



FACULTAD DE CIENCIAS EXPERIMENTALES

GUIA DOCENTE

CURSO 2022-23

GRADO EN QUÍMICA

DATOS DE LA ASIGNATURA

Nombre:

DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

Denominación en Inglés:

STRUCTURAL DETERMINATION OF ORGANIC COMPOUNDS

Código:

757509210

Tipo Docencia:

Presencial

Carácter:

Obligatoria

Horas:

	Totales	Presenciales	No Presenciales
Trabajo Estimado	150	60	90

Créditos:

Grupos Grandes	Grupos Reducidos			
	Aula estándar	Laboratorio	Prácticas de campo	Aula de informática
3.78	2.22	0	0	0

Departamentos:

QUIMICA.PROF. JOSE CARLOS VILCHEZ MARTIN

Áreas de Conocimiento:

QUIMICA ORGANICA

Curso:

3º - Tercero

Cuatrimestre

Primer cuatrimestre

DATOS DEL PROFESORADO (*Profesorado coordinador de la asignatura)

Nombre:	E-mail:	Teléfono:
David Benjamin Guzman Rios	davidbenjamin.guzman@diq.uhu.es	959 219 487
* Jose Antonio Gonzalez Delgado	jose.gonzalez@dqcm.uhu.es	959 219 772

Datos adicionales del profesorado (Tutorías, Horarios, Despachos, etc...)

- **David B. Guzmán Ríos**

Despacho: CIQSO - Ed. Robert H. Grubbs, Planta Baja CIPB11

Horario de Tutorías: Miércoles y Jueves de 12:00 a 15:00h

- **José Antonio González Delgado**

Despacho: CIQSO - Ed. Robert H. Grubbs, Planta Baja CIPB04

Horario de Tutorías: Miércoles y Viernes de 12:00 a 15:00h

DATOS ESPECÍFICOS DE LA ASIGNATURA

1. Descripción de Contenidos:

1.1 Breve descripción (en Castellano):

En las asignaturas previas impartidas pertenecientes al Área de Química Orgánica se ha estudiado la diferente funcionalización de las moléculas orgánicas así como su reactividad y síntesis. En el ámbito de la Química Orgánica la determinación de la estructura de las moléculas orgánicas (Elucidación Estructural) ocupa un lugar determinante ya que se emplea tanto para la identificación de compuestos aislados a partir de fuentes naturales, como en el trabajo de síntesis de laboratorio para comprobar si el producto obtenido posee la estructura deseada.

1.2 Breve descripción (en Inglés):

In the previous subjects taught in the Organic Chemistry area the different functionalization of organic molecules as well as their reactivity and synthesis have studied. Within the field of Organic Chemistry the structural elucidation of organic molecules occupies a determining place since it is used both for the identification of compounds isolated from natural sources, and in synthtic works to check if the obtained product has the desired structure.

2. Situación de la asignatura:

2.1 Contexto dentro de la titulación:

El conocimiento tanto teórico como práctico de las diferentes técnicas empleadas para la caracterización de estructuras es indispensable para el correcto desempeño profesional de un Químico.

2.2 Recomendaciones

Haber cursado las asignaturas "Conceptos Básicos de Química Orgánica" y "Química Orgánica" de segundo curso.

3. Objetivos (Expresados como resultado del aprendizaje):

El objetivo fundamental es que el alumno sea capaz de determinar la estructura de un compuesto desconocido, sobre la base de la información espectroscópica obtenida a partir de los espectros de UV-Vis., IR, RMN y Masas. El alumno deberá comprender los principios físicos sobre los que se basa cada técnica, los aspectos experimentales e instrumentales, la información estructural que proporciona cada método y finalmente el alumno deberá hacer uso de la información estructural que le ha proporcionado cada método, para proponer la estructura del compuesto.

4. Competencias a adquirir por los estudiantes

4.1 Competencias específicas:

C11: Conocer las propiedades de los compuestos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos y organometálicos.

C12: Conocer la naturaleza y el comportamiento de los grupos funcionales en moléculas orgánicas.

C13: Conocer las principales rutas sintéticas en química orgánica, incluyendo la interconversión de grupos funcionales y la formación de enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo.

C2: Conocer los tipos principales de reacción química y las principales características asociadas a cada una de ellas.

C4: Conocer las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo espectroscopía.

P1: Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.

P2: Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.

