

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	34224
Nombre	Determinación Estructural en Química Orgánica
Ciclo	Grado
Créditos ECTS	4.5
Curso académico	2017 - 2018

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1108 - Grado en Química	Facultad de Química	4	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Carácter
1108 - Grado en Química	17 - Química Orgánica Aplicada	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
PARRA ALVAREZ, MARGARITA	325 - Química Orgánica

RESUMEN

La asignatura “Determinación Estructural en Química Orgánica” forma parte de la materia “Química Orgánica Aplicada” de 15 créditos ECTS dentro del módulo Química, Industria y Sociedad. Se trata de una asignatura de carácter optativo de 4,5 créditos ECTS que se imparte en 7º semestre de cuarto curso.

El objetivo básico de esta asignatura es profundizar y ampliar los conocimientos adquiridos en las asignaturas de orgánica. Su enfoque es fundamentalmente práctico y su objetivo es proporcionar al alumno una visión general de las principales técnicas espectroscópicas disponibles actualmente (ultravioleta-visible, infrarroja y de resonancia magnética nuclear), así como la espectrometría de masas, y su aplicación práctica para la obtención de información y determinación de estructuras de los compuestos orgánicos. Además, se pretende que el alumno adquiera el conocimiento suficiente para poder diseñar la mejor manera de abordar un determinado problema de determinación estructural a partir de la información que proporciona cada tipo de espectro, así como conocer las aplicaciones y limitaciones de cada una de las técnicas espectroscópicas.



Hoy en día la mayoría de los problemas de elucidación estructural, tanto a nivel de investigación como industrial, se solucionan de una forma fácil, rápida y segura con la utilización de las técnicas que se estudian en esta asignatura. Esta formación proporciona al estudiante y futuro químico recursos suficientes para la aplicación de los métodos espectroscópicos a la resolución de los problemas estructurales menos complejos.

CONOCIMIENTOS PREVIOS

Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

Aunque la asignatura tiene un carácter de formación básico, es esencial que el estudiante posea una formación sólida en la terminología, nomenclatura y propiedades estructurales de los grupos funcionales y de las moléculas orgánicas. Es también importante que el estudiante esté familiarizado con la estereoquímica y posea las nociones de espectroscopia de moléculas orgánicas adquiridas en las asignaturas de Química Orgánica de cursos anteriores, así como conocer los fundamentos teóricos mínimos que permitan la comprensión de los principios físico-químicos relacionados con las espectroscopías de absorción y resonancia magnética de espín nuclear.

COMPETENCIAS (RD 1393/2007) // RESULTADOS DEL APRENDIZAJE (RD 822/2021)

1108 - Grado en Química

- Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico.
- Demostrar capacidad inductiva y deductiva.
- Demostrar capacidad de gestión y dirección, espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, control, liderazgo, toma de decisiones y negociación.
- Resolver problemas de forma efectiva.
- Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional.
- Comprometerse con la ética, los valores de igualdad y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.
- Adquirir una sensibilidad permanente por la calidad y el medio ambiente, el desarrollo sostenible y la prevención de riesgos laborales.
- Demostrar que reconoce los elementos químicos y sus compuestos: Obtención, estructura, reactividad, propiedades y aplicaciones.



- Relacionar las propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.
- Demostrar que conoce la estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos.
- Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
- Evaluar, interpretar y sintetizar los datos e información Química.
- Llevar a cabo procedimientos experimentales estándar implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- Relacionar teoría y experimentación.
- Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
- Desarrollar metodologías sostenibles y respetuosas con el medio ambiente.
- 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.
- Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.
- Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.
- Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.
- Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la Comunidad Valenciana.
- Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (RD 1393/2007) // SIN CONTENIDO (RD 822/2021)

3 Saber valorar la importancia de los aspectos estereoquímicos de los productos estudiados tanto en su síntesis como en su aplicación práctica. CE12, CE18, CE22

