íntegre en anglès: Sí

Grup íntegre en català: No

Grup íntegre en espanyol: No

Equip docent

Ona Illa Soler

Prerequisits

- Tota la docència, incloent els materials que es posen a disposició dels alumnes, seran en anglès. Per tant, es necessita un bon nivell de comunicació en anglès.
- Es recomana que només aquells estudiants que hagin superat l'assignatura "Espectroscòpia" de 2n curs es matriculin a l'assignatura.
- S'assumeix que l'estudiant està familiaritzat amb els conceptes bàsics de la química orgànica i inorgànica. Per tant, s'espera que els estudiants hagin cursat les assignatures de segon curs "Estructura i Reactivitat dels Compostos Orgànics" i "Química dels Elements".

Objectius

Aquest curs pretén proporcionar als estudiants eines bàsiques per a l'anàlisi de les dades espectroscòpiques de compostos moleculars orgànics i inorgànics, permetent així als alumnes resoldre la seva estructura. Es consideren diverses tècniques espectroscòpiques i espectromètriques (espectrometria de masses i espectroscòpia UV-vis, IR i ressonància magnètica nuclear), tot i que la major part dels esforços es dedicaran a l'anàlisi de dades de RMN.

Els objectius específics d'aquesta assignatura són:

- Introduir la tècnica d'espectrometria de masses i revisar els conceptes bàsics d'espectroscòpia UV-vis, IR i RMN vistes a l'assignatura "Espectroscòpia" de 2n curs.
- Introduir conceptes avançats en espectroscòpia de RMN.
- Utilitzar aquest coneixement per dur a terme l'anàlisi dels espectres de masses, UV-vis, IR i 1D de RMN de compostos moleculars orgànics i inorgànics.
- Detallar l'estructura d'aquests compostos a partir de les seves dades espectroscòpiques.

Competències

- "Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques; identificar-ne el significat i relacionar les dades amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades."
- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se amb claredat en anglès.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
- Manejar instruments i material estàndard en laboratoris químics d'anàlisi i síntesi.
- Mantenir un compromís ètic.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer i analitzar problemes químics i plantejar respostes o treballs adequats per a resoldre'ls.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Analitzar problemes químics i planejar a nivell espectroscòpic respostes o treballs adequats per a la seva resolució, utilitzant models moleculars i fonts bibliogràfiques.
3. Aprendre de manera autònoma.
4. Avaluar la millor metodologia espectroscòpica per a la resolució d'un problema estructural.
5. Avaluar les capacitats de la informació continguda a les xarxes en línia.
6. Comunicar-se amb claredat en anglès.
7. Demostrar motivació per la qualitat.
8. Examinar bases de dades espectroscòpiques i altres dades bibliogràfiques relacionades.
9. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
10. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
11. Innovar mètodes per adequar-los a la interpretació d'una estructura molecular concreta.
12. Interpretar les dades obtingudes en les mesures experimentals per expressar una estructura química.
13. Interrelacionar bases de dades i programes de càlcul per determinar una estructura.
14. Manejar els termes químics més habituals en anglès.
15. Mantenir un compromís ètic.
16. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
17. Proposar idees i solucions creatives.
18. Raonar de forma crítica.
19. Reconèixer i analitzar problemes químics estructurals en compostos orgànics i inorgànics.
20. Reconèixer la terminologia anglesa en les bases de dades bibliogràfiques i la informació en línia.
21. Resoldre problemes i prendre decisions.
22. Utilitzar els mètodes espectroscòpics [IR, UV-VIS, RMN (^1H , ^{13}C) i EM] per a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en l'àmbit de l'estructura i les relacions intra- i intermoleculars.
23. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Continguts

1. Introducció a l'espectrometria de masses (MS)

Antecedents i mètode experimental. Resolució espectral. Anàlisi d'isòtops. Processos de fragmentació:

trencament d'enllaç homolític i heterolític. Patrons de fragmentació associats a grups funcionals específics. Exemples.

2. Conceptes bàsics en espectroscòpia electrònica (UV-Vis), Infraroig (IR) i Ressonància Magnètica Nuclear (RMN).

Els mètodes experimentals. Cromòfors UV-vis en molècules orgàniques. IR: absorcions de grups funcionals orgànics i interpretació d'espectres IR. Taules de grups funcionals (IR). Aspectes bàsics dels espectres de RMN: desplaçaments químics, rangs espectrals i referències.

3. ^1H RMN: el desplaçament químic.

Mecanismes d'apantallament. Relacions tòpiques i simetria molecular. Altres factors que influeixen en el desplaçament químic: anisotropia magnètica, efectes dels dissolvents. Correlacions: hidrògens enllaçats al carboni, hidrògens enllaçats a altres nuclis. Simulacions espectrals. Exemples.

4. ^1H RMN: acoblament spin-spin.

Conceptes bàsics sobre interacció spin-spin, constants d'acoblament i patrons de multiplicitat. L'equació de Karplus. Sistemes de spin: relació $\Delta\nu / J$, espectres de primer i segon ordre. Acoblaments heteronuclears. Exemples.

5. ^1H RMN: anàlisi dels espectres.

Fenòmens depenents del temps. Mètodes d'anàlisi. Simplificació d'espectres: canvi de camp magnètic, desacoblament de spin, reactius de desplaçament. La relaxació creuada i l'efecte nuclear d'Overhauser (NOE). Introducció a l'espectroscòpia RMN 2D. Exemples.

