



1. DATOS GENERALES

Asignatura: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL**Tipología:** OBLIGATORIA**Grado:** 398 - GRADO EN QUÍMICA**Centro:** 1 - FTAD. CC. Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS CR.**Curso:** 3**Lengua principal de impartición:** Español**Uso docente de otras lenguas:****Página web:****Código:** 57320**Créditos ECTS:** 6**Curso académico:** 2020-21**Grupo(s):** 20 23**Duración:** Primer cuatrimestre**Segunda lengua:** Inglés**English Friendly:** S**Bilingüe:** N

Profesor: MARÍA ANTONIA HERRERO CHAMORRO - Grupo(s): 20 23				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Irica	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.	926052556	mariaantonia.herrero@uclm.es	
Profesor: BLANCA ROSA LOURDES MANZANO MANRIQUE - Grupo(s): 20 23				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
San Alberto Magno/first floor	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.	926052050	blanca.manzano@uclm.es	

2. REQUISITOS PREVIOS

No existen, aunque se recomienda poseer conocimientos básicos de Química Orgánica e Inorgánica

3. JUSTIFICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS, RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS Y CON LA PROFESIÓN

La Materia de Determinación Estructural, incluida en el módulo de Fundamentos de Química se imparte en el primer semestre del tercer curso del Grado en Químicas.

Esta materia está diseñada para enseñar los fundamentos y aplicaciones de los principales métodos de elucidación de estructuras de compuestos químicos. Los alumnos deberán saber aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de estructuras, de procesos químicos, estereoquímica, etc. Así mismo, se debe hacer evidente cómo estas técnicas están evolucionando y desarrollando nuevas metodologías con aplicaciones muy variadas desde la biología y medicina a la ciencia de materiales.

Esta asignatura está muy relacionada, por un lado, con las asignaturas Q. Orgánica I y Q. orgánica II de 2º curso de Grado y con Q. orgánica III y Ampliación de Q. orgánica de 3º curso. Por otro lado, guarda también relación en lo referente a su versión inorgánica con las asignaturas de Q. Inorgánica I y Q. Inorgánica II de 2º curso así como Q. Inorgánica Molecular y Q. Inorgánica del estado sólido de 3º curso. En la asignatura de Determinación Estructural se darán herramientas de caracterización de las estructuras de multitud de compuestos estudiados en las asignaturas mencionadas anteriormente.

4. COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN QUE LA ASIGNATURA CONTRIBUYE A ALCANZAR

Competencias propias de la asignatura

Código	Descripción
CB02	Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio
E01	Comprender y utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
E05	Conocer los elementos químicos y sus compuestos, sus formas de obtención, estructura, propiedades y reactividad, así como las principales técnicas para su análisis.
E06	Conocer los rasgos estructurales de los compuestos químicos, incluyendo la estereoquímica, así como las principales técnicas de investigación estructural.
E17	Desarrollar la capacidad para relacionar entre sí las distintas especialidades de la Química, así como ésta con otras disciplinas (carácter interdisciplinar).
G01	Conocer los principios y las teorías de la Química, así como las metodologías y aplicaciones características de la química analítica, química física, química inorgánica y química orgánica, entendiendo las bases físicas y matemáticas que precisan.
G02	Ser capaces de reunir e interpretar datos, información y resultados relevantes, obtener conclusiones y emitir informes razonados en problemas científicos, tecnológicos o de otros ámbitos que requieran el uso de herramientas químicas.
G03	Saber aplicar los conocimientos teóricos-prácticos adquiridos en los diferentes contextos profesionales de la Química.
G04	Saber comunicar, de forma oral y escrita, los conocimientos, procedimientos y resultados de la Química, tanto a nivel especializado como no especializado.
G05	Adquirir y adaptar nuevos conocimientos y técnicas de cualquier disciplina científico-técnica con incidencia en el campo químico.
T02	Dominio de las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC).
T03	Una correcta comunicación oral y escrita.
T05	Capacidad de organización y planificación.
T07	Capacidad para trabajar en equipo y, en su caso, ejercer funciones de liderazgo, fomentando el carácter emprendedor.
T10	Capacidad de utilización de software específico para química a nivel de usuario.
T11	Capacidad de obtener información bibliográfica, incluyendo recursos en Internet.

