

**FICHA IDENTIFICATIVA****DATOS DE LA ASIGNATURA****Código:** 36469**Nombre:** Determinación Estructural en Química Orgánica**Ciclo:** Grado**Créditos ECTS:** 6**Curso académico:** 2026-27**TITULACIONES**

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1110 - Grado en Química	Facultat de Química	4	Primer cuatrimestre

MATERIAS

Titulación	Materia	Carácter
1110 - Grado en Química	Química Orgánica Aplicada	OPTATIVA

COORDINACIÓN

GAVIÑA COSTERO PABLO

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.

ctroscópicos 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 / RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1110 - Grado en Química

Al final de la materia el estudiante/la estudiante demostrará capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante demostrará capacidad inductiva y deductiva.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante evaluará, interpretará y sintetizará los datos e información Química de forma correcta

Al final de la materia el estudiante/la estudiante identificará la estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante identificará los elementos químicos y sus compuestos: obtención, estructura, reactividad, propiedades y aplicaciones.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante identificará los procesos químicos en la vida diaria.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante podrá implementar metodologías sostenibles y respetuosas con el medio ambiente.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante relacionará teoría y experimentación.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante resolverá problemas de forma efectiva.

Al final de la materia el estudiante abordará nuevos problemas y planteará estrategias para solucionarlos.

Capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico en la aplicación del método científico.

Colaborar eficazmente en equipos de trabajo, asumiendo responsabilidades y funciones de liderazgo y contribuyendo a la mejora y desarrollo colectivo.

Conocer y comprender, desde el propio ámbito de la titulación, las desigualdades por razón de sexo y género en la sociedad; integrar las diferentes necesidades y preferencias por razón de sexo y de género en



el diseño de soluciones y resolución de problemas.

Contribuir en el diseño, desarrollo y ejecución de soluciones que den respuesta a demandas sociales, teniendo en cuenta como referente los Objetivos de Desarrollo Sostenible.

Demostrar razonamiento crítico y autocrítico en el ámbito de la titulación, considerando aspectos tales como la ética profesional, los valores morales y las implicaciones sociales de las diferentes actividades realizadas

Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la comunidad valenciana

Saber comunicarse de manera efectiva, tanto de forma oral como escrita, adaptándose a las características de la situación y de la audiencia.

Ser capaces de analizar la influencia que sobre el diseño del sistema de información de costes, ejercen, tanto la actividad concreta desarrollada por la entidad como la tecnología utilizada, la estructura organizativa y el estilo de dirección. Calcular costes preestablecidos y relacionarlos con la planificación y el control de la actividad interna. Seleccionar aquellos indicadores de gestión que faciliten el desempeño personal, estableciendo la frecuencia y el formato en función del usuario de destino.

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.

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.



3. Fundamentos de la espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear

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 δ . 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 ^{13}C . Acoplamientos $^{13}C-1H$. Desacoplamientos: De banda ancha BB, Off-resonance, DEPT (Distortionless Enhancement by Polarization Transfer). Desplazamientos químicos de los núcleos de ^{13}C . Numero de señales. Disolventes. Posición de las señales. Factores que influyen en el desplazamiento (δ). Correlaciones empíricas. Experimentos bidimensionales $1H^{13}C$: 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 monohalogenados. 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 (HORAS)

ACTIVIDADES PRESENCIALES

Actividad	Horas
Tutorías	9,00
Teoría	51,00
Total horas	60,00

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

Actividad	Horas
Asistencia a otras actividades	0,00
Elaboración de trabajos individuales o en grupo	10,00
Estudio y trabajo autónomo	30,00
Preparación de clases	50,00
Preparación de actividades de evaluación	0,00
Resolución de casos prácticos	0,00
Total horas	90,00

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.

ción 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 de éste.

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 4.5 puntos sobre 10. 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".

Advertencia final

La copia o plagio manifiesto de cualquier tarea que forma parte de la evaluación supondrá la imposibilidad de superar la asignatura, sometiéndose seguidamente a los procedimientos disciplinarios oportunos.

Téngase en cuenta que, de acuerdo con el artículo 13 d) del Estatuto del Estudiante Universitario (RD 1791/2010, de 30 de diciembre), *"es deber de un estudiante abstenerse en la utilización o cooperación en procedimientos fraudulentos en las pruebas de evaluación, en los trabajos que se realicen o en documentos oficiales de la Universidad"*.

s pruebas de evaluación, en los trabajos que se realicen o en documentos oficiales de la Universidad".

BIBLIOGRAFÍA



- 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.
- 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