



Universidad
de Alcalá

GUÍA DOCENTE

DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS ORGÁNICOS (660016)

Grado en Química
Universidad de Alcalá

Curso Académico 2022/2023
3^{er} Curso – 1^o Cuatrimestre

GUÍA DOCENTE

Nombre de la asignatura:	DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS ORGÁNICOS
Código:	660016
Titulación en la que se imparte:	GRADO EN QUÍMICA
Departamento y Área de Conocimiento:	QUÍMICA ORGÁNICA Y QUÍMICA INORGÁNICA/ (ÁREA DE QUÍMICA ORGÁNICA)
Carácter:	OBLIGATORIO
Créditos ECTS:	6 teóricos
Curso y cuatrimestre:	3º curso, 1º cuatrimestre
Profesorado:	Grupo A: Dra. Estíbaliz Merino Marcos Grupo B: Dr. Javier Carreras Pérez-Aradros (Coordinador)
Horario de Tutoría:	Contactar con el profesor
Idioma en el que se imparte:	Español

1. PRESENTACIÓN

Los objetivos de esta asignatura se centran en:

- 1) Los aspectos básicos de los métodos físicos fundamentales de determinación estructural, con especial incidencia en la espectroscopía de RMN.
- 2) Su aplicación de forma conjunta, a la elucidación estructural de compuestos orgánicos con una doble finalidad: a) determinación de la estructura en función de datos espectroscópicos y b) predicción de las características espectroscópicas a partir de la estructura

La asignatura se ha planificado con un enfoque fundamentalmente práctico con objeto de proporcionar al alumno una formación básica sobre los métodos experimentales de determinación estructural y su utilización, aspectos de gran importancia en la formación actual de un Graduado en Química.

Prerrequisitos y Recomendaciones

Se recomienda que el alumno posea los conocimientos impartidos en las asignaturas:

*Química Básica, Enlace Químico y Estructura de la Materia (1^{er} curso),
Química Orgánica y Química Física Molecular (2º curso).*

2. COMPETENCIAS

Competencias genéricas:

1. Capacidad de aplicar los conocimientos teóricos a la resolución de ejercicios y cuestiones prácticas.
2. Desarrollo de habilidades para el aprendizaje crítico y autónomo.
3. Capacidad para comunicar ideas y expresarse correctamente de forma oral y escrita.
4. Desarrollo de la capacidad de análisis y síntesis con el apoyo del material docente y la bibliografía recomendados.
5. Desarrollo de la capacidad de trabajo en equipo.
6. Ser capaz de resolver problemas según modelos previamente desarrollados

Competencias específicas:

1. Conocer los aspectos fundamentales de las diferentes técnicas utilizadas para la determinación estructural de los compuestos orgánicos.
2. Adquirir una visión general del comportamiento de los compuestos orgánicos frente a las diferentes técnicas espectroscópicas.
3. Comprender las correlaciones entre la estructura molecular y las características espectroscópicas y saber aplicarlas a casos concretos
4. Desarrollar habilidades para la aplicación integrada de todas las técnicas estudiadas a la elucidación estructural de compuestos orgánicos
5. Ser capaz de analizar, interpretar y sintetizar información estructural con objeto de predecir el comportamiento de compuestos orgánicos.

3. CONTENIDOS

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

Introducción. Tipos de interacción de la radiación con la materia. Espectroscopía de absorción: transiciones entre niveles energéticos.

Tema 2 Espectroscopía infrarroja (IR).

Fundamentos. Tipos de vibraciones. Ley de Hooke. Factores que influyen en la posición y forma de las bandas: acoplamiento de bandas, enlace de hidrógeno, conjugación, efectos electrónicos y tensión anular. Aspectos instrumentales. Absorciones características de los grupos funcionales de las moléculas orgánicas. Interpretación de espectros.

Tema 3 Espectrometría de masas (EM).

Fundamento físico. Instrumentación: métodos de ionización. El ion molecular. Factores que controlan los modos generales de fragmentación.

Fragmentaciones de los grupos funcionales más comunes. Interpretación de espectros.

Tema 4 Espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN). Introducción.

Magnetismo nuclear. Niveles de energía. Magnetización macroscópica. Relajación. Espectroscopía de RMN de multipulsos y transformada de Fourier. Instrumentación.

Tema 5 Espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN). Aspectos fundamentales.

Desplazamiento químico. Equivalencia química. Integración. Acoplamiento espín-espín. Multiplicidad: espectros de primer orden.

