

Plan 558 MÁSTER QUÍMICA SINTÉTICA E INDUSTRIAL

Asignatura 52260 METODOS DE DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

Grupo 1

### Tipo de asignatura (básica, obligatoria u optativa)

Obligatoria

### Créditos ECTS

3

### Competencias que contribuye a desarrollar

- G1.- Conocimiento del método científico.
- G2.- Competencia para aplicar los conocimientos adquiridos.
- G3.- Capacidad crítica, de análisis y síntesis, y capacidad de interpretación.
- G4.- Competencias metodológicas.
- G5.- Capacidad para valorar la originalidad y creatividad.
- G6.- Capacidades de comunicación.
- G7.- Capacidad de trabajo en equipo.
- G8.- Capacidad para el uso de las nuevas tecnologías.
- G9.- Desarrollar el interés por la formación permanente.
- G10.- Capacidad de aprendizaje autónomo.
- E1.- Adquisición de destrezas técnicas generales en el ámbito de una o varias disciplinas químicas.
- E4.- Capacidad y destrezas para la gestión de las fuentes de la investigación en Química.
- E5.- Capacidad de aplicar y adaptar los modelos teóricos y las técnicas específicas tanto a problemas abiertos en su línea de especialización, como a problemas provenientes de otros ámbitos ya sean científicos o técnicos.
- E11.-Capacidad de relacionar las características espectroscópicas con la estructura molecular.

### Objetivos/Resultados de aprendizaje

El objetivo global de esta materia será lograr que el alumno sea capaz de determinar la estructura de sustancias orgánicas desconocidas a partir de los datos obtenidos de los espectros de EM y RMN.

Aprendizaje de los fundamentos y técnicas de interpretación de cada tipo de espectroscopia. Precisamente la consideración de los espectros de un compuesto como un todo unitario es el objetivo principal de la asignatura.

Objetivos específicos RMN:

Dejar claro el fundamento físico de la Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Lograr que el alumno distinga entre RMN de pulsos y de onda continua, entendiendo el concepto de pulso. Aclarar los conceptos de “desplazamiento químico” y “acoplamiento spin-spin” tanto para el núcleo  $^1\text{H}$

como para el  $^{13}\text{C}$  así como para otros núcleos activos. Conseguir que el alumno conozca los experimentos que permitan efectuar desacoplamiento spin-spin. Una vez introducido el concepto de “relajación”, lo cual permitirá explicar el efecto NOE, se trata de que el alumno tenga claro cuales son las principales aplicaciones de este tipo de experimentos. Dar a conocer los principales tipos de experimentos de dos dimensiones y su aplicabilidad para la determinación de estructuras. Conseguir que el alumno sea capaz de reproducir los tipos de experimentos citados en los objetivos

anteriores en los equipos de RMN, aplicándolo a muestras reales.

Objetivos específicos EM

Dar a conocer al alumno los métodos de ionización y análisis. Obtención de la fórmula molecular. Interpretación de espectros de masas de compuestos orgánicos.

### Contenidos

Tema 1

ESPECTROMETRÍA DE MASAS

Métodos de ionización. Métodos de análisis. Ión molecular. Requisitos del ión molecular. Composición elemental: isótopos y conjuntos isotópicos. Fórmula molecular. Espectros de masas de compuestos orgánicos y organometálicos.

Tema 2

## RMN

Descripción simple del sistema. Fundamento físico. Precesión nuclear. Magnetización macroscópica. Transición espectroscópica y poblaciones. RMN de pulsos. El espectrofotómetro (shims-lock-sonda-preparación de muestras). Composición de pulsos, experimentos con más de un pulso.

### Tema 3

#### RELAJACION Y EFECTO NOE.

Introducción (relajación transversal y longitudinal). Movimientos moleculares. Tipos de relajación (dipolo-dipolo, por anisotropía del desplazamiento químico, por spin-rotación, cuadrupolar, escalar y por sustancias paramagnéticas). Medida de T1. Medida de T2 y secuencia eco de spin. Fundamentos del efecto NOE. Relación entre relajación y movilidad molecular. Dependencia del efecto NOE. Principios básicos para analizar el efecto NOE. NOE transitorio. Medida experimental del efecto NOE. Experimentos NOE-diferencia. Aplicaciones: asignación de espectros, determinación de estructuras y análisis conformacional.

### Tema 4

#### RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR DINAMICA.

Concepto. Tipos de procesos. Vida media y anchura de línea.

### Tema 5

RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR DE DOS DIMENSIONES. Correlaciones heteronucleares: Correlaciones heteronucleares protón- heteronúcleo: HMBC, HSQC, HMQC.

Correlaciones homonucleares: COSY y TOCSY. Espectroscopia de dos dimensiones con resolución de J (J-spectroscopy) heteronuclear y homonuclear. Espectroscopia nOe y de intercambio: NOESY, ROESY.

### Tem 6

#### USO DE GRADIENTES DE CAMPO EN RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR.

Qué es y qué efecto tiene un gradiente de campo. Espectroscopía DOSY.

## Principios Metodológicos/Métodos Docentes

### Clases teóricas en el aula

Para conseguir un aprendizaje significativo, la principal herramienta a utilizar en este curso es la clase magistral participativa. Para este tipo de clase se utilizarán los medios audiovisuales habituales.

Clases prácticas en el aula y Clases prácticas en el laboratorio de instrumentación. se realizarán clases de problemas seleccionados en el aula.

El tiempo restante será de prácticas en los equipos de RMN, es decir se enseñará a los alumnos como utilizar dicho equipamiento, una vez puestas en su conocimiento las normas de utilización de los equipos. Se realizarán experimentos con muestras reales y a continuación se sacarán las correspondientes conclusiones de cada experimento realizado. Para llevar a cabo estas prácticas se repartirán los alumnos en grupos de seis.

Trabajos a realizar por el alumno fuera del aula

Fuera del aula el alumno realizará ejercicios de resolución de problemas y interpretación de espectros.

## Criterios y sistemas de evaluación

Evaluación continua de la actividad del alumno: 40%

Examen final (caso práctico): 60%

## Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial

### Recursos de aprendizaje:

Los alumnos tienen a su disposición la instrumentación necesaria para la realización de las prácticas. Su uso está sujeto a la normativa de la UVa vigente para su uso por parte de los grupos de investigación. También dispone del software de tratamiento de datos espectroscópicos (Topspin, MestReNova, etc) y del las bases de datos bibliográficos (SciFinder, Web of Knowledge, etc) y del resto de recursos propios de la Biblioteca Universitaria.

Apoyo tutorial: Los alumnos pueden concertar tutorías en las horas de tutoría de los profesores, preferiblemente comunicándolo por correo electrónico con 24 h de anticipación.

## Calendario y horario

## Tabla de Dedicación del Estudiante a la Asignatura/Plan de Trabajo

### ACTIVIDADES PRESENCIALES

#### HORAS

### ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

#### HORAS

Clases teóricas

8

Estudio y trabajo autónomo individual\*

Clases prácticas

---

20  
Estudio y trabajo autónomo grupal\*

Laboratorios

Prácticas externas, clínicas o de campo

Seminarios

Otras actividades  
2

Total presencial  
30  
Total no presencial

---

**Responsable de la docencia (recomendable que se incluya información de contacto y breve CV en el que aparezcan sus líneas de investigación y alguna publicación relevante)**

Juan A. Casares.  
Ver CV y publicaciones en su página web  
Jesús M<sup>a</sup> Martínez de Ilarduya.

---

**Idioma en que se imparte**

Español. Puede impartirse en inglés si hubiera alumnos no hispanohablantes.

---