



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

Guía docente
Escenarios 1, 2 y 3:

CARACTERIZACIÓN
ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS
ORGÁNICOS

Código: 605219

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2021-2022

ESCENARIO 1. PRESENCIAL

Nombre de la asignatura (*Subject name*)

Caracterización Estructural de Compuestos Orgánicos

Structural Characterization of Organic Compounds

Duración

Primer semestre

Créditos ECTS /Carácter

6 ECTS / OPTATIVA

Contenidos básicos (*Subject knowledge*)

Espectroscopias UV/Vis, IR y Raman: Correlación espectro-estructura, Métodos avanzados.

Espectrometría de masas: fundamentos, aplicaciones. Aspectos modernos de la em: nuevos métodos de ionización y aplicaciones a moléculas de elevado peso molecular.

Resonancia magnética nuclear: fundamentos y aplicaciones. Espectroscopía de correlación homo y heteronuclear.

UV/Vis, IR, Raman spectroscopy: Spectrum-structure correlation. Advanced methodologies.

Mass Spectrometry: the concept of mass spectrometry, applications. Modern aspects of MS. Soft ionization methods and applications to high molecular mass molecules.

Nuclear magnetic resonance. Principles and applications. Homo- and heterocorrelated spectra.

Profesores y ubicación

Profesor	JOSÉ M. SANTOS BARAHONA
Departamento	QUÍMICA ORGÁNICA
Despacho	QB-348A
Correo electrónico	jsantosb@ucm.es

Objetivos y competencias (Abilities 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.
3. 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.
4. Desarrollar herramientas de aprendizaje, mediante la educación en ciencia y tecnología químicas, que permitan a los estudiantes continuar su formación de un modo autónomo.
5. Generar en el estudiante el gusto por la investigación científica.

OBJECTIVES

- 1.- *To give the proper basis of knowledge on different strategies towards the structural characterization of organic molecules.*
- 2.- *To develop theoretical and practical abilities to solve relevant scientific problems in structural characterization of target molecules. To critically analyze, evaluate, and generate new and complex ideas in new field of chemistry and related areas.*
- 3.- *To develop abilities that allow the students to communicate their conclusions and knowledge to both specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous manner.*
- 4.- *To develop learning tools that allow the students their formation in an autonomous manner.*
- 5.- *To induce in the student the enjoyment for research activities.*

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 integrate the knowledge on structural characterization of organic compounds and to face up the complexity of questions in the area.*
- GS2.- *To develop abilities on theory and practice in order to solve scientific and social questions of interest in structural characterization of organic molecules.*
- GS3.- *To analyse complex data contributing for the structural characterization of organic compounds.*
- GS4.- *To recognize and evaluate the quality of the results by using the appropriate tools.*
- GS7.- *To establish the relationship between materials composition and their structure and properties.*
- GS8.- *To apply the adequate techniques and to distinguish the information given for each of them.*
- GS9.- *The student must recognize the importance and utility of chemical compounds in different areas.*
- GS10.- *To describe the processes in which some uses of the 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 and practical abilities in characterization techniques.*
- SS2.- *To design the research according to the compound to be characterized.*
- SS4.- *To develop theoretical and practical abilities for the characterization organic compounds.*
- SS6.- *To apply the knowledge in the structural characterization of organic compounds to solve chemical problems in different areas.*

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.

GENERIC COMPETENCES

GC1.- To elaborate, write and defend scientific and technical reports.

GC2.- To work in multidisciplinary team.

GC4.- To demonstrate the ability to learn independently.

GC6.- To communicate results orally or in writing.

GC7.- To work safely in research laboratories.

GC8.- To show motivation for scientific research.

Contextualización en el Máster

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.

Programa de la asignatura

Espectroscopia UV-Vis: Correlación desplazamiento-estructura.

Espectroscopias IR y Raman: Correlación desplazamiento-estructura.

Espectrometría de Masas: Ionización y picos moleculares. Información a extraer del pico molecular. Satélites isotópicos. Masa nominal y exacta. Determinación de la fórmula molecular. Sistemas de ionización suave: ionización química, ESI y MALDI.

Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear: Correlación desplazamiento-estructura. Determinación del esqueleto hidrocarbonado. Correlaciones homo y heteronucleares. Aspectos modernos de la RMN.

Metodología y programación docente

Las clases de teoría estarán dirigidas a explicar al alumno una serie de conceptos generales que deberá profundizar con ayuda de la bibliografía adecuada. Las clases de seminarios y problemas estarán encaminadas a que el alumno pueda despejar sus dudas tanto mediante ejercicios sencillos como en la realización de problemas de complejidad creciente. Las tutorías servirán para desarrollar por parte de los alumnos ejercicios y trabajos conjuntos, a la exposición de sus resultados, comentarios de éstos y resolución de dudas.

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	6	0,4
Preparación de trabajos y exámenes	3	17	0,8
Total	55	95	6

Evaluación del aprendizaje

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 20% 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 55% del valor final de la nota. (Dicho examen deberá ser aprobado para acceder a la calificación final). Finalmente, la asistencia a clase (5%) completará el cómputo final de la nota.

Idioma o idiomas en que se imparte

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

Bibliografía y recursos complementarios

Además del material que por parte del profesor se pondrá a disposición del alumno, se recomiendan los siguientes libros:

“**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

“**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

“**Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy**”, H. Friebolin, Wiley, 2011, ISBN: 978-3-527-32782-9

“**Structural identification of Organic Compounds with Spectroscopic Techniques**”, Y-C. Ning, Wiley, 2005, ISBN: 3-527-31240-4

“**A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy**”, R. S. Macomber, Wiley, 1998, ISBN: 0-471-15736-8

“**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

“**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

“**200 Problemas de determinación Estructural de Compuestos Orgánicos**”, G. Blay, J.R. Pedro. Visión Libros, 2010, ISBN:978-84-9983-993-6

ESCENARIO 2. SEMIPRESENCIAL

Metodología

- **Clases de teoría y seminarios** impartidos por el profesor en el régimen habitual, como en el Escenario 1, y con el mismo contenido. Atendiendo al principio de *máxima presencialidad* aprobado por el Rectorado de la UCM, la sesión será seguida presencialmente por los alumnos en el aula, hasta aforo completo considerando distancia social. Los alumnos ubicados en aulas provistas de cámaras, y que no quepan en el aula, seguirán la sesión virtualmente, bien desde su domicilio o en las zonas de uso público habilitadas por la Facultad para este fin, que estarán debidamente publicitados en el CV. Para las aulas que no tienen cámara, se establecerá un turno rotatorio de alumnos presenciales en el aula, atendiendo a la numeración del DNI. Este procedimiento podrá ser modificado por el profesor a lo largo del curso, según considere oportuno, para ir ajustando el aforo del aula con los estudiantes asistentes a su clase.
 - El material docente utilizado será las presentaciones de clase habilitadas en el Campus Virtual UCM empleadas también en el Escenario 1, así como vídeos relacionados con la materia y otros tipos de materiales que los profesores de la asignatura consideran de relevancia e interés. Todo el material estará con antelación a disposición de los estudiantes a través del Campus Virtual para su utilización.
 - Los medios telemáticos utilizados para que los alumnos sin presencialidad en el aula sigan virtualmente las sesiones serán las plataformas: Google Meet, Microsoft Teams o Zoom. El profesor mantendrá abierta una sesión de este tipo para mantener una relación directa y fluida con los estudiantes que asisten virtualmente, pudiendo así proyectarse simultáneamente la presentación .ppt y seguir las tradicionales explicaciones que se den en la pizarra.
- **Tutorías Individuales**
Se realizarán por vídeo conferencia y/o correo electrónico.
- **Seguimiento del alumnado**
En la parte de docencia que se realiza de forma presencial se seguirán las mismas técnicas empleadas de forma tradicional.
En la parte de docencia virtual el seguimiento se realizará por diversas técnicas, según considere el profesor: mediante la herramienta de registro de actividades de cada sesión (Microsoft Teams), el nombre de los asistentes (Google Meet), hoja de firmas habilitada en el CV a modo de cuestionario, análisis de descargas efectuadas por los alumnos en el CV, etc.

