Universidad de Navarra

Análisis orgánico (F. Ciencias)

Guía docente 2025-26

PRESENTACIÓN

Breve descripción:

La asignatura da una visión general de los métodos espectroscópicos más utilizados en Química Orgánica. Se pretende que el alumno/a conozca los medios y criterios de trabajo que le permitan identificar o confirmar la estructura de compuestos orgánicos polifuncionales. El curso trata la teoría, la instrumentación y las correlaciones espectro-estructura de las técnicas espectroscópicas mayoritarias.

- **Titulación**: Grado en Química y Doble Grado en Química-Bioquímica
- **Módulo/Materia**: Módulo II: Fundamentos teóricos de la química (Química Orgánica)
- **ECTS**: 6 ECTS (150 h.)
- **Curso, semestre**: 3º - Primer semestre
- **Carácter**: Asignatura obligatoria
- **Profesor responsable**: Dra. Elena Lizarraga
- **Idioma**: Castellano
- **Aula, Horario**: Lunes 11h., Martes 11 h., Jueves 9 h., Viernes 10 h. (Aula 34)

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Competencias)

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

CG2: Pensar de forma integrada y abordar los problemas desde diferentes perspectivas. Tener razonamiento crítico. Aportar soluciones a problemas en el ámbito científico

CG3: Trabajar en equipo, seleccionar y elegir la metodología de trabajo y distribución de funciones. Saber escuchar y hacer uso de la palabra con intervenciones positivas y constructivas

CG4: Fomentar el sentido de responsabilidad, aplicar en la profesión y en la vida cotidiana la ética desde una perspectiva científica. Buscar información, evaluarla, así como analizar, sintetizar, resumir, comunicar, citar y presentar trabajos

CG5: Comunicar de forma escrita y oral sobre temas relacionados con la profesión con un estilo y lenguaje adecuado a la situación y al interlocutor

CG6: Usar correctamente el método de inducción. Ser capaz de generalizar el conocimiento obtenido en una ocasión a otros casos u ocasiones semejantes que puedan presentarse en el futuro

CE1: Analizar y resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados, así como reconocer nuevos problemas y planificar de estrategias para su resolución

CE2: Procesar, computar, evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química

CE6: Interpretar datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio, reconociendo su significación y las teorías que la sustentan

CE11: Analizar los principios de disciplinas diversas tales como la termodinámica, la mecánica cuántica, la espectroscopía y la electroquímica. Conocer sus aplicaciones en Química, su papel en la descripción de estructura y propiedades de átomos y moléculas o su función en técnicas de investigación analítica o estructural

CE12: Conocer los materiales más relevantes, sus propiedades, en función de su composición Química y estructura. Identificar las diversas técnicas de análisis y de determinación estructural

PROGRAMA

1. Introducción. Principios generales de la espectroscopía de absorción. Cromóforos. Grado de insaturación. Conectividad. Sensibilidad. Consideraciones prácticas.

2. Espectroscopía de infrarrojo (IR). Naturaleza de la absorción IR. Rango de absorción y frecuencias características. Cromóforos importantes en IR. Influencia del entorno químico y sustituyentes sobre las frecuencias de absorción. Información estructural y correlaciones empíricas. Identificación de grupos funcionales.

3. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear de protón (^{1}H-RMN). El fenómeno de la resonancia magnética nuclear. Desplazamiento químico y estructura. Correlaciones empíricas. Multiplicidad de las señales. Interacciones spin-spin. Constante de acoplamiento. Espectros de primer orden. Sistemas de spines. Acoplamientos a corta y larga distancia. Espectros de segundo orden.

4. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear de carbono-13 (^{13}C-RMN). Correlaciones desplazamiento-estructura. Técnicas de desacoplamiento. Multiplicidad DEPT. Constantes de acoplamiento ^{13}C-^{1}H.

5. Espectrometría de masas. Procesos de ionización. Iones positivos y negativos. Iones moleculares. Picos isotópicos. Tipos de reacciones de fragmentación. Factores determinantes. Análisis del espectro de masas. Sustancias con sustituyentes de primer orden. Sustancias con sustituyentes de segundo orden. Compuestos aromáticos.

6. Determinación estructural de moléculas orgánicas. Espectros integrados.

Programa práctico: el programa práctico de la asignatura consistirá en sesiones de Seminarios de aplicación en el aula donde se resolverán cuestiones prácticas y ejercicios similares a los que se propondrán en los exámenes.

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Se combinarán las actividades presenciales y las de realización individual por parte del alumno.

A lo largo del semestre se efectuará 1 prueba corta de resolución de casos prácticos y de tipo test de teoría.

A. Actividades Presenciales (en el aula)

1. Clases teóricas, impartidas por el profesor, participativas e interactivas en las que se exponen los conceptos fundamentales de cada tema: **42 horas**.

- *Competencias que se adquieren:* conocimiento de los fundamentos esenciales de la materia y su aplicación práctica a la resolución de problemas comunes

2. Seminarios en los que se realizan problemas y casos prácticos poniendo en práctica los conceptos aprendidos en las clases teóricas: **14 horas**.

- *Competencias que se adquieren:* aplicación de los conocimientos adquiridos

3. Tutorías dentro de las horas establecidas de manera presencial o remota, telefónicamente o por videollamada.

4. Exámenes: **4 horas**

B. Trabajo personal de alumno

1. Realización de problemas propuestos en clase (algunos deberán ser ser entregados): **28 horas.**

- *Competencias que se adquieren:* aplicación de los conocimientos teóricos a la resolución de problemas

2. Estudio personal del alumno en el que estudiará de manera autónoma el material explicado en clase y resolver los problemas propuestos para cada tema: **70 horas**.

- *Competencias que se adquieren:* fijación de los conocimientos para alcanzar los objetivos de la asignatura

EVALUACIÓN

CONVOCATORIA ORDINARIA

En la **convocatoria ordinaria**, la evaluación de los conocimientos y habilidades conseguidas por el alumno se realizará de la siguiente forma:

- **Examen parcial (20%):** con cuestiones teórico-prácticas sobre conocimientos expuestos la fecha
- **Examen final (80%):** constará de una parte teórica cuyo valor es del 30% de la nota del examen y una parte teórico-práctica de resolución de espectros que constituye el 70% restante. Será necesario obtener una nota mínima de 4 sobre 10 en el examen final para poder ponderar la nota.

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

En la **convocatoria extraordinaria** el examen contará el 100% de la nota. Constará de una parte teórica (20%) y otra de resolución de espectros (80%).

Los **alumnos con circunstancias o necesidades especiales** deberán ponerse en contacto con el profesor de la asignatura al principio del curso.

HORARIOS DE ATENCIÓN

Dra Elena Lizarraga Pérez (elizarraga@unav.es)

- Despacho S232. Edificio CIFA. Planta sótano.
- Horario de tutoría: solicitar cita por correo electrónico

BIBLIOGRAFÍA

- Pretsch, E. "Determinación estructural de compuestos orgánicos". Springer, Barcelona, 2005
- Lizarraga, E. "Determinación Estructural. Seminarios". Ulzama Digital, 2005
- Pretsch, E. and Clerc, J. T. "Spectra interpretation of organic compounds". VCH, Weinheim, 1997 Localízalo en la Biblioteca
- Field, L. D., Sternhell, S. and Kalman, J. R. "Organic Structures from Spectra". 2º ed. John Wiley and Sons, New York, 1995 Localízalo en la Biblioteca
- Silverstein, R. M. "Spectrometric Identification of Organic Compounds". John Wiley and Sons, New York, 1998 Localízalo en la Biblioteca