

## 1 Identificación de la asignatura

Nombre de la signatura	TÉCNICAS INSTRUMENTALES EN QUÍMICA ORGÁNICA
Código	3J6
Curso / Grupos	Tercero / Uno
Tipo	Optativa/Libre configuración
Créditos LRU	4'5 (2'5 T + 2 P)
Estimación del volumen de trabajo del alumno (ECTS)*	4'5x5x60/309= 4'09 4'09 x 25 = 102 horas;
Duración	cuatrimestral (primero)
Idiomas en que se imparte	español

\* Los créditos ECTS por curso de cualquier Titulación son 60. La transformación de un crédito LRU a ECTS debe hacerse de forma proporcional (regla de tres), es decir, no se debe modificar el porcentaje de créditos que tiene la asignatura dentro de su Plan de estudios. Por tanto, la fórmula sería:

$$\text{Crd. ECTS} = \text{crd. LRU} \times \frac{\text{n}^\circ \text{ de cursos de la titulación} \times 60 \text{ crd. ECTS del curso}}{\text{crd. LRU totales de la titulación}}$$

Por ejemplo: una asignatura de 9 crd LRU de la titulación de Pedagogía (304 crd. totales):  $9 \times 5 \times 60 / 304 = 8.8$  crd ECTS que multiplicado por 25 h. da lugar al volumen de trabajo del estudiante de dicha asignatura: 220 h.

## 1.2 Del profesorado

Nombre y Apellidos	Antonio Arques Adame
Departamento	Química Orgánica
Despacho y Facultad	B1.4A.024; 4ª planta, ala norte, F. Química
Teléfono	868 88 74 94
Correo electrónico	<a href="mailto:arques@um.es">arques@um.es</a>
página web	<a href="http://www.um.es/dete/">http://www.um.es/dete/</a>
Horario de atención al alumnado	Jueves de 16:30-19:30. A cualquier hora a través de TUTORIA de SUMA.

## 2 Presentación

Se pretende que los alumnos adquieran los conocimientos necesarios para poder comprender las técnicas básicas utilizadas en la determinación de la estructura de los compuestos orgánicos y que, ante los espectros utilizados actualmente como de rutina, sean capaces de proceder a la identificación del compuesto de que se trate.

## 3 Conocimientos previos

No es imprescindible pero es conveniente que hayan cursado la Química Orgánica de primer curso (00J5) para que conozcan los grupos funcionales más importantes y los efectos que tienen en la estructura. Al haber cursado esa asignatura conocerían algo sobre las técnicas que se utilizarán en esta, aunque no es imprescindible ya que se realiza una introducción teórica básica de cada una de las técnicas que se aplicarán en la determinación de la estructura.

## 4 Competencias

### Competencias

- Conocer y saber utilizar las técnicas habituales en la determinación estructural de compuestos orgánicos.
- Elucidar la estructura de los compuestos orgánicos sencillos, utilizando técnicas espectroscópicas.
- Saber buscar y utilizar datos espectroscópicos de los compuestos orgánicos.
- Capacidad de organización y planificación de tareas.

### Capacidades adquiridas

- Adquirir la formación e instrucción práctica necesaria para aplicarla a la caracterización de compuestos orgánicos.
- Conocer y saber utilizar las técnicas experimentales habituales en la determinación estructural de compuestos orgánicos.
- Dentro de la espectroscopía infrarroja aprenderá los tipos de vibraciones de los grupos funcionales más importantes en química orgánica, en qué zonas del espectro aparecen las bandas de cada grupo funcional, utilización de los espectros en el seguimiento de reacciones, etc.

- En espectrometría de masas conocerá las rupturas generales de diversos tipos de compuestos orgánicos y su utilización en la identificación de estructuras. Conocerá igualmente las distintas técnicas existentes y su aplicación específica en cada campo.
- En espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN) aprenderá tanto los conceptos básicos en resonancia de protón y de carbono 13 como la utilización de las señales en la identificación de los compuestos orgánicos. Aprenderá a estimar desplazamientos químicos de protón y carbono mediante cálculos en moléculas no complejas y conocerá distintos experimentos monodimensionales sencillos.

## 5 Contenidos

- 1 ESTRATEGIAS EN LA DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL E IDH.
- 2 ESPECTROS INFRARROJO.  
Aplicación en la determinación estructural en química orgánica
- 3 ESPECTROMETRÍA DE MASAS.  
Principios básicos.- Abundancia de isótopos.- Procesos de fragmentación. Fragmentos asociados a grupos funcionales.- El ión molecular. - Ionización por impacto electrónico.- Ionización mediante técnicas "blandas".
- 4 DESPLAZAMIENTO QUÍMICO Y CONECTIVIDADES DE LOS ÁTOMOS HH.  
Factores que influyen en el desplazamiento químico.- Teoría del acoplamiento de espín.- Magnitud del acoplamiento HH. Constantes de acoplamiento HH.- Diagrama energético de la interacción nuclear en sistemas AX.- Sistemas con acoplamientos complejos.- Factores que influyen en la constante de acoplamiento.
- 5 SIMPLIFICACIÓN DE ESPECTROS  
Efecto de la variación del campo magnético.- Variación con el cambio del disolvente y temperatura.- Empleo de reactivos de desplazamiento.- Desacoplamientos.-
- 6 ESPECTROS DE CARBONO-13.  
Multiplicidades CH.- Magnitud del acoplamiento CH.- Espectros desacoplados de protón.- Espectros APT y DEPT.- Otros espectros.
- 7 CÁLCULO DE ESPECTROS.  
Estimación de los desplazamientos químicos en sistemas sencillos.
- 8 PROBLEMAS.

