



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 2022-2023

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, 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