

PLAN DOCENTE DE ASIGNATURA

CÓDIGO NOMBRE

Asignatura	206018	DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL
Titulación	0206	LICENCIATURA EN QUÍMICA
Departamento	C129	QUIMICA ORGANICA
Curso	4	
Duración (A: Anual, 1Q/2Q)	1Q	
Créditos ECTS	5,6	

Créditos Teóricos 4

Créditos Prácticos 2

Tipo Troncal

Profesores	María Jesús Ortega Agüera Rosa María Varela Montoya
Objetivos	Esta asignatura tiene como objetivo central dotar al alumno del conocimiento de las herramientas espectroscópicas básicas para poder determinar las estructuras de los compuestos químicos, y especialmente de los compuestos orgánicos, a partir de sus características espectroscópicas.
Programa	Tema 1: Introducción. Como se inicia la determinación estructural de un compuesto químico. Secuencias lógicas a seguir. Técnicas no espectroscópicas. Técnicas espectroscópicas. Tema 2: Técnicas no espectroscópicas. Análisis elemental. Cálculo de la fórmula molecular. Puntos de fusión y ebullición. Derivatización química.

Código Seguro de verificación: 7KA/0a3/pUYJ3tek4BIHgA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/5



7KA/0a3/pUYJ3tek4BIHgA==

Tema 3: Espectrometría de masas (EM). Introducción: ionización por impacto electrónico, analizador de sector magnético. Medida y presentación de datos. Interpretación de un espectro de masas: identificación del ion molecular, determinación de la fórmula molecular, procesos de fragmentación. Identificación de grupos funcionales. Técnicas de ionización suaves: por reacciones del ion molecular, por desorción de campo, bombardeo y láser, por spray. Técnicas acopladas. Aplicaciones.

Tema 4: Espectroscopía Ultravioleta (UV). Rango de radiación y transiciones electrónicas. Interpretación de un espectro UV, absorciones características de los compuestos orgánicos y cálculo de la longitud de onda de máxima absorción. Métodos quirópticos: Rotación óptica, ORD, Dicroísmo circular.

Tema 5: Espectroscopía Infrarroja (IR). Teoría de la absorción y tipos de vibraciones. Principios básicos: obtención de un espectro IR y zonas del espectro. Bandas no fundamentales. Utilidad y aplicaciones.

Tema 6: Resonancia Magnética Nuclear (RMN) I. Núcleos objeto de estudio. Desplazamiento químico y factores que determinan el desplazamiento. Equivalencia química y simetría. Constantes de acoplamiento. Equivalencia magnética. Simplificación o eliminación del acoplamiento. Efectos noOe. Técnicas monodimensionales: RMN de ¹H. RMN de ¹³C. Utilidad y aplicaciones.

Tema 7: Resonancia Magnética Nuclear (RMN) II. Técnicas bidimensionales. Tipos de núcleos y técnicas aplicables. Técnicas de homocorrelación e información

Código Seguro de verificación:7KA/0a3/pUYJ3tek4BIHgA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/5



7KA/0a3/pUYJ3tek4BIHgA==

	<p>que se deriva de su estudio. Técnicas de heterocorrelación e información que se deriva de su estudio. Utilización de técnicas combinadas en las que interviene la RMN. Utilidad y aplicaciones. Determinación de la configuración absoluta por RMN.</p> <p>Tema 8: Resolución de problemas complejos. Uso de técnicas combinadas</p>
Metodología	<p>Para el aprendizaje de la teoría y de los conceptos fundamentales que constituyen el cuerpo de esta disciplina se utilizará la clase o lección magistral apoyada con los medios audiovisuales adecuados.</p> <p>Grupos PEP: Durante estas sesiones, muy importante en esta asignatura, se realizará una aplicación práctica de los conceptos aprendidos. De esta forma y ya que los PEP son menos numerosos y la atención es más personalizada, se pretende facilitar la asimilación de los conceptos explicados.</p> <p>El uso de las nuevas tecnologías se fomentará mediante el empleo de plataformas docentes virtuales y la utilización de determinadas páginas web presentadas en la sección de recursos bibliográficos.</p>
Criterios y sistemas de evaluación	<p>El nivel de asimilación de los contenidos se valorará con los siguientes criterios:</p> <p>Alumnos acogidos a la iniciativa PEP La nota PEP constituirá un 30% de la nota final. El 70% se obtendrá del examen final.</p> <p>La asistencia PEP se considera obligatoria.</p> <p>Alumnos no acogidos a la iniciativa PEP La nota será la del examen final.</p>
Recursos	- E. Pretsch, P. Bühlmann, C.

Código Seguro de verificación:7KA/0a3/pUYJ3tek4BIHgA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/5



7KA/0a3/pUYJ3tek4BIHgA==

bibliográficos	<p>Affolter, A. Herrera, R. Martínez "Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos" Springer (2001).</p> <ul style="list-style-type: none"> - J.B. Lambert, H.F. Shurvell, D.A. Lightner, R. Graham Cooks, "Organic Structural Spectroscopy" Prentice Hall (1998). - R. M. Silverstein, F. X. Webster. "Spectrometric Identification of Organic Compounds", 6ª edición, John Wiley & Sons (1998). - L. M. Harwood, T. D. W. Claridge. "Introduction to Organic Spectroscopy", Oxford University Press (1997). - P. Crews, M. Jaspars, J. Rodríguez. "Organic Structure Analysis", Oxford University Press (1997). - E. Breitmaier. "Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. A Practical Guide", John Wiley & Sons (1993). - H. Duddeck, W. Dietrich, G. Toth. "Elucidación Estructural por RMN", Springer-Verlag Iberica (2000). - E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon. "Tablas para la Elucidación Estructural por Métodos Espectroscópicos", 3ª edición (1998). - C.H. Yoder, C.D. Schafer, Jr. "Introduction to Multinuclear NMR", The Benjamin/Cumming Publishing Company, Inc. (1987). - E. Pretsch, G. Tóth, M. E. Munk, M. Badertscher. "Computer-Aided Structure Elucidation". Wiley-VCH. (2002). <p>Páginas Web: Organic Chemistry Online. Spectroscopy Integrated Spectral Data Base System for Organic Compounds Animated Infra-red Spectroscopy Infrared Spectroscopy for Organic Chemists Web Resources 1H NMR Interpretation Tutorial The Basics of NMR Little Encyclopedia of Mass Spectrometry The Exact Mass Calculator Organic Structure Elucidation Workbook WebSpectra. Problems in IR and NMR Spectroscopy</p>
----------------	---

Código Seguro de verificación:7KA/0a3/pUYJ3tek4BIHgA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	4/5



7KA/0a3/pUYJ3tek4BIHgA==



Código Seguro de verificación:7KA/0a3/pUYJ3tek4BIHgA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	5/5



7KA/0a3/pUYJ3tek4BIHgA==