

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		
	Curso académico: 2026-27	Código: P/CL009_FC_D002	

PLAN DOCENTE DE LA ASIGNATURA

Identificación y características de la asignatura				
Código	501845		Créditos ECTS	6
Denominación (español)	Determinación Estructural de los Compuestos Orgánicos			
Denominación (inglés)	Structural Determination of Organic Compounds			
Titulaciones	GRADO EN QUIMICA			
Centro	FACULTAD DE CIENCIAS			
Semestre	6º	Carácter	OBLIGATORIO	
Módulo	FUNDAMENTAL			
Materia	QUÍMICA ORGÁNICA			
Profesor/es				
Nombre	Despacho	Correo-e		Página web
Cipriano Rangel Delgado	Planta baja (Edificio Viguera Lobo)	ciprira@unex.es		
Profesor pendiente de contratación				
Área de conocimiento		Química Orgánica		
Departamento		Química Orgánica e Inorgánica		
Profesor coordinador (si hay más de uno)		Cipriano Rangel Delgado		

Competencias
Competencias básicas CB1: Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio. CB2: Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio. CB3: Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética. CB4: Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado. CB5: Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		
	Curso académico: 2026-27	Código: P/CL009_FC_D002	

Competencias generales

CG1: Que los estudiantes se involucren en la tarea intelectualmente estimulante y satisfactoria del proceso de aprendizaje.

CG2: Que los estudiantes desarrollen un interés especial por el aprendizaje de la Química, valorando su importancia en los contextos científico, industrial, económico, medioambiental y social.

CG3: Que los estudiantes posean una base sólida y equilibrada de conocimientos químicos y habilidades prácticas de forma que le permita desenvolverse con seguridad en un laboratorio químico.

CG4: Que los estudiantes desarrollen habilidades/capacidades de comprensión, interpretación, aplicación y transmisión (de forma oral y por escrito) de sus conocimientos químicos, teóricos y prácticos.

Competencias Transversales

CT1: Capacidad de:

- a) Utilización correcta del método de inducción y generación de nuevas ideas.
- b) Análisis y síntesis.
- c) Organización y planificación.
- e) Expresión tanto oral como escrita.
- f) Razonamiento crítico. Resolución de problemas.
- g) Toma de decisiones.

CT2: Capacidad de comunicar de una forma clara y precisa conocimientos y conclusiones a un público tanto especializado como no especializado.

CT3: Capacidad para aprender nuevas técnicas y conocimientos que permitan emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

CT4: Desarrollo de habilidades de aprendizaje personal. Adquisición de habilidades en las relaciones interpersonales, liderazgo, creatividad y adaptación a nuevas situaciones.

CT5: Demostración de sensibilidad hacia temas medioambientales.

CT8: Motivación por la calidad.

CT10: Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC's) más adecuadas en cada situación.

Competencias específicas

CE1: Adquirir conocimientos sobre los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.

CE6: Identificar los elementos químicos y sus compuestos. Comprender la obtención, estructura y propiedades de los compuestos inorgánicos, orgánicos, organometálicos y macromoléculas (naturales y sintéticas).

CE7: Analizar la interacción radiación-materia. Entender los principios de espectroscopia.

CE9: Asimilar la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales.

CE10: Distinguir y aplicar los métodos de determinación estructural.

CE16: Resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

CE17: Reconocimiento y análisis de nuevos problemas y planificación de estrategias para su

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		 FACULTAD DE CIENCIAS (UEx)
	Curso académico: 2026-27	Código: P/CL009_FC_D002	

solución tanto en un entorno académico como profesional.

CE18: Capacidad para desenvolverse con seguridad en un laboratorio químico, que se concreta en el manejo de productos, materiales e instrumentación química mediante tecnologías apropiadas y con cumplimiento estricto de las normas de seguridad estipuladas. Valoración de riesgos.

CE19: Evaluación, interpretación y síntesis de datos e información química. Obtención, procesamiento y tratamiento, mediante técnicas computacionales, de datos químicos.

CE20: Ejecución de procedimientos estándares de laboratorios implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.

CE21: Interpretación de datos derivados de observaciones y medidas en el laboratorio.

CE24: Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC's) más adecuadas en cada situación.

CE25: Reconocimiento y valoración de los procesos químicos en la vida diaria.

CE26: Comprensión de los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.

CE27: Capacidad de relación de la Química con otras disciplinas.