4 Saber adquirir, utilizar y transmitir información bibliográfica referida a los compuestos orgánicos. CT1, CE7, CT3.

5 Conocer y saber utilizar las técnicas habituales en la determinación estructural de compuestos orgánicos CG1, CG2, CG4, CE7

6 Elucidar la estructura de los compuestos orgánicos sencillos, utilizando técnicas espectroscópicas CG1, CG2, CG4, CE7



- 7 Saber buscar y utilizar datos espectroscópicos de los compuestos orgánicos. CE16, CT3
- 8 Comprender las propiedades estructurales de los compuestos y de los grupos funcionales orgánicos aplicándolos a la solución de problemas estructurales CE11
- 14 Saber organizar y planificar tareas CG3
- 15 Trabajar en equipo con un comportamiento serio y profesional y con perspectiva de género CG5

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Métodos físicos de determinación estructural. Espectroscopía ultravioleta-visible(UV-Vis).

El espectro electromagnético. Tipos de interacción de la radiación con la materia. Espectroscopia de absorción: transiciones entre niveles energéticos. Espectroscopia ultravioleta (UV)-visible. Transiciones electrónicas. Conceptos fundamentales. El espectrofotómetro de UV-VIS. Preparación de la muestra. Absorciones características de las moléculas orgánicas. Cromóforos: olefinas, polienos, benceno y derivados, compuestos carbonílicos.

2. Espectroscopía Infrarroja (IR)

Fundamentos de la espectroscopia infrarroja. Vibraciones moleculares. Ley de Hooke. Tipos de vibraciones. Factores que influyen en la posición y forma de las bandas: acoplamiento de bandas, enlace de hidrógeno, conjugación, efectos electrónicos y tensión anular. El espectrofotómetro de infrarrojo. Preparación de muestras. Absorciones características de los grupos funcionales de las moléculas orgánicas. Interpretación de espectros de IR.

3. Fundamentos de la espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear

Espines nucleares. Núcleos en un campo magnético externo. Población de niveles de energía. Descripción del fenómeno de la resonancia magnética nuclear: condiciones de resonancia. Magnetización macroscópica. Los procesos de relajación. Espectroscopía de RMN de pulsos y transformada de Fourier. Instrumentación. Preparación de muestras para RMN. El espectro de RMN: resolución.

4. Resonancia Magnética Nuclear de protón

Frecuencias de resonancia para los distintos núcleos. Desplazamiento químico. La escala delta. Apantallamiento y desapantallamiento. Análisis de espectros de RMN. Tipos de protones en RMN. Núcleos química- y magnéticamente equivalentes. Integración del área de las señales. Desdoblamiento de las señales: acoplamiento espín-espín. Tipos de acoplamiento espín-espín. Multiplicidad. Acoplamientos de primer orden. Factores que afectan a los acoplamientos protón-protón. Influencia de factores estructurales e intermoleculares en el desplazamiento químico: correlaciones empíricas. Tablas



para la estimación del desplazamiento químico.

5. Análisis de Espectros de RMN de protón

Sistemas complejos de acoplamiento espín-espín. Aproximación de segundo orden. Ejemplos de diversos sistemas de acoplamiento. Procesos de intercambio químico (intermoleculares, con el disolvente, intramoleculares): aplicaciones. Métodos de desacoplamiento espín-espín: doble resonancia. Experimentos bidimensionales: COSY.

6. Resonancia Magnética Nuclear de carbono-13

Análisis de un espectro de RMN de ^{13}C . Acoplamientos ^{13}C - ^1H . Desacoplamientos: de banda ancha (BB), off-resonance, DEPT (Distortionless Enhancement by Polarization Transfer). Desplazamientos químicos de los núcleos de ^{13}C . Factores que influyen en el desplazamiento químico. Correlaciones empíricas.

