Escuela de Doctorado y Estudios de Posgrado

Máster Universitario en Química

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA (ESCENARIO 0):

Determinación estructural
(2021 - 2022)

1. Datos descriptivos de la asignatura

Asignatura: Determinación estructural	Código: 835931107

- Centro: **Escuela de Doctorado y Estudios de Postgrado**
- Lugar de impartición: **Facultad de Ciencias. Sección de Química**
- Titulación: **Máster Universitario en Química**
- Plan de Estudios: **2018 (Publicado en 2014-04-29)**
- Rama de conocimiento: **Ciencias**
- Itinerario / Intensificación:
- Departamento/s:
  Química Orgánica
- Área/s de conocimiento:
  Química Orgánica
- Curso: **1**
- Carácter: **Obligatoria**
- Duración: **Primer cuatrimestre**
- Créditos ECTS: **3,0**
- Modalidad de impartición: **Presencial**
- Horario: **Enlace al horario**
- Dirección web de la asignatura: **http://www.campusvirtual.ull.es**
- Idioma: **Castellano e Inglés (0,15 ECTS en Inglés)**

2. Requisitos para cursar la asignatura

Ninguno

3. Profesorado que imparte la asignatura

Profesor/a Coordinador/a: **MARIA LUISA SOUTO SUAREZ**

- Grupo:

General
- Nombre: **MARIA LUISA**
- Apellido: **SOUTO SUAREZ**
- Departamento: **Química Orgánica**
- Área de conocimiento: **Química Orgánica**

Contacto
- Teléfono 1: **922316502 ext. 6407**
- Teléfono 2:
- Correo electrónico: **msouto@ull.es**
- Correo alternativo: **msouto@ull.edu.es**
- Web: **http://www.campusvirtual.ull.es**

Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	11:00	13:00	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	frente al Lab-12
Todo el cuatrimestre		Miércoles	15:00	17:00	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	frente al Lab-12
Todo el cuatrimestre		Jueves	11:00	13:00	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	frente al Lab-12

Observaciones:

Tutorías segundo cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	11:00	13:00	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	frente al Lab-12
Todo el cuatrimestre		Martes	16:30	18:30	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	frente al Lab-12

Todo el cuatrimestre		Miércoles	11:00	13:00	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	frente al Lab-12
Observaciones:						

4. Contextualización de la asignatura en el plan de estudio

Bloque formativo al que pertenece la asignatura: **General**
Perfil profesional:

5. Competencias

General

CG01 - Tener habilidad en el empleo de las principales fuentes de información y documentación, incluyendo el manejo de bases de datos e internet

Básica

CB06 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
CB07 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo

Específica

CE01 - Aplicar las técnicas instrumentales más adecuadas para la identificación, cuantificación, separación, caracterización y determinación estructural
CE05 - Desarrollar habilidades teórico-prácticas para relacionar la estructura con las propiedades de sustancias de diferente complejidad

6. Contenidos de la asignatura

Contenidos teóricos y prácticos de la asignatura

Contenidos teóricos y prácticos

Tema 1: Espectroscopía de IR
Fundamentos. Instrumentación. IR y grupos funcionales. Aplicaciones estructurales.

Tema 2: Consideraciones básicas sobre la espectroscopía de RMN. Espectroscopía RMN monodimensional 1D. Conceptos fundamentales. Instrumentación. Desplazamiento químico. Acoplamiento escalar. RMN de 1H y 13C. Ejemplos de aplicación.

Tema 3: Espectroscopía RMN bidimensional 2D homonuclear.
Consideraciones generales. Experimentos correlación escalar: COSY, TOCSY. Experimentos correlaciones espacial: NOESY, ROESY, T-ROESY. Ejemplos de aplicación.

Tema 4: Espectroscopía RMN bidimensional 2D heteronuclear.
Consideraciones generales. Espectroscopía detección inversa. Correlaciones a un enlace HMQC, HSQC. Correlaciones a larga distancia: HMBC. Experimentos híbridos: HSQC-TOCSY, HSQC-NOESY. Ejemplos de aplicación.

Tema 5: Experimentos selectivos.
Introducción. Pulsos selectivos. Aplicaciones homonucleares y heteronucleares.

Tema 6: Espectrometría de masas
Fundamentos e instrumentación (Sistemas de Introducción de Muestras, Métodos de Ionización). Mecanismos principales de fragmentación. Ejemplos de aplicación.

Tema 7: Espectroscopía de UV y Dicroismo Circular
Transiciones electrónicas (UV y visible). Terminología. Efector del disolvente y de la cojugación. Reglas de Woodward-Fieser. Dicroismo circular: Métodos de quiralidad excitón. Ejemplos de aplicación.

Nota: A lo largo de todo el programa se intercalarán ejercicios de determinación estructural, haciéndose hincapié en el uso combinado de las distintas técnicas espectroscópicas.

Actividades a desarrollar en otro idioma

Los manuales recomendados en la bibliografía y gran parte del material utilizado en las clases y seminarios estarán en inglés.
El alumno deberá presentar en inglés la resolución de un ejercicio presentado por el profesor

7. Metodología y volumen de trabajo del estudiante

Descripción

- Clases magistrales. Se orientan a explicar los aspectos básicos del temario con la finalidad de facilitar la comprensión y aplicación de los procedimientos específicos de la asignatura, así como que el alumno disponga de información actualizada y bien organizada procedente de diversas fuentes que en algunos casos puede resultarle de difícil acceso En la explicaciones se hará uso de los medios audiovisuales disponibles, principalmente el cañón de proyección, material impreso, etc.
- Seminarios: resolución de problemas. Permitirán ejercitar, ensayar y poner en práctica los conocimientos previos; para ello, el profesor propondrá y resolverá problemas y ejercicios tipo. Se fomentará en los alumnos la capacidad de aprender a

aprender. El objetivo final de que el alumno aprenda a resolver problemas es que adquiera el hábito de plantear y resolver problemas como forma de aprender.
- Prácticas en el aula: Se abordará la preparación de muestras, el aprendizaje del funcionamiento de aparatos, la aplicación de técnicas e instrumentos, análisis de los resultados obtenidos, etc. Una vez finalizadas las clases de laboratorio, los alumnos elaborarán un informe detallado de cada una de las unidades prácticas realizadas, presentando un análisis crítico de los resultados obtenidos y las conclusiones alcanzadas.
- Las Tutorías se considerarán periodos de instrucción y/o orientación realizados por el profesor con el objetivo de revisar y discutir los materiales y temas presentados en las clases, seminarios, lecturas, realización de trabajos, preparación de exposiciones. etc. Se podrán realizar en pequeños grupos o incluso de forma individualizada si las circunstancias así lo aconsejen

Actividades formativas en créditos ECTS, su metodología de enseñanza-aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante

Actividades formativas	Horas presenciales	Horas de trabajo autónomo	Total horas	Relación con competencias
Clases teóricas	10,00	0,00	10,0	[CE05], [CE01], [CB10], [CB07], [CB06]
Clases prácticas (aula / sala de demostraciones / prácticas laboratorio)	2,00	0,00	2,0	[CE05], [CE01], [CB10], [CB07], [CB06]
Realización de seminarios u otras actividades complementarias	14,00	0,00	14,0	[CE05], [CE01], [CB10], [CB07], [CB06], [CG01]
Realización de exámenes	2,00	0,00	2,0	[CE05], [CE01], [CB07], [CB06]
Asistencia a tutorías	2,00	0,00	2,0	[CE05], [CE01], [CB10], [CB07], [CB06]
Estudio autónomo	0,00	20,00	20,0	[CE05], [CE01], [CB07], [CB06]

Preparación de seminarios, elaboración de memorias y/o informes de las prácticas realizadas, resolución de ejercicios que le haya entregado el profesor, preparación de debates, preparación de exposición oral, lecturas recomendadas, búsquedas bibliográfica	0,00	25,00	25,0	[CE05], [CE01], [CB10], [CB07], [CB06]
Total horas	30,00	45,00	75,00	
		Total ECTS	3,00	

8. Bibliografía / Recursos

Bibliografía Básica

- T.D.W. Claridge “High resolution NMR techniques in Organic Chemistry” 2nd Ed. Elsevier, Oxford (2009)
- N. Harada, and K. Nakanishi, Circular Dichroic Spectroscopy-Exciton Coupling in Organic Stereochemistry, University Science Books, Mill Valley, CA (1983).
- L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman “Organic structures from spectra” 4th Ed. (2008).
- Jürgen H. Gross, \"Mass spectrometry: a textbook\", Ed. Springer, Berlin, (2004).