Contenidos
Breve descripción del contenido
Se proporcionan al alumno herramientas y técnicas útiles para determinar la estructura de sustancias desconocidas. Para ello se estudian los fundamentos y técnicas de interpretación de las espectroscopias UV-Visible, IR, EM, ^1H- y ^{13}C-RMN entre otras. Con la evolución del curso, se elabora una metodología de trabajo que se apoya en un proceso iterativo que utiliza como hipótesis asignaciones basadas en alguna de las técnicas espectroscópicas para, una vez contrastada con las demás, obtener una solución o soluciones razonables. La asignatura debe incidir significativamente en la mejora de la capacidad de razonamiento lógico de los estudiantes y en la expresión eficaz del mismo. También debe mejorar su espíritu crítico, incluso cuando analiza sus propias hipótesis. Las competencias que aporta son útiles en perfiles profesionales de investigación e industrial.
Temario de la asignatura
Denominación del tema 1: CARACTERIZACIÓN Y DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL Contenidos del tema 1: 1.- Introducción. 2.- Desarrollo histórico. 3. – Caracterización de compuestos orgánicos mediante sus constantes físicas. 3.1.- Puntos de fusión. 3.2.- Puntos de ebullición. 3.3.- Densidad. 3.4.- Índice de refracción. 3.5.- Poder rotatorio.

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		 FACULTAD DE CIENCIAS [UEx]
	Curso académico: 2026-27	Código: P/CL009_FC_D002	

4.- Análisis elemental. 4.1.- Análisis elemental cualitativo y cuantitativo. 4.2.- Determinación de pesos moleculares.

5.- Determinación de estructuras mediante métodos químicos. 5.1.- Pruebas de solubilidad. 5.2.- Análisis químico de funciones. 5.3.- Reactividad y síntesis orgánica en determinación de estructuras.

6.- Técnicas instrumentales de determinación de estructuras.

7.- El espectro electromagnético.

Seminario 1. En el que se aportarán y recordarán conocimientos y herramientas, tanto teóricas como numéricas, que son útiles en Determinación Estructural.

Descripción de las actividades prácticas del tema 1: Bases de datos espectroscópicas. Representación y diseño de estructuras. Aplicación del polarímetro a la caracterización de compuestos.

Denominación del tema 2: RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PROTONES.

Contenidos del tema 2:

1.- Introducción.

2.- Fundamento de la RMN e instrumentación. 2.1.- El espectrómetro de RMN.

3.- El espectro de Resonancia Magnética Nuclear de Protones 3.1.- Apantallamiento de núcleos. 3.2.- Protones equivalentes y no equivalentes. 3.3.- Escala δ de desplazamiento químico. 3.4.- Disolventes. 3.5.- Integración de las señales de RMN. 3.6.- Multiplicidad de las señales de RMN. 3.7.- Constantes de acoplamiento. 3.8.- Diagramas de desdoblamiento.

4.- Efectos determinantes del desplazamiento químico de protones. 4.1.- Efectos electrónicos. 4.2.- Anisotropía diamagnética. 4.3.- Efectos estéricos.

5.- Datos de ^1H -RMN de las funciones y compuestos químicos relevantes.

6.- Sistemas de incremento para la estimación de los desplazamientos químico de protones.

7.- Constantes de acoplamiento y estructura molecular. 7.1.- Constantes de acoplamiento vecinales. Ecuación de Karplus. 7.2.- Constantes de acoplamiento geminales. 7.3.- Acoplamientos a larga distancia.

8.- El tiempo en RMN. Protones intercambiables. Intercambio con deuterio.

9.- Espectros de segundo orden. ^1H -RMN de alta resolución.

10.- Desacoplamiento de espines.

Seminario 2. Se estudian detenidamente espectros de Resonancia Magnética Nuclear de Protones (^1H -RMN). El desplazamiento químico, intensidad de las señales, desdoblamiento de señales, constantes de acoplamiento, son algunos datos espectroscópicos que se consideran en el propósito de alcanzar una propuesta estructural lógica.

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		
	Curso académico: 2026-27	Código: P/CL009_FC_D002	

Descripción de las actividades prácticas del tema 2: Espectrómetro de Resonancia magnética nuclear. Registro de espectros del cloroanfenicol. Tratamiento de las FID obtenidas mediante programas.

Denominación del tema 3: RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO

Contenidos del tema 3:

1.- Introducción.