5. OBJETIVOS O RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPERADOS

Resultados de aprendizaje propios de la asignatura

Descripción

Adquirir destreza en la exposición oral y escrita.

Aplicar los conceptos de simetría en la resolución de problemas de tipo estructural.

Capacidad para obtener información de tablas y gráficos para resolver un problema de determinación estructural.

Conocer la aplicación de estas técnicas en el análisis y resolución de problemas cotidianos y en campos científicos relacionados.

Conocer la estequiometría de los compuestos.

Conocer la estructura de los principales grupos funcionales orgánicos.

Conocer las principales aplicaciones de los métodos de determinación estructural, de modo que sea capaz de: A partir de datos espectroscópicos deducir estructuras de compuestos orgánicos e inorgánicos y, a partir de una estructura determinada, predecir las características más significativas de los correspondientes espectros.

Conocer los aspectos principales de la terminología y nomenclatura en Química Inorgánica y Orgánica.

Conocer los principios básicos de los principales métodos de determinación estructural, espectroscopias Ultravioleta-Visible, Infrarroja, RAMAN, Resonancia Magnética Nuclear y Espectrometría de masas.

El alumno deberá ser capaz de discernir y seleccionar las técnicas más adecuadas para la resolución de un problema concreto.

Ser capaz de buscar y seleccionar información en el ámbito de la Química Inorgánica y Orgánica, y presentarla adecuadamente tanto de forma oral como escrita, desarrollando su capacidad de síntesis, siendo crítico y objetivo.

Suscitar y fomentar en el alumno todos aquellos valores y actitudes inherentes a la actividad científica.

Utilizar conjuntamente las técnicas de determinación estructural mostrando su complementariedad.

6. TEMARIO

Tema 1: Fundamentos y RMN de 1H y 13C (Q. Orgánica)

Tema 1.1 Fundamentos de la espectroscopia de RMN.

Tema 1.2 RMN de 1H y 13C. Desplazamiento químico.

Tema 1.3 Acoplamiento spin-spin. Doble resonancia.

Tema 1.4 Aplicaciones de la RMN de 1H y 13C.

Tema 1.5 Fenómenos de relajación.

Tema 1.6 . Introducción a la RMN de multipulsos.

Tema 2: RMN de núcleos distintos de 1H y 13C (Q. Inorgánica)

Tema 2.1 Otros núcleos de interés en RMN.

Tema 2.2 Acoplamiento spin-spin

Tema 2.3 Satélites de acoplamiento spin-spin

Tema 2.4 Resonancia dinámica

Tema 2.5 Métodos de simplificar espectros.

Tema 2.6 Resonancia de núcleos de importancia en Q. Inorgánica

Tema 3: Espectroscopia vibracional (Q. Inorgánica)

Tema 3.1 Fundamentos de Espectroscopia Infrarroja y Raman

Tema 3.2 Modos normales de vibración. Aplicación de la simetría

Tema 3.3 Aplicaciones de las espectroscopias IR y Raman en Química Inorgánica.

Tema 4: Espectroscopia vibracional (Q. Orgánica)

Tema 4.1 Aplicaciones de la Espectroscopia Infrarroja en Química Orgánica.

Tema 5: Espectrometría de masas (Q. Orgánica)

Tema 5.1 Fundamentos de la Espectrometría de Masas.

Tema 5.2 Aplicaciones de la Espectrometría de Masas.

Tema 5.3 Introducción a técnicas de ionización química.

