



1. **Código:** 4089 **Nombre:** DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS ORGÁNICAS

2. **Créditos:** 4,5 **--Teoría:** 2,0 **--Prácticas:** 2,5

Centro: E.T.S.I. INDUSTRIALES

3. **Coordinador:** García Gómez, Hermenegildo

Departamento: QUIMICA

4. Bibliografía

Spectrometric identificatoion of organic compounds

Silverstein, Robert M.

5. Descripción general de la asignatura

- Descripción de los fundamentos teóricos y técnicas experimentales de las espectroscopias:
 - UV-Vis,
 - IR
 - RMN-1H y RMN-13C
 - Masas
- Establecer la estructura de compuestos orgánicos a partir de sus datos espectroscópicos y analíticos

6. Asignaturas previas o simultáneas recomendadas

Para elucidar estructuras se requiere el conocer las familias de compuestor orgánicos. Este conocimiento es básico y necesario. La espectroscopía tiene un fundamento en la estructura de la materia y en la existencia de orbitales electrónicos. Por ello ciertos conocimientos básicos sobre la estructura electrónica y de fundamentos de mecánica cuántica son necesarios. La experimentación en química permite entender la preparación y manipulación de muestras, así como las técnicas de purificación y aislamiento de compuestos.

7. Objetivos de la asignatura - Resultados del aprendizaje

Competencia

(E) Química Orgánica. Estudio de los compuestos del carbono. Síntesis orgánica. Química de los productos naturales y sintéticos

Nivel

Indispensable (4)

8. Unidades didácticas

1. INTRODUCCIÓN

2. ESPECTROSCOPÍA

1. A partir de la teoría atómica y molecular describir los fundamentos de la espectroscopia.
2. Describir el origen y las consecuencias de la interacción de la luz con la materia.
3. Poner en conocimiento del alumno las radiaciones útiles en espectroscopia y su justificación.
4. Indicar los elementos comunes en todos los instrumentos espectroscópicos y discutir las diferencias entre los dos modos básicos de registrar un espectro.

3. ULTRAVIOLETA-VISIBLE

1. Descripción del tipo de estados energéticos implicados en la espectroscopia UV-Vis.
2. Indicar en detalle los componentes de un espectrofotómetro UV-Vis y el manejo de muestras.
3. Definiciones básicas en espectroscopia UV-Vis.
4. El origen estructural del color en compuestos orgánicos e inorgánicos.
5. Bandas de absorción características de los grupos funcionales.





8. Unidades didácticas

6. Resumen breve de la espectroscopia de emisión.
4. INFRARROJO
 1. Descripción del tipo de estados energéticos implicados en la espectroscopia IR.
 2. Indicar en detalle los componentes de un espectrofotómetro IR y la manipulación y preparación de muestras.
 3. Definiciones básicas en espectroscopia IR.
 4. Poner en conocimiento del alumno las zonas diferenciadas en un espectro de IR y el concepto de huella dactilar
 5. Bandas de absorción IR características de los grupos funcionales y manejo de Tablas de IR.
5. ESPECTROSCOPIA DE MASAS
 1. Describir al alumno del fundamento de la espectrometría de masas y formas de ionización.
 2. Indicar en detalle los componentes de un espectrometro masas y el manejo y manipulación de muestras.
 3. Acoplamiento de espectrometría de masas con cromatografía gaseosa y cromatografía líquida de alta eficiencia.
 4. Recordar al alumno la composición isotópica de los principales elementos químicos y su implicación en la aparición de series de picos en espectrometría de masas.
 5. Que el alumno sea capaz de establecer la formula molecular a partir de espectros de masas de alta y baja resolución.
 6. Ejemplos de mecanismos de fragmentación.
6. RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR
 1. Que el alumno recuerde el concepto de espin y la interacción de esta propiedad con campos magnéticos.
 2. Describir los principales núcleos activos en resonancia magnética nuclear.
 3. Describir los elementos de un equipo de RMN y la importancia de conseguir imanes de alto campo basados en superconductores
 4. Que el alumno adquiera destreza en el manejo de tablas de RMN y conozca los desplazamientos químicos de las principales agrupaciones de protones.
 5. Introducir el concepto de acoplamiento de espines nucleares y la aplicación del desdoblamiento de señales en la determinación estructural.
 6. Diferencias y analogías entre el RMN-1H y el RMN-13C. El alumno debe adquirir destreza en el manejo de las ecuaciones y tablas que predicen desplazamientos químicos.
7. DIFRACCIÓN DE RAYOS X.
 1. Energía de la radiación X y modos de interacción con la materia.
 2. El alumno debe conocer las partes y elementos de un difractor de rayos X y el manejo y manipulación de muestras.
 3. El alumno debe apreciar como de la ley de difracción de Bragg y de las frecuencias de los rayos X se derivan fenómenos de interferencia y difracción.
 4. Tipos de estructuras cristalinas y modelos de difracción esperables..
 5. Métodos computacionales y de refinamiento de Rietveld para determinación de estructuras cristalinas.
 6. Difracción de rayos X de monocristal e información a nivel atómico.





8. Unidades didácticas

8. 8. Resolución de Problemas.

1. Procedimiento general para combinar la información

2. Determinación de la fórmula molecular.

3. Grupos funcionales y familia.

4. Determinación de la conectividad.

5. Cálculos de los desplazamientos químicos en protón y carbono.

6. Confirmación de la estructura.

9. Método de enseñanza-aprendizaje

UD	TA	SE	PA	PL	PC	PI	EVA	TP	TNP	TOTAL HORAS
1	2,00	--	1,00	--	--	--	--	3,00	6,00	9,00
2	2,00	--	2,00	--	--	--	--	4,00	10,00	14,00
3	2,00	--	2,00	1,00	--	--	--	5,00	10,00	15,00
4	2,00	--	2,00	1,00	--	--	--	5,00	10,00	15,00
5	2,00	--	2,00	2,00	--	--	--	6,00	8,00	14,00
6	4,00	--	4,00	2,00	--	--	--	10,00	6,00	16,00
7	2,00	--	2,00	--	--	--	--	4,00	6,00	10,00
8	4,00	--	4,00	--	--	--	--	8,00	20,00	28,00
TOTAL HORAS	20,00	--	19,00	6,00	--	--	--	45,00	76,00	121,00

UD: Unidad Didáctica. TA: Teoría de Aula. SE: Seminario. PA: Práctica de Aula. PL: Práctica de Laboratorio. PC: Práctica de Campo. PI: Práctica de Informática. EVA: Actividades de Evaluación. TP: Trabajo Presencial. TNP: Trabajo No Presencial.

10. Evaluación

Descripción

(02) Prueba escrita de respuesta abierta

(07) Diario

(05) Trabajo académico

Nº Actos

1 20

1 60

1 20

Peso (%)

30% Prueba escrita + 10% Exposición + 30% Métodos de evaluación de habilidades clínicas o asistenciales + 30% Trabajos.

La asignatura se puede aprobar y obtener hasta un 7 sin necesidad de examen. Ello requiere la asistencia a TODAS las clases y la participación en las actividades que se propongan. Además se deben realizar unos ejercicios fuera del aula por parte del alumno.

La prueba escrita consiste en la resolución de tres problemas de espectroscopía cuya complejidad va creciendo gradualmente. Esta prueba escrita es optativa, salvo para los alumnos que no hayan asistido a las clases. En este caso, el examen consta de cinco ejercicios y la nota total se basa únicamente en esta prueba.