P4: Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para estudios estructurales y separaciones.

P6: Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.

Q3: Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química.

Q4: Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico y profesional.

Q5: Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada

4.2 Competencias básicas, generales o transversales:

CB1: Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

CB2: 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.

CB3: 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.

CB4: Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.

CB5: Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

CG1: Que los estudiantes hayan desarrollado y demostrado poseer habilidades de aprendizaje y conocimientos procedentes de su campo de estudio, siendo capaces de aplicarlos en su trabajo, interpretando datos relevantes para emitir juicios de temas de diversa índole pudiendo transmitirlos a un público tanto especializado como no especializado.

5. Actividades Formativas y Metodologías Docentes

5.1 Actividades formativas:

- Grupo teórico práctico.
- Grupo de Actividades Dirigidas.

5.2 Metodologías Docentes:

- Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos.
- Seminarios y conferencias sobre temas específicos de los contenidos propios de la asignatura, presentación de material de video y multimedia para ilustrar temas del programa teórico.
- Discusión de artículos científicos.
- Cualquier actividad dirigida que ayude a la adquisición de conocimientos, habilidades y destrezas.
- Resolución de dudas.
- Ejercicios de autoevaluación sobre los contenidos de la materia.

5.3 Desarrollo y Justificación:

1.- Sesiones académicas de teoría (Grupo Grande)

Se realizarán clases teóricas de una hora con todo el alumnado de la asignatura. Su objetivo es estructurar los conceptos y fundamentos de la asignatura en los tres primeros bloques del temario y contenido. La exposición del profesor estará apoyada con los recursos audiovisuales y herramientas informáticas necesarias. Se estima que son necesarias 15 sesiones semanales (total 37,8 h). El alumnado adquirirá las competencias CB1, CB2, CB3, CB4, CB5, B1, C2, C4, C11, C12, C13, Q3 Y Q4.

2.- Sesiones académicas de problemas (Grupo Reducido).

Sesiones dirigidas a desarrollar los procedimientos específicos de la resolución de problemas, así como la elucidación estructural de compuestos orgánicos. Habitualmente estarán intercaladas con las sesiones académicas de teoría (total 22,2 h). El alumnado adquirirá las competencias B2, B6 y B8.

3.- Trabajo en grupos reducidos (Sesiones prácticas en sala ordenadores)

El objetivo de estas sesiones es que el alumnado trabaje autónomamente en un entorno virtual de la asignatura resolviendo cuestiones y problemas. El alumnado adquirirá las competencias B04, CB1, B2, B6 y B8.

4.- Resolución y entrega de problemas/prácticas (Asociada a la evaluación continua).

Los alumnos elaborarán informes de las prácticas desarrolladas en los laboratorios. El alumno adquirirá las competencias B2, B4, B6 B8 y CG1.

6. Temario Desarrollado

Bloque I. Espectrometría de masas. (5 horas)

-Tema 1. Introducción a la de determinación de estructuras: (2 horas)

Métodos químicos y métodos físicos. Métodos espectroscópicos.

-Tema2. Espectrometría de masas: (3 horas)

Introducción. Instrumentación. Métodos de ionización. Tipos de iones. Determinación de masas moleculares. Fragmentación de iones positivos. Reglas generales de fragmentación de moléculas orgánicas. Análisis del espectro de masas. Ejemplos representativos

Bloque II. Espectroscopía UV e IR. (7 horas)

-Tema 3. Espectroscopía Ultravioleta: (3 horas)

El espectro electromagnético. Absorción de la luz: Ley de Beer-Lambert. Espectroscopía UV-Visible.

-Tema 4. Espectroscopía Infrarroja: (4 horas)

Introducción. Tipos de vibraciones. Enlace de hidrógeno. Moléculas poliatómicas. Absorción característica de distintos grupos funcionales. Espectrofotómetro de FTIR. Preparación de muestras. Interpretación de espectros de IR.

Bloque III. Resonancia Magnética Nuclear. (24 horas)

-Tema 5. Magnetismo Nuclear, RMN: (4 horas)

Principios básicos de la resonancia magnética nuclear. Espectrómetros. Desplazamiento químico. Efectos que influyen en RMN. Intensidades de las bandas. Sustancias de referencia. Disolventes.

-Tema 6. Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear de ^1H : (8 horas)

Acoplamiento spin-spin. La Constante de acoplamiento. Correlaciones desplazamiento químico-estructura molecular.

