

Determinación Estructural

Código: 102532
Créditos ECTS: 6

2024/2025

Titulación	Tipo	Curso
2502444 Química	OB	3

Contacto

Nombre: Jordi Hernando Campos

Correo electrónico: jordi.hernando@uab.cat

Equipo docente

Juan Pablo Bayon Rueda

Jordi Hernando Campos

Ona Illa Soler

Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al [final](#) del documento.

Prerrequisitos

- Toda la docencia, incluyendo los materiales que se ponen a disposición del alumnado, estarán en inglés. Por lo tanto, se necesita un buen nivel de comunicación en inglés.
- Se recomienda que solo el alumnado que haya 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 el alumnado haya cursado las asignaturas de 2º curso "Estructura i Reactivitat dels Compostos Orgànics" y "Química dels Elements".

Objetivos y contextualización

Este curso pretende proporcionar al alumnado 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 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, 13C) 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 $\Delta v / J$, 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. ^{13}C 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 ^{31}P , RMN ^{19}F , RMN ^{14}N y ^{15}N . Complejos metálicos: RMN multinuclear.

8. Determinación estructural.

Aplicación combinada de las técnicas espectroscópicas. Ejemplos.

Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases teóricas	37	1,48	6, 7, 4, 5, 8, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 20, 21, 23
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	43	1,72	3, 7, 5, 9, 10, 14, 15, 16, 18, 20, 19
Resolució de problemes	46	1,84	1, 3, 6, 7, 5, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 20, 19, 21, 23, 22

Se desarrollarán dos tipos de actividades diferentes en el aula:

Clases teóricas

El profesor explicará los contenidos del curso en el aula con pizarra o material multimedia, que se pondrán a disposición del alumnado a través de "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". En algunas de estas sesiones el alumnado deberá resolver ejercicios (evidencias) para las que se dará una nota.

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 el alumnado deberá resolver ejercicios (evidencias) para las que se dará una nota.

Notas importantes

La enseñanza, incluidos todos los materiales y evaluación (por ejemplo, diapositivas, problemas, exámenes) se realizarán en inglés. Se recomienda al alumnado 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.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

Evaluación

Actividades de evaluación continuada

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

El alumnado podrá optar por dos modalidades de evaluación: evaluación continuada y evaluación única.

Evaluación continuada

La nota global se desglosará de la siguiente manera:

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

La evaluación del alumnado incluirá los siguientes elementos:

- Resolución de problemas: se entregará periódicamente un número de ejercicios cortos al alumnado. Se dará una nota a cada ejercicio. La nota media de los ejercicios supondrá el 15% de la nota global del curso.
- Exámenes escritos: se realizarán dos exámenes durante el curso que representarán el 35% y el 50% de la nota global del curso, respectivamente.

Para aprobar la asignatura, se deberán cumplir los dos requisitos siguientes:

A) La nota media ponderada de los dos exámenes (parcial 1 y 2) debe ser como mínimo 5/10.

B) La nota global (problemas + examen parcial 1 + examen parcial 2) debe ser al menos 5/10.

En el caso de que no se cumpla alguno de esos requisitos, se programará un examen de recuperación y será obligatorio para el alumnado con una nota media ponderada de los dos exámenes anteriores (parcial 1 y 2) inferior a 5/10. Los/las estudiantes que tengan una nota superior a 5 pero que quieran mejorar su nota también podrán hacer el examen final. Sólo el alumnado que haya realizado los dos exámenes anteriores (parcial 1 y 2), podrán presentarse al examen final.

Para el alumnado que realice el examen de recuperación, la nota global se computará de la siguiente manera:

Resolución de problemas (15%) + examen de recuperación (85%) = 100%

La fórmula se aplicará a todo el alumnado que haya realizado el examen de recuperación, independientemente de si la nueva nota es superior o inferior a la original.

Para aprobar la asignatura, se deberán cumplir los dos requisitos siguientes:

A) La nota del examen de recuperación debe ser como mínimo 5/10.

B) La nota global (problemas + examen de recuperación) debe ser como mínimo 5/10

Evaluación única

La nota global se obtendrá directamente de un examen único final realizado a finales de semestre. En el caso de que la nota de este examen sea menor de 5/10, se programará un examen de recuperación posteriormente. El alumnado que tenga una nota superior a 5 pero que quiera mejorar su nota, también podrá hacer el examen de recuperación. En cualquiera de estos casos, la nota del examen de recuperación sustituirá la nota previa obtenida en el examen único final. Solo el alumnado que haya realizado el examen único final podrá presentarse al examen de recuperación.

Para aprobar la asignatura, deberá cumplirse el siguiente requisito:

A) La nota del examen único final (o del de recuperación en el caso de que se haya hecho) tiene que ser como mínimo 5/10.

Independentemente de la modalidad de evaluación realizada, el alumnado que realice menos de un tercio de los ítems de evaluación se calificará como "no evaluable".

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. Jaspar, *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 libro](#)

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
- A. Randazzo, 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 libro](#)

c) Tablas

- E. Pretzsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera, R. Martínez, *Determinación estructural de compuestos orgánicos*, Springer, Barcelona, 2002.
- E. Pretzsch, P. Bühlmann, M. Badertscher, *Structure Determination of Organic Compounds*, Springer, Berlin, 2020. e-book: https://csuc-uab.primo.exlibrisgroup.com/permalink/34CSUC_UAB/1c3utr0/cdi_askewsholts_vlebooks_9

Software

No aplica

Lista de idiomas

Nombre	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(PAUL) Prácticas de aula	1	Inglés	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(PAUL) Prácticas de aula	2	Inglés	primer cuatrimestre	tarde
(TE) Teoría	1	Inglés	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(TE) Teoría	2	Inglés	primer cuatrimestre	tarde