



Universidad
de Huelva

Grado en QUÍMICA

Curso 2018/2019



GRADO EN QUÍMICA

DATOS DE LA ASIGNATURA

ASIGNATURA	DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS ORGÁNICOS	SUBJECT	STRUCTURAL DETERMINATION OF ORGANIC COMPOUNDS
CÓDIGO	757509210		
MÓDULO	FUNDAMENTAL	MATERIA	Q. ORGÁNICA
CURSO	3º	CUATRIMESTRE	2º
DEPARTAMENTO	QUÍMICA PROFESOR JOSÉ CARLOS VÍLCHEZ MARTÍN	ÁREA DE CONOCIMIENTO	QUÍMICA ORGÁNICA
CARÁCTER	OBLIGATORIA	CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

DISTRIBUCIÓN DE CRÉDITOS

	TOTAL	TEÓRICOS GRUPO GRANDE	TEÓRICOS GRUPO REDUCIDO	PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA	PRÁCTICAS DE LABORATORIO	PRÁCTICAS DE CAMPO
ECTS	6	3.78	2.22	0	0	0

DATOS DEL PROFESORADO

COORDINADOR

NOMBRE	JESÚS FERNÁNDEZ ARTEAGA		
DEPARTAMENTO	QUÍMICA PROFESOR JOSÉ CARLOS VÍLCHEZ MARTÍN		
ÁREA DE CONOCIMIENTO	QUÍMICA ORGÁNICA		
UBICACIÓN	P4-N5-06		
CORREO ELECTRÓNICO	jesus.fernandez@diq.uhu.es	TELÉFONO	959219999
URL WEB		CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

OTROS DOCENTES

NOMBRE	PATRICIA MARÍA REMÓN RUIZ		
DEPARTAMENTO	QUÍMICA PROFESOR JOSÉ CARLOS VÍLCHEZ MARTÍN		
ÁREA DE CONOCIMIENTO	QUÍMICA ORGÁNICA		
UBICACIÓN	EDIFICIO ROBERT GRUBBS		
CORREO ELECTRÓNICO	patriciamaria.remon@diq.uhu.es	TELÉFONO	959219945
URL WEB		CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA ASIGNATURA

DESCRIPCIÓN GENERAL

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.

ABSTRACT

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 synthetic works to check if the obtained product has the desired structure.

OBJETIVOS: RESULTADOS 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.

REPERCUSIÓN EN EL PERFIL PROFESIONAL

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.

RECOMENDACIONES AL ALUMNADO

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

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

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.

B1 - Capacidad de análisis y síntesis.

B2 - Capacidad de organización y planificación.

B6 - Resolución de problemas.

B8 - Trabajo en equipo.

COMPETENCIAS GENERALES

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.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

C2 - Conocer los tipos principales de reacción 4 y las principales características asociadas a cada una de ellas.

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

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.

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.

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.

TEMARIO Y DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

TEORÍA

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)



Universidad
de Huelva

Grado en QUÍMICA

Curso 2018/2019



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

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

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

METODOLOGÍA DOCENTE

Grupo grande	<ul style="list-style-type: none">• 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.
Grupo reducido	<ul style="list-style-type: none">• 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.• Seminarios tutorizados de resolución de problemas y de supuestos prácticos.

CRONOGRAMA ORIENTATIVO I



Universidad
de Huelva

Grado en QUÍMICA

Curso 2018/2019



SEMANAS (S):	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
GRUPO GRANDE	T1	T2/T3	T3/T4	T4	T5	T5/T6	T6	T7	T7	T7	T8	T8	BIV	BIV	BIV
GRUPO REDUCIDO	T1	T2/T3	T3/T4	T4	T5	T5/T6	T6	T7	T7	T7	T8	T8	BIV	BIV	BIV
PRÁCTICAS DE LABORATORIO															
PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA															
PRÁCTICAS DE CAMPO															

EVALUACIÓN DE LA ASIGNATURA

PRIMERA EVALUACIÓN ORDINARIA (FEBRERO/JUNIO)

EVALUACIÓN CONTINUA **PORCENTAJE** 30 %

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

¿Existe opción alternativa a la evaluación continua arriba contemplada? NO

EVALUACIÓN FINAL **PORCENTAJE** 70 %

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 puntos sobre 10 en el examen. - Para aprobar la asignatura es necesaria obtener una calificación mínima de 5.0 en el examen final y obtener una calificación sumatoria (nota final) mínima de 5.0 conjuntamente con las AAD. En el caso de una calificación < 5.0 en el examen final no se tiene en cuenta la nota media de la evaluación continua y la nota final corresponde simplemente a la nota del 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 -Las competencias adquiridas en cada unidad temática se evaluarán conjuntamente con las distintas actividades de la asignatura, es decir, con las calificaciones de la docencia teórica, práctica y de las actividades académicas dirigidas.

¿Contempla una evaluación parcial voluntaria? NO

SEGUNDA EVALUACIÓN ORDINARIA (SEPTIEMBRE) Y OTRAS EVALUACIONES

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 puntos sobre 10 en el examen.

OTROS CRITERIOS DE EVALUACIÓN

¿Contempla la posibilidad de subir nota una vez realizadas las pruebas? NO

Requisitos para la concesión de matrícula de honor

Ser la/s máxima/s calificación/es del grupo de estudiantes y que la calificación promedio final sea superior a 9.0 puntos sobre 10. Sólo se concederá la Matrícula e Honor en la primera convocatoria ordinaria de evaluación (febrero o junio).

REFERENCIAS

BÁSICAS

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



Universidad
de Huelva

Grado en QUÍMICA

Curso 2018/2019



ESPECÍFICAS

“*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).