7. Espectrometría de Masas

Fundamentos. Ionización por impacto electrónico. Fragmentación del ión molecular. Interpretación de los espectros de EM. Información analítica. Ion molecular y satélites isotópicos. Análisis elemental. Masa exacta. Instrumentación y tipos de analizadores. Otros métodos de ionización aplicados al análisis de moléculas orgánicas y bioorgánicas. Sistemas de introducción de muestras y acoplamiento a las diferentes técnicas de separación cromatográficas.

8. Aplicación de las técnicas espectroscópicas a la determinación de estructuras de compuestos orgánicos

Resolución de problemas con aplicación conjunta de los diferentes métodos estudiados en los temas anteriores para establecer la estructura de compuestos orgánicos sencillos. Utilización de programas informáticos como ayuda a la asignación estructural basada en técnicas espectroscópicas.

**VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	38,00	100
Tutorías regladas	7,00	100
Estudio y trabajo autónomo	30,50	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	37,00	0
TOTAL	112,50	

METODOLOGÍA DOCENTE

La asignatura está planteada para que el estudiante sea el protagonista de su propio aprendizaje y estructura de la siguiente manera:

•**Clases teóricas presenciales.** Se dedicarán a exponer a los estudiantes los aspectos fundamentales de la materia. En estas clases se desarrollarán de forma oral los diferentes apartados que se recogen en el programa de la asignatura, lo que permitirá al alumno obtener una visión global y comprensiva de la misma. Se hará uso de la pizarra y de presentaciones PowerPoint. Previamente a al desarrollo de la clase, todo el material pedagógico que es necesario para el seguimiento de las clases podrá estar a disposición de los alumnos en el Aula Virtual.

Estas clases se complementan con el tiempo de estudio personal del alumno.

•**Clases prácticas.** En estas clases se llevará a cabo la aplicación específica de los conocimientos que los estudiantes hayan adquirido en las clases de teoría. Los estudiantes deberán haber trabajado previamente los problemas que se van a resolver. La resolución de estos problemas se llevará a cabo en algunas ocasiones por el profesor y en otros casos por los alumnos, bien en grupo, bien de forma individualizada.

•**Tutorías.** Srán 6 sesiones repartidas uniformemente a lo largo del curso, siendo de 1 hora la duración de cada una de estas sesiones. En ellas, el profesor evaluará el proceso global de aprendizaje de los estudiantes, a los que se podrá haber organizado previamente en subgrupos de trabajo. En las sesiones de tutoría se podrán recoger los trabajos que hayan sido encomendados por el profesor. Igualmente, las tutorías servirán para resolver todas las dudas que hayan podido surgir a lo largo de las clases y orientarán a los estudiantes sobre los métodos de trabajo más útiles para la resolución de los problemas que se les puedan presentar.

•**Seminarios.** Se llevarán a cabo seminarios de 1 hora cada uno a lo largo del semestre. En algunos de ellos, se desarrollaraán aspectos relacionados con las distintas técnicas explicadas en el curso. Como parte de las actividades del curso, cada grupo de estudiantes tendrá que elucidar la estructura de una muestra desconocida que les será entregada a principio de curso. El proceso desarrollado para llevar a cabo la elucidación será expuesto mediante una presentación oral. Para este trabajo, los estudiantes serán organizados en subgrupos de trabajo al igual que en el caso de las tutorías.



EVALUACIÓN

El rendimiento académico del estudiante y la calificación final de la asignatura se realizarán, de forma ponderada, según los porcentajes que se muestran en cada uno de los apartados evaluados. Todas las calificaciones estarán basadas en la puntuación absoluta sobre 10 puntos, y de acuerdo con la escala establecida en el RD 1125/2003. Este criterio se mantendrá en todas las convocatorias.

Los diferentes apartados que se evaluarán son los siguientes:

1- Evaluación directa del profesor (1 punto): En esta evaluación se tendrán en cuenta diferentes aspectos, entre los que cabe destacar:

- Asistencia y participación razonada y clara en las discusiones planteadas.
- Progreso en el uso del lenguaje característico de la química orgánica
- Resolución de problemas y planteamiento de dudas.
- Espíritu crítico.