6. ^{13}C RMN.

Visió general. Mètodes d'enregistrament (banda ampla, off-resonance, DEPT). Desplaçaments químics: additivitat i simulacions espectrals. Acoblaments spin-spin. Anàlisi dels espectres. Exemples

7. RMN d'altres nuclis.

^1H RMN en compostos inorgànics, inclosos els complexos metàl·lics. RMN ^{31}P , RMN ^{19}F , RMN ^{14}N i ^{15}N . Complexos metàl·lics: RMN multinuclear.

8. Determinació estructural.

Aplicació combinada de les tècniques espectroscòpiques. Exemples.

Metodologia

Es desenvoluparan dos tipus d'activitats diferents a l'aula:

Classes teòriques

El professor explicarà els continguts del curs a l'aula amb pissarra o amb material multimèdia, que es posaran a disposició dels alumnes al "Moodle". Després d'un conjunt de sessions magistrals que tindran lloc durant les primeres setmanes per introduir conceptes bàsics, la resta de les classes teòriques es basaran en un enfocament de "aprenentatge basat en problemes". En algunes d'aquestes sessions els estudiants hauran de resoldre exercicis (evidències) per a els quals es donarà una nota.

Sessions de resolució de problemes

Es penjaran al "Moodle" un conjunt d'exercicis al principi del curs. Diversos d'ells seran tractats durant les sessions de resolució de problemes. D'altra banda, en algunes d'aquestes sessions els estudiants hauran de resoldre exercicis (evidències) per a els quals es donarà una nota.

Notes importants

L'ensenyament, inclosos tots els materials i avaluació (per exemple, diapositives, problemes, exàmens) es realitzaran en anglès. Es recomana als estudiants que utilitzin l'anglès al respondre els exercicis d'avaluació o comunicar-se als professors. Malgrat això, l'ús del català i del castellà també serà acceptat.

El professorat destinarà aproximadament uns 15 minuts d'alguna classe a permetre que el seu alumnat pugui respondre les enquestes d'avaluació de l'actuació docent i d'avaluació de l'assignatura o mòdul.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes teòriques	37	1,48	4, 5, 6, 7, 8, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 21, 22
Sessions de resolució de problemes	12	0,48	4, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 21, 22
Tipus: Autònomes			
Estudi personal	43	1,72	3, 5, 7, 9, 10, 14, 15, 16, 18, 19, 20
Resolució de problemes	46	1,84	1, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23

Avaluació

1. La nota global es desglossarà de la manera següent:

Resolució de problemes (10%) + 1er examen parcial (40%) + 2n examen parcial (50%) = 100%

L'avaluació dels estudiants inclourà els següents elements:

Resolució de problemes o evidències: es lliurarà periòdicament un nombre d'exercicis curts als estudiants. Es donarà una nota a cada exercici. La nota mitjana dels exercicis i les preguntes de classe suposarà el 10% de la nota global del curs.

Exàmens escrits: es realitzaran dos exàmens parcials durant el curs que representaran el 40% i el 50% de la nota global del curs, respectivament.

Per aprovar l'assignatura, els estudiants han de complir amb els dos requisits següents:

A) La nota mitjana ponderada dels dos exàmens parcials ha de ser com a mínim 5/10.

B) La nota global (problemes + P1 + P2) ha de ser almenys 5/10.

2. També es programarà un examen final i serà obligatori per a aquells amb una nota mitjana ponderada dels dos exàmens parcials inferior a 5/10. Els que tinguin una nota superior a 5 però que vulguin millorar la seva nota també poden fer l'examen final.

Només aquells estudiants que han realitzat els dos exàmens parcials poden presentar-se a l'examen final.

Per a aquells alumnes que realitzin l'examen final, la nota global es computarà de la manera següent:

Resolució de problemes (10%) + 1er examen parcial (10%) + 2n examen parcial (15%) + examen final (65%) = 100%

La fórmula s'aplicarà a tots els alumnes que hagin realitzat l'examen final, independentment de si la nova nota és superior o inferior a l'original.

Per aprovar l'assignatura, els estudiants han de complir amb els dos requisits següents:

A) La nota mitjana ponderada dels tres exàmens ha de ser com a mínim 5/10.

B) La nota global (problemes + P1 + P2 + Examen Final) ha de ser com a mínim 5/10

Els estudiants que realitzin menys d'1/3 dels ítems d'avaluació es classificaran com a "no presentat".

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exams	85%	8	0,32	1, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Problem Solving	15%	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23

Bibliografia

a) Llibres de text

- 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.

- Simpson, Jeffrey H. *Organic Structure Determination Using 2-D NMR Spectroscopy - A Problem-Based Approach (2nd Edition)*. Elsevier, 2012. e-book: [link al llibre](#)

b) Problemes

- 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
- A. Randazo, Guía Práctica de Interpretación de Espectros de RMN, Loghia Publishing, Nápoles 2018. ISBN 978-88-95122-44-1
- Simpson, Jeffrey H. *Organic Structure Determination Using 2-D NMR Spectroscopy - A Problem-Based Approach (2nd Edition)*. Elsevier, 2012. e-book: [link al llibre](#)

c) Taules

- 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. e-book: https://cataleg.uab.cat/iii/encore/record/C__Rb1956431

Programari

No aplica