

ASIGNATURA

Nombre de asignatura: Química Orgánica IV (5183217)

Créditos: 6

PLAN/ES DONDE SE IMPARTE

Plan: Grado en Química (Plan 2018)

Curso: 3

Carácter:

Obligatoria

Duración: Segundo Cuatrimestre

Idioma/s en que se imparte: Español

Módulo/Materia: 02. Obligatorio/Química Orgánica

PROFESOR/A COORDINADOR/A

Nombre	Departamento	Centro	Correo electrónico
Fernández de las Nieves, Ignacio	Química y Física	Facultad de Ciencias Experimentales	

PROFESORADO

Nombre	Departamento	Centro	Correo electrónico
Fernández de las Nieves, Ignacio	Química y Física	Facultad de Ciencias Experimentales	
Contreras Cáceres, Rafael Jesús	Química y Física	Facultad de Ciencias Experimentales	
García López, Jesús	Química y Física		
López Vargas, Mireya Estela	Química y Física	Facultad de Ciencias Experimentales	
Casas Solvas, Juan Manuel	Química y Física		
Moreno Gutiérrez, Irene	Química y Física	Facultad de Ciencias Experimentales	

DATOS BÁSICOS

Modalidad

Presencial

ELEMENTOS DE INTERÉS PARA EL APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

Justificación de los contenidos

Los contenidos establecidos para esta materia en el plan de estudios incluyen "la profundización en la determinación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos y espectrométricos" y una componente experimental "con especial énfasis en la síntesis y caracterización de productos orgánicos". Algunas técnicas espectroscópicas han sido introducidas con muy poco nivel de detalle en la asignatura Química Orgánica I (de segundo curso). Asimismo, las operaciones básicas de un laboratorio de Química Orgánica y sus implicaciones de seguridad, manejo de reactivos, manipulación de residuos, procesado de datos químicos, entre otros aspectos relevantes, se han abordado en las asignaturas de Laboratorio Químico I y II. Aquí se propone un desarrollo específico para cada bloque.

En relación con las técnicas espectroscópicas, se estudiarán los métodos que reflejan el estado del arte de la determinación estructural de compuestos orgánicos. Ello supone el análisis combinado de espectros de masas (MS), ultravioleta-visible (UV-Vis), infrarrojo (IR) y de resonancia magnética nuclear (RMN). La información estructural que proporcionan los espectros MS y UV-Vis es limitada y como tal, estas técnicas se introducen con un enfoque centrado en su aportación a la resolución de la estructura de un compuesto desconocido. La espectroscopía IR se ha utilizado en cursos previos. Aquí se le dedicará el tiempo necesario para

tener una visión de conjunto de su utilidad en la identificación de grupos funcionales. Los alumnos también han estado expuestos anteriormente a los conceptos y aplicaciones básicas de la RMN. Se trata de la principal herramienta de elucidación estructural y como tal se recoge en el temario propuesto para la asignatura, que cubre los diversos aspectos implícitos en el análisis de espectros monodimensionales y bidimensionales sobre la base de los núcleos de protón y carbono-13.

Por lo que se refiere al apartado de experimentación, la asignatura ofrece una visión general del trabajo en un laboratorio de Química Orgánica sobre la base de una selección de procesos de síntesis de compuestos orgánicos que permitan al alumno trasladar a la práctica la química aprendida en las clases de teoría y problemas. Así, la asignatura comprende una serie de experimentos que ilustran transformaciones fundamentales a través de mecanismos de reacción básicos en Química Orgánica, que conllevan una amplia variedad de procedimientos operativos para efectuar las operaciones de síntesis, aislamiento y purificación. Los productos aislados se caracterizarán estructuralmente, incluyendo su grado de pureza, empleando métodos espectroscópicos de IR y RMN.

Materia con la que se relaciona en el Plan de Estudios

La asignatura se relaciona con las materias Laboratorio Químico I y Laboratorio Químico II del módulo básico, y con todas las del área de Química Orgánica que integran el módulo obligatorio (Química Orgánica I - III) y optativo (Química Orgánica de Productos Naturales y Síntesis Orgánica). A su vez, resulta esencial para la realización de Trabajos Fin de Grado en el área de Química Orgánica.

