



## 1. DATOS GENERALES

**Asignatura:** DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL**Tipología:** OBLIGATORIA**Grado:** 409 - GRADO EN QUÍMICA (2021)**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:** 2023-24**Grupo(s):** 20 23**Duración:** Primer cuatrimestre**Segunda lengua:** Inglés**English Friendly:** S**Bilingüe:** N

Profesor: <b>MARÍA ANTONIA HERRERO CHAMORRO</b> - Grupo(s): <b>20 23</b>				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Irica	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.	926052556	mariaantonia.herrero@uclm.es	Martes, miércoles y jueves de 16.30-18.30 h
Profesor: <b>BLANCA ROSA LOURDES MANZANO MANRIQUE</b> - Grupo(s): <b>20 23</b>				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
San Alberto Magno/first floor	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.	926052050	blanca.manzano@uclm.es	Martes, miércoles y jueves de 16.30-18.30 h

## 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.
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

Conocer la estructura de los principales grupos funcionales orgánicos.

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

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 estereoquímica de los compuestos.

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.

Adquirir destreza en la exposición oral y escrita.

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.

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

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.

## 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	S	N	Las clases presenciales se dedicarán a la transmisión de conocimientos a los alumnos con apoyo de medios informáticos y la pizarra. Simultáneamente, se favorece una interacción con el alumno mediante preguntas y programas como Socrative.
Talleres o seminarios [PRESENCIAL]	Resolución de ejercicios y problemas	E01 E05 E17 G02 G03 G04 T10 T11	0.8	20	S	N	Se plantea una relación de problemas que los alumnos deben haber trabajado previamente. En clase, se corrigen y se pide participación al alumnado mediante preguntas o resolución en la pizarra.
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL]	Tutorías grupales	E01 E05 E17 G02 G03 G04	0.08	2	S	N	Se plantean casos o problemas directamente en clase. El alumnado dispone de un tiempo para pensarlo y se hace un debate sobre la solución.
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA]	Trabajo autónomo	E06 E17 G01 G05 T10 T11	3.6	90	N	-	El alumnado prepara la materia, tanto teórica como práctica
Prueba parcial [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	E17 G02 G03 G04	0.16	4	S	N	Prueba que permite eliminar parcialmente la asignatura. Se necesita un 4 para eliminar materia y se hará media con otras vías de

Prueba final [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	E17 G02 G03 G04	0.08	2	S	S	Examen final al que el alumnado puede presentarse con toda la materia si no ha eliminado en las pruebas parciales, con parte de la asignatura si ha eliminado materia o no debe presentarse si ha eliminado toda la materia.
<b>Total:</b>			<b>6</b>	<b>150</b>			
<b>Créditos totales de trabajo presencial: 2.4</b>			<b>Horas totales de trabajo presencial: 60</b>				
<b>Créditos totales de trabajo autónomo: 3.6</b>			<b>Horas totales de trabajo autónomo: 90</b>				

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%	0.00%	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 parciales	90.00%	0.00%	Se realizarán dos pruebas durante el semestre para valorar el seguimiento del aprendizaje
Prueba final	0.00%	100.00%	Esto lo deben realizar quien no han superado la asignatura mediante las pruebas parciales.
<b>Total:</b>	<b>100.00%</b>	<b>100.00%</b>	

\* 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).

#### Crterios 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:

El examen será el 100% de la nota.

#### 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
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	4
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	2
<b>Tema 1 (de 5): Fundamentos y RMN de 1H y 13C (Q. Orgánica)</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
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
<b>Tema 2 (de 5): RMN de núcleos distintos de 1H y 13C (Q. Inorgánica)</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	9
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	6
<b>Tema 3 (de 5): Espectroscopia vibracional (Q. Inorgánica)</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
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
<b>Tema 4 (de 5): Espectroscopia vibracional (Q. Orgánica)</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	2
<b>Tema 5 (de 5): Espectrometría de masas (Q. Orgánica)</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	3

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
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	4
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	2
<b>Total horas: 150</b>	

10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS					
Autor/es	Título/Enlace Web	Editorial	Población ISBN	Año	Descripción
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
A. K. Brisdon	Inorganic Spectroscopic Methods	Oxford Science Publications		1998	RMN