



**Máster en Ciencia y Tecnología Químicas**  
**Facultad de Ciencias Químicas**  
**Universidad Complutense de Madrid**

**Guía docente**

**CARACTERIZACIÓN  
ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS  
ORGÁNICOS**

Código: 605219

**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**  
**UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID**  
**CURSO 2024-2025**

**Nombre de la asignatura (Subject name)**

**Caracterización Estructural de Compuestos Orgánicos**  
(*Structural Characterization of Organic Compounds*)

**Duración (Duration)**

Primer semestre (*First semester*)

**Créditos ECTS /Carácter (ECTS credits/Type)**

6 ECTS / Optativa (*6 ECTS / Optional*)

**Contenidos básicos (Subject knowledge)**

**Espectroscopia de ultravioleta-visible, infrarrojo y Raman.** Fundamentos y aplicaciones. Métodos avanzados. Correlación espectro-grupo funcional.

**Espectrometría de masas.** Fundamentos y aplicaciones. Métodos modernos de ionización. Correlación espectro - relación masa/carga.

**Espectroscopía de resonancia magnética nuclear.** Fundamentos y aplicaciones. Experimentos avanzados de correlación homo y heteronuclear. Correlación espectro-estructura.

*Ultraviolet-visible, infrared and Raman spectroscopy. Fundamentals and applications. Advanced methods. Correlation between spectra and functional groups present.*

*Mass spectrometry. Fundamentals and applications. Modern ionization methods. Correlation between spectra and the mass-to-charge ratio of the species analyzed.*

*Nuclear magnetic resonance spectroscopy. Fundamentals and applications. Advanced homonuclear and heteronuclear correlation experiments. Correlation between spectra and molecular structure.*

**Profesores y ubicación (Lecturer contact information)**

<b>Profesor (Lecturer)</b>	Laura Castañar Acedo
<b>Departamento (Department)</b>	Química orgánica
<b>Despacho (Office)</b>	QB-348B
<b>Correo electrónico (E-mail)</b>	lcastana@ucm.es

## Objetivos y competencias (*Objectives and skills*)

### OBJETIVOS

1. Proporcionar una base sólida y equilibrada de conocimientos que no se han adquirido en el Grado en Química. Si los estudiantes proceden de otros estudios de grado la formación de acceso al máster les permitirá desarrollar las destrezas y habilidades necesarias para proseguir su formación científica e investigadora.
2. Desarrollar capacidades para aplicar los conocimientos, tanto teóricos como prácticos, a la resolución de problemas en entornos nuevos o dentro de contextos poco conocidos tanto químicos como multidisciplinares.
4. Desarrollar capacidades que le permitan comunicar sus conclusiones, conocimientos y razonamientos tanto a audiencias especializadas como no especializadas de una forma clara y sin ambigüedades.
5. Desarrollar herramientas de aprendizaje, mediante la educación en ciencia y tecnología químicas, que permitan a los estudiantes continuar su formación de un modo autónomo.
6. Generar en el estudiante el gusto por la investigación científica.

### OBJECTIVES

1. *To provide solid and balanced foundation that was not acquired in the Degree in Chemistry. If students come from other degree studies, the master's access training will allow them to develop the skills and abilities necessary to continue their scientific and research training.*
2. *To develop the necessary skills to apply the gained knowledge, both theoretical and practical, to solve problems in new environments, both chemical and multidisciplinary.*
4. *To develop skills that allow students to communicate their conclusions, knowledge and reasoning to both specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous manner.*
5. *To develop learning tools, through education in chemical science and technology, that allow students to continue their training autonomously.*
6. *Generate in the student an interest for scientific research.*

### COMPETENCIAS GENERALES

- CG1.- Integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de problemas químicos.
- CG2.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para resolver problemas de interés científico y social en el contexto de la Química.
- CG3.- Interpretar y analizar datos complejos en el entorno de la química y la tecnología química.
- CG4.- Reconocer y evaluar la calidad de los resultados teóricos y prácticos utilizando las herramientas adecuadas.
- CG7.- Correlacionar la composición con la estructura y propiedades de las sustancias.
- CG8.- Aplicar las técnicas de caracterización adecuadas al sistema objeto de estudio.
- CG9.- Reconocer la importancia y utilidad de los compuestos químicos en diversos campos.
- CG10.- Describir los procesos en los que se basan los diversos usos de los compuestos químicos.