2.- El espectro de Resonancia Magnética Nuclear de Carbono 2.1.- Generalidades. 2.2.- Desplazamientos químicos en ^{13}C . 2.3.- Constantes de acoplamiento.

3.- Utilización de tablas y sistemas de incremento en la estimación de los δ de ^{13}C .

4.- El espectro DEPT de R. M. N. de ^{13}C .

Seminario 6. Se estudian detenidamente espectros de Resonancia Magnética Nuclear de carbono (^{13}C -RMN).

Descripción de las actividades prácticas del tema 3: Espectrómetro de Resonancia magnética nuclear. Registro de espectros de C-13 del cloroanfenicol. Tratamiento de las FID obtenidas para la visualización del espectro de C-13 y el espectro DEPT.

Denominación del tema 4: ESPECTROSCOPÍA UV/VIS.

Contenidos del tema 4:

1.- La radiación electromagnética. Ecuaciones y unidades.

2.- Teoría de la espectroscopia UV-Vis. 2.1.- La absorción luminosa y el espectro. 2.2.- El Espectro UV-Vis. 2.3.- Instrumentación. Esquema de un espectrofotómetro. 2.4. Transiciones electrónicas.

3.- Grupos cromóforos. 3.1.- Definiciones previas. 3.2.- Regiones de absorción de las distintas transiciones electrónicas.

4.- Preparación de la muestra y registro del espectro.

5.- Absorciones características de los compuestos orgánicos. 5.1.- Compuestos que contienen sólo electrones σ . 5.2.- Compuestos que contienen sólo electrones n (no enlazantes). 5.3.- Compuestos que contienen sólo electrones p. 5.4.- Cromóforos etilénicos. 5.4.1.- Polienos conjugados. 5.4.2.- Isomería Z/E. 5.4.3.- Reglas de Woodward. 5.5.- Cromóforo acetilénico. 5.6.- Cromóforos carbonílicos. 5.6.1.- Compuestos a-dicarbonílicos. 5.6.2.- Compuestos carbonílicos α,β -insaturados. 5.6.3.- Reglas de Woodward para compuestos carbonílicos α,β -insaturados. 5.5.4.- β -Dicetonas. 5.7.- Compuestos con enlaces múltiples carbono-nitrógeno. 5.8.- Azocompuestos. 5.9.- Compuestos con enlaces nitrógeno-oxígeno. 5.10.- Compuestos con enlace múltiple C=S. 5.11.- Bencenos y sistemas aromáticos bencénicos. 5.10.1.- Reglas aditivas para derivados del benceno. 5.10.2.- Compuestos aromáticos condensados. 5.12.- Compuestos heteroaromáticos.

Seminario 4. Dedicado al estudio de la espectroscopia Ultravioleta-Visible. Se hace énfasis en

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		 FACULTAD DE CIENCIAS [UEx]
	Curso académico: 2026-27	Código: P/CL009_FC_D002	

la relación entre los máximos de absorción y estructura.

Descripción de las actividades prácticas del tema 4: Espectrofotómetro UV-Visible. Registro de espectros, seguimiento de reacciones y obtención de datos espectroscópicos.

Denominación del tema 5: ESPECTROSCOPÍA IR Y RAMAN.

Contenidos del tema 5:

1.- Introducción.

2.- Fundamento y reglas de selección. 2.1.- Tipos de vibraciones moleculares. 2.2.- Reglas de selección. 2.3.- Tipos de bandas del espectro IR (y Raman). 2.4.- Intensidad de las bandas. 2.5.- Posición de las bandas. Regiones del espectro de IR.

3.- Instrumentación, registro de muestras y aplicaciones de la espectroscopía de IR.

4.- Absorciones características de los grupos funcionales.- 4.1.-Enlaces C-H. Alcanos. 4.2.- hidrocarburos olefínicos. 4.3.- hidrocarburos aromáticos. 4.4.-Hidrocarburos acetilénicos. 4.5.- Alcoholes y fenoles 4.6.- Éteres y compuestos relacionados. 4.7.- Aminas. 4.8.- Sales de amonio. 4.9.- Grupos carbonilo: Cetonas, aldehídos, ácidos carboxílicos, carboxilatos, ésteres y lactonas, haluros de ácido, anhídridos de ácido, amidas

Seminario 5. Se estudia detenidamente el espectro de infrarrojo y la posibilidad de deducir los grupos funcionales presentes en una molécula. Tomando como base el espectro de infrarrojo y el análisis elemental, se proponen estructuras para sustancias sencillas.