Evaluación del aprendizaje

Se realizarán exámenes presenciales. Se seguirá el procedimiento de evaluación descrito en el procedimiento del Escenario 1.

ESCENARIO 3. TOTALMENTE VIRTUAL

Metodología

- **Clases de teoría y seminario** que serán impartidas de forma combinada en sesiones: (a) síncronas, en el horario oficial establecido y (b) asíncronas.
 - El material docente utilizado será las presentaciones de clase habilitadas en el Campus Virtual UCM empleadas también en los Escenarios 1 y 2, presentaciones PowerPoint acompañadas, según proceda, de grabaciones de voz, así como vídeos relacionados con la materia y/u otros tipos de materiales que los profesores de la asignatura consideren de relevancia e interés. Como en los Escenarios anteriores, todo el material estará a disposición de los estudiantes a través del Campus Virtual para su utilización.
 - Los medios telemáticos utilizados serán las plataformas ya mencionadas en el Escenario 2:
 - Google Meet, Microsoft Teams o Zoom.
- **Las tutorías individuales** se realizarán como en el Escenario 2.
- **Seguimiento del alumnado**
Se realizará igual que lo descrito en el Escenario 2 para la docencia virtual.

Evaluación del aprendizaje

Se realizarán exámenes o pruebas virtuales según los criterios de evaluación descritos en el procedimiento del Escenario 1.

DESCRIPCIÓN DEL PROTOCOLO DE EVALUACIÓN

- **Identificación de estudiantes:**
En los minutos anteriores al inicio del examen, los alumnos deberán entregar un documento de compromiso escrito a mano y digitalizado en formato PDF, aceptando las normas para la realización de la prueba. El texto del documento, elaborado por el Departamento, estará disponible en el espacio de la asignatura del Campus Virtual. En dicho documento se deberá hacer constar: nombre y apellidos, firma, lugar y copia del DNI. La identificación de los alumnos que realicen el examen se llevará a cabo a través de: (i) entrada al Campus Virtual para poder visualizar los enunciados del examen, (ii) imagen de vídeo a través de Google Meet o Microsoft Teams (desde la cámara del ordenador o del móvil), (iii) documento de compromiso, y (iv) posible comprobación telemática a lo largo del examen por parte del profesor.
- **Tipo de examen:**
El examen se diseñará en el Campus Virtual (Moodle) a través de la herramienta de Tareas. Consistirá en la realización de una parte teórica sin bibliografía ni material adicional y otra parte totalmente práctica donde el alumno podrá utilizar el material

específico permitido. El profesor informará debidamente del procedimiento concreto a seguir antes de la prueba.

Seguimiento de estudiantes durante la prueba:

Durante la realización de la prueba, los alumnos deberán tener conectada una cámara (del ordenador o del móvil) que haga posible la comprobación por parte del profesor del cumplimiento del compromiso firmado por el alumno para realizar el examen de forma individual y con los medios indicados.

- **Revisión de exámenes:**

Los estudiantes que deseen revisión se pondrán en contacto con los profesores de su grupo mediante correo electrónico y se establecerá el horario de revisión individual mediante Microsoft Teams/Google Meet. El estudiante conservará copia de los ficheros PDF enviados como respuesta del examen para facilitar la revisión. Por otra parte, el profesor podrá requerir del alumno la revisión y discusión interactiva de su examen dentro del plazo que se establezca para la revisión de los mismos que se notificará en el CV.

- **Mecanismo empleado para la documentación/grabación de las pruebas de evaluación para su posterior visualización y evidencia:**

El profesor conservará los ficheros (en el formato electrónico que se especifique) del ejercicio de examen enviados por el estudiante, con las calificaciones parciales que estime oportunas. Además, si así se considera, se podrá proceder a la grabación de la sesión del examen, con las limitaciones establecidas por la UCM, para posterior revisión si fuera necesario. Dicha grabación, de efectuarse, se almacenará con las medidas de seguridad necesarias en equipos de UCM y será eliminada pasado el tiempo de revisión.