### **GENERAL SKILLS**

- GS1.- To combine all knowledge to deal with the complexity of chemical problems.*
- GS2.- To develop theoretical-practical skills to solve problems of scientific and social interest from a chemical perspective.*
- GS3.- To interpret and analyse complex data from chemistry and chemical technology.*
- GS4.- To recognize and evaluate the quality of theoretical and practical results by using the appropriate tools.*
- GS7.- To establish the relationship between materials composition and their structure and properties.*
- GS8.- To apply the adequate characterization techniques to the system under study.*
- GS9.- To recognise the importance and utility of chemical compounds in different areas.*
- GS10.- To describe the processes in which the uses of chemical compounds are based.*

### **COMPETENCIAS ESPECÍFICAS**

- CE1.-** Desarrollar habilidades teórico-prácticas en técnicas instrumentales.
- CE2.-** Planificar la experimentación de acuerdo a modelos teóricos o experimentales establecidos.
- CE4.-** Desarrollar habilidades teórico-prácticas para la caracterización y análisis de diferentes sustancias químicas y materiales.
- CE6.-** Aplicar conocimientos tanto teóricos como prácticos a la resolución de problemas en entornos poco conocidos.

### **SPECIFIC SKILLS**

- SS1.- To develop theoretical-practical skills in instrumental techniques.*
- SS2.- To design the experimental work according to established theoretical or experimental models.*
- SS4.- To develop theoretical-practical skills for the and analysis of different chemical substances and materials.*
- SS6.- To apply both theoretical and practical knowledge to solve problems in unfamiliar environments.*

### **COMPETENCIAS TRANSVERSALES**

- CT1.-** Elaborar, escribir y defender informes de carácter científico y técnico.
- CT2.-** Trabajar en equipo.
- CT4.-** Demostrar capacidad de autoaprendizaje.
- CT6.-** Comunicar resultados de forma oral/escrita.
- CT7.-** Trabajar con seguridad en laboratorios de investigación.
- CT8.-** Demostrar motivación por la investigación científica.

### **TRANSFERABLE SKILLS**

- TS1.- To elaborate, write and defend scientific and technical reports.*
- TS2.- Teamwork.*
- TS4.- To demonstrate the ability to learn independently.*
- TS6.- To communicate results orally or in writing.*
- TS7.- To work safely in research laboratories.*
- TS8.- To show motivation for scientific research.*

## Contextualización en el Máster (*Contextualization in the Master*)

Esta asignatura pertenece al Módulo 2 de especialización que consta de cuatro itinerarios diferentes basados en cuatro materias diferentes. En concreto, esta asignatura forma parte de la Materia 2.3 “Instrumentación y Análisis” que consta de cuatro asignaturas diferentes.

*This course belongs to Module 2, the specialization module, consisting of four different itineraries based on four different areas of interest. Specifically, this course is part of Subject 2.3 “Instrumentation and Analysis”, which consists of four different courses.*

## Programa de la asignatura (*Course structure*)

**Espectroscopia de ultravioleta-visible, infrarrojo y Raman.** Fundamentos y aplicaciones. Métodos avanzados. Correlación espectro-grupo funcional.

**Espectrometría de masas.** Fundamentos y aplicaciones. Sistemas de ionización suave: ionización química, ESI y MALDI. Correlación espectro - relación masa/carga. Información a extraer del pico molecular. Satélites isotópicos. Masa nominal y exacta. Determinación de la fórmula molecular.

**Espectroscopía de resonancia magnética nuclear.** Fundamentos y aplicaciones. Experimentos avanzados de correlación homo y heteronuclear. Aspectos modernos de la RMN. Correlación espectro-estructura. Determinación y caracterización estructural de compuestos orgánicos

*Ultraviolet-visible, infrared and Raman spectroscopy. Fundamentals and applications. Advanced methods. Correlation between spectra and functional groups present.*

*Mass spectrometry. Fundamentals and applications. Soft ionization systems: chemical ionization, ESI and MALDI. Correlation between spectra and the mass-to-charge ratio of the species analysed. Information to be extracted from the molecular peak. Isotopic satellites. Nominal and exact mass. Determination of the molecular formula.*

*Nuclear magnetic resonance spectroscopy. Fundamentals and applications. Advanced homonuclear and heteronuclear correlation experiments. Cutting-edge NMR methods. Correlation between spectra and molecular structure. Structural characterization and determination of organic compounds.*

## Metodología y programación docente (*Teaching programming*)

### METODOLOGIA

Las clases de teoría estarán dirigidas a explicar al alumno una serie de conceptos generales en los que deberá profundizar con ayuda de la bibliografía adecuada. Las clases de seminarios y problemas estarán encaminadas a enseñar al alumno las estrategias necesarias para la resolución de ejercicios y ponerlas en práctica tanto mediante ejercicios sencillos como en la realización de problemas de complejidad creciente. Las tutorías servirán para resolución de dudas, así como reforzar conceptos previamente introducidos en las clases teóricas y los seminarios.

