

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA**

Codi: 36469
Nom: Determinació Estructural en Química Orgànica
Cicle: Grau
Crèdits ECTS: 6
Curs acadèmic: 2026-27

TITULACIONS

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

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química	Química Orgànica Aplicada	OPTATIVA

COORDINACIÓ

GAVIÑA COSTERO PABLO

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.

;todes espectroscòpics a la resolució dels problemes estructurals menys complexos.



CONEXEMENTS PREVIS

RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ

No s'ha especificat 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 / RESULTATS D' APRENENTATGE

1110 - Grau de Química

Al final de la matèria, l'estudiantat ha de relacionar teoria i experimentació.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'abordar nous problemes i plantejar estratègies per a solucionar-los.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'identificar els elements químics i els compostos d'aquests: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'identificar els processos químics en la vida diària.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de demostrar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de demostrar capacitat inductiva i deductiva.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de poder implementar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de resoldre problemes de manera efectiva.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant avaluarà, interpretarà i sintetitzarà les dades i informació Química de manera correcta

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant identificarà l'estructura i reactivitat de les principals classes de biomolècules i la química dels principals processos biològics.

Capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític en l'aplicació del mètode científic.

Col·laborar eficaçment en equips de treball, assumint responsabilitats i funcions de lideratge i contribuint a la millora i desenvolupament col·lectiu.

Conèixer i comprendre, des de l'àmbit de la titulació, les desigualtats per raó de sexe i gènere en la societat; integrar les diverses necessitats i preferències per raó de sexe i de gènere en el disseny de solucions i resolució de problemes.



Contribuir en el disseny, desenvolupament i execució de solucions que donen resposta a demandes socials, tenint en compte com a referent els objectius de desenvolupament sostenible.

Demostrar raonament crític i autocrític en l'àmbit de la titulació, considerant aspectes com ara l'ètica professional, els valors morals i les implicacions socials de les diverses activitats realitzades.

Expressar-se correctament, tant de forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.

Saber comunicar-se de manera efectiva, tant de manera oral com escrita, adaptant-se a les característiques de la situació i de l'audiència.

Ser capaços d'analitzar la influència que sobre el disseny del sistema d'informació de costos, exercixen, tant l'activitat concreta desenrotllada per l'entitat com la tecnologia utilitzada, l'estructura organitzativa i l'estil de direcció. Calcular costos preestablits i relacionar-los amb la planificació i el control de l'activitat interna. Seleccionar aquells indicadors de gestió que faciliten l'exercici personal, establint la freqüència i el format en funció de l'usuari de destí.

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.

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.



3. Fonaments de la espectroscòpia de Ressonància Magnètica Nuclear

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 δ . 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}C

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 (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Tutories	9,00
Teoria	51,00
Total hores	60,00

ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	10,00
Estudi i treball autònom	30,00
Preparació de classes	50,00
Preparació d'activitats d'avaluació	0,00
Resolució de casos pràctics	0,00
Total hores	90,00

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.

ió 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 establida en l'RD 1125/2003. Este criteri es mantindrà en totes les convocatòries.

Els diferents apartats que s'avaluaran són els següents:

1- Avaluació directa del professor (1 punt): En esta 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 este apartat tindrà en consideració:

- Assistència.



• Qualificacions dels qüestionaris.

• Contingut i presentació per escrit de les tasques encomanats 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 d'este.

Per a rebre qualificació en este 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. Esta prova consistirà en preguntes, problemes i exercicis que permeten valorar l'adquisició per part de l'alumne de les competències arrellegades en la guia docent. Constarà de dos 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'aprovat global en l'assignatura portarà necessàriament implicat l'haver obtingut en l'examen una puntuació mínima de 4.5 punts sobre 10. 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- "Seminaris, Qüestionaris i Tasques") de la primera convocatòria i es procedirà a avaluar de nou la part corresponent al Punt 3- "Exàmens".

Advertiment final

La còpia o plagi manifest de qualsevol tasca que forma part de l'avaluació suposarà la impossibilitat de superar l'assignatura, sotmetent-se seguidament als procediments disciplinaris oportuns.

Tinga's en compte que, d'acord amb l'article 13 d) de l'Estatut de l'Estudiant Universitari (RD 1791/2010, de 30 de desembre), "és deure d'un estudiant abstinre's en la utilització o cooperació en procediments fraudulents en les proves d'avaluació, en els treballs que es realitzen o en documents oficials de la Universitat".

n les proves d'avaluació, en els treballs que es realitzen o en documents oficials de la Universitat".

BIBLIOGRAFIA

- 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