

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	36469
Nom	Determinació Estructural en Química Orgànica
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química	Facultat de Química	4	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química	17 - Química Orgànica Aplicada	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
ABAD SOMOVILLA, ANTONIO	325 - Química Orgànica

RESUM

L'assignatura "Determinació Estructural en Química Orgànica" forma part de la matèria "Química Orgànica Aplicada" de 22.5 crèdits ECTS dins del mòdul Química, Indústria i Societat. Es tracta d'una assignatura de caràcter optatiu de 6 crèdits ECTS que s'imparteix en 7^o semestre de quart curs. L'objectiu bàsic d'aquesta assignatura és aprofundir i ampliar els coneixements adquirits en les assignatures de Química Orgànica. El seu enfocament és fonamentalment pràctic i el seu objectiu és proporcionar a l'alumne una visió general de les principals tècniques espectroscòpiques disponibles actualment (ultraviolada-visible, infraroja i ressonància magnètica nuclear), així com l'espectrometria de masses, i la seva aplicació pràctica per a l'obtenció d'informació i determinació d'estructures dels compostos orgànics. A més, es pretén que l'alumne adquireixi el coneixement suficient per poder dissenyar la millor manera d'abordar un determinat problema de determinació estructural a partir de la informació que proporciona cada tipus d'espectre, així com conèixer les aplicacions i limitacions de cadascuna de les tècniques espectroscòpiques.



Avui dia, la majoria dels problemes d'elucidació estructural, tant a nivell de recerca com a industrial, se solucionen d'una forma fàcil, ràpida i segura amb la utilització de les tècniques que s'estudien en aquesta assignatura. Aquesta formació proporciona a l'estudiant i futur químic recursos suficients per a l'aplicació dels mètodes espectroscòpics a la resolució dels problemes estructurals menys complexos.

CONEXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

Encara que l'assignatura té un nivell bàsic, és essencial que l'estudiant posseeixca una formació sòlida en la terminologia, nomenclatura i propietats estructurals dels grups funcionals i de les molècules orgàniques. És també important que l'estudiant estiga familiaritzat amb la estereoquímica i posseeixca les nocions de espectroscòpia de molècules orgàniques adquirides en les assignatures de Química Orgànica de cursos anteriors, així com conèixer els fonaments teòrics mínims que permetesquen la comprensi

COMPETÈNCIES (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENENTATGE (RD 822/2021)

1110 - Grau de Química

- Demostrar capacitat inductiva i deductiva.
- Resoldre problemes de forma efectiva.
- Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.
- Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.
- Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres materials.
- Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.
- Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.
- Dur a terme procediments experimentals estàndards interessats en treballs analítics i sintètics, en relació amb sistemes orgànics i inorgànics.
- Relacionar teoria i experimentació.



- Que els estudiants sàpien aplicar els seus coneixements al seu treball o vocació d'una forma professional i posseïsquen les competències que solen demostrar-se per mitjà de l'elaboració i defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.
- Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.
- Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.

RESULTATS D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)

L'apartat anterior recull les competències contingudes en el document VERIFICA. En aquesta assignatura s'aborden part dels resultats d'aprenentatge de la matèria Química Orgànica Aplicada que permeten adquirir, tant coneixements específics de Química, com habilitats i competències cognitives i competències generals recomanades per l'EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) per al *Chemistry Eurobachelor® Label*. A la següent taula es relacionen els resultats d'aprenentatge adquirits en l'assignatura de Determinació Estructural dels Compostos Orgànics relacionats amb les competències del grau en Química.

CONEIXEMENTS ESPECÍFICS DE QUÍMICA	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura Determinació Estructural dels Compostos Orgànics que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Els principis i els procediments utilitzats en anàlisi química i la caracterització dels compostos químics.	Demostrar que coneix els principis, els procediments i les tècniques per a la determinació, la separació, la identificació i la caracterització de compostos químics. (CE8) Comprendre els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics.(CE24).
Les principals tècniques de la recerca	Demostrar que reconeix els elements químics i els seus



d'estructures incloent l'espectroscòpia.	compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.(CE7). Demostrar que coneix els principis, els procediments i les tècniques per a la determinació, la separació, la identificació i la caracterització de compostos químics. (CE8)
Els trets estructurals dels elements químics i els seus compostos incloent l'estereoquímica.	Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.(CE7). Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres materials.(CE11).

COMPETÈNCIES I HABILITATS COGNITIVES**El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:**

	Competències de l'assignatura Determinació Estructural dels Compostos Orgànics que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a demostrar coneixement i comprensió dels fets, conceptes, principis i teories fonamentals relacionades amb els temes esmentats anteriorment.	Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.(CE13).
Capacitat per a aplicar aquest coneixement i comprensió a la solució de problemes comuns qualitatiu i quantitatiu.	Resoldre problemes qualitatiu i quantitatiu segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15). Comprendre els aspectes qualitatiu i quantitatiu dels problemes químics.(CE24).
Competències per a l'avaluació, interpretació i síntesi d'informació i dades químiques.	Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les



	teories que la sustenten.(CE20).
--	----------------------------------

COMPETÈNCIES GENERALS	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura Determinació Estructural dels Compostos Orgànics que contemplem els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a aplicar coneixement pràctic per a la resolució de problemes relacionats amb informació qualitativa i quantitativa.	Resoldre problemes de forma efectiva.(CG4). Resoldre problemes qualitius i quantitius segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Relacionar teoria i experimentació.(CE22). Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.(CE23). Comprendre els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics.(CE24).
Competències d'estudi necessàries per al desenvolupament professional. Aquestes inclouran l'habilitat de treballar de forma autònoma.	Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.(CG3). Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.(CG5). Aprendre de forma autònoma.(CG8). Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions noves.(CG9). Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.(CB5).



DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Mètodes físics de determinació estructural. Espectroscòpia ultraviolada-visible (UV-Vis).

L'espectre electromagnètic. Tipus d'interaccions de la radiació amb la matèria. Espectroscòpia d'absorció: transicions entre nivells energètics. Espectroscòpia ultraviolada (UV) -visible. Transicions electròniques. Conceptes fonamentals. L'espectrofotòmetre de UV-VIS. Preparació de la mostra. Absorcions característiques de les molècules orgàniques. Cromòfors: olefines, poliens, benzè i derivats, compostos carbonílics. Efectes del dissolvent i del pH.

2. Espectroscòpia Infraroja (IR)

Fonaments de la espectroscòpia infraroja. Vibracions moleculars. Llei de Hooke. Tipus de vibracions. Factors que influeixen en la posició i forma de les bandes: acoblament de bandes, enllaç d'hidrogen, conjugació, efectes electrònics i tensió anular. L'espectrofotòmetre d'infraroig. Preparació de mostres. Absorcions característiques dels grups funcionals de les molècules orgàniques. Interpretació d'espectres d'IR.

3. Fonaments de la espectroscòpia de Ressonància Magnètica Nuclear

Espins nuclears. Nuclis en un camp magnètic extern. Població de nivells d'energia. Descripció del fenomen de la ressonància magnètica nuclear: condicions de ressonància. Magnetització macroscòpica. Els processos de relaxació. Simplificació de l'anàlisi del procés de ressonància. Apantallament. L'espectre de RMN: Resolució. Espectròmetres de RMN d'ona contínua. Mètode de polsos i transformada de Fourier. Angle d'un pols-amplària d'un pols. Caiguda lliure de la inducció (FID). Transformada de Fourier. Acumulació d'espectres. Espectròmetre de polsos i Transformada de Fourier.

4. Ressonància Magnètica Nuclear de protó

Freqüències de ressonància per als diferents nuclis. Desplaçament químic. L'escala . Apantallament i desapantallament. Preparació de mostres per a RMN. Anàlisi d'espectres de RMN. Tipus de protons en RMN. Integració de l'àrea dels senyals. Desdoblament dels senyals: acoblament spin-spin. Tipus d'acoblament spin-spin. Multiplicitat. Acoblaments de primer ordre. Acoblaments més complexos. Valors de desplaçament químic. Factors que afecten el desplaçament químic: Efecte inductiu, Anisotropia magnètica, repulsions de Van der Waals, Existència d'enllaços d'hidrogen, Efectes conjugatius. Taules per a l'estimació del desplaçament químic.

5. Anàlisi d'espectres de RMN de protó



emes complexos d'acoblament spin-spin. Aproximació de segon ordre. Exemples de diversos sistemes d'acoblament. Efectes especials en RMN: Processos d'intercanvi químic (intermoleculars, amb el dissolvent, intramoleculars). Desacoblament de spin-spin: doble ressonància. Introducció a l'efecte Nuclear Overhauser (NOE). Experiments bidimensionals 1H-1H (COSY).

6. Ressonància Magnètica Nuclear de carboni-13

Anàlisi d'un espectre de RMN de ^{13}C . Acoblaments ^{13}C - ^1H . Desacoblaments: De banda ampla BB, Off-resonance, DEPT (Distortionless Enhancement by Polarization Transfer). Desplaçaments químics dels nuclis de ^{13}C . Nombre de senyals. Dissolvents. Posició dels senyals. Factors que influeixen en el desplaçament (δ). Correlacions empíriques. Experiments bidimensionals 1H- ^{13}C : HETCOR i HSQC.

7. Espectrometria de Masses

Introducció. L'espectròmetre de masses. Tipus d'espectròmetres de masses. Mètodes d'ionització més rellevants. Espectrometria de masses per impacte electrònic. L'ió molecular i els pics isotòpics. Reconeixement de l'ió molecular. Deducció de la fórmula molecular. Factors que controlen els modes de fragmentació. Principals tipus de fragmentació. Fragmentació en α . Fragmentació bencílica. Fragmentació al·lílica. Fragmentacions d'enllaços no activats. Fragmentació de derivats mono-halogenats. Reacció de retro Diels-Alder. Transposicions de McLafferty. Reaccions oni. Pèrdua de CO. Eliminació d'aigua. Fragmentacions en compostos bi- i poli-funcionalitzats. Altres mètodes de ionització per a anàlisi de molècules bioorgàniques. MALDI-TOF-MS.

