Guía docente de la asignatura

Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos (M43/56/4/6)

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

Elucidación estructural de compuestos orgánicos mediante combinación de técnicas espectrométricas: masas, IR, RMN, UV-vis. Interpretación de espectros de masas: MS y HRSM. Interpretación de espectros IR. Interpretación de espectros de RMN mono y bidimensional. Interpretación de espectros UV-vis.

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

- Comprensión de textos en inglés científico. - Conocimientos fundamentales Química Orgánica, Estereoquímica y Espectroscopia.-

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

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): CA666B215DB1AEBB9311188E4A832F80
06/05/2026 - 11:01
Pág. 1 de 7

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 GENERALES

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

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.
- CE13 - Utilizar de forma adecuada equipos y técnicas para la caracterización estructural de compuestos (bio)químicos y de materiales industriales.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT04 - Conocimiento y uso de las tecnologías de la información y comunicación (TICs) y de los recursos informáticos (programas, bases de datos, etc.) relativos al ámbito de estudio para adquirir, gestionar y comunicar la información
- 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

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): CA666B215DB1AEBB9311188E4A832F80
06/05/2026 - 11:01
Pág. 2 de 7

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 GENERALES

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

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.
- CE13 - Utilizar de forma adecuada equipos y técnicas para la caracterización estructural de compuestos (bio)químicos y de materiales industriales.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT04 - Conocimiento y uso de las tecnologías de la información y comunicación (TICs) y de los recursos informáticos (programas, bases de datos, etc.) relativos al ámbito de estudio para adquirir, gestionar y comunicar la información
- CT06 - Trabajo en equipo

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

*Tras cursar esta asignatura, el alumno será capaz de:

(1) Conocer los conceptos fundamentales de las principales técnicas espectroscópicas utilizadas en la determinación de las estructuras de los compuestos orgánicos.

(2) Describir los principales tipos de experimentos asociados a estas técnicas y establecer la metodología necesaria para desarrollarlos.

(3)Conocer los objetivos de las diferentes técnicas de reconocimiento con el fin de poder seleccionar la técnica adecuada a un problema/caso concreto.

(4) Utilizar los principales métodos de reconocimiento de sustancias orgánicas.

(5) Conocer y aplicar estos métodos de reconocimiento comprobando la utilidad de cada uno de

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/ 06/05/2026 - 11:01
Código seguro de verificación (CSV): CA666B215DB1AEBB9311188E4A832F80 Pág. 3 de 7

ellos.

(6)Conocer las aplicaciones y restricciones de cada una de las técnicas espectroscópicas utilizadas en la determinación de las estructuras de los compuestos orgánicos.

(7)Conocer los principales experimentos de la Resonancia Magnética Nuclear para la elucidación estructural de compuestos orgánicos.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

TEÓRICO

I. Introducción a la Espectroscopia.

Espectro electromagnético. Interacción de la radiación electromagnética con la materia orgánica: Tipos de Espectros. Propiedades ópticas de los compuestos orgánicos. Aplicación de las espectroscopias de UV e IR en la determinación estructural de los compuestos orgánicos.

II. Espectrometría de Masas.

Introducción. Métodos de ionización y análisis: Impacto electrónico; Ionización química; FAB; Desorción de Campo; Otros. Composición elemental: Isótopos y conjuntos isotópicos; Formula molecular. Propiedades del ión molecular. Reglas de fragmentación simple. Reagrupamientos de los iones. Iones metaestables.

III. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear monodimensional.

Introducción. La RMN de pulsos: generalidades. El Desplazamiento químico protónico. Factores que afectan a la RMN protónica. Equivalencia. Desplazamiento químico de C-13. Factores estéricos que afectan al desplazamiento químico de C-13. El acoplamiento spin-spin. Factores que afectan a las constantes de acoplamiento. Patrones de acoplamiento spin-spin: Reglas de primer orden. Acoplamientos heteronucleares.

IV. Espectroscopia de RMN: Técnicas de doble resonancia y secuencias de pulsos. Técnicas de doble resonancia: Desacoplamientos homonuclear y heteronuclear. Efecto n.O.e. Tiempos de relajación: su significado químico. Secuencias de pulso. Calculo de los tiempos de relajación. Otras secuencias: ATP, DEPT, INEPT, SPT o SPI, INADEQUATE, etc.

V. La Resonancia Magnética Nuclear bidimensional.

La espectroscopia de RMN bidimensional. J Resolved. Correlación homonuclear: COSY, TOCSY. Correlación heteronuclear: HMQC, HMBC. NOESY. Otros espectros bidimensionales. Otras aplicaciones de la RMN.

PRÁCTICO

Seminarios a lo largo del curso a cada uno de los subgrupos, dirigidos a reforzar los aspectos teóricos mediante la resolución de cuestiones en donde se podrán aplicar los conocimientos adquiridos.

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): CA666B215DB1AEBB9311188E4A832F80
06/05/2026 - 11:01
Pág. 4 de 7

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- Crew, P.; Rodríguez, J. y Jaspars, H. Organic Structure Analysis; Oxford Univ. Press: Oxford, 1998.

- Sternhell, S.; Kalman, J.R. "Organic Structures from Spectra", 3ª Ed.; John Wiley and Sons: Chichester, 2002.

- Duddeck, H.; Dietrich, W.; Toth, G.; Elucidación Estructural por RMN, 3ª Ed. Springer Verlag Iberica: España, 2000.

- Whittaker, D.; Interpreting Organic Spectra; Royal Society of Chemistry: Cambridge, England, 2000.

- Silverstein, R.; Webster, F.; Spectrometric Identification of Organic Compounds, 6ª Ed.; John Wiley and Sons: Chichester, 1998.

- Hesse, M.; Meier, H.; Zeeh, B.; Spectroscopic Methods in Organic Chemistry; Thieme: Stuttgart, 1997.

- Pavia, D.L.; Lampman, G.M.; Kriz, G.S.; Vyvyan, J.R.; Introduction to Spectroscopy; Brooks/Cole: Belmont, CA, 2009.

- Pedro, J. R. y Blay, G.; 200 Problemas de Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos; Visión Libros: Madrid. 2010.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ENLACES RECOMENDADOS

www.ugr.es/local/quiored

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.
- MD03 Clases prácticas. El equipo docente podrá recurrir a métodos como estudio de casos, análisis diagnósticos, prácticas de laboratorio, aula de informática, visitas, búsqueda de datos, etc.
- MD04 Talleres, seminarios, debates, exposición (y/o defensa) de trabajos individuales o en grupo. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes

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/ 06/05/2026 - 11:01
Código seguro de verificación (CSV): CA666B215DB1AEBB9311188E4A832F80 Pág. 5 de 7

métodos: 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

EVALUACIÓN CONTINUA

(A)Instrumentos de evaluación:

- Pruebas escritas. 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. Su contenido y duración serán establecidos de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013.

- Evaluación de asistencia y participación activa. Se basa en la valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planeados, en las prácticas de laboratorio, prácticas externas o cualquier otra tarea asignada, pudiéndose evaluar, si procede, la capacidad de trabajo en equipo. - Resolución de ejercicios o proyectos. 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.

(B)Criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final:

Criterio de evaluación % sobre la calificación final

- Conocimientos teóricos adquiridos..... 35

- Valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planeados, en las prácticas de laboratorio o cualquier otra tarea asignada, pudiéndose evaluar, si procede, la capacidad de trabajo en equipo..... 5

- Desempeño en la realización del trabajo experimental, manejo de instrumentación y software, análisis e interpretación de datos experimentales y elaboración de registros e informes de resultados..... 15

- Resolución de ejercicios o proyectos . 25

- Exposición de trabajos, informes, conclusiones..... 20

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

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): CA666B215DB1AEBB9311188E4A832F80
06/05/2026 - 11:01
Pág. 6 de 7

- Examen final. 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.

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): CA666B215DB1AEBB9311188E4A832F80
06/05/2026 - 11:01
Pág. 7 de 7