Tema 6 Espectroscopía de resonancia magnética nuclear de protón.

Influencia de factores estructurales e intermoleculares en el desplazamiento químico: correlaciones empíricas. Constantes de acoplamiento: tipos. Factores que afectan a los acoplamientos protón-protón. Interpretación de espectros.

Tema 7 Espectroscopía de resonancia magnética nuclear de protón: aspectos adicionales.

Acoplamientos con otros núcleos. Procesos de intercambio: aplicaciones. Sistemas de espines: equivalencia magnética. Espectros de orden superior. Métodos de desacoplamiento espín-espín. Efecto nuclear Overhauser (NOE). Compuestos paramagnéticos: reactivos de desplazamiento.

Tema 8 Espectroscopía de resonancia magnética nuclear de carbono-13

Introducción. Tipos de espectros. Desplazamientos químicos: correlaciones empíricas. Acoplamientos espín-espín. Aplicaciones.

Tema 9 Espectroscopía de resonancia magnética nuclear: espectros multidimensionales.

Técnicas multidimensionales. Espectros 2D *J*-resueltos. Espectros 2D de correlación. Interpretación de espectros y aplicaciones

Tema 10 Determinación estructural de compuestos orgánicos.

Aplicación conjunta de los diferentes métodos al establecimiento de la estructura de compuestos orgánicos.

Bloques de contenido	Horas presenciales de teoría (T) y de seminarios y problemas (S+P)
Introducción y Espectroscopía UV (Tema 1)	1T
Espectroscopía IR (Tema 2)	2T + 3(S+P)
Espectrometría de Masas (Tema 3)	3 T + 2(S+P)

Introducción a la Espectroscopía RMN (Temas 4-5)	8 T + 2(S+P)
Espectroscopía ¹ H RMN (Temas 6-7)	8 T + 5(S+P)
Espectroscopía ¹³ C RMN (Tema 8)	3T + 2(S+P)
Espectros RMN Multidimensionales (Tema 9)	1 T + 1(S+P)
Problemas Conjuntos de Elucidación Estructural (Tema 10)	7 P

4. METODOLOGÍAS DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.-ACTIVIDADES FORMATIVAS

4.1. Distribución de créditos (en horas)

Número de horas presenciales: 51	Clases teóricas y seminarios: 48h Tutorías ECTS: 3h
Número de horas del trabajo propio del estudiante: 99	Estudio autónomo: estudio independiente, elaboración trabajos, ejercicios
Total horas:	150

4.2. Estrategias metodológicas, materiales y recursos didácticos

Clases presenciales	<ul style="list-style-type: none"> • Clases teóricas (T) en las que se desarrollarán las bases fundamentales de la materia. • Seminarios (S) donde se desarrollarán algunos aspectos específicos derivados de las clases teóricas y en los que se realizarán ejercicios y cuestiones con objeto de facilitar la comprensión de los conceptos y su aplicación. • Clases prácticas de resolución de problemas y discusión colectiva de casos prácticos (P).
Trabajo autónomo	<ul style="list-style-type: none"> • Análisis y asimilación de los contenidos de la materia. • Lecturas sobre aspectos interdisciplinares actuales relacionados con los contenidos de la materia para desarrollar curiosidad y

	espíritu crítico <ul style="list-style-type: none"> Realización de actividades: ejercicios, mapas conceptuales, ejemplificaciones, búsqueda de información.
Tutorías grupales programadas e individuales	<ul style="list-style-type: none"> Atención a los estudiantes tanto individualmente como en grupos pequeños con el fin de realizar un adecuado seguimiento de los mismos así como resolver las dudas y afianzar los conocimientos adquiridos
Materiales y recursos didácticos	<ul style="list-style-type: none"> Material impreso: libros de texto, ejercicios y problemas. Manuales de ejercicios y problemas y otros materiales complementarios elaborados y suministrados por el profesor para ayudar al aprendizaje. Material audiovisual. Presentaciones utilizadas por el profesor. Presentaciones de las actividades desarrolladas por los alumnos. Recursos en red: publicaciones electrónicas, bases de datos, páginas web. Aula Virtual.

5. EVALUACIÓN: Procedimientos, criterios de evaluación y de calificación

Procedimientos de evaluación

Los procedimientos de evaluación se ajustarán a la normativa Reguladora de los Procesos de evaluación de los Aprendizajes, aprobada en Consejo de Gobierno de 24 de marzo de 2011.