8. Aplicació de les tècniques espectroscòpiques a la determinació d'estructures de compostos orgànics

Resolució de problemes amb aplicació conjunta dels diferents mètodes estudiats en els temes anteriors per establir l'estructura de compostos orgànics senzills. Utilització de programes informàtics com a ajuda a l'assignació estructural basada en tècniques espectroscòpiques.



VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	51,00	100
Tutories reglades	9,00	100
Elaboració de treballs en grup	10,00	0
Estudi i treball autònom	30,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	50,00	0
TOTAL	150,00	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura està plantejada perquè l'estudiant sigui el protagonista del seu propi aprenentatge i estructura de la següent manera:

•**Classes teòriques presencials.** Es dedicaran a exposar als estudiants els aspectes fonamentals de la matèria. En aquestes classes es desenvoluparan de forma oral els diferents apartats que es recullen al programa de l'assignatura, la qual cosa permetrà a l'alumne obtenir una visió global i comprensiva de la mateixa. Es farà ús de la pissarra i de presentacions PowerPoint. Prèviament a a el desenvolupament de la classe, tot el material pedagògic que és necessari per al seguiment de les classes estarà a la disposició dels alumnes a l'Aula Virtual.

Aquestes classes es complementen amb el temps d'estudi personal de l'alumne.

•**Classes pràctiques i seminaris.** En aquestes classes es durà a terme l'aplicació específica dels coneixements que els estudiants hagin adquirit a les classes de teoria. Els estudiants hauran d'haver treballat prèviament els problemes que es van a resoldre. La resolució d'aquests problemes es durà a terme en algunes ocasions pel professor i en altres casos pels alumnes, bé en grup, bé de forma individualitzada.

Tutories. Seran 9 sessions en total repartides uniformement al llarg del curs, sent d'1 hora la durada de cadascuna d'aquestes sessions. En elles, el professor avaluarà el procés global d'aprenentatge dels estudiants, als quals es podrà organitzar en subgrups de treball. En les sessions de tutoria es recolliran els treballs que hagen estat encomanats pel professor. Igualment, les tutories serviran per resoldre tots els dubtes que hagen pogut sorgir al llarg de les classes i orientaran als estudiants sobre els mètodes de treball més útils per a la resolució dels problemes que se'ls puguen presentar.

AVALUACIÓ

L'avaluació del rendiment acadèmic de l'estudiant i la qualificació final de l'assignatura es realitzaran, de forma ponderada, segons els percentatges que es mostren en cadascun dels apartats avaluats. Totes les qualificacions estaran basades en la puntuació absoluta sobre 10 punts, i d'acord amb l'escala establerta en el RD 1125/2003. Aquest criteri es mantindrà en totes les convocatòries.



Els diferents apartats que s'avaluaran són els següents:

1- Avaluació directa del professor (1 punt): En aquest avaluació es tindran en compte diferents aspectes, entre els quals cal destacar:

- Assistència i participació raonada i clara en les discussions plantejades.
- Progrés en l'ús del llenguatge característic de la química orgànica.
- Resolució de problemes i plantejament de dubtes.
- Esperit crític.

2.-Tutories, Qüestionaris i Tasques (globalment 2 punts): La nota de cada estudiant en aquest apartat tindrà en consideració:

- Assistència.
- Qualificacions als qüestionaris.
- Contingut i presentació per escrit de les tasques encomanades pel professor en cada subgrup de treball. La qualificació de les tasques serà una nota global per al subgrup i es computarà per igual a cada membre del subgrup..

Per rebre qualificació en aquest apartat, s'haurà d'haver realitzat tots els qüestionaris i haver assistit a un mínim de 7 tutories.

3.- Exàmens (7 punts): es realitzarà en la data indicada per la Facultat i serà comuna per a tots els grups de l'assignatura. Aquesta prova consistirà en preguntes, problemes i exercicis que permetesquen valorar l'adquisició per part de l'alumne de les competències recollides en la guia docent. Constarà de dues parts, d'acord amb la doble finalitat de l'assignatura: i) qüestions en les quals s'establiran i/o justificaran determinades característiques espectroscòpiques de compostos orgànics coneguts i ii) la determinació raonada de l'estructura de dos compostos orgànics mitjançant l'anàlisi conjunta dels seus espectres.

L'aprobat global en l'assignatura portarà necessàriament implicat l'haver obtingut en l'examen una puntuació mínima de 3.3 punts sobre els 7 totals. En l'avaluació de la segona convocatòria, es mantindrà la qualificació obtinguda en l'avaluació contínua (punt 1- "Avaluació directa del professor" i Punt 2 "SeminariisCuestionaris y Tasques") de la primera convocatòria i es procedirà a avaluar de nou la part corresponent al Punt 3- "Exàmens".

REFERÈNCIES

Bàsiques

- KEMP, W. Organic Spectroscopy 3^a edició, Polgrave Publishers LTD, 2002
- HESSE, M.; MEIER, H.; ZEEH, B. Métodos espectroscòpicos en Química Orgànica, 2^a edició, 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.

Complementàries

- 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