

## **i ASIGNATURA ANÁLISIS Y DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE PRODUCTOS NATURALES**

Código	40208026
Titulación	GRADO EN QUÍMICA
Módulo	MÓDULO II - FUNDAMENTAL
Materia	MATERIA II.4 QUÍMICA ORGÁNICA
Curso	3
Duración	SEGUNDO SEMESTRE
Tipo	OBLIGATORIA
Idioma	CASTELLANO
Ofertable en Lengua Extranjera	
Movilidad Nacional	
Movilidad Internacional	
Estudiante Visitante Nacional	
ECTS	6,00
Departamento	C129 - QUIMICA ORGANICA

## **✓ REQUISITOS Y RECOMENDACIONES**

### **Requisitos**

Haber superado al menos 12 créditos de la materia "Química".

## Recomendaciones

Haber cursado la asignatura "Química Orgánica General I" del semestre previo.

## OFERTA EN LENGUA EXTRANJERA

- Idioma:
- Tipo de grupo: (\*)
- Nivel requerido:

\*(Exclusivo, sólo se imparte en ese idioma; Adicional, un grupo adicional en ese idioma; Mixto, un mismo grupo con el idioma base - español y el que se oferta)

## MOVILIDAD

- Movilidad Nacional (SICUE): .
- Movilidad Internacional: .
- Estudiante Visitante Nacional: .

## RESULTADO DEL APRENDIZAJE

Id.	Resultados
1	Conocer y saber utilizar las técnicas experimentales habituales en la determinación estructural de compuestos orgánicos.
2	Conocer la estructura, función y reactividad de los productos naturales orgánicos.

Id.	Resultados
3	Adquirir la formación e instrucción práctica necesaria para aplicarla a la metodología sintética y a la caracterización de compuestos orgánicos. Desarrollar una actitud crítica de perfeccionamiento en la labor experimental y buscando soluciones a los problemas diarios en el laboratorio incluyendo los aspectos de seguridad.
4	Elucidar la estructura de los compuestos orgánicos sencillos, utilizando técnicas espectroscópicas.
5	Saber adquirir y utilizar información bibliográfica y técnica referida a los compuestos orgánicos.

## **COMPETENCIAS**

Tipo	Competencia
BÁSICA	Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía
GENERAL	Capacidad de análisis y síntesis.
GENERAL	Capacidad para utilizar con fluidez la informática a nivel de usuario.
GENERAL	Capacidad para comunicarse fluidamente de manera oral y escrita en la lengua nativa.
GENERAL	Capacidad para la resolución de problemas.
GENERAL	Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y de tomar decisiones.
ESPECÍFICA	Distinguir y explicar la naturaleza y el comportamiento de los grupos funcionales en moléculas orgánicas.

Tipo	Competencia
ESPECÍFICA	Utilizar las técnicas instrumentales y describir sus aplicaciones.
ESPECÍFICA	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
ESPECÍFICA	Reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico
ESPECÍFICA	Exponer, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
ESPECÍFICA	Manejar y procesar informáticamente datos e información química.
ESPECÍFICA	Manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.
ESPECÍFICA	Manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
ESPECÍFICA	Interpretar datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan
ESPECÍFICA	Aplicar las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo espectroscopia, a la caracterización de sustancias.

## Q CONTENIDOS

Contenido	Descripción
Prácticas de laboratorio: se desarrollarán prácticas de laboratorio acordes con el contenido de la asignatura.	

Contenido	Descripción
<p>Tema 1. Introducción a la espectroscopía. El espectro electromagnético. Absorción de la radiación electromagnética. Tipos de técnicas espectroscópicas. Introducción a la determinación estructural de compuestos orgánicos mediante técnicas espectroscópicas..</p>	
<p>Tema 2. Productos Naturales. Introducción. Aislamiento y detección de productos naturales. Rutas biosintéticas de los productos naturales: ruta del acetato, ruta del mevalonato, ruta del ácido shikímico, alcaloides y otros compuestos nitrogenados. Características estructurales distintivas de los productos naturales.</p>	
<p>Tema 3. Espectroscopía infrarroja. Absorción IR y tipo de vibraciones. Ley de Hooke. Regiones espectrales. Información estructural. Instrumentación y preparación de muestras. Asignación de espectros IR de productos naturales seleccionados.</p>	
<p>Tema 4. Espectrometría de masas. Introducción, ionización por impacto electrónico e instrumentación. Obtención de la fórmula molecular. Métodos alternativos de ionización. Espectros de masas de compuestos orgánicos.</p>	
<p>Tema 5. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear de protón. Propiedades magnéticas de los núcleos. Spin nuclear. Espectroscopía de RMN de protón. Desplazamiento químico. Factores que influyen en el desplazamiento: apantallamiento electrónico y anisotropía magnética. Interacciones spin-spin en RMN de protón. Constantes de acoplamiento. Espectros de primer orden y espectros más complejos. Análisis de sistemas de protones acoplados en compuestos orgánicos. Equivalencia química y magnética. Análisis de espectros de <sup>1</sup>H-RMN de productos naturales.</p>	

Contenido	Descripción
Tema 6. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear de carbono. Introducción. Acoplamientos spin-spin del $^{13}\text{C}$ . Simplificación del espectro: desacoplamiento $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$ . Correlaciones desplazamiento-estructura. Desplazamientos químicos característicos. Conectividad $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$ de una dimensión: APT (Attached Proton Test), DEPT (Distortionless Enhancement by Polarization Transfer). Espectros bidimensionales: correlaciones homo y heteronucleares. Análisis de espectros de $^{13}\text{C}$ -RMN de productos naturales.	
Tema 7. Aplicaciones de las técnicas espectroscópicas a los productos naturales. Elucidación estructural de productos naturales.	