Conocimientos necesarios para abordar la asignatura

Los correspondientes a las asignaturas Laboratorio Químico I, Laboratorio Químico II, Química Orgánica I y Química Orgánica II.

Requisitos previos recogidos en la memoria de la Titulación

No se contemplan requisitos previos.

RESULTADOS DEL PROCESO DE FORMACIÓN Y DE APRENDIZAJE

Competencias.

Básicas:

- Aplicación de conocimientos
- Capacidad de emitir juicios

Transversales:

- Habilidad en el uso de las TIC
- Capacidad para aprender a trabajar de forma autónoma

Específicas:

- C4: Conocer y aplicar las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo espectroscopía.
- P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

Conocimientos o contenidos

- Comprender y poseer conocimientos
- Conocer y aplicar las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo espectroscopía

Habilidades o destrezas.

- Aplicar los contenidos teóricos en la identificación estructural de compuestos orgánicos de tamaño pequeño o medio.
- Realizar síntesis en el laboratorio empleando las técnicas usuales en química para preparación, separación, purificación y determinación estructural de compuestos.
- Elaborar informes de resultados con concisión y rigor científico, analizando y evaluando los resultados obtenidos en la realización de síntesis en el laboratorio.
- Manipular con seguridad los compuestos químicos utilizados en un laboratorio de experimentación básica en química orgánica.
- Llevar a cabo el desarrollo, observación, seguimiento de una determinada reacción o proceso químico.
- Registrar los datos que garanticen la reproducibilidad de un experimento realizado en el laboratorio.
- Correlacionar los cambios observados en el transcurso de un experimento con los resultados obtenidos.
- Interpretar los datos obtenidos en las distintas etapas de los experimentos.
- Explicar las posibles desviaciones entre los resultados obtenidos y los esperados.

PLANIFICACIÓN

Temario

Bloque I: Determinación estructural

Tema 1. Introducción a los métodos físicos de determinación estructural. Aplicaciones de la espectroscopía UV-Vis, espectrometría de masas y espectroscopía infrarroja.

Tema 2. Fundamentos de RMN. Modelo vectorial. Relajación.

Tema 3. Desplazamiento químico.

Tema 4. Constantes de acoplamiento.

Tema 5. Efecto nuclear Overhauser e intercambio químico.

Tema 6. Resonancia magnética nuclear de carbono-13.

Tema 7. Resonancia magnética nuclear bidimensional.

Bloque II: Laboratorio de experimentación en Química Orgánica

Práctica 1. Procesado de espectros de RMN mediante los softwares TopSin® y MestreNova.

Práctica 2. Sustitución electrofílica aromática de un éster: nitración de benzoato de metilo.

Práctica 3. Reacciones estereoespecíficas: preparación de trans-2-bromociclohexanol.

Práctica 4. Síntesis de alil-fenil éter mediante sustitución de Williamson.

Práctica 5. Oxidación de borneol a alcanfor utilizando Oxone®.

Práctica 6. Síntesis de Wittig de alquenos mediante catálisis de transferencia de fase. Preparación de cis- y trans-estilbenos.

Práctica 7. Síntesis de N-cinamil-3-nitroanilina por aminación reductiva de aldehído cinámico.

Actividades Formativas y Metodologías Docentes

Las actividades formativas se desarrollarán de manera presencial, como establece la memoria de verificación del título, excepto en las situaciones indicadas en el plan de contingencia. Las actividades formativas (AF) las metodologías docentes (MD) asociadas y el tipo de sesión utilizado se detallan a continuación:

AF01. Resolución de problemas. MD03. Clase teórico-práctica. Grupo reducido.

AF03. Participación y trabajo en clase. MD02. Clase magistral participativa. Grupo docente.

AF04. Realización de ejercicios. MD03. Clase teórico-práctica. Grupo reducido.

AF05. Tareas de laboratorio. MD09. Clase de laboratorio. Grupo reducido.

AF08. Trabajo en equipo. Clase de laboratorio. Grupo reducido.

