

Plan 435 MÁSTER EN TÉCNICAS AVANZADAS EN QUÍMICA  
 Asignatura 52201 TÉCNICAS DE ELUCIDACIÓN ESTRUCTURAL  
 Grupo 1

### Tipo de asignatura (básica, obligatoria u optativa)

OBLIGATORIA

### Créditos ECTS

3 Créditos ECTS

### Competencias que contribuye a desarrollar

Técnicas de elucidación estructural

Competencias generales:

G1.- Conocimiento del método científico.

Conocer el método científico dentro de las ciencias experimentales, en particular en el ámbito de la Química, formulando modelos e hipótesis de trabajo relevantes y planificando el análisis en relación con dichas hipótesis y la discusión de las conclusiones, de modo que se pueda avanzar en el conocimiento científico.

G2.- Competencia para aplicar los conocimientos adquiridos.

Es la capacidad para aplicar los conocimientos técnicos adquiridos, de forma coherente y profesional, sobre todo en contextos novedosos o en constante renovación, que impliquen la realización de una actividad química

G3.- Capacidad crítica, de análisis y síntesis, y capacidad de interpretación.

Ser capaz de emitir juicios críticos sobre propuestas, hipótesis y validez científica de las conclusiones, así como sintetizar propuestas y resultados dentro del ámbito de la química.

G4.- Competencias metodológicas.

Es la capacidad para elegir la metodología más adecuada para el desarrollo de la investigación y resolución de un problema concreto, adaptándola al contexto en el que se éste se ha originado.

G5.- Capacidad para valorar la originalidad y creatividad.

Es la competencia para reconocer la originalidad en la concepción, formulación y resolución de problemas, en el ámbito de la investigación química y científico-tecnológica en general.

G6.- Capacidades de comunicación.

Ser capaz de presentar de forma oral y escrita, ante públicos especializados o no, resultados avanzados de investigación química, considerando antecedentes, hipótesis de trabajo, resultados y conclusiones

G7.- Capacidad de trabajo en equipo.

Capacidad para el desarrollo de actividades químicas, supervisadas o autónomas, al servicio de un proyecto de trabajo común, que puede ser multidisciplinar.

G8.- Capacidad para el uso de las nuevas tecnologías.

Adquirir destrezas generales en el uso de las nuevas tecnologías en el ámbito de la química, que le permiten la utilización de las herramientas informáticas disponibles más importantes en el campo científico-tecnológico.

G9.- Desarrollar el interés por la formación permanente.

Promover un interés permanente para ampliar conocimientos y el desarrollo de un perfil profesional específico, mediante el estudio, la reflexión y la investigación.

G10.- Capacidad de aprendizaje autónomo.

Adquirir las destrezas necesarias para el aprendizaje autónomo en el ámbito de la Química, reconociendo las fuentes de conocimiento para dicho aprendizaje y su utilización, y motivando el aprendizaje a lo largo de la vida, en el ámbito de la química.

Competencias específicas:

E3.- Capacidad para iniciarse en la investigación en Química.

El alumno del Máster adquirirá competencias suficientes que le permitan iniciar un proyecto de investigación en alguna de las áreas de conocimiento de la Química, de forma que pueda integrarse en las líneas de investigación de un Programa de Doctorado de la Universidad de Valladolid., o en un departamento de I+D+i de una empresa pública o privada

E4.- Capacidad y destrezas para la gestión de las fuentes de la investigación en Química.

Comprende esta competencia la capacidad del estudiante para la búsqueda y gestión de documentación y bibliografía especializada química, el uso racional y crítico de ésta para determinar el estado del arte en un

determinado problema, y el dominio de los recursos bibliográficos pertinentes.

E5.- Capacidad de aplicar y adaptar los modelos teóricos y las técnicas específicas tanto a problemas abiertos en su línea de especialización, como a problemas provenientes de otros ámbitos ya sean científicos o técnicos.

Competencia para adaptar los modelos teóricos químicos para el estudio de problemas relacionados con la química o provenientes de otros campos científico-tecnológicos.

E6.- Capacidad de analizar problemas, detectando la posible utilización de herramientas químicas para contribuir a su comprensión y resolución.

Comprende esta competencia la capacidad analítica frente a nuevas situaciones para identificar la aplicación de herramientas químicas, existentes o de nuevo diseño, que contribuyan a la comprensión y solución de los problemas planteados tanto en el campo de la química en general, como dentro del medio-ambiente en particular.

E7.- Capacidad de defender trabajos de investigación avanzados en el ámbito de sus líneas de especialización así como de mantener debates científicos sobre los mismos, ya sean estos propios o adquiridos.

Competencia estrechamente vinculada a la competencia de una buena comunicación científica, en el ámbito propio de la especialización adquirida, tanto para defender las tesis propias como para debatir con juicio crítico con terceros, en una relación entre pares.

E8.- Capacidad de comprender nuevos avances y perspectivas científicas en el ámbito de la investigación en las líneas de su especialización.

Competencia para comprender la formulación de nuevos avances, en el ámbito de la investigación propio de cada disciplina de la química, y las perspectivas que plantean.

E11.-Capacidad de relacionar las características espectroscópicas con la estructura molecular.

Esta competencia implica ser capaz de relacionar las características espectroscópicas experimentales, con la estructura molecular de los diferentes compuestos, así como la de predecir, a partir de esta última, las posibles características espectroscópicas que pueden ser esperadas.

E15.- Capacidad de conocer, elegir y aplicar nuevas técnicas instrumentales para la resolución de problemas químicos o medio-ambientales

Esta competencia implica el conocimiento de técnicas instrumentales avanzadas, que permita la elección de la más adecuada para la resolución de un problema químico o medio-ambiental concreto.

## Objetivos/Resultados de aprendizaje

Técnicas de elucidación estructural

Ser capaces de elucidar la estructura de los compuestos orgánicos utilizando técnicas espectroscópicas avanzadas  
Conocer las características estructurales que permiten el análisis cualitativo y cuantitativo de mezclas mediante las distintas técnicas espectroscópicas

Saber adquirir y utilizar de forma óptima información bibliográfica de determinación estructural molecular.

## Contenidos

Técnicas de elucidación estructural

Determinación estructural de los compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos avanzados.

- 1.- Resonancia Magnética nuclear de  $^1\text{H}$
- 2.- Resonancia magnética nuclear de  $^{13}\text{C}$
- 3.- Espectroscopía de Infrarrojo
- 4.- Espectroscopía de ultravioleta-visible
- 5.- Espectrometría de masas
- 6.- Determinación estructural por aplicación conjunta de las espectroscopías de RMN, IR, UV-VIS y E-M

## Principios Metodológicos/Métodos Docentes

Actividades presenciales

- Clases magistrales
- Seminarios en grupo
- Tutorías individualizadas
- Prácticas de laboratorio
- Prácticas de ordenador en aula de informática
- Exposición de trabajos y ejercicios
- Realización de pruebas objetivas (controles, exámenes...)
- Defensa del Trabajo Fin de Master

Trabajo personal

- Estudio autónomo
- Documentación bibliográfica
- Resolución de ejercicios y casos
- Programación de la experimentación
- Elaboración de informes

## Crterios y sistemas de evaluaci3n

### T3cnicas de elucidaci3n estructural

La calificaci3n final tendr1 en cuenta: ex1menes escritos u orales, trabajo personal, actividades dirigidas, participaci3n activa