Convocatoria ordinaria.

Estará basada en una evaluación continua, salvo los casos en los que el alumno solicite al Decano o Director de Centro la evaluación final y le sea concedida.

- La evaluación continua se basará en la recogida de evidencias mediante diversas estrategias que valoren el proceso de aprendizaje del alumno. Se valorarán la asistencia y participación de los alumnos en las actividades presenciales, los trabajos realizados por los alumnos en los seminarios, el resultado de las pruebas y otras actividades.
- Para la evaluación continua se realizarán 2 pruebas: 1ª, temas 1-6; 2ª, temas 7-10 (prueba de conjunto). Los alumnos que deseen superar la calificación

obtenida en estas pruebas podrán hacerlo en un control de recuperación al final del curso.

- La opción excepcional de evaluación final consistirá en un examen de todos los contenidos de la asignatura y constará de dos partes, de acuerdo con la doble finalidad de la asignatura: a) cuestiones en las que se establecerán y/o justificarán determinadas características espectroscópicas de compuestos orgánicos conocidos y b) la determinación razonada de la estructura de dos compuestos orgánicos mediante el análisis conjunto de sus espectros.

Convocatoria extraordinaria.

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

Criterios de evaluación

Se valorarán fundamentalmente los siguientes aspectos:

- Posesión y comprensión de conocimientos
- Capacidad de aplicación de los conocimientos adquiridos
- Interpretación de resultados y resolución de problemas
- Capacidad de observación y de razonamiento crítico
- Participación activa en el desarrollo de la asignatura, fundamentalmente en las clases de seminarios y problemas y en las tutorías grupales

Criterios de calificación

Las calificaciones reflejarán el dominio de la materia adquirido por el estudiante de acuerdo con las competencias y los criterios de evaluación anteriormente indicados.

Convocatoria ordinaria

En el sistema de evaluación continua, el aprendizaje de cada alumno se valorará mediante datos objetivos procedentes de:

- Las dos pruebas previstas (80%). Para calcular la nota media de las pruebas se aplicarán los siguientes porcentajes: 1ª, 40%; 2ª, 40%.
- Actividades presenciales descritas previamente (20%).

En la opción excepcional de evaluación final se requiere obtener una nota media mayor o igual a 5, siendo imprescindible una calificación superior a 4 en cada una de las dos partes.

Convocatoria extraordinaria

Será necesario obtener una nota media mayor o igual a 5, siendo imprescindible una calificación superior a 4 en cada una de las dos partes.

6. BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía Básica

1. M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh, *Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica. Síntesis* (7ª Ed. revisada. Adaptación española 2ª Ed.) 2005.
2. R.M. Silverstein, F.X. Webster, D. Kiemle, D. L. Bryce, *Spectroscopic Identification of Organic Compounds*. Wiley (8ª Ed.) 2014.
3. E. Pretsch, P. Bühlmann, M. Badertscher, *Structure Determination of Organic Compounds. Tables of Spectral Data*. (4ª Ed. Revisada). Springer-Verlag 2009.
4. D.H. Williams, I. Fleming, *Spectroscopic Methods in Organic Chemistry*. McGraw-Hill (6ª Ed.) 2008.
5. J. R. Pedro Llinares, G. Blay Llinares, *200 Problemas de Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos*, Visión Libros, 2010.

Bibliografía Complementaria

6. L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, *Organic Structures from Spectra*. (Problemas) Wiley (5ª Ed.) 2013.
7. H. Friebolin, *Basic One- and Two- Dimensional NMR Spectroscopy*. VCH (5ª Ed.) 2010.
8. D.L. Pavía, G.M. Lampman, G.S. Kriz, R. Vyvyan, *Introduction to Spectroscopy*. Cengage Learning (5ª Ed.) 2015.
9. H. Duddeck, W. Dietrich, G. Tóth, *Elucidación Estructural por RMN*. Springer-Verlag Ibérica (Traducción de la 3ª Ed. Revisada y actualizada) 2000.

Tutoriales de la biblioteca

https://uah-es.libguides.com/biblioguias_biblioteca_uah/

La Universidad de Alcalá garantiza a sus estudiantes que, si por exigencias sanitarias las autoridades competentes impidieran la presencialidad total o parcial de la actividad docente, los planes docentes alcanzarían sus objetivos a través de una metodología de enseñanza-aprendizaje y evaluación en formato online, que retornaría a la modalidad presencial en cuanto cesaran dichos impedimentos.