Bibliografía Complementaria

- S. Berger, S. Braun “200 and more NMR experiments. A practical course” Ed. John Wiley & Sons (2004)
- S. Berger, D. Siecker “Classics in Spectroscopy” Isolation and structure elucidation of natural compounds. Ed. John Wiley & Sons (2009).
- R. Benn, H. Günther “Modern pulses methods in high-resolution NMR spectroscopy” Angew. Chem. Int. Ed. 1983, 22, 350-380
- D. G. Donne, D. G. Gorenstein “A pictorial representation of product operator formalism: non-classical vector diagrams for multidimensional NMR” Concepts Magn. Reson. 1997, 9, 95-111.
- M. Hesse, H. Meier y B.Zeeh, “Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica”, Editorial Síntesis, S.A., Madrid, 2005
- J. Keeler “Two-dimensional nuclear magnetic resonance spectroscopy” Chem. Soc. Rev. 1990, 19, 381-406
- J. Keeler, R. T. Clowes, A. L. Davis, E. D. Laue, “ Pulse-field gradients: theory and practice” Methods in Enzymology 1994, 239, 145-206
- J. Keeler “Understanding NMR spectroscopy” Ed. John Wiley & Sons, (2005)
- H. Kessler, M. Gerhke, C. Griesinger “Two-dimensional NMR Spectroscopy: background and overview of the experiments” Angew. Chem. Int. Ed. 1988, 27, 490-536
- R. W. King, K. R. Williams “A glossary of NMR therms” J. Chem. Educ. 1990, 67, A100-105

- E. E. Kwan, S. G. Huang "Structure elucidation with NMR spectroscopy: practical strategies for organic chemists" Eur. J. Org. Chem. 2008, 2671-2688.
- P.K. Mandal, A. Majumdar " A comprehensive discussion of HSQC and HMQC pulse sequence". Concepts in Magn. Reson. 2004, 20A, 1-23.
- F. W.McLafferty, "Interpretación de los espectros de masas", Editorial Reverté, Barcelona [etc.], 1969
- F.W. McLafferty \"Interpretation of mass spectra\" University Science Books 1993
- G. E. Martin, C. E. Hadden " Long-range 1H-15N heteronuclear shift correlation at natural abundance" J. Nat. Prod. 2000, 63, 543-585.
- D. Neuhaus, M.P: Williamson "The Nuclear Overhauser Effect in structural and conformational analysis" 2nd Ed. John Wiley &Sons , New York (2000)
- W. F. Reynolds, R. G. Enriquez "Choosing the best pulse sequences, acquisition parameters,post-acquisition processing strategies and probes for natural products structure elucidation by NMR spectroscopy" J. Nat. Prod. 2002, 65, 221-244.
- K. Nakanishi, N. Berova, and R. W. Woody CircularDichoism, Principles and Applications (, eds.), VCH Publishers, Inc., New York (1994).
- N. Purdie, Analytical Applications of Circular Dichroism in Techniques and Instrumentation in Analytical Chemistry (Volume 14) (N. Purdie, and H. G. Brittain, eds.), Elsevier Science B. V., Amsterdam (1994).
- Circular Dichroism and the Conformational Analysis of Biomolecules (G. D. Fasman, ed.), Plenum Press, New York, p. 25-157. (1996).
- Berova, N.; Nakanishi, K.; Woody, R., CircularDichroism - Principles and Applications (Eds.), Wiley-VCH: New York, 2000.

