



Proyecto/Guía docente de la asignatura

Se debe indicar de forma fiel cómo va a ser desarrollada la docencia. Esta guía debe ser elaborada teniendo en cuenta a todos los profesores de la asignatura. Conocidos los espacios y profesorado disponible, se debe buscar la máxima presencialidad posible del estudiante siempre respetando las capacidades de los espacios asignados por el centro y justificando cualquier adaptación que se realice respecto a la memoria de verificación. Si la docencia de alguna asignatura fuese en parte online, deben respetarse los horarios tanto de clase como de tutorías). La planificación académica podrá sufrir modificaciones de acuerdo con la actualización de las condiciones sanitarias.

Asignatura	Química Orgánica IV		
Materia	Química Orgánica		
Módulo	Obligatorio		
Titulación	Grado en Química		
Plan	611	Código	45977
Periodo de impartición	Segundo cuatrimestre	Tipo/Carácter	Obligatoria
Nivel/Ciclo	Grado	Curso	3º
Créditos ECTS	6		
Lengua en que se imparte	Español		
Profesor/es responsable/s	Celia Andrés Juan Alicia Maestro		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	celian@qo.uva.es Despacho C-329. Facultad de Ciencias. Tlfnos: 983 185 864/983 186 333 amaestro@qo.uva.es Despacho C-314. Facultad de Ciencias. Tlfnos.: 983 423 564/983 186 335		
Departamento	Química Orgánica		



1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

QUÍMICA ORGÁNICA IV es la última de las cuatro asignaturas obligatorias sobre los principios básicos de Química Orgánica. Conocidas las características estructurales de las funciones, su reactividad y aplicaciones sintéticas, las Técnicas de elucidación estructural, en concreto, aportan conocimientos fundamentales para todas aquellas actividades relacionadas con la síntesis de productos químicos, siendo el único procedimiento que permite abordar resultados desconocidos.

1.2 Relación con otras materias

Directamente relacionada con todas las asignaturas teórico-básicas de química orgánica estudiadas en la carrera. Así mismo, por su carácter práctico, es un excelente complemento para las asignaturas sobre fundamentos espectroscópicos teóricos impartidos por otras áreas

1.3 Prerrequisitos

Los genéricos de la titulación.

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



2. Competencias

2.1 Generales

- G.1- Ser capaz de comunicarse con corrección tanto de forma oral como escrita.
- G.2- Ser capaz de resolver problemas tanto de naturaleza cualitativa como cuantitativa y de tomar decisiones.
- G.3- Ser capaz de encontrar y manejar información, tanto de fuentes primarias como secundarias.
- G.4- Ser capaz de trabajar de forma eficaz y autónoma mediante la planificación y la organización de su trabajo y de su tiempo.
- G.5- Ser capaz de trabajar en equipo, apreciando el valor de las ideas de otras personas para enriquecer un proyecto, sabiendo escuchar las opiniones de otros colaboradores.
- G.6- Conseguir usar con destreza las tecnologías de la información, en lo que se refiere al software más habitual, recursos audiovisuales e Internet.
- G.7- Alcanzar un manejo del idioma inglés suficiente para leer y comunicarse, en aspectos generales y también específicos de su campo científico.
- G.8- Poseer los hábitos, capacidad de aprendizaje y autonomía necesarios para proseguir su formación posterior.
- G.9- Conocer y apreciar las responsabilidades éticas y profesionales

2.2 Específicas

Competencias específicas de conocimiento de la disciplina:

Los aspectos básicos en los que un graduado en química debe ser competente y que ha de conocer de la asignatura son los que aquí se recogen:

- EC.1- Conocer y manejar los aspectos principales de terminología química.
- EC.5- Conocer los principales tipos de compuestos orgánicos.
- EC.7- Conocer los métodos fundamentales de análisis y caracterización estructural de compuestos químicos.
- EC.8- Reconocer aquellos aspectos dentro de la química que son interdisciplinares o que suponen una frontera en el conocimiento

Competencias específicas relacionadas con habilidades cognitivas:

- EH.2- Ser capaz de aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.
- EH.3- Ser capaz de reconocer y analizar un problema y plantear estrategias para su resolución.
- EH.4- Ser capaz de analizar, interpretar y evaluar información química y datos químicos.
- EH.5- Ser capaz de comunicar información química y argumentar sobre ella.



3. Objetivos

Objetivos Generales

El planteamiento eminente práctico de la asignatura debe enseñar al alumno a interpretar espectros reales, de tal manera que el análisis contrastado de todas las técnicas le permiten establecer la estructura molecular de compuestos orgánicos y el análisis de mezclas.