Los grupos reducidos comprenden dos ámbitos específicos: Problemas y ejercicios en el aula y prácticas de tipo experimental en el laboratorio.

Grupo reducido en aula: Realización de ejercicios y resolución de problemas relacionados con los temas del Bloque I de la asignatura. Para cada tema se propondrá una serie de ejercicios y problemas que el alumno deberá trabajar y resolver autónomamente con antelación a la clase de grupo reducido. En el aula, el profesor resolverá algunos de los ejercicios y problemas propuestos conjuntamente con las aportaciones de los estudiantes.

Grupo reducido en laboratorio: Realización de experimentos de síntesis de compuestos orgánicos indicados en las prácticas que integran el Bloque II de la asignatura. Los experimentos a realizar incluyen una selección de las reacciones más representativas de los procesos de síntesis orgánica que abarcan, a su vez, los procedimientos, métodos de procesado, purificación, aislamiento e identificación estructural habituales en un laboratorio de química orgánica.

Los alumnos deben preparar de manera autónoma cada práctica antes de comenzar la correspondiente sesión de laboratorio (trabajo prelaboratorio) e ****IMPORTANTE**** entregar al inicio de cada sesión un esquema-resumen de la práctica a realizar. Esa preparación incluye conocer el procedimiento, las técnicas experimentales que se utilizarán y el mecanismo a través del cual se produce cada transformación haciendo uso de la bibliografía apropiada. Asimismo, en el cuaderno de laboratorio deben recogerse los datos preliminares del experimento que se va a efectuar: fecha, nombre, ecuación química, cálculos detallados, y tabla de cantidades de reactivos y disolventes, conforme a las instrucciones especificadas en el cuaderno de prácticas. El trabajo en el laboratorio químico conlleva unos riesgos inherentes a su naturaleza debido a los productos que se manejan y las manipulaciones que se hace con ellos. El desconocimiento de los aspectos teóricos y prácticos del experimento a realizar será considerado como un comportamiento irresponsable que puede ser motivo de expulsión inmediata del laboratorio. Durante el desarrollo de la práctica, se completará la descripción del experimento incorporando de manera esquemática las operaciones realizadas y todas las observaciones, medidas y cálculos pertinentes, así como los detalles correspondientes a la caracterización estructural. Con toda la información disponible, y también de manera autónoma, los alumnos elaborarán unas cuestiones prelaboratorio y otras tantas poslaboratorio, conforme se establece en el Cuaderno de Guiones de Prácticas, que estará disponible al comienzo de la asignatura. Las copias de los espectros de IR y de RMN (monodimensionales y bidimensionales) serán necesarios para la correcta resolución de estas cuestiones. ****IMPORTANTE**** Las cuestiones prelaboratorio se entregarán al inicio de cada sesión, y las cuestiones poslaboratorio se entregarán al profesor en el plazo de una semana después de completarse la práctica correspondiente. Por otra parte, ****IMPORTANTE**** al concluir el último experimento de prácticas, los alumnos tendrán una semana para entregar el cuaderno de prácticas al profesor para su revisión.

El tiempo para la realización de los experimentos es muy ajustado. El retraso injustificado o repetidamente justificado puede dar lugar al suspenso en este apartado de la asignatura.

En lo referente a las tutorías, podrán ser de carácter individual, previa solicitud de los alumnos, o (preferiblemente) de tipo grupal, a propuesta del profesor y con la adhesión de los alumnos que así lo necesiten.

Plan de contingencia

Ante niveles de alerta sanitaria elevados, las actividades formativas planificadas en los grupos docentes se impartirán mediante videoconferencia. Los grupos reducidos continuarán con la impartición presencial conforme a la planificación establecida. Si las autoridades sanitarias acordasen medidas más restrictivas, la docencia en grupos reducidos de aula se realizaría también por videoconferencia. En ambos escenarios, las tutorías pasarían a impartirse a través de videoconferencia, con las mismas modalidades antes mencionadas.