Otros Recursos

- Bases de datos (Por ejemplo: SciFinder)
- http://www.spectroscopynow.com
- http://www.chem.ucla.edu/webspectra
- http://science-and-fun.de/tools/
- http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi?lang=eng
- http://webbook.nist.gov/chemistry/
- http://www.chem.arizona.edu/massspec/intro html/intro.html

9. Sistema de evaluación y calificación

Descripción

La calificación de la convocatoria de junio se basará en la evaluación continua que consta de los siguientes elementos:
- Asistencia y participación activa en todas las actividades de la asignatura: 5%
- Presentación de un trabajo a determinar con el profesor: 40%
- Prueba final escrita: 55 %

En el resto de las convocatorias se realizará una evaluación alternativa que consistirá en un examen teórico-práctico sobre los contenidos de la asignatura y su calificación final será la correspondiente a dicho examen. En el supuesto de que se hubiesen superado, la calificación de las prácticas obtenida en la evaluación continua se tendrá en cuenta en la evaluación única.

Estrategia Evaluativa

Tipo de prueba	Competencias	Criterios	Ponderación
Trabajos y proyectos	[CE05], [CE01], [CB10], [CB07], [CB06], [CG01]	SE2 – Evaluación continua: Evaluación de los trabajos y ejercicios realizados a propuesta del profesorado - Presentación - Capacidad de análisis y síntesis. - Capacidad de organización y planificación - Resultados, discusión e interpretación de los resultados - Razonamiento crítico. - Creatividad.	30,00 %
Técnicas de observación	[CE05], [CE01], [CB10], [CB07], [CB06]	SE1 – Evaluación continua: Control de asistencia y participación activa en todas las actividades de la asignatura	5,00 %
Examen Final	[CE05], [CE01], [CB07]	SE11 – Examen Final: Pruebas Escritas en la que se deberá determinar una serie de estructuras haciendo uso de los espectros que se aportan.	55,00 %
Exposición Oral	[CE05], [CE01], [CB10], [CB07], [CB06]	SE3 – Evaluación continua. Presentación oral y defensa del trabajo acordado con el profesor.	10,00 %

10. Resultados de Aprendizaje

Utilizar la información extraída de los espectros EM, IR, UV-visible, DC y RMN mono y bidimensionales de sustancias de complejidad media.
Elegir el tipo de experimento de RMN a realizar en función del problema estructural al que se enfrente.
Interpretar y debatir el contenido de artículos de la literatura científica en los que se hace uso de las técnicas espectroscópicas presentadas.
Aplicar los conocimientos de la espectrometría de masas al análisis cualitativo y cuantitativo.

11. Cronograma / calendario de la asignatura

Descripción

Al no preveerse un número demasiado elevado de alumnos, toda la docencia será presencial. Caso no no poder realizarse la misma, las clases pasarán a realizarse en el Aula Virtual del curso emitidas en el horario estipulado para las mismas, con herramientas tales como Meet o Zoom.
Las tutorías se realizarán personalmente o virtualmente bajo cita previa con el profesor.
La fecha en que se realizarán la prueba final contemplada en la evaluación continua de la convocatoria de junio y la evaluación única en las diferentes convocatorias se puede consultar en

http://www.ull.es/view/master/mquimica/Calendario_de_examenes/es
Por último, destacar que la distribución de los temas por semana en el cronograma es orientativa, pudiendo sufrir cambios según las necesidades de organización docente.

Primer cuatrimestre					
Semana	**Temas**	**Actividades de enseñanza aprendizaje**	**Horas de trabajo presencial**	**Horas de trabajo autónomo**	**Total**
Semana 4:	Temas 1 y 2	Teoría (3.0 horas) Seminarios (3.5 horas) Prácticas (1 hora)	7.50	10.00	17.50
Semana 5:	Temas 3 y 4	Teoría (3 horas) Seminarios (4.5 horas)	7.50	10.00	17.50
Semana 6:	Tema 5 y 6	Teoría (2.5) Seminarios (3.5 horas)	6.00	9.00	15.00
Semana 7:	Temas 6 y 7	Clases teoría (1.5 horas) Seminarios (2 horas) Tutorías (2 horas)	5.50	8.00	13.50
Semana 8:		Examen (2 horas)	2.00	6.00	8.00
Semana 10:		Prácticas (1 hora) Seminario (0.5 horas)	1.50	2.00	3.50
		Total	30.00	45.00	75.00