2.- Seminarios de Química Orgánica y Tutorías (globalmente 2 puntos): La nota de cada estudiante en este apartado tendrá en consideración:

- Asistencia.
- Contenido y presentación por escrito de los ejercicios encomendados por el profesor en cada subgrupo de trabajo. La calificación será una nota global para el subgrupo y se computará por igual a cada miembro del mismo.

Para recibir calificación en este apartado, se deberá haber asistido a un mínimo de 4 seminarios y 4 tutorías.

3.- Exámenes (7 puntos): se realizará en la fecha indicada por la Facultad y será común para todos los grupos de la asignatura. Esta prueba consistirá en preguntas, problemas y ejercicios que permitan valorar la adquisición por parte del alumno de las competencias recogidas en la guía docente.

Constará de dos partes, de acuerdo con la doble finalidad de la asignatura: i) cuestiones en las que se establecerán y/o justificarán determinadas características espectroscópicas de compuestos orgánicos conocidos y ii) la determinación razonada de la estructura de dos compuestos orgánicos mediante el análisis conjunto de sus espectros.

El aprobado global en la asignatura llevará necesariamente implicado el haber obtenido en el examen una puntuación mínima de 3,2 puntos sobre los 7 puntos totales

En la evaluación de la segunda convocatoria, se mantendrá la calificación obtenida en la evaluación continua (punto 1- "Evaluación directa del profesor" y Punto 2- "Seminarios") de la primera convocatoria y se procederá a evaluar de nuevo la parte correspondiente al Punto 3- "Exámenes".



El estudiante podrá acogerse a ser evaluado únicamente con un examen escrito sobre los contenidos de la asignatura tratados a las clases de teoría, las tutorías y seminarios, de manera que el profesor podrá así evaluar si el estudiante ha adquirido las competencias y conocimientos relacionados con la asignatura. Este examen será el 100% de la calificación global.

En este caso el estudiante deberá renunciar a la evaluación continua y acogerse a esta modalidad de evaluación comunicándolo en el primer mes mediante escrito presentado con registro de entrada en la secretaría del departamento.

REFERENCIAS

Básicas

- Kemp W. Organic Spectroscopy 3ª edición, MacMillan Press LTD, 1991
- Hesse, M.; Meier, H. y Zeeh, B. Métodos espectroscópicos en Química Orgánica, 2ª edición, Editorial Síntesis, 2005.
- Pretsch E., Clerc T., Seibl J., , Simon W. Tablas para la determinación estructural por métodos espectroscópicos. Springer-Verlag Ibérica, 1998.
- Pedro, J. R.; Blay, G. 200 problemas de determinación estructural de compuestos orgánicos" Vision Libros, 2010.
- Field, L.D.; Sternhell, S. y Kalman, J. R Organic Structures from Spectra, 4ª edición, Wiley, 2008.
- ChemBioOffice Ultra, PerkinElmer (CambridgeSoft)
Amplia selección de aplicaciones y funcionalidades que permite a químicos y biólogos dibujar, formular, modelar y editar estructuras moleculares químicas y biológicas.
- Pavia D. L., Lampman G. M., Kriz G. S., Vyvyan J. A. Introduction to Spectroscopy 4ª edición, Brooks/Cole Cengage Learning, 2009.

Complementarias

- Pretsch, E.; Bühlmann, P.; Affolter, C.; Herrera, A. y Martínez R.: Determinación estructural de compuestos orgánicos, Elsevier-Masson. 2005.
- Silverstein, R. M.; Webster, F. X.; Kiemle, D. J.: Spectrometric Identification of Organic Compounds, 2005, Wiley.
- Duddeck H., Dietrich W., Tóth G., Elucidación Estructural por RMN. Springer-Verlag Ibérica (Traducción de la 3ª Ed. Revisada y actualizada), 2000.
- Ekman R., Silberring J., Westman-Brinkmalm A., Kraj A., Mass spectrometry (Instrumentation, Interpretation, and Applications), John Wiley & Sons, 2009