Descripción de las actividades prácticas del tema 5: Espectrofotómetro de IR. Técnicas de registro de espectros de IR y obtención de datos espectroscópicos.

Denominación del tema 6: ESPECTROMETRÍA DE MASAS

Contenidos del tema 6:

1.- Introducción.

2.- Instrumentación y registro de espectros.

3.- El espectro de masas, generalidades.

4.- Principales reacciones de fragmentación de los compuestos orgánicos. 4.1.- Fragmentación en a. 4.2.- Fragmentación bencílica y alílica. 4.3.- Reacciones retro Diels-Alder (RDA). 4.4.- Transposición de McLafferty. 4.5.- Reacciones onio.

5.- Fragmentaciones de los grupos funcionales comunes.

6.- Otras técnicas de E. M.

Seminario 6. Se analizan Los datos estructurales que aportan las distintas pautas de fragmentación y las posibilidades de su consideración conjunta con los espectros de absorción.

Descripción de las actividades prácticas del tema 6 Alta resolución y EM. Determinación de fórmulas moleculares.

Denominación del tema 7: ESTRATEGIAS DE DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL MEDIANTE

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		 FACULTAD DE CIENCIAS [UEx]
	Curso académico: 2026-27	Código: P/CL009_FC_D002	

DIVERSAS TÉCNICAS.

Contenidos del tema 7:

1.- Determinación estructural mediante la utilización de diversas técnicas.

Seminario 7. Se proponen supuestos en los que se utilizan conjuntamente todas las técnicas estudiadas.

Denominación del tema 8: TÉCNICAS MULTIDIMENSIONALES EN RMN.

Contenidos del tema 8:

1.- Introducción.

2.- El espectro COSY.

3.- El espectro HETCOR.

4.- El espectro INADEQUATE.

5.-Correlaciones 2D que involucran el efecto n.O.e.

6.- Resonancia Magnética de Imagen.

Seminario 8. Se hace una introducción a las potencialidades de las técnicas de resonancia avanzadas.

Descripción de las actividades prácticas del tema 8: Se visualiza la obtención y registro del espectro HETCOR del cloroanfenicol.

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		
	Curso académico: 2026-27	Código: P/CL009_FC_D002	

5. Aprendizaje a partir de la experimentación Descripción: Método de enseñanza-aprendizaje basado en el método científico en el que el estudiante plantea hipótesis, experimenta, recopila datos, busca información, aplica modelos, contrasta las hipótesis y extrae conclusiones.

6. Aprendizaje cooperativo. Descripción: Método de enseñanza-aprendizaje basado en un enfoque interactivo de organización del trabajo. Se trata de lograr un intercambio efectivo de información entre los estudiantes, los cuales deben estar motivados tanto par lograr su propio aprendizaje como el de los demás.

7. Aprendizaje a través del aula virtual. Descripción: Situación de enseñanza/aprendizaje en la que se usa un ordenador con conexión a la red como sistema de comunicación entre profesor y estudiante e incluso entre los estudiantes entre si y se desarrolla un plan de actividades formativas.

8. Tutorización Descripción: Situación de enseñanza/aprendizaje en la que el profesor de forma individualizada o en pequeños grupos orienta al estudiante en su aprendizaje.

9. Aprendizaje autónomo Descripción: Situación de aprendizaje en la que el estudiante de forma autónoma profundiza en el estudio de una materia para adquirir las competencias.

10. Evaluación Descripción: Situación de aprendizaje/evaluación en la que el alumno realiza alguna prueba que sirve para reforzar su aprendizaje y como herramienta de evaluación.

Resultados de aprendizaje

Conocer técnicas y herramientas usuales para la identificación, caracterización y determinación estructural.

Conocer los fundamentos de las espectroscopias de UV-Visible, IR, EM, ¹H- y ¹³C-RMN, entre otras.

Desarrollo de habilidades útiles en determinación estructural y en el control de procesos de química orgánica, basadas en técnicas espectroscópicas.

Iniciación práctica al manejo del instrumental.