## METHODOLOGY

*The lectures will focus on explaining to the student a series of general concepts in which they must delve deeper with the help of appropriate bibliography. The seminars will focus on teaching the student the necessary strategies for solving exercises and putting them into practice both through simple exercises and by carrying out exercises of increasing complexity. The tutorials will serve to solve doubts, as well as reinforce concepts previously introduced in lectures and seminars.*

## PROGRAMACIÓN DOCENTE

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos (horas)
Clases teóricas	24	36	2,4
Seminarios	24	36	2,4
Tutorías/Trabajos dirigidos	4	5	0,4
Preparación de trabajos y exámenes	4	17	0,8
<b>Total</b>	<b>56</b>	<b>94</b>	<b>6</b>

### Evaluación del aprendizaje (*Evaluation*)

La evaluación del correcto aprendizaje se realizará mediante la resolución tanto de cuestiones teóricas como de ejercicios y/o problemas en diversas actividades. Para ello los alumnos deben realizar una serie de problemas facilitados por el profesor para adquirir la formación básica en las distintas técnicas espectroscópicas y espectrométricas. La realización de dichos ejercicios junto con la exposición oral de problemas seleccionados representará el 20% del global de la nota. El trabajo personal y actividades dirigidas computarán un 15% de la calificación final. Se evaluarán mediante la realización de pruebas objetivas (resolución de tests o ejercicios breves) en el aula u/o online. Por otro lado, el alumno deberá realizar un examen final que supondrá el 60% del valor final de la nota, siendo necesaria una calificación mínima de 5 para que compute para la calificación final. Finalmente, la asistencia a clase (5%) completará el cómputo final de la nota.

*The evaluation will be done by solving both theoretical questions and exercises and/or problems in various activities. To do this, students must complete a series of problems provided by the lecturer to acquire basic training in the different spectroscopic and spectrometric techniques. The completion of these exercises together with the oral presentation of selected problems will represent 20% of the overall grade. Personal work and guided activities will count for 15% of the final grade. They will be evaluated by carrying out objective tests (solving tests or short exercises) in the classroom or/online. On the other hand, the student must take a final exam that will account for 60% of the final value of the grade, with a minimum grade of 5 required to count for the final grade. Finally, class attendance (5%) will complete the final calculation of the grade.*

### Idioma en que se imparte (*Course language*)

Las clases se impartirán en español, aunque la mayor parte de la bibliografía recomendada se encuentra en inglés.

*Lectures and seminars will be taught in Spanish, although most of the recommended bibliography is in English.*

### Bibliografía y recursos complementarios (*Bibliography*)

- **“Mass Spectrometry”**, J. H. Gross, Springer, 2017, ISBN: 978-3-319-54397-0.
- **“Introduction to Mass Spectrometry”**, J. T. Watson, O. D. Sparkman, Wiley, 2007, ISBN: 978-0-470-51634-8.
- **“Spectrometric Identification of Organic Compounds”**, R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, 7ª edición, 2005, Wiley, ISBN: 0-471-39362-2.
- **“High-resolution NMR techniques in organic chemistry”**, T. D. W. Claridge, Elsevier Science, 2016.
- **“Problems in organic structure determination: a practical approach to NMR spectroscopy”**, R. G. Linington, P. G. Williams, J. B. MacMillan, Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2016.
- **“NMR Data Interpretation Explained: Understanding 1D and 2D NMR Spectra of Organic Compounds and Natural Products”**, N. E. Jacobsen, Wiley 2016, ISBN: 978-1-118-37022-3.
- **“Guía Práctica para la interpretación de espectros de RMN. Ejercicios para la determinación estructural de pequeñas moléculas orgánicas”** A. Randazzo, LOGHIA 2018, ISBN: 978-88-95122-44-1.
- **“Structural identification of Organic Compounds with Spectroscopic Techniques”**, Y-C. Ning, Wiley, 2005, ISBN: 3-527-31240-4.
- **“Métodos espectroscópicos en Química Orgánica”**, M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh, Síntesis, 2005, ISBN: 84-7738-522-X.
- **“Determinación estructural de compuestos orgánicos”**, E. Prestsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera, R. Martínez, Elsevier-Masson, 2001, ISBN: 84-07-00526-6
- **“Organic Structures from Spectra”**, L. D. Field, S. Sternhell, J. R. Kalman, 5ª edición, 2013, Wiley, ISBN: 9781118325490.
- **“200 Problemas de determinación Estructural de Compuestos Orgánicos”**, G. Blay, J.R. Pedro. Visión Libros, 2010, ISBN:978-84-9983-993-6.