Guía docente de la asignatura

Espectroscopia Avanzada (M43/56/2/1)

Fecha de aprobación por la Comisión Académica: 04/07/2025

Máster	Máster Universitario en Ciencias y Tecnologías Químicas, Khemia
MÓDULO	Avances en Química
RAMA	Ciencias
CENTRO RESPONSABLE DEL TÍTULO	Escuela Internacional de Posgrado

Semestre	Primero	**Créditos**	3	**Tipo**	Optativa	**Tipo de enseñanza**	Presencial

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

Se recomiendan conocimientos fundamentales de Física, Mecánica Cuántica y Estructura Molecular, así como un conocimiento previo de aspectos fundamentales de la Espectroscopía Molecular.

En el caso de utilizar herramientas de IA para el desarrollo de la asignatura, el estudiante debe adoptar un uso ético y responsable de las mismas. Se deben seguir las recomendaciones contenidas en el documento de "Recomendaciones para el uso de la inteligencia artificial en la UGR" publicado en esta ubicación: https://ceprud.ugr.es/formacion-tic/inteligencia-artificial/recomendaciones-ia#contenidoo

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Máster)

Medida y procesamiento de las señales espectroscópicas. Dispersión de luz y sus aplicaciones. Espectroscopia infrarroja de transformada de Fourier (FT-IR). Espectroscopias UV-visible y de Luminiscencia. Resonancia magnética nuclear (RMN).

COMPETENCIAS

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 32A18CBB245FA11946ED157DC4D2CD56
05/05/2026 - 11:24
Pág. 1 de 7

COMPETENCIAS BÁSICAS

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE01 - Poseer y comprender conocimientos químicos avanzados, tanto a nivel teórico como de su aplicación práctica.
- CE02 - Aplicar conocimientos teórico-prácticos a la resolución de problemas científico-técnicos relacionados con las ciencias y tecnologías químicas.
- CE03 - Comprender, analizar y solucionar problemas avanzados relacionados con la Química mediante el uso de las herramientas y metodologías aprendidas.
- CE12 - Aplicar metodologías para la caracterización y análisis de productos químicos.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT06 - Trabajo en equipo

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 32A18CBB245FA11946ED157DC4D2CD56
05/05/2026 - 11:24
Pág. 2 de 7

modo claro y sin ambigüedades.
- CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE01 - Poseer y comprender conocimientos químicos avanzados, tanto a nivel teórico como de su aplicación práctica.
- CE02 - Aplicar conocimientos teórico-prácticos a la resolución de problemas científico-técnicos relacionados con las ciencias y tecnologías químicas.
- CE03 - Comprender, analizar y solucionar problemas avanzados relacionados con la Química mediante el uso de las herramientas y metodologías aprendidas.
- CE12 - Aplicar metodologías para la caracterización y análisis de productos químicos.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT06 - Trabajo en equipo

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Tras cursar esta asignatura, el estudiante sabrá/comprenderá:

- Las características espectrales básicas, tales como anchura de línea espectral y resolución, relación señal/ruido y los métodos para su optimización.
- Diferenciar entre los diferentes tipos de dispersión de la REM.
- Los fundamentos avanzados de la transformada de Fourier y su aplicación en técnicas espectroscópicas como la espectrometría infrarroja.
- Los fundamentos teóricos de la Resonancia Magnética Nuclear (RMN) a través de las descripciones mecano-clásica, no relativista, y mecano-cuántica.
- La instrumentación de los modernos espectrómetros de RMN, sus características y requerimientos experimentales.
- Las diferentes etapas de un experimento RMN: preparación de las muestras, edición de parámetros espectrales, selección del programa de pulsos, adquisición de datos, apodización, transformación rápida de Fourier (FFT), corrección de fase y línea base, etc.

A su vez será capaz de:

- Comprender cualquier parámetro característico de una r. e.
- Predecir los resultados de la interacción entre la r. e. y la materia.
- Aplicar métodos de optimización de las características espectrales de las bandas de cualquier tipo de espectro, para mejorar la sensibilidad (relación señal/ruido), la resolución (anchura de línea espectral), etc.
- Aplicar correctamente cualquiera de las ecuaciones derivadas de los fundamentos de la RMN.
- Describir los componentes fundamentales y su interrelación en un moderno espectrómetro RMN.
- Procesar de forma completa la atenuación libre de la inducción (FID) como señal en el dominio del tiempo de un experimento sencillo para obtener el espectro monodimensional correcto.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 05/05/2026 - 11:24
Código seguro de verificación (CSV): 32A18CBB245FA11946ED157DC4D2CD56 Pág. 3 de 7

- Analizar experimentos bidimensionales COSY, NOESY, TOCSY, etc.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

TEÓRICO

I. Introducción a la Espectroscopía.

- Concepto de espectroscopía.
- La radiación electromagnética. Regiones del espectro electromagnético.
- Modelo ondulatorio y modelo corpuscular de la radiación electromagnética.
- Interacción de la r.e. con la materia. Absorción, Emisión y Dispersión.
- Características espectrales. Anchura de línea espectral y resolución, relación señal/ruido.

II. Dispersión de la radiación electromagnética.

- Dispersión Rayleigh
- Dispersión Raman
- Dispersión estática y dinámica
- Dispersión de ángulo pequeño
- Aplicaciones

III. Espectroscopía infrarroja (IR).

- Introducción y regiones del espectro infrarrojo.
- Rotaciones y vibraciones moleculares.
- Modelos clásico y cuántico de las vibraciones moleculares.
- Espectrómetros FTIR (Fourier Transform InfraRed).
- Aplicaciones generales. Aplicaciones a Proteínas y ADN.

IV. Espectroscopía UV-Visible.

- Fundamentos de la espectroscopia electrónica.
- Tipos de transiciones electrónicas.
- Grupos cromóforos de interés.
- Dispersión óptica rotatoria y dicroísmo circular
- Aplicaciones generales y aplicaciones en macromoléculas biológicas.

V. Espectroscopía de emisión molecular.

- Mecanismos de relajación
- Fluorescencia, Fosforescencia y Quimioluminiscencia.
- Anisotropía de fluorescencia
- Tiempos de vida de la fluorescencia. Fluorescencia resuelta en el tiempo
- Grupos fluoróforos de interés
- Photobleaching, blinking y quenching.
- Fluorescencia de transferencia de energía por resonancia (Fluorescence Resonance Energy Transfer (FRET)).

VI. Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de alta resolución.

- El fenómeno de la RMN.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 05/05/2026 - 11:24
Código seguro de verificación (CSV): 32A18CBB245FA11946ED157DC4D2CD56 Pág. 4 de 7

- El experimento RMN de Transformada de Fourier.
- El espectrómetro de RMN de alta resolución. Características instrumentales.
- Procesamiento de espectros de RMN.
- El desplazamiento químico.
- Acoplamientos de espines.
- Procesos de relajación. El Efecto Nuclear Overhauser.
- Espectros monodimensionales de 1H y 13C.
- RMN bidimensional. Experimentos de correlación homonuclear y heteronuclear.

PRÁCTICO

Seminarios/Talleres:

- Aplicación de los conceptos desarrollados en las clases de teoría a resolución de ejercicios con sistemas sencillos, así como demostración y justificación de alguno de aquellos conceptos.
- Planteamiento y respuestas razonadas a cuestiones conceptuales relacionadas con los contenidos de las clases de teoría.
- Resolución de problemas numéricos o de casos prácticos.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- Requena, A.; Zúñiga, J. Espectroscopia; Pearson, Prentice Hall: Madrid, 2004.
- Levine, Ira N. Espectroscopia Molecular; AC, D.L.: Madrid 1980.
- Hore, P.J.; Nuclear Magnetic Resonance; Oxford University: Oxford, 1995.
- Derome, Andrew E. Modern NMR Techniques for Chemistry Research. Pergamon: Oxford, 1987.
- Hennel, J. W. & Klinowski, J. Fundamentals of Nuclear Magnetic Resonance. Longman Group UK: Essex, 1993.
- Cavanagh, J.; Fairbrother, Wayne J.; Palmer III, Arthur G. & Skelton, Nicholas J.; Rance, M. Protein NMR Spectroscopy. Principles and Practice; Elsevier Science & Technology: 2007.
- Roberts, Gordon C. K. col. NMR of macromolecules: a practical approach; IRL: Oxford,1995.
- Clore, G.M.; Gronenborn, A.M. NMR of proteins; Macmillan: 1993.
- Wüthrich, K. NMR of proteins and nucleic acids; John Wiley and Sons: New York, 1986.
- Evans, Jeremy N.S. Biomolecular NMR spectroscopy; Oxford University: Oxford 1995.
- Lambert, Joseph B. &. Mazzola, Eugene P. Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy; Pearson, Prentice Hall: New York, 2004.
- van Holde, Kensal E. W.; Johnson, C. y Shing Ho, P. Principles of physical biochemistry; Prentice Hall: 1998.
- Berne, Bruce J.; Pecora, R. Dynamic Light Scattering; Robert E. Krieger: Florida, 1990.
- Cantor, Ch.; Schimmel, P. Biophysical Chemistry Part II: Techniques for the Study of Biological Structure and Function; W.H. Freeman & Co: New York, 1980.
- Lakowicz, J. R.; Principles of Fluorescence Spectroscopy; Kluwer Acad./Plenum Publ.: 1999 (ISBN:9780306460937).

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 05/05/2026 - 11:24
Código seguro de verificación (CSV): 32A18CBB245FA11946ED157DC4D2CD56 Pág. 5 de 7

- Albani, J.R.; Structure And Dynamics of Macromolecules: Absorption And Fluorescence Studies, Elsevier Science: 2004.
- Klostermeier, D., Rudolph, M.G. Biophysical Chemistry. CRC Press, Taylor & Francis Group. 2017

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ENLACES RECOMENDADOS

https://masteres.ugr.es/khemia

https://prado.ugr.es

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 Clases magistrales/expositivas. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: sesión expositiva, aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos.
- MD02 Clases de resolución de problemas. El equipo docente podrá utilizar algunos de los siguientes métodos para su desarrollo: Aprendizaje basado en problemas; ejemplificación y estudio de casos.
- MD05 Tutorías: Programadas y de seguimiento (para trabajos de fin de Máster y Prácticas de Empresa), pudiéndose utilizar en las modalidades personalizada o en grupo, sincrónica (presenciales) o asincrónica (virtuales). La modalidad seleccionada por el equipo docente quedará recogida en la Guía Docente de cada materia
- MD07 Estudio y trabajo autónomo, individual y/o en grupo

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

Se realizará una evaluación continua con los siguientes instrumentos de evaluación:

- Exámenes o pruebas breves a realizar a lo largo del curso basadas en la resolución de ejercicios, casos o problemas propuestos con anterioridad por el profesor. Su formato (preguntas largas, cortas, pruebas respuesta múltiple, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia (40%)

- Evaluación de asistencia y participación activa. Se valorará tanto el interés del alumno (que se refleja principalmente en la asistencia regular a las clases), como su participación activa en las discusiones que se desarrollan en las mismas. (10%)

- Clases Prácticas. Se evaluará en grado de desempeño en la realización del trabajo experimental, manejo de instrumentación y software, análisis e interpretación de datos

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 05/05/2026 - 11:24
Código seguro de verificación (CSV): 32A18CBB245FA11946ED157DC4D2CD56 Pág. 6 de 7

experimentales y elaboración de registros e informes de resultados (25%).

- La corrección y calidad de la resolución de los ejercicios propuestos. Proyecto o ejercicio complejo que, el alumno o grupo de alumnos, deberá ir resolviendo por etapas a lo largo del curso. Cada etapa o hito alcanzado será evaluado y el alumno recibirá retroalimentación sobre su éxito o fracaso (25%).

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

Consistirá en un examen escrito único con preguntas de teoría (50%) y problemas o ejercicios prácticos (50%).

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

Examen final. Este sistema de evaluación será aplicable únicamente para evaluar a alumnos que, de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013 elijan esta modalidad de evaluación. Esta opción debe ser comunicada por escrito a la Coordinadora del Máster durante los primeros quince días desde el comienzo de impartición de la materia. Su formato (preguntas largas, cortas, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia. La puntuación obtenida en este examen constituirá el 100% de la calificación otorgada siguiendo este tipo de evaluación.

INFORMACIÓN ADICIONAL

• Escuela Internacional de Posgrado (Universidad de Granada): http://escuelaposgrado.ugr.es/
• Página web del Master: http://masteres.ugr.es/khemia/

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): Gestión de servicios y apoyos (https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad).

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 32A18CBB245FA11946ED157DC4D2CD56
05/05/2026 - 11:24
Pág. 7 de 7