## 6 Metodología docente y estimación del volumen de trabajo del estudiante (ECTS)

### 6.1 Metodología docente

Las clases incluirán siempre el desarrollo básico de cada uno de los temas seguido de su aplicación práctica en ejemplos que involucren cada una de las técnicas. El trabajo en clase favorecerá la participación de los alumnos y estos formarán grupos para el desarrollo conjunto de algunas tareas.

Sobre los temas 2 y 3 los grupos elaborarán una presentación que implique la búsqueda de información de infrarrojo y masas sobre diversos grupos funcionales (base de datos SDDBS).

Los problemas que se encuentran al final del temario, combinan todas las técnicas y serán realizados, por una parte, por los alumnos de manera individualizada, y por otra mediante la formación de grupos de 3 alumnos que elaborarán conjuntamente tres problemas, poniéndolos en común con el resto de la clase mediante la elaboración presentaciones PowerPoint. Las estructuras químicas necesarias en la presentaciones se realizarán con el programa ChemSketch.

Globalmente, dicho proceso supone la participación de todos los alumnos y facilita la asimilación de conocimientos y el desarrollo de habilidades de comunicación. Los problemas,

así como otros datos de posible interés para los alumnos, se encuentran en la dirección <http://www.um.es/dete/>

## 6.2 Estimación del volumen de trabajo del estudiante (ECTS). Parte de Química Orgánica.

➤ Horas presenciales	41 h	
▪ Clases magistrales		25 h
▪ pruebas cortas		2 h
▪ exposición de presentaciones		5 h
▪ trabajo con problemas		9 h
<b>total</b>		41 h
▪ examen final	2 h	
➤ Horas de estudio	59 h	
▪ Horas de trabajo personal		45 h
▪ Horas de preparación de examen		14 h
➤ <b>Total</b>	102 h	
➤		
➤		

## 7 Temporalización o cronograma

Materia	Fechas	
1. ESTRATEGIAS/IDH UTILIZACIÓN DE CHEMSKETCH	21-09 a 23-09	3
2. ESPECTROS INFRARROJO	28-09 a 05-10	4
3. ESPECTROMETRÍA DE MASAS	06-10 a 19-10	5
Presentaciones	20 y 21-10	2
Prueba corta	L-26-10	1
4. DESPLAZAMIENTO QUÍMICO Y CONECTIVIDADES DE LOS ÁTOMOS HH.		
5. SIMPLIFICACIÓN DE ESPECTROS	27-10 a 23-11	12
6. ESPECTROS DE CARBONO-13.		
7. CÁLCULO DE ESPECTROS.		
Presentaciones	24 y 25-11	2
Prueba corta	30-11	1
29 PROBLEMAS	01-12 a 13-01	11
Total horas clase		24
Total horas pruebas cortas		2
Total Presentaciones		4
Total horas problemas		11
Total horas presenciales		41

La evaluación de la asignatura se realizará de forma continua, valorándose la asistencia y la participación en los debates.

Fechas de exámenes

Febrero	<b>V-29-01</b> 9:30-13 h
Junio	<b>M-06-06</b> 16:30-20 h
Septiembre	<b>J-09-09</b> 9:30-13 h

## 8 Evaluación

## 1. Evaluación del aprendizaje

Instrumentos de evaluación	Criterios de evaluación	Ponderación hasta
Asistencia y participación	La evaluación de la asignatura se realizará de forma continua, valorándose la asistencia y la participación en los debates.	1 punto
Dos pruebas cortas	Prueba corta sobre los temas 2 y 3	1 punto
	Prueba corta sobre los temas 4 a 7	1'5 puntos
Presentaciones	De los temas 2 y 3	0'5 puntos
	De los conjuntos de tres problemas	1 punto
Examen teórico	examen escrito en el que han de resolver cuestiones y problemas de nivel similar a los planteados durante el curso.	5 puntos
En las presentaciones se valorará la claridad expositiva, la capacidad crítica y la capacidad de análisis.		

### Observaciones y/o recomendaciones:

Los alumnos que no puedan ser evaluados de forma continuada durante el desarrollo de la asignatura según la fórmula de evaluación indicada serán evaluados mediante una prueba final, distinta de la que realicen los alumnos que sigan evaluación continua, y que será puntuada sobre 10.

## 9-Bibliografía Básica

### MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS EN QUÍMICA ORGÁNICA

M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh

ISBN: 84-7738-522-X

Síntesis

### DETERMINACION ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS ORGANICOS

INCLUYE CD ROM

Pretsch/Buhlmann/Affolter/Herrera/Martin

ISBN: 840700526-6

Springer-Verlag Ibérica, Barcelona, 2001

### Bibliografía Complementaria

#### [Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry](#)

Eberhard Breitmaier (Third revised edition)

Print ISBN: 047085006X. Online ISBN: 0470853069

Published Online: 05 Feb 2003

John Wiley & Sons, Ltd

(gratis para los alumnos accediendo desde la Universidad de Murcia)

Los alumnos dispondrán en SUMA de materiales que les sirvan de apoyo y también de un listado de direcciones de Internet con páginas que les puedan servir para autoevaluación, ampliación de conocimientos, etc.