

## 27219 - Determinación estructural

### Información del Plan Docente

**Año académico:** 2024/25

**Asignatura:** 27219 - Determinación estructural

**Centro académico:** 100 - Facultad de Ciencias

**Titulación:** 452 - Graduado en Química

**Créditos:** 6.0

**Curso:** 4

**Periodo de impartición:** Primer semestre

**Clase de asignatura:** Obligatoria

**Materia:**

### 1. Información básica de la asignatura

Esta asignatura proporciona al estudiante los conocimientos y herramientas para determinar la estructura molecular, a partir de datos espectroscópicos, de compuestos químicos. Las técnicas de determinación estructural se emplean en todas las áreas de la química y disciplinas relacionadas como bioquímica, geología, ciencia de materiales, investigación médica y farmacéutica, etc. La identificación de compuestos, el seguimiento de reacciones químicas, la determinación del grado de pureza de una sustancia o el diseño de nuevos materiales, cuyas propiedades se relacionan con su estructura, son campos en los que se aplican los conocimientos y habilidades que se adquieren en esta asignatura.

### 2. Resultados de aprendizaje

Conocer los fundamentos físicos y la información que proporcionan las distintas técnicas espectroscópicas (espectroscopia de masas, IR, RMN y v-uv) para la determinación estructural de compuestos orgánicos e inorgánicos.

Calcular, deducir y comparar los valores de los principales parámetros de cada técnica.

Determinar la estructura de las moléculas a partir de la interpretación de los datos espectroscópicos experimentales.

Predecir razonadamente las características espectroscópicas de una determinada molécula conociendo su estructura.

Seleccionar y relacionar las técnicas más adecuadas para la obtención de datos experimentales que permitan la determinación estructural de un compuesto.

Reconocer la importancia de las distintas técnicas de determinación estructural y que la información que proporciona cada una de ellas se puede complementar con las demás.

Comprender, interpretar y utilizar la información espectroscópica que se recoge en la bibliografía.

### 3. Programa de la asignatura

Generalidades de análisis y caracterización de compuestos químicos.

Espectroscopia infrarroja. Fundamentos y aplicaciones. Tipos de vibraciones. Zonas del espectro de infrarrojo. Estudio de grupos funcionales de interés. Interpretación de espectros. Instrumentación. Preparación de muestras.

Espectrometría de masas. Fundamentos y aplicaciones. Métodos de ionización y análisis de iones. Ion molecular. Picos isotópicos. Masa exacta. Fragmentaciones. Instrumentación. Preparación de muestras.

Resonancia magnética nuclear de protón. Fundamentos y aplicaciones. Instrumentación. Desplazamiento químico y apantallamiento. Equivalencia química. Integración. Acoplamiento spin-spin. Estudio de grupos funcionales de interés. Manejo de tablas. Simulación de espectros. Preparación de muestras.

Resonancia magnética nuclear de carbono. Fundamentos y aplicaciones. Estudio de grupos funcionales de interés. Manejo de tablas. RMN bidimensional y técnicas bidimensionales más comunes.

Estrategias para la asignación de la estructura de un compuesto a partir de los correspondientes espectros.

Resonancia magnética nuclear de otros núcleos. Núcleos con diferentes valores de espín y de abundancias isotópicas.

Espectros de segundo orden. Inequivalencia química y magnética. Fluxionalidad.

Espectroscopia ultravioleta-visible. Tipos de transiciones. Desdoblamiento de los orbitales d: campo fuerte y campo débil. Diagramas de Tanabe-Sugano. Reglas de selección.

Susceptibilidades magnéticas. Momento magnético efectivo. Contribución orbital.

### 4. Actividades académicas

1.- Clases magistrales, en las que se expondrán los fundamentos teóricos de las distintas técnicas y cómo se aplican a la determinación estructural (3 créditos).

2.- Resolución de problemas y cuestiones aplicadas. Discusión colectiva de la resolución de los problemas y cuestiones, de complejidad creciente (3 créditos).

Se impartirán 4 sesiones por semana, de 1 h de duración. Las clases de resolución de problemas se irán intercalando entre las clases magistrales, de modo que, tras presentar los fundamentos y características de cada técnica, se pasará a la resolución de problemas y casos relacionados.

## 5. Sistema de evaluación

**Evaluación continua.** Se realizarán dos pruebas parciales escritas de contenido teórico-práctico. La calificación final de la asignatura se obtendrá como la media aritmética de las calificaciones de cada una de las pruebas parciales. La asignatura se considerará aprobada si se obtiene una calificación mínima de 5 puntos (sobre 10) en el promedio de los dos exámenes parciales. Para promediar será necesario alcanzar un mínimo de 4 puntos (sobre 10) en cada una de las pruebas parciales.

**Prueba global.** Los alumnos que no se acojan al sistema de evaluación continua o que no superen la asignatura por este procedimiento, realizarán una prueba global que consistirá en un único examen escrito de contenido teórico-práctico. Para aprobar será necesario alcanzar una calificación mínima de 5 puntos (sobre 10).

La normativa de evaluación puede consultarse en: <http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>

## 6. Objetivos de Desarrollo Sostenible

- 4 - Educación de Calidad
- 7 - Energía Asequible y No Contaminante
- 9 - Industria, Innovación e Infraestructura