Actividades de Innovación Docente

Diversidad Funcional

El estudiantado con discapacidad o necesidades específicas de apoyo educativo puede dirigirse a la Unidad de Inclusión y Atención a la Diversidad para recibir la orientación y el asesoramiento necesarios, facilitando así un mejor aprovechamiento de su proceso formativo. Asimismo, podrán solicitar las adaptaciones curriculares necesarias para garantizar la igualdad de oportunidades en su desarrollo académico. La información relativa a este alumnado se trata con estricta confidencialidad, en cumplimiento con la Ley Orgánica de Protección de Datos (LOPD). El equipo docente responsable de esta guía aplicará las adaptaciones aprobadas por la Unidad de Inclusión y Atención a la Diversidad, tras su notificación al Centro y a la coordinación del curso

PROCEDIMIENTO DE EVALUACIÓN

Sistemas de evaluación:

Pruebas orales/escritas Sí

Realización de trabajos/ensayos Sí

Resolución de problemas Sí

Asistencia y participación en clase Sí

Prácticas de laboratorio. Sí

Observación directa del desempeño Sí

Otros

Criterios:

Criterios

Modalidad A: Evaluación continua.

Aplicable exclusivamente al período ordinario de impartición de la docencia. La asignatura integra docencia de teoría y problemas en aula (Bloque I) y docencia de prácticas en laboratorio (Bloque II). Para aprobar la asignatura se requiere obtener una calificación mínima de 4 sobre 10 en la evaluación de cada bloque temático, aplicándose la siguiente ponderación para la calificación final: 70 % para el Bloque I y 30 % para el Bloque II. Los instrumentos de evaluación que se aplicarán se describen a continuación para cada bloque, junto con las competencias involucradas indicadas entre paréntesis y la contribución a la calificación final.

Bloque I: Teoría y problemas

SE01. Actividades y ejercicios de clase (GCB02, GCB03, UAL2, UAL9, C4); 10 %.

SE03. Observaciones del proceso (GCB02, GCB03, UAL9, C4); 20 %.

SE05. Pruebas finales escritas u orales (GCB02, GCB03, C4); 40 %.

Las pruebas parciales eliminatorias (o no eliminatorias) se integran dentro de las observaciones del proceso.

Bloque II: Prácticas de laboratorio de experimentación en Química Orgánica

SE01. Actividades y ejercicios de clase (GCB02, GCB03, UAL2, UAL9, C4, P2, P5); 25 %.

SE03. Observaciones del proceso (GCB02, GCB03, UAL2, UAL9, C4, P2, P5); 5 %.

La asistencia a las prácticas de laboratorio es obligatoria. La falta a dos sesiones de prácticas conllevará la calificación de 0 en este apartado.

En todas las actividades a desarrollar durante el curso se valorará positivamente el planteamiento sintético apoyado bibliográficamente, la claridad, orden, concisión y rigor de la exposición, ajustándose al objetivo planteado con el adecuado manejo del lenguaje científico; el dibujo y uso adecuado de estructuras moleculares y de las convenciones establecidas para los símbolos y unidades; la correcta asignación de las señales de los espectros de las moléculas, así como la interpretación y justificación de los rendimientos obtenidos, o en su caso de las conversiones logradas. Se valorará negativamente la copia de texto del propio guion de prácticas.

El cuaderno de laboratorio, las preguntas prelaboratorio, preguntas poslaboratorio y el esquema-resumen de las prácticas, se integran en las actividades y ejercicios de clase. Se valorará positivamente la precisión y brevedad en las descripciones, el ajuste de los esquemas a los procedimientos experimentales y su claridad, la interpretación y justificación de los rendimientos obtenidos, o en su caso de las conversiones logradas. Se valorarán negativamente los errores de cálculo y las omisiones respecto a las "normas para la elaboración del cuaderno" (especificadas en el guion de prácticas). El incumplimiento del requisito exigido para iniciar el trabajo experimental implica que no se podrá proceder a efectuar la práctica, debiendo el alumno abandonar el laboratorio.

Modalidad B: Evaluación extraordinaria y evaluación única final

Debido al carácter teórico y experimental de la asignatura, en esta modalidad de evaluación se realizarán dos pruebas. Una de contenido teórico relativa al Bloque I (competencias evaluables: GCB01, GCB02, UAL9, C4) y otra de carácter teórico-práctico (GCB01, GCB02, UAL9, C4, P2, P5) basada en el Bloque II. La parte teórica se examinará en la fecha establecida por la Facultad. Los estudiantes que concurran a la evaluación extraordinaria y en el desarrollo de la asignatura hubiesen aprobado el apartado experimental, mantendrán esa calificación en el Bloque II y solo tendrán que realizar la prueba final de contenido teórico. Los alumnos que opten por la evaluación única final, en los términos contemplados en el Reglamento de Régimen de Evaluación del Estudiante, han de efectuar las dos pruebas. Al examen práctico concurrirán los alumnos que hayan aprobado el examen de contenido teórico. Tendrá lugar en el laboratorio de Química Orgánica. Para aprobar la asignatura se requiere obtener una calificación mínima de 4 sobre 10 en la evaluación de cada bloque temático, aplicándose la siguiente ponderación para la calificación final: 70 % para el Bloque I y 30 % para el Bloque II.

Plan de Contingencia

En caso de que las autoridades sanitarias acuerden la no presencialidad de las pruebas de evaluación de la convocatoria ordinaria y/o de la convocatoria extraordinaria, dichas pruebas se realizarán en modo telemático con ayuda de la plataforma de enseñanza virtual.

Se mantendrán los mismos criterios e instrumentos contemplados en el apartado anterior, tanto en la modalidad A como en la modalidad B.

RECURSOS

Bibliografía básica.

Teoría y problemas:

- 1) Joseph Lambert. **Organic Structural Spectroscopy**. Pearson. 2ª. 2013
- 2) Timothy D.W. Claridge. **High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry**. Elsevier.3rd. 2016
- 3) Harald Günther. **NMR Spectroscopy. Basic Principles, Concepts, and Applications in Chemistry**. Wiley-VCH.3rd. 2013
- 4) Robert M. Silverstein, Francis X. Webster, David J. Kiemle, David L. Bryce. **Spectrometric Identification of Organic Compounds**. Wiley-VCH.8th. 2014
- 5) L. D. Field, H. L. Li, A. M. Magill. **Organic Structure from Spectra**. Wiley-VCH.6th. 2020

Prácticas de laboratorio:

- 1) John Gilbert, Stephen Martin. **Experimental Organic Chemistry: A Miniscale & Microscale Approach**. Cengage Learning.6th. 2016
- 2) Joaquín Isac-García, José A. Dobado, Francisco G. Calvo-Flores, Henar Martínez-García. **Experimental Organic Chemistry. Laboratory Manual**. Elsevier.1st. 2016

Bibliografía complementaria.

Teoría y problemas:

- 1) Donald L. Pavia, Gary M. Lampman, George S. Kriz, James A. Vyvyan. **Introduction to Spectroscopy**. Cengage Learning.5th. 2015
- 2) Hesse, Manfred; Meier, Herbert; Zeeh, Bernd. **Métodos espectroscópicos en Química Orgánica**. Síntesis.2ª. 2005
- 3) John S. Harwood and Huaping Mo. **Practical NMR Spectroscopy Laboratory Guide Using Bruker Spectrometers**. Academic Press.1ª. 2001
- 4) A. Randazzo. **Guía Práctica para la Interpretación de Espectros de RMN: ejercicios para la determinación estructural de pequeñas moléculas orgánicas**. Loghía.1ª. 2018

Prácticas de laboratorio:

- 1) Donald L. Pavia, Gary M. Lampman, George S. Kriz, Randall G. Engel. **A Microscale Approach to Organic Laboratory Techniques**. Cengage Learning.6th. 2018

Otros recursos.

Videos sobre operaciones básicas en el laboratorio de química orgánica:

- <http://https://www-jove-com.ual.debiblio.com/education/17/organic-chemistry>
- <http://https://www-jove-com.ual.debiblio.com/education/32/organic-chemistry-ii>
- <http://https://www-jove-com.ual.debiblio.com/science-education-library/99/lab-chem>