## SISTEMA DE EVALUACIÓN

### Procedimientos de evaluación

Tarea/Actividades	Medios, técnicas e instrumentos	Ponderación
Evaluación continua.	Se propondrán a los alumnos ejercicios y problemas para su resolución bien en clase, bien a través del Campus Virtual.	
Evaluación de las prácticas de laboratorio.	Cada alumno responderá a cuestiones concretas que se le plantearán en cada práctica. Asimismo, deberá responder cuestionarios sobre cada práctica, que se le entregará una vez concluidas.	
Examen escrito	Se realizará un examen escrito en el que los alumnos pongan de manifiesto la adquisición de las competencias y de los principales aspectos teóricos y prácticos de la asignatura.	

## Criterios de evaluación

La adquisición de competencias se valorará a través de un examen final con cuestiones y problemas sobre los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura. Se realizará evaluación continua a través de los ejercicios propuestos en clase o en el aula virtual.

La evaluación de las prácticas se basará en el trabajo desarrollado en el laboratorio, las cuestiones planteadas durante las prácticas y en una prueba escrita con respuestas cortas.

Será necesario aprobar las prácticas para superar la asignatura.

## PROFESORADO

Profesorado	Categoría	Coordinador
MACÍAS DOMÍNGUEZ, FRANCISCO ANTONIO	CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD TC	Sí
VARELA MONTOYA, ROSA MARÍA	PROFESORA TITULAR DE UNIVERSIDAD	No
IGARTUBURU CHINCHILLA, JOSE MANUEL	PROFESOR TITULAR UNIVERSIDAD	No

## ACTIVIDADES FORMATIVAS

Actividad	Horas	Detalle
-----------	-------	---------

Actividad	Horas	Detalle
01 Teoría	26	Las clases de teoría tendrán carácter expositivo, siendo su objetivo fundamental el desarrollo de conceptos, hipótesis y teorías científicas sobre el contenido de la asignatura. Se fomentará la participación mediante el planteamiento de cuestiones que el alumno debe contestar en clase. Alternativamente, se podrán plantear cuestiones que el alumno resolverá en su casa y presentará en la clase que el profesor indique.
02 Prácticas, seminarios y problemas	10	Clases con contenido práctico que se organizarán de la siguiente manera: A) Lección magistral: presentación de un problema de resolución estructural de forma organizada con la finalidad de facilitar información de forma organizada. B) Resolución de ejercicios y y problemas: se plantearán problemas a los estudiantes para que ejerciten las rutinas de utilización de la información disponible e interpretación de resultados, para la resolución de los ejercicios planteados.
04 Prácticas de taller/laboratorio	24	Las prácticas se realizarán por parejas y en grupos reducidos. Se realizarán prácticas directamente relacionadas con los conocimientos impartidos en la asignatura.
10 Actividades formativas no presenciales	84,00	Actividades académicamente dirigidas. Horas de estudio personal.
12 Actividades de evaluación	6,00	Examen final. Actividades de evaluación continua Cuestionarios de prácticas.



## BIBLIOGRAFÍA

### Determinación estructural:

- Field, L.D., Sternhell, J.K., Kalman, J.R. "Organic structures from spectra" John Wiley and Sons (2004).
- L. M. Harwood, T. D. W. Claridge. "Introduction to Organic Spectroscopy", Oxford University Press (1997).
- J.B. Lambert, H.F. Shurvell, D.A. Lightner, R. Graham Cooks, "Organic Structural Spectroscopy" Prentice Hall (1998).
- R. M. Silverstein, F. X. Webster. "Spectroscopic Identification of Organic Compounds", 7ª edición, John Wiley & Sons (2005).
- P. Crews, M. Jaspars, J. Rodríguez. "Organic Structure Analysis", Oxford University Press (1997, 2ª edición 2010).
- E. Breitmaier. "Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. A Practical Guide", John Wiley & Sons (1993).
- H. Duddeck, W. Dietrich, G. Toth. "Elucidación Estructural por RMN" Springer-Verlag Iberica (2000).
- E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon. "Tablas para la Elucidación Estructural por Métodos Espectroscópicos", 3ª edición (1998).

### Productos Naturales:

- Dewick, P. M. "Medicinal Natural Products: a Biosynthetic approach". Wiley,
- Harborne, J. B. "Introduction to Ecological Biochemistry" 4th. Ed. Academic Press. 1993.

El presente documento es propiedad de la Universidad de Cádiz y forma parte de su Sistema de Gestión de Calidad Docente.

En aplicación de la Ley 3/2007, de 22 de marzo, para la igualdad efectiva de mujeres y hombres, así como la Ley 12/2007, de 26 de noviembre, para la promoción de la igualdad de género en Andalucía, toda alusión a personas o colectivos incluida en este documento estará haciendo referencia al género gramatical neutro, incluyendo por lo tanto la posibilidad de referirse tanto a mujeres como a hombres.