Sistemas de evaluación

El sistema de evaluación utiliza tanto la **evaluación continua** como la **global**. La elección de la modalidad de evaluación global corresponde a los estudiantes, que podrán llevarla a cabo durante el primer cuarto del semestre (o hasta el último día del periodo de ampliación de matrícula si este acaba después de ese periodo), a través de un espacio específico creado para ello en el Campus Virtual. En caso de ausencia de solicitud expresa por parte del estudiante, la modalidad asignada será la de evaluación continua. Los alumnos acogidos a este sistema obtendrán una calificación de la asignatura que será, al menos, la mejor de las dos siguientes

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		
	Curso académico: 2026-27	Código: P/CL009_FC_D002	

opciones (a ó b):

a) Sistema ponderado, en el que las actividades programadas durante el curso pueden suponer hasta el 100% de la calificación de la asignatura, en los apartados:

- Controles (actividad recuperable). Hasta un 80%.
- Intervenciones en clase y resolución de supuestos (actividad no recuperable). Hasta un 10%.
- Actividades de laboratorio, actividades con programas informáticos y determinación de parámetros espectrales, realización y exposición de trabajos (actividades no recuperables). Hasta un 10%.

b) Calificación del examen final.

Cuando el alumno escoja la **evaluación global**, su calificación será la obtenida en el examen final.

En convocatorias extraordinarias, la calificación del alumno será la obtenida en el examen.

Se evaluarán tanto los conocimientos teóricos adquiridos en la asignatura como las habilidades prácticas o capacidades en el análisis estructural. Los exámenes y demás evaluaciones constarán de una serie de cuestiones o preguntas sobre los contenidos que hayan sido explicados en clase, y una serie de problemas. Estos problemas serán frecuentemente ejercicios prácticos de determinación de estructuras. Las calificaciones se otorgarán desde cero a diez puntos, y la contribución de cada cuestión a la calificación final se indicará antes de comenzar el examen.

Bibliografía (básica y complementaria)

Los siguientes libros incluyen introducciones teóricas, tablas y ejemplos al nivel de la asignatura:

- **Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica.** M. Hesse, H. Meier y B. Zeeh. Edit. Síntesis. Madrid.
- **Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos.** E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera y R. Martinez. Editorial Springer.
- **Spectrometric Identification of Organic Compounds.** R. M. Silverstein, G. Clayton y T. C. Morril. Ed: John Wiley & Sons. (En Español Ed. Diana, México).
- **Tablas para la determinación estructural por métodos espectroscópicos.** Pretsch, Clerc, Seibl y Simon. Editorial Springer.
- **Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos.** E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl y W. Simon. Editorial Alhambra.

Un libro general de Q. Orgánica con un buen tratamiento de las espectroscopías:

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		
	Curso académico: 2026-27	Código: P/CL009_FC_D002	

Organic Chemistry. P. Y. Bruice. Prentice Hall ed.

Monografías más especializadas:

- **Infrared Absorption Spectroscopy.** K. Nakanishi. Holden-Day
- **Espectrometría de Masas.** J. Seibl. Ed. Alhambra.
- **Interpretación de los Espectros de Masas.** F. W. McLafferty. Ed Reverté
- **¹³C-NMR Spectroscopy. Methods and Applications.** E. Breit-Maier y W. Voelter. Verlag Chemie, 1974.
- **Elucidación Estructural por RMN.** H. Dudderck, W. Dietrich y G. Tóth.

Textos prácticos clásicos que abordan la caracterización y determinación estructural.

- **Vogels' Textbook of Practical Organic Chemistry,** B.S. Furniss, A. J. Hannaford, P.W.G. Smith and A. R. Tatchell. Ed Longman Scientific & Technical, 5ª ed.
- **Determinación de Estructuras Orgánicas.** Daniel R. Pasto y Carl R. Johnson. Ed. Reverté.

Otros recursos y materiales docentes complementarios

Manual de Laboratorio. Confeccionado por el área de Química Orgánica.

Material en la red de acceso gratuito:

La base SDBS incluye los espectros de miles de sustancias orgánicas:

http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi?lang=eng

Las siguientes páginas de distintas universidades incluyen contenidos interesantes:

(<http://www.chem.sci.ubu.ac.th/inmr/>)

<http://www.nd.edu/~smithgrp/structure/workbook.html>.

http://www3.nd.edu/~smithgrp/structure/pbm_table.html

http://homepages.strath.ac.uk/~bas01125/NMR_Teaching_Material/Teaching%20Links.htm

<http://www.chem.ucla.edu/%7Ewebspectra/>

<http://www.orgchemboulder.com/Spectroscopy/Problems/15.shtml>

Búsquedas recomendadas: NMR educational exercises, NMR educational problems.