Objetivos Específicos

- Relacionar la estructura de los principales grupos funcionales orgánicos con sus características espectroscópicas.
- Saber aplicar conjuntamente las técnicas instrumentales de RMN, IR, UV y Masas, superando el mero fundamento teórico de las mismas.
- Saber deducir razonadamente la estructura de los compuestos orgánicos utilizando técnicas espectroscópicas avanzadas.
- Saber adquirir y utilizar información bibliográfica de determinación estructural molecular.



4. Contenidos y/o bloques temáticos

Bloque 1: "Nombre del Bloque"

Carga de trabajo en créditos ECTS:

a. Contextualización y justificación

b. Objetivos de aprendizaje

c. Contenidos

Tema 0. Introducción a la determinación estructural de compuestos orgánicos.

Los métodos físicos de análisis orgánico. Consideraciones generales y posibilidades. Fundamento de los métodos espectroscópicos.

Tema 1. Espectroscopía de RMN.

Introducción. Desplazamiento químico. Técnicas de desacoplamiento. Aplicaciones de la RMN de ^{13}C a la identificación de compuestos orgánicos. Introducción a los experimentos bidimensionales. Tipos. Experimentos COSY, HSQC y NOESY. Aplicaciones a la identificación de compuestos orgánicos.

Tema 2. Espectroscopía de Infrarrojo.

Aspectos generales. Fundamentos teóricos. Vibraciones moleculares. Frecuencias características de grupos y su distribución general en el espectro. Aplicaciones a la investigación estructural de compuestos orgánicos.

Tema 3. Espectrometría de masas.

Fundamento. Instrumentación. Presentación y utilidad del espectro de masas. Procesos de fragmentación. Principales fragmentaciones de los compuestos orgánicos. Análisis de datos espectrales de masas y aplicación a la elucidación estructural de compuestos orgánicos.

Tema 4. Elucidación estructural de compuestos orgánicos por aplicación conjunta de las espectroscopías de IR, RMN y la espectrometría de masas.

Exclusivamente mediante la resolución de ejercicios el alumno pone en práctica de manera conjunta todos los conocimientos adquiridos en los temas anteriores. Es un tema flexible por cuanto los ejercicios pueden variar en extensión y dificultad.

d. Métodos docentes

Se sigue 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 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

- **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 problemas relacionados con cada tema de los que consta la asignatura. Los profesores explicarán 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.
- **Tutorías presenciales/Actividades dirigidas.** Se programarán sesiones presenciales de tutorías sobre ejercicios relacionados con el temario de la asignatura. En las primeras sesiones de tutoría los profesores revisarán y corregirán, si es el caso, las soluciones propuestas por los alumnos, resolverán las dudas y dificultades que se hayan presentado en la resolución de los ejercicios propuestos y orientarán 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.

e. Plan de trabajo

f. Evaluación

g Material docente

Es fundamental que las referencias suministradas este curso estén actualizadas y sean completas. Los profesores tienen acceso, a la plataforma Leganto de la Biblioteca para actualizar su bibliografía recomendada ("Listas de Lecturas"). Si ya lo han hecho, pueden poner tanto en la guía docente como en el Campus Virtual el enlace permanente a Leganto.

g.1 Bibliografía básica

Bibliografía básica

- R. M. SILVERSTEIN, F. X. WEBSTER, D. J. KIEMLE, D. L. BRYCE, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, Wiley, 2014, 8ª Ed. ISBN-13: 978-0-470-61637-6.
- M. HESSE, H. MEIER, B. ZEEH, *Métodos espectroscópicos en Química Orgánica*, Síntesis, 2005, 2ª Ed. ISBN-13: 978-8-447-38522-6.
- J. B. LAMBERT, S. GRONERT, H. F. SHURVELL, D. LIGHTNER, R. G. COOKS, *Organic Structural Spectroscopy*, Pearson, 2011, 2ª Ed. ISBN-13: 978-0-321-59256-9.
- D. L. PAVIA, G. M. LAMPMAN, G. S. KRIZ, J. R. VYVYAN, *Introduction to Spectroscopy*, Cengage Learning, 2015, 5ª Ed. ISBN-13: 978-1-285-46012-3.

Tablas de datos espectroscópicos

- E. PRETSCH, P. BÜHLMANN, M. BADERTSCHER, *Structure Determination of Organic Compounds*, Springer, 2010. ISBN-13: 978-3-540-93809-5.
- E. PRETSCH, P. BÜHLMANN, C. AFFOLTER, A. HERRERA, R. MARTÍNEZ, *Determinación estructural de compuestos orgánicos*, Elsevier España, 2002. ISBN-13: 978-8-445-81215-0.

Libros de problemas



- L. D. FIELD, S. STERNHELL, J. R. KALMAN, *Organic Structures from Spectra*, Wiley, 2013, 5ª Ed. ISBN-13: 978-1-118-32545-2.
- G. BLAY, J. R. PEDRO, *200 Problemas de determinación estructural de compuestos orgánicos*, Visión Libros, 2011. ISBN-13: 978-8-499-83993-6.

g.2 Bibliografía complementaria

- E. de HOFFMANN, V. STROOBANT, *Mass Spectrometry, Principles and Applications*, Wiley, 2007, 3ª Ed. ISBN-13: 978-0-470-03310-4.
- T. A. LEE, *A Beginner's Guide to Mass Spectral Interpretation*, Wiley, 1998. ISBN-13: 978-0-471-97629-5.
- H. GÜNZLER, H.-U. GREMLICH, *IR Spectroscopy: An Introduction*, Wiley, 2002. ISBN-13: 978-3-527-28896-0.
- B. H. STUART, *Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications*, Wiley, 2004. ISBN-13: 978-0-470-85427-3.
- N. E. JACOBSEN, *NMR Spectroscopy Explained. Simplified Theory, Applications and Examples for Organic Chemistry and Structural Biology*, Wiley, 2007. ISBN-13: 978-0-471-73096-5.
- R. S. MACOMBER, *A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy*, Wiley, 1997. ISBN-13: 978-0-471-15736-6.
- L. D. FIELD, S. STERNHELL, J. R. KALMAN, *Organic Structures from Spectra*, Wiley, 2013, 5ª Ed. ISBN-13: 978-1-118-32549-0.
- Y-C. NING, *Interpretation of Organic Spectra*, Wiley, 2011. ISBN-13: 978-0-470-82516-7.
- H. FRIEBOLIN, *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, Wiley, 2010. ISBN-13: 978-3-527-32782-9.
- D. H. WILLIAMS, I. FLEMING, *Spectroscopic Methods in Organic Chemistry*. McGraw-Hill Education, 2007, 6ª Ed. ISBN-13: 978-0-077-11812-9.

Bibliografía on-line

Teoría en la web:

- <http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/>.
- <http://www.ch.ic.ac.uk/local/organic/nmr.html>.
- <https://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/VirtTxtJml/Spectrpy/spectro.htm#intro>.
- <http://www-keeler.ch.cam.ac.uk/lectures/Irvine/index.html>.

Problemas de RMN e IR:

- <http://www.nd.edu/~smithgrp/structure/workbook.html>.
- <http://www.chem.ucalgary.ca/courses/351/spectroscopy/index.html>.
- <https://webspectra.chem.ucla.edu/index.html>.

Bases de datos de espectros:

- http://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi.

Software



- ChemBioOffice Ultra, PerkinElmer (CambridgeSoft). El programa informático ChemDraw proporciona los datos espectrales (^1H -RMN y ^{13}C -RMN) de las moléculas que se dibujan con su ayuda.

g.3 Otros recursos telemáticos (píldoras de conocimiento, blogs, videos, revistas digitales, cursos masivos (MOOC), ...)

h. Recursos necesarios

i. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO

Añada tantas páginas como bloques temáticos considere realizar.

5. Métodos docentes y principios metodológicos

6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES o PRESENCIALES A DISTANCIA ⁽¹⁾	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teóricas	25	Preparación y estudio personal de los contenidos teóricos	35
Clases de problemas y seminarios	25	Preparación y resolución de ejercicios	40
Asistencia a tutorías	2	Estudio y preparación de controles y exámenes	15
Realización de controles periódicos	4		
Realización de examen ordinario	4		
Total presencial	60	Total no presencial	90
TOTAL presencial + no presencial			150

(1) Actividad presencial a distancia es cuando un grupo sigue una videoconferencia de forma síncrona a la clase impartida por el profesor.

7. Sistema y características de la evaluación

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Evaluación continua	30%	
Examen teórico	70%	
Convocatoria extraordinaria. Examen final	100%	

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

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.

La superación de la asignatura supondrá obtener una calificación igual o superior a cinco puntos.

CONVOCATORIA ORDINARIA:

Evaluación continua (A) (30%)

- Se basará en la puntuación media alcanzada por el alumno en controles periódicos previamente especificados como tales.
- Son de carácter obligatorio, entendiéndose que la puntuación será cero en los ejercicios no entregados.

Examen de contenidos globales (B) (70%)

- Los conocimientos globales adquiridos se evaluarán mediante la realización de un examen final escrito, en fecha y hora establecidas en el calendario oficial de exámenes.

Calificación final (sobre 10) = 0.3 A + 0.7 B

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA



- La evaluación se realizará mediante **un único examen global escrito (100% de la puntuación)**, de toda la asignatura con las características especificadas en la convocatoria ordinaria.

8. Consideraciones finales



