

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

Código	36469
Nombre	Determinación Estructural en Química Orgánica
Ciclo	Grado
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1110 - Grado de Química V2-2018	Facultad de Química	4	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
1110 - Grado de Química V2-2018	17 - Química Orgánica Aplicada	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
ABAD SOMOVILLA, ANTONIO	325 - Química Orgánica

RESUMEN

La asignatura “Determinación Estructural en Química Orgánica” forma parte de la materia “Química Orgánica Aplicada” de 22.5 créditos ECTS dentro del módulo Química, Industria y Sociedad. Se trata de una asignatura de carácter optativo de 6 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 Química 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 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 nivel 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 espectroscopía de moléculas orgánicas adquiridas en las asignaturas de Química Orgánica de cursos anteriores, así como conocer los fundamentos teóricos mínimos que permitan la comprensión

COMPETENCIAS

1110 - Grado de Química V2-2018

- Demostrar capacidad inductiva y deductiva.
- Resolver problemas de forma efectiva.
- Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional.
- 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.
- 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.
- 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 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

El apartado anterior recoge las competencias contenidas en el documento VERIFICA. En esta asignatura se abordan parte de los resultados de aprendizaje de la materia Química Orgánica Aplicada que permiten adquirir, tanto conocimientos específicos de Química, como habilidades y competencias cognitivas y competencias generales recomendadas por la EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) for the Chemistry Eurobachelor® Label. En la siguiente tabla se relacionan los resultados de aprendizaje adquiridos en la asignatura de Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos relacionados con las competencias del grado en Química.

CONOCIMIENTOS ESPECÍFICOS DE QUÍMICA	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
	Competencias de la asignatura Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHELOR®
Los principios y los procedimientos utilizados en análisis químico y la caracterización de los compuestos químicos.	Demostrar que conoce los principios, procedimientos y técnicas para la determinación, separación, identificación y caracterización de compuestos químicos. (CE8) Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos (CE24).
Las principales técnicas de la investigación de estructuras incluyendo la espectroscopia.	Demostrar que reconoce los elementos químicos y sus compuestos: Obtención, estructura, reactividad, propiedades y aplicaciones (CE7). Demostrar que conoce los principios, procedimientos y técnicas para la determinación, separación, identificación y caracterización de compuestos químicos. (CE8)



Los rasgos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos incluyendo la estereoquímica.	Demostrar que reconoce los elementos químicos y sus compuestos: Obtención, estructura, reactividad, propiedades y aplicaciones (CE7). Relacionar las propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales (CE11).
---	---

COMPETENCIAS Y HABILIDADES COGNITIVAS	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
	Competencias de la asignatura Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos del título de grado que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHLEOR®
Capacidad para demostrar conocimiento y comprensión de los hechos, conceptos, principios y teorías fundamentales relacionadas con los temas mencionados anteriormente.	Demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química (CE13).
Capacidad para aplicar dicho conocimiento y comprensión a la solución de problemas comunes cualitativos y cuantitativos.	Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14). Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos (CE15). Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos (CE24).
Competencias para la evaluación, interpretación y síntesis de información y datos químicos.	Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan (CE20).



COMPETENCIAS GENERALES	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
	Competencias de la asignatura Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos del título de grado que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHLEOR®
Capacidad para aplicar conocimiento práctico para la resolución de problemas relacionados con información cualitativa y cuantitativa.	Resolver problemas de forma efectiva (CG4). Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14). Relacionar teoría y experimentación (CE22). Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria (CE23). Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos (CE24).
Competencias de estudio necesarias para el desarrollo profesional. Éstas incluirán la habilidad de trabajar de forma autónoma.	Demostrar capacidad de gestión y dirección, espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, liderazgo, toma decisiones y negociación (CG3). Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional (CG5). Aprender de forma autónoma (CG8). Demostrar capacidad para adaptarse a nuevas situaciones (CG9). Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía (CB5).



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. Espectroscopía de absorción: transiciones entre niveles energéticos. Espectroscopía 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. Efectos del disolvente y del pH.

2. Espectroscopía Infrarroja (IR)

Fundamentos de la espectroscopía 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 espectroscopía 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. Simplificación del análisis del proceso de resonancia. Apantallamiento. El espectro de RMN: Resolución. Espectrómetros de RMN de onda continua. Método de pulsos y transformada de Fourier. Ángulo de un pulso. Anchura de un pulso. Caída libre de la inducción (FID). Transformada de Fourier. Acumulación de espectros. Espectrómetro de pulsos y Transformada de Fourier.

4. Resonancia Magnética Nuclear de protón

Frecuencias de resonancia para los distintos núcleos. Desplazamiento químico. La escala . Apantallamiento y desapantallamiento. Preparación de muestras para RMN. Análisis de espectros de RMN. Tipos de protones en RMN. Integración del área de las señales. Desdoblamiento de las señales: acoplamiento espín-espín. Tipos de acoplamiento espín-espín. Multiplicidad. Acoplamientos de primer orden. Acoplamientos más complejos. Valores de desplazamiento químico. Factores que afectan al desplazamiento químico: Efecto inductivo, Anisotropía magnética, Repulsiones de Van der Waals, Existencia de enlaces de hidrógeno, Efectos conjugativos. 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. Efectos especiales en RMN: Procesos de intercambio químico (intermoleculares, con el disolvente, Intramoleculares). Desacoplamiento de espín-espín: doble resonancia. Introducción al efecto Nuclear Overhauser (NOE). Experimentos bidimensionales 1H1H (COSY).

6. Resonancia Magnética Nuclear de carbono-13

Análisis de un espectro de RMN de 13C. Acoplamientos 13C- 1H. Desacoplamientos: De banda ancha BB, Off-resonance, DEPT (Distortionless Enhancement by Polarization Transfer). Desplazamientos químicos de los núcleos de 13C. Numero de señales. Disolventes. Posición de las señales. Factores que influyen en el desplazamiento (δ). Correlaciones empíricas. Experimentos bidimensionales 1H13C: HETCOR y HSQC.

7. Espectrometría de Masas

Introducción. El espectrómetro de masas. Tipos de espectrómetros de masas. Métodos de ionización más relevantes. Espectrometría de masas por impacto electrónico. El ion molecular y los picos isotópicos. Reconocimiento del ion molecular. Deducción de la fórmula molecular. Factores que controlan los modos de fragmentación. Principales tipos de fragmentación. Fragmentación en α . Fragmentación bencílica. Fragmentación alílica. Fragmentaciones de enlaces no activados. Fragmentación de derivados mono-halogenados. Reacción retro Diels-Alder. Transposiciones de McLafferty. Reacciones onio. Pérdida de CO. Eliminación de agua. Fragmentaciones en compuestos bi- y poli-funcionalizados. Otros métodos de ionización para análisis de moléculas bioorgánicas. MALDI-TOF-MS.

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	51,00	100
Tutorías regladas	9,00	100
Elaboración de trabajos en grupo	10,00	0
Estudio y trabajo autónomo	30,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	50,00	0
TOTAL	150,00	

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 estará a disposición de los alumnos en el Aula Virtual.

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

•**Clases prácticas y seminarios.** 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.** Serán 9 sesiones en total 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 organizar en subgrupos de trabajo. En las sesiones de tutoría se recogerán 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.

EVALUACIÓN

La evaluación del 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.-Tutorías, Cuestionarios y

Tareas (globalmente 2 puntos): La nota de cada estudiante en este apartado tendrá en consideración:

- Asistencia.
- Calificaciones de los cuestionarios.
- Contenido y presentación por escrito de las tareas encomendados por el profesor en cada subgrupo de trabajo. La calificación de las tareas 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 realizado todos los cuestionarios y haber asistido a un mínimo de 7 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 3.3 puntos sobre los 7 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 Cuestionarios y Tareas") de la primera convocatoria y se procederá a evaluar de nuevo la parte correspondiente al Punto 3- "Exámenes".

REFERENCIAS

Básicas

- KEMP, W. Organic Spectroscopy 3ª edición, Polgrave Publishers LTD, 2002
- HESSE, M.; MEIER, H.; ZEEH, B. Métodos espectroscópicos en Química Orgánica, 2ª edición, Madrid: Editorial Síntesis, 2005.



- PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M., KRIZ G. S., VYVYAN, J. A. Introduction to Spectroscopy, 5ª edición, Cengage Learning, 2015.
- PRETSCH, E.; MARTINEZ, R.; HERRERA, A.; BÜHLMANN, P. AFFOLTER, C. Determinación estructural de compuestos orgánicos + CD-ROM, Barcelona: Elsevier España, 2002
- PEDRO, J. R.; BLAY, G. 200 problemas de determinación estructural de compuestos orgánicos. Madrid: Vision Libros, 2010.
- FIELD, L. D.; STERNHELL, S.; KALMAN, J. R Organic Structures from Spectra, 4ª edición, Chichester: 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 así como simular espectros de RMN de protón y carbono.

Complementarias

- PRETSCH, E.; BÜHLMANN, P.; AFFOLTER, C.; HERRERA, A.; MARTINEZ, R. Determinación estructural de compuestos orgánicos, Amsterdam: Elsevier-Masson. 2005.
- SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. Spectrometric Identification of Organic Compounds, New Jersey: Wiley, 2005.
- DUDDECK, H.; DIETRICH, W.; TOTH, G. Elucidación Estructural por RMN. (Traducción de la 3ª Ed. Revisada y actualizada), Springer-Verlag Ibérica, 2000.
- EKMAN, R.; SILBERRING, J.; WESTAMN-BRINKMALM, A.; KRAJ, A. Mass spectrometry (Instrumentation, Interpretation, and Applications), Chichester: John Wiley & Sons, 2009.
- RANDAZZO, A.; Guía práctica para la interpretación de espectros de RMN. Loghia Publ., 2018