



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

**Guía docente:**  
**CARACTERIZACIÓN**  
**ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS**  
**ORGÁNICOS**

Código: 605219

Curso 2011-2012

**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)**

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.

*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**

|                           |                          |
|---------------------------|--------------------------|
| <b>Profesor</b>           | ROBERTO MARTÍNEZ ALVAREZ |
| <b>Departamento</b>       | QUÍMICA ORGÁNICA         |
| <b>Correo electrónico</b> | rma@quim.ucm.es          |

**Objetivos y competencias (Abilities and Skills)**

**OBJETIVOS**

1.- Proporcionar una base sólida y equilibrada de conocimientos sobre estrategias para la caracterización estructural de compuestos orgánicos.

- 2.- Desarrollar en el estudiante capacidades que le permitan aplicar sus conocimientos en entornos nuevos o dentro de contextos poco conocidos tanto químicos como multidisciplinarios.
- 3.- Desarrollar herramientas de aprendizaje que permitan a los estudiantes continuar su formación de un modo autodirigido o autónomo.
- 4.- 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 learning tools that allow the students their formation in an autonomous manner.*
- 4.- *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 caracterización estructural.
- 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.

### **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 several field.*

### **COMPETENCIAS ESPECÍFICAS**

CE1.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas en técnicas de caracterización.

CE2.- Planificar la experimentación de acuerdo a modelos teóricos o experimentales establecidos.

CE4.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para la caracterización de diferentes sustancias químicas.

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 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.*

This course is dedicated to improve the knowledge of chemistry graduate students in order to facilitate them a professional and/or scientific career and the further chemistry advanced courses.

### 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

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. Aplicaciones.

Picos multicarga y deconvolución. Secuenciación de péptidos y proteínas.

Espectroscopía 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              |
| <b>Total</b>                       | <b>55</b>          | <b>95</b>                | <b>6</b>         |

## Evaluación del aprendizaje

La evaluación del correcto aprendizaje se realizará mediante la resolución tanto individual como por grupos de toda una serie de ejercicios y problemas. Los alumnos entregarán los problemas resueltos al profesor y harán exposición pública de sus resultados más relevantes. Dicha calificación representará el 50% del global de la nota. Por otro lado el alumno deberá realizar un examen final que supondrá el 40% del valor final de la nota. El trabajo personal y actividades dirigidas (5%) y la asistencia a clase (5%) completarán 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 las siguientes obras:

“**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

“**Mass Spectrometry**”, J. H. Gross, Springer, 2004, ISBN: 3-540-40739-1

“**Introduction to Mass Spectrometry**”, J. T. Watson, O. D. Sparkman, Wiley, 2007, ISBN: 978-0-470-51634-8

“**Organic Structures from Spectra, L. D. Field**”, S. Sternhell, J. R. Kalman, 4ª edición, 2008, Wiley, ISBN: 978-0-470-31926-0

“**Spectrometric Identification of Organic Compounds**”, R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, 2005, Wiley, ISBN: 0-471-39362-2

“**Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy**”, H. Friebolin, Wiley, 2005, ISBN: 3-527-31233-1

“**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