7. ACTIVIDADES O BLOQUES DE ACTIVIDAD Y METODOLOGÍA

Actividad formativa	Metodología	Competencias relacionadas (para títulos anteriores a RD 822/2021)	ECTS	Horas	Ev	Ob	Descripción
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL]	Método expositivo/Lección magistral	E01 E05 E06 G01 G05 T10	1.28	32	N	-	
Talleres o seminarios [PRESENCIAL]	Resolución de ejercicios y problemas	E01 E05 E17 G02 G03 G04 T10 T11	0.8	20	S	N	
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL]	Tutorías grupales	E01 E05 E17 G02 G03 G04	0.08	2	S	N	
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA]	Trabajo autónomo	E06 E17 G01 G05 T10 T11	3.6	90	N	-	
Pruebas de progreso [PRESENCIAL]	Combinación de métodos	E17 G02 G03 G04	0.16	4	S	N	
Prueba final [PRESENCIAL]	Combinación de métodos	E17 G02 G03 G04	0.08	2	S	S	
Total:			6	150			
Créditos totales de trabajo presencial: 2.4							Horas totales de trabajo presencial: 60
Créditos totales de trabajo autónomo: 3.6							Horas totales de trabajo autónomo: 90

Ev: Actividad formativa evaluable

Ob: Actividad formativa de superación obligatoria (Será imprescindible su superación tanto en evaluación continua como no continua)

8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y VALORACIONES

Sistema de evaluación	Evaluación continua	Evaluación no continua*	Descripción
Resolución de problemas o casos	10.00%	10.00%	Se valorará positivamente la resolución de los problemas por parte del alumno, así como su participación activa en clase. Por otra parte, el alumno podrá incrementar su nota de evaluación continua entregando seminarios y cuestiones a propuesta del profesor y participando en actividades on-line propuestas. Adaptándose este tipo de evaluación a aquellos alumnos que no puedan asistir a clase.
Pruebas de progreso	90.00%	0.00%	Se realizarán dos pruebas corta de tres horas durante el semestre para valorar el seguimiento del aprendizaje
Prueba final	0.00%	90.00%	Esto lo deben realizar quien no han superado la asignatura mediante las pruebas de progreso.
Total:	100.00%	100.00%	

* En **Evaluación no continua** se deben definir los porcentajes de evaluación según lo dispuesto en el art. 4 del Reglamento de Evaluación del Estudiante de la UCLM, que establece que debe facilitarse a los estudiantes que no puedan asistir regularmente a las actividades formativas presenciales la superación de la asignatura, teniendo derecho (art. 12.2) a ser calificado globalmente, en 2 convocatorias anuales por asignatura, una ordinaria y otra extraordinaria (evaluándose el 100% de las competencias).

Criterios de evaluación de la convocatoria ordinaria:

Evaluación continua:

evaluación continua a través del seguimiento de adquisición de conocimientos teóricos (90%), y de resolución de problemas y casos prácticos (10%), y participación en actividades on-line, que demuestren la adquisición de las competencias correspondientes

Evaluación no continua:

Un examen será el 90% de la nota y se evaluará la resolución o casos prácticos con un 10% adaptada a los alumnos que no puedan asistir a clase

Particularidades de la convocatoria extraordinaria:

La calificación de este examen será el 100% de la nota final

9. SECUENCIA DE TRABAJO, CALENDARIO, HITOS IMPORTANTES E INVERSIÓN TEMPORAL	
No asignables a temas	
Horas	Suma horas
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	90
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Combinación de métodos]	4
Prueba final [PRESENCIAL][Combinación de métodos]	2
Tema 1 (de 5): Fundamentos y RMN de 1H y 13C (Q. Orgánica)	
Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	10
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	5
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	1
Grupo 20:	
Inicio del tema: 08-09-2020	Fin del tema: 07-10-2020
Grupo 23:	
Inicio del tema: 08-09-2020	Fin del tema: 07-10-2020
Comentario: tutoría 9 de Noviembre	
Tema 2 (de 5): RMN de núcleos distintos de 1H y 13C (Q. Inorgánica)	
Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	9
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	6
Grupo 20:	
Inicio del tema: 08-10-2020	Fin del tema: 04-11-2020
Grupo 23:	
Inicio del tema: 08-10-2020	Fin del tema: 04-11-2020
Tema 3 (de 5): Espectroscopia vibracional (Q. Inorgánica)	
Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	7
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	4
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	1
Grupo 20:	
Inicio del tema: 05-11-2020	Fin del tema: 27-11-2020
Grupo 23:	
Inicio del tema: 05-11-2020	Fin del tema: 27-11-2020
Comentario: tutoría IR inorganica el 18 de diciembre	
Tema 4 (de 5): Espectroscopia vibracional (Q. Orgánica)	
Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	2
Grupo 20:	
Inicio del tema: 30-11-2020	Fin del tema: 04-12-2020
Grupo 23:	
Inicio del tema: 30-11-2020	Fin del tema: 04-12-2020
Tema 5 (de 5): Espectrometría de masas (Q. Orgánica)	

Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	3
Grupo 20:	
Inicio del tema: 09-12-2020	Fin del tema: 17-12-2020
Grupo 23:	
Inicio del tema: 09-12-2020	Fin del tema: 17-12-2020
Actividad global	
Actividades formativas	Suma horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	32
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	20
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	90
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Combinación de métodos]	4
Prueba final [PRESENCIAL][Combinación de métodos]	2
Total horas: 150	

10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS					
Autor/es	Título/Enlace Web	Editorial	Población ISBN	Año	Descripción
A. K. Brisdon	Inorganic Spectroscopic Methods	Oxford Science Publications		1998	RMN
Akitt, J. W.	NMR and chemistry : an introduction to modern NMR spectroscopy	Taylor & Francis		2000	RMN
D. C. Harris, M. D. Bertolucci	Symmetry and Spectroscopy				Espectroscopia vibracional
D.W. Brown, A.J. Floyd y M. Sainsbury	Organic Spectroscopy	John Wiley & sons;		1988	Parte de organica
Drago, R. S.	Physical Methods in Chemistry	W. B. Saunders Company		1997	libro general
E. Pretch, P.Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera y R. Martínez	Determinación estructural de compuestos orgánicos.	Determinación estructural de compuestos orgánicos. Springer-Verlag Ibérica,	barcelona	2001	RMN, Parte de organica
E. Pretch, T. Clerc, J. Seibl y W. Simon	Tablas para la elucidación estructural por métodos espectroscópicos. 3ª Edición.	Elsevier		1998	RMN, Parte de organica
F.A. Cotton	La Teoría de Grupos aplicada a la Química	Limusa		1983	Espectroscopia vibracional
J. A. Iggo	NMR Spectroscopy in Inorganic Chemistry,	Oxford Science Publications		1999	RMN
J.B. Lambert, H.F. Shurvell, D. Lighter y R.G. Cooks;	Introduction to Organic Spectroscopy	MacMillan,		1987	Parte de organica
K. Nakamoto	Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds	John Wiley and Sons		1997	Espectroscopia vibracional
Kemp, W	NMR in Chemistry. A Multinuclear Introduction	Mac Millan		1986	RMN
A. García, E. Teso	Análisis Orgánico	UNED		1992	Parte de organica
M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh;	Métodos espectroscópicos en Química Orgánica	Ed. Síntesis, 2ª edición		1999	Parte de organica
Sandström, J.	Dynamic NMR Spectroscopy	Academic Press		1982	
Verkade, J. G.; Quin L. D.	Phosphorus-31 NMR Spectroscopy in Stereochemical Analysis	VCH		1987	RMN
W. Kemp	Organic Spectroscopy	MacMillan		1991	Parte de organica
¿ Ebsworth E. A. V. Rankin, D. W. H., Cradock S.	Structural Methods in Inorganic Chemistry	Blackwell Scientific Publications		1987	libro general