Guía Docente

QUÍMICA ORGÁNICA ESTRUCTURAL

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2022-2023

ESCENARIO 1. PRESENCIAL

I.- IDENTIFICACIÓN

NOMBRE DE LA ASIGNATURA:	**Química Orgánica Estructural**
NÚMERO DE CRÉDITOS:	**6**
CARÁCTER:	**Optativa**
MATERIA:	**Química Orgánica Avanzada**
MÓDULO:	**Avanzado**
TITULACIÓN:	**Grado en Química**
SEMESTRE/CUATRIMESTRE:	**Segundo (cuarto curso)**
DEPARTAMENTO/S:	**Química Orgánica**

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

Grupo A		
Teoría **Seminario** **Tutoría**	**Profesor:** **Departamento:** **Despacho:** **e-mail:**	Mª ÁNGELES CANALES MAYORDOMO Química Orgánica QB-348A (4ª planta, edificio B) ma.canales@quim.ucm.es
Grupo B		
Teoría **Seminario** **Tutoría**	**Profesor:** **Departamento:** **Despacho:** **e-mail:**	MARÍA JOSÉ MANCHEÑO REAL Química Orgánica QB-417 (4ª planta, edificio B) mjmreal@ucm.es

II.- OBJETIVOS

■ OBJETIVO GENERAL

Introducir al estudiante en el estudio de la correlación espectro-estructura y en las diferentes aplicaciones de las técnicas espectroscópicas.

Se pretende además que el alumno:

- Adquiera los conocimientos adecuados y necesarios que le permitan identificar sustancias orgánicas a partir de una serie de espectros o datos espectroscópicos dados.
- Adquiera el suficiente conocimiento para diseñar la mejor manera de enfrentarse a un determinado problema de determinación estructural conociendo la información que proporciona o aporta cada tipo de espectro.
- Conozca las aplicaciones y limitaciones de las diferentes técnicas espectroscópicas.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Correlacionar el espectro UV-Vis con la estructura y reconocer los diferentes cromóforos. Aprender y conocer el manejo de las tablas.
- Correlacionar el espectro IR-Raman con los diferentes grupos funcionales. Conocer las modificaciones en el espectro que introducen las variaciones estructurales de los diferentes grupos funcionales.
- Correlacionar los espectros de RMN de núcleos de interés orgánico: ^{1}H, ^{13}C, ^{19}F y ^{31}P con la estructura. Interpretar espectros mono y bidimensionales. Aprender el manejo de las tablas.
- Correlacionar espectros de masas y sistemas de ionización. Reconocer el ion molecular y los satélites isotópicos. Conocer las principales fragmentaciones.
- Conocer y usar las bases de datos espectroscópicas, su manejo, aplicaciones y limitaciones. Usar programas para el cálculo teórico de espectros.
- Consultar y utilizar la bibliografía propuesta para el desarrollo del curso.

III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

CONOCIMIENTOS PREVIOS:

Estructura y reactividad de los principales grupos funcionales. Estereoquímica. Nociones de espectroscopía de moléculas orgánicas adquiridas en el Módulo Fundamental.

RECOMENDACIONES:

Se recomienda a los estudiantes que se matriculen de esta asignatura que tengan previamente cursadas y superadas las asignaturas de *Química Orgánica I* y *Química Orgánica II*.

IV.- CONTENIDOS

BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

Técnicas espectroscópicas en el análisis de entidades orgánicas y metodología de la determinación estructural. Espectrometría de masas aplicada a la determinación estructural de compuestos orgánicos. El esqueleto hidrocarbonado: combinaciones RMN-EM. Determinación de grupos funcionales: combinación de las técnicas espectroscópicas. Métodos avanzados en RMN. Estrategias en la determinación estructural y configuracional. Metodología/Procedimiento para aplicar la información espectroscópica a la determinación estructural. Métodos emergentes: aplicaciones a las ciencias de la vida, industria alimentaria, geles, polímeros y fases intermedias.

PROGRAMA:

BLOQUE 1: ESPECTROSCOPÍA ULTRAVIOLETA-VISIBLE (UV-Vis)

1- Cromóforos, auxócromos y sus interacciones.
2- Olefinas, polienos, benceno y sistemas aromáticos, compuestos carbonílicos insaturados.
3- Ejemplos de espectros y manejo de Tablas. Problemas.

BLOQUE 2: ESPECTROSCOPÍA INFRARROJA (IR) Y RAMAN

4- Absorciones características de enlaces sencillos y múltiples.
5- Variación de la frecuencia con la estructura.
6- Espectroscopía Raman.
7- Problemas y aplicaciones.