Espectros complejos. Grupos homotópicos, enantiotópicos y diastereotópicos. Estereoisomería y RMN. Acoplamientos de protones con otros núcleos. Experimentos de doble resonancia. Desacoplamiento de spin. Efecto NOE (Nuclear Overhauser Effect): Proximidad en el espacio 1H-1H.

-Tema 7. Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear de ^{13}C : (6 horas)

Resonancia magnética de ^{13}C . Técnicas de desacoplamiento. Análisis cuantitativo ^{13}C . Experimentos DEPT. Correlaciones espectrales.

-Tema 8. Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear 2D: (5 horas)

COSY, HETCOR, TOCSY, NOESY y HMBC. Resonancia magnética de imagen.

-Tema 9. RMN con otros núcleos importantes: (1 hora)

^{31}P , ^{15}N , ^{19}F .

Bloque IV. Resolución de ejercicios complejos. (9 horas)

7. Bibliografía

7.1 Bibliografía básica:

"Spectrometric identification of organic compounds" R.M. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle. (Wiley, 7th Edition).

7.2 Bibliografía complementaria:

"Nuclear Magnetic Resonance and Spectroscopy" J. B. Lambert, E. P. Mazzola (Pearson).

"Spin Dynamics, Basics of Nuclear Magnetic Resonance" M. H. Levitt (Wiley, 2nd Edition 2008).

"Organic Structures from Spectra" L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman (Wiley)

"Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos", E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon (Ed. Springer-Verlag).

"Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy", H. Friebolin (Ed. Wiley-VCH).

8. Sistemas y criterios de evaluación

8.1 Sistemas de evaluación:

- Examen final.
- Evaluación continua.

8.2 Criterios de evaluación relativos a cada convocatoria:

8.2.1 Convocatoria I:

El 30% de la calificación de la asignatura se obtendrá mediante evaluación continua a través de la entrega periódica de actividades dirigidas (problemas y/o cuestiones), individualmente o en equipo.

El 70% restante de la calificación corresponderá obtenida en el examen final de la asignatura.

Para aprobar la asignatura es necesaria obtener una calificación mínima de 5.0 en el examen final y obtener un calificación sumatoria (nota final) mínima de 5.0 conjuntamente entre los diferentes apartado de la evaluación continua antes definidos.

En la calificación final de la asignatura se tendrá en cuenta el incumplimiento por parte del alumno de las normas básicas de comportamiento y funcionamiento que debe respetar la comunidad universitaria de la Facultad de Ciencias Experimentales y que ha sido aprobada en Junta de Centro.

8.2.2 Convocatoria II:

Calificación obtenida en el examen final de la asignatura. El examen constará de preguntas teóricas y problemas. Para superar la asignatura habrá que obtener 5.0 puntos sobre 10 en el examen.

En la calificación final de la asignatura se tendrán en cuenta las normas básicas de comportamiento y funcionamiento que debe respetar la comunidad universitaria de la Facultad de Ciencias Experimentales y que ha sido aprobada en Junta de Centro.

8.2.3 Convocatoria III:

Calificación obtenida en el examen final de la asignatura. El examen constará de preguntas teóricas y problemas. Para superar la asignatura habrá que obtener 5.0 puntos sobre 10 en el examen.

En la calificación final de la asignatura se tendrán en cuenta las normas básicas de comportamiento y funcionamiento que debe respetar la comunidad universitaria de la Facultad de Ciencias Experimentales y que ha sido aprobada en Junta de Centro.

8.2.4 Convocatoria extraordinaria:

Calificación obtenida en el examen final de la asignatura. El examen constará de preguntas teóricas y problemas. Para superar la asignatura habrá que obtener 5.0 puntos sobre 10 en el examen.

En la calificación final de la asignatura se tendrán en cuenta las normas básicas de comportamiento y funcionamiento que debe respetar la comunidad universitaria de la Facultad de Ciencias Experimentales y que ha sido aprobada en Junta de Centro.

8.3 Evaluación única final:

8.3.1 Convocatoria I:

Calificación obtenida en el examen final de la asignatura. El examen constará de preguntas teóricas y problemas. Para superar la asignatura habrá que obtener 5.0 puntos sobre 10 en el examen.

Los alumnos podrán acogerse a la modalidad de evaluación única final comunicándolo formalmente al profesor de la asignatura (mediante formulario que se elaborará al efecto) en un periodo comprendido: a) entre en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura, o b) en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de la asignatura.

Esta elección implicará la renuncia expresa a la evaluación continua, sin posibilidad de que el estudiante pueda modificar el sistema de evaluación seleccionado posteriormente.

En la calificación final de la asignatura se tendrán en cuenta las normas básicas de comportamiento y funcionamiento que debe respetar la comunidad universitaria de la Facultad de Ciencias Experimentales y que ha sido aprobada en Junta de Centro.

8.3.2 Convocatoria II:

Calificación obtenida en el examen final de la asignatura. El examen constará de preguntas teóricas y problemas. Para superar la asignatura habrá que obtener 5.0 puntos sobre 10 en el examen.

Los alumnos podrán acogerse a la modalidad de evaluación única final comunicándolo formalmente al profesor de la asignatura (mediante formulario que se elaborará al efecto) en un periodo comprendido: a) entre en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura, o b) en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de la asignatura.

Esta elección implicará la renuncia expresa a la evaluación continua, sin posibilidad de que el estudiante pueda modificar el sistema de evaluación seleccionado posteriormente.

En la calificación final de la asignatura se tendrán en cuenta las normas básicas de comportamiento y funcionamiento que debe respetar la comunidad universitaria de la Facultad de Ciencias Experimentales y que ha sido aprobada en Junta de Centro.

8.3.3 Convocatoria III:

Calificación obtenida en el examen final de la asignatura. El examen constará de preguntas teóricas y problemas. Para superar la asignatura habrá que obtener 5.0 puntos sobre 10 en el examen.

Los alumnos podrán acogerse a la modalidad de evaluación única final comunicándolo formalmente al profesor de la asignatura (mediante formulario que se elaborará al efecto) en un periodo

comprendido: a) entre en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura, o b) en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de la asignatura.

Esta elección implicará la renuncia expresa a la evaluación continua, sin posibilidad de que el estudiante pueda modificar el sistema de evaluación seleccionado posteriormente.

En la calificación final de la asignatura se tendrán en cuenta las normas básicas de comportamiento y funcionamiento que debe respetar la comunidad universitaria de la Facultad de Ciencias Experimentales y que ha sido aprobada en Junta de Centro.

8.3.4 Convocatoria Extraordinaria:

Calificación obtenida en el examen final de la asignatura. El examen constará de preguntas teóricas y problemas. Para superar la asignatura habrá que obtener 5.0 puntos sobre 10 en el examen.

Los alumnos podrán acogerse a la modalidad de evaluación única final comunicándolo formalmente al profesor de la asignatura (mediante formulario que se elaborará al efecto) en un periodo comprendido: a) entre en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura, o b) en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de la asignatura.

Esta elección implicará la renuncia expresa a la evaluación continua, sin posibilidad de que el estudiante pueda modificar el sistema de evaluación seleccionado posteriormente.

En la calificación final de la asignatura se tendrán en cuenta las normas básicas de comportamiento y funcionamiento que debe respetar la comunidad universitaria de la Facultad de Ciencias Experimentales y que ha sido aprobada en Junta de Centro.

9. Organización docente semanal orientativa:

Fecha	Grupos Grandes	G. Reducidos				Pruebas y/o act. evaluables	Contenido desarrollado
		Aul. Est.	Lab.	P. Camp	Aul. Inf.		
19-09-2022	3	1	0	0	0		T1
26-09-2022	3	1	0	0	0	Actividad dirigida I	T2/T3
03-10-2022	3	1	0	0	0		T3/T4
10-10-2022	3	1	0	0	0		T4
17-10-2022	3	1	0	0	0		T5
24-10-2022	3	1	0	0	0		T5/T6
31-10-2022	3	1	0	0	0	Actividad dirigida II	T6
07-11-2022	3	1	0	0	0		T7
14-11-2022	3	1	0	0	0		T7
21-11-2022	3	1	0	0	0		T7
28-11-2022	2	2	0	0	0		T8
05-12-2022	2	2	0	0	0		T8/T9
12-12-2022	2	2	0	0	0		BIV
19-12-2022	2	2	0	0	0	Actividad dirigida III	BIV
09-01-2023	2	2	0	0	0		BIV

TOTAL 40 20 0 0 0