BLOQUE 3: ESPECTROSCOPÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

8- Introducción. Núcleos de interés en Química orgánica. Desplazamiento químico para diferentes núcleos.
9- Causas que modifican el desplazamiento químico.
10- Acoplamiento homo y heteronuclear.
11- Sistemas de incrementos para la estimación de los desplazamientos. Manejo de tablas y programas de simulación.
12- Espectroscopía bidimensional homo y heteronuclear.
13- Problemas y aplicaciones.

BLOQUE 4: ESPECTROMETRÍA DE MASAS

15- Ionización y registro del espectro.
16- Ion molecular y satélites isotópicos. Información. Manejo de tablas. Masa exacta.
17- Fragmentaciones principales.
18- Problemas.

BLOQUE 5:

19- Problemas conjuntos de elucidación estructural completa de moléculas orgánicas.

BLOQUE 6:

20- Aplicaciones emergentes de las técnicas de determinación estructural.

V.- COMPETENCIAS

GENERALES:

Las competencias generales del título, CG1, CG2, CG3, CG4, CG7, CG8, CG11 y CG13, se recogen, en este módulo, en las siguientes (CG-MA: **C**ompetencias **G**enerales del **M**ódulo **A**vanzado):

CG1-MA1: Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.

CG2-MA1: Valorar la importancia de la Química y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica.

CG2-MA2: Relacionar áreas interdisciplinares en plena expansión, y tomar conciencia de la importancia que la investigación interdisciplinar tiene en el avance de la Ciencia.

CG3-MA1: Demostrar una base de conocimientos y habilidades con las que pueda continuar sus estudios en áreas especializadas de Química o en áreas multidisciplinares.

CG4-MA1: Plasmar los conocimientos específicos de cada materia en el lenguaje científico universal, entendido y compartido interdisciplinarmente.

CG7-MA1: Aplicar conocimientos teóricos y prácticos a la solución de problemas en Química y seleccionar el método más adecuado para resolverlos.

CG8-MA1: Valorar investigaciones y estudios detallados en el campo de la Química.

CG11-MA1: Manejar instrumentación para análisis, síntesis e investigaciones estructurales.

CG13-MA1: Desarrollar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.

■ ESPECÍFICAS:

Además de las competencias generales y transversales del módulo, las competencias específicas del título, CE14, CE15, CE16 y CE30, se desarrollan, para esta materia, en las siguientes (CEMAQO: **C**ompetencias **E**specíficas del **M**ódulo **A**vanzado de la materia **Q**uímica **O**rgánica **A**vanzada):

CE14-MAQO4: Reconocer la estructura química de las moléculas orgánicas y organometálicas y relacionarla con sus propiedades espectroscópicas o espectrométricas.

CE14-MAQO5: Distinguir la información estructural específica que pueden aportar las técnicas espectroscópicas en el estudio de diferentes matrices.

CE14-MAQO6: Diseñar el procedimiento de análisis estructural que requiere una muestra problema determinada.

■ TRANSVERSALES:

Las competencias transversales del título, CT1, CT2, CT3, CT4, CT5, CT7, CT8, CT11 y CT12 se recogen, en este módulo, en las siguientes (CT-MA: **C**ompetencias **T**ransversales del **M**ódulo **A**vanzado):

CT1-MA1: Elaborar y escribir memorias e informes de carácter científico y técnico.

CT2-MA1: Trabajar en equipo.

CT3-MA1: Aprender a tomar decisiones ante un problema real práctico.

CT4-MA1: Seleccionar el método más adecuado para resolver un problema planteado.

CT5-MA1: Consultar, utilizar y analizar cualquier fuente bibliográfica.

CT5-MA2: Manejar bibliografía y bases de datos especializadas, y de recursos accesibles a través de Internet.

CT7-MA1: Usar programas informáticos que sirvan, en el mundo de la Química, para calcular, diseñar, simular, aproximar y predecir.

CT8-MA1: Comunicarse en español utilizando los medios audiovisuales más habituales.

CT11-MA1: Desarrollar trabajo autónomo.

CT12-MA1: Desarrollar sensibilidad hacia temas medioambientales y preservación del medioambiente.

VI. – RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

- Identificar la información estructural que cada técnica espectroscópica aporta.
- Reconocer las ventajas e inconvenientes del uso de cada una de las técnicas estudiadas para una determinada molécula en función de su estructura.
- Identificar cromóforos y auxocromos.
- Identificar grupos funcionales por medio de la espectrocopía IR.
- Identificar los elementos estructurales de esqueleto que proporciona la RM
- Identificar picos moleculares, presencia de ciertos átomos poliisotópicos y fragmentos y sus aplicaciones a la determinación estructural.
- Elucidar la estructura total de una molécula orgánica a partir de una serie de espectros.

VII. – HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos (horas)
Clases teóricas	22,5	37,5	2,4 (60)
Seminarios y clases de problemas	22,5	37,5	2,4 (60)
Tutorías/Trabajos dirigidos	4	6	0,4 (10)
Preparación de trabajos y exámenes	6	14	0,8 (20)
Total	**55**	**95**	**6 (150)**

VIII.- METODOLOGÍA

Se seguirá una metodología mixta basada en el aprendizaje cooperativo, el aprendizaje colaborativo y el autoaprendizaje. Las actividades presenciales de la asignatura se estructuran en **clases expositivas o magistrales de teoría, clases de seminario, tutorías** y **actividades dirigidas**.

Clases teóricas presenciales: estas clases serán expositivas y en ellas se desarrollarán de forma oral los epígrafes que se indican en el programa de la asignatura como clases presenciales, lo que permitirá al alumno obtener una visión global y comprensiva de la misma. Se hará uso de la pizarra y de presentaciones PowerPoint. Al final del tema se podrán plantear nuevas propuestas que permitan interrelacionar contenidos ya estudiados con los del resto de la asignatura o con otras asignaturas. Previamente a la exposición, todo el material presentado necesario para el seguimiento de las clases estará a disposición de los alumnos en el Campus Virtual.

Clases de seminario: tendrán como objetivo aplicar los conocimientos adquiridos a un conjunto de cuestiones/ejercicios. Para ello, se proporcionará a los estudiantes una colección de ejercicios. El profesor explicará algunos ejercicios tipo (que se indicarán como tal en el enunciado) y el resto lo resolverán los estudiantes como trabajo personal. Algunas de las cuestiones estarán relacionadas con aspectos no descritos en el desarrollo teórico de la asignatura, para que los alumnos puedan utilizar los conocimientos adquiridos en la justificación de los hechos planteados en los mismos.

En esta asignatura es fundamental la parte dedicada a los problemas. Una vez que el alumno haya adquirido los conocimientos necesarios, los problemas serán resueltos y expuestos por los alumnos. Para problemas de especial dificultad se formarán grupos de dos o tres alumnos encargados de la resolución de los mismos.

Tutorías presenciales/Actividades dirigidas: se programarán cuatro sesiones presenciales de tutorías sobre ejercicios relacionados con el temario de la asignatura. En las primeras sesiones de tutoría el profesor revisará y corregirá, si es el caso, las soluciones propuestas por los alumnos, resolverá las dudas y dificultades que se hayan presentado en la resolución de los ejercicios propuestos y orientará a los alumnos para la solución correcta de los ejercicios que estuvieran mal planteados o resueltos. En las posteriores se revisarán definitivamente las soluciones de los ejercicios planteados y se resolverán las últimas dudas y dificultades.

IX.- BIBLIOGRAFÍA

Existen muy escasas obras sobre la determinación estructural de compuestos orgánicos traducidas al español. El alumno puede encontrar diferentes monografías en inglés y alemán. No se seguirá un libro de texto concreto, pero quizás la obra más completa y general sea:

- **BÁSICA:**
  - Hesse, M.; Meier, H. y Zeeh, B.: *"Métodos espectroscópicos en Química Orgánica"*, 2ª edición, Editorial Síntesis 2005, ISBN: 84-7738-522-X
- **TABLAS DE DATOS ESPECTROSCÓPICOS**

- Pretsch, E.; Bühlmann, P.; Affolter, C.; Herrera, A. y Martínez R.: "*Determinación estructural de compuestos orgánicos*", Elsevier-Masson 2002, ISBN13: 978844581215-0.
- Pretsch, E.; Bühlmann, P; Badertscher, M. "*Structure Determination of Organic Compounds"* Springer 2009. ISBN 978-3-540-93809-5.

LIBROS DE TEORÍA y PROBLEMAS

Field, L. D., Sternhell, S. y Kalman, J. R.: "*Organic Structures from Spectra"*, 6ª edición, Wiley 2020, ISBN: 978-1-119-52480-9.
Randazzo, A. *"Guía Práctica para la interpretación de espectros de RMN. Ejercicios para la determinación estructural de pequeñas moléculas orgánicas"*. Loghia 2018, ISBN: 978-88-95122-44-1.
Blay, G., Pedro, J.R.: *"200 Problemas de Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos"*, Visión Libros 2010, ISBN: 978-84-9983-993-6.

MONOGRAFÍAS

- Günzler, H. y Gremlich, H-U.: "*IR Spectroscopy*", Wiley 2002, ISBN: 3-527-28896-1.
- Lee, T. E.: "*A Beginner's guide to Mass Spectral interpretation*", Wiley 1998, ISBN: 0-471-97629-6.
- Gross, J.H.: "*Mass Spectrometry",* Springer 2017, ISBN: 978-3-319-54397-0.
- H. Friebolin, *"Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy"*, Wiley-VCH 2011, ISBN: 978-3-52732782-9.
- R.M. Silverstein, F.X. Webster. Spectrometric Identification of Organic Compounds. 8ª ed., Wiley 2015, ISBN: 978-0-470-61637-6.

Se proporcionará a los alumnos una serie de direcciones de páginas web donde podrán encontrar bases de datos en forma de diferentes espectros de numerosas sustancias orgánicas, glosarios de términos usados en cada tipo de espectroscopía y cursos on-line con problemas propuestos y resueltos.

X.- EVALUACIÓN

Para la evaluación final es obligatoria la participación en las diferentes actividades propuestas. Para poder acceder a la evaluación final será necesario que el estudiante haya participado al menos en el 60% de las actividades presenciales.

El rendimiento académico del estudiante y la calificación final de la asignatura se computarán, de forma ponderada, atendiendo a los porcentajes que se muestran en cada uno de los aspectos recogidos a continuación. 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.

Las calificaciones de las actividades previstas para la evaluación de la asignatura se comunicarán a los alumnos con la antelación suficiente antes de la realización del examen final para que puedan planificar adecuadamente el estudio de ésta u otras asignaturas.

En todo caso, se respetará el plazo mínimo de siete días entre la publicación de las calificaciones y la fecha del examen final de la asignatura.

EXÁMENES ESCRITOS:

Examen final:	**60%**
Los conocimientos adquiridos se evaluarán mediante la realización de un examen final al que deberán presentarse todos los alumnos. El examen constará de preguntas teóricas sobre aplicación de conceptos aprendidos durante el curso y resolución de problemas.	
Competencias evaluadas:	
Todas las competencias genéricas, específicas y transversales.	

TRABAJO PERSONAL Y ACTIVIDADES DIRIGIDAS:

Cuestiones y problemas:	**40%**
La evaluación del trabajo de aprendizaje individual realizado por el alumno se realizará mediante resolución de cuestiones y problemas. Se valorará la destreza del alumno en la resolución de los problemas y ejercicios propuestos y sus conocimientos de aspectos teóricos. La asistencia y participación activas en las clases queda englobada en esta evaluación. Competencias evaluadas: Todas las competencias genéricas, específicas y transversales.	

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

Examen:	**60%**
La evaluación continua del curso se tendrá en cuenta en la convocatoria extraordinaria. El examen de dicha convocatoria tendrá un valor del 60% al que se sumarán las notas obtenidas en la valoración continua del semestre.	
Competencias evaluadas:	
Todas las competencias genéricas, específicas y transversales.	

PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA

TEMA	ACTIVIDAD	HORAS	GRUPOS	INICIO	FIN
BLOQUE 1 UVVis	Clases Teoría y seminario	6	1	1ª Semana	
BLOQUE 2 IR	Clases Teoría y Seminario	6	1	2ª Semana	4ª Semana
BLOQUE 3 RMN	Clases Teoría y seminario	15	1	5ª Semana	8ª Semana
BLOQUE 4 Masas	Clases Teoría y Seminario	8	1	9ª Semana	10ª Semana
BLOQUE 5 Prob Conj	Clases Teoría y seminario	10	1	11ª Semana	14ª Semana
BLOQUE 6	Seminarios y Tutorías*	4	1	15ª Semana	

* La programación de las tutorías depende de la planificación global de todas las asignaturas del curso.

RESUMEN DE LAS ACTIVIDADES								
Actividad docente	**Competencias asociadas**	**Actividad Profesor**	**Actividad alumno**	**Procedimiento de evaluación**	**P**	**NP**	**Total**	**C**
Clases de teoría	Todas las competencias genéricas, específicas y transversales	Preparación del material Exposición de conceptos teóricos	Preparación previa de las clases Toma de apuntes	Calificación de respuestas realizadas por escrito a preguntas realizadas sobre conceptos teóricos	22,5	37,5	60	40%
Clases de problemas /seminarios	Todas las competencias genéricas, específicas y transversales	Preparación del material Aplicación de los conceptos teóricos a la resolución de casos prácticos	Preparación previa de las clases Toma de apuntes Realización de problemas Formulación de preguntas y dudas	Calificación de los problemas propuestos Calificación del desarrollo de la metodología para la determinación estructural Calificación de la propuesta de estructuras Calificación de la propuesta de técnicas espectroscópicas a emplear para la mejor determinación de la estructura	22,5	37,5	60	
Tutorías	Todas las competencias genéricas, específicas y transversales	Preparación de controles Resolución de dudas Resolución de problemas especiales	Realización de controles Formulación de preguntas y dudas	Calificación de los controles	4	6	10	
Exámenes	Todas las competencias genéricas, específicas y transversales	Propuesta, vigilancia y corrección del examen. Calificación del alumno	Preparación y realización del examen	Calificación del examen realizado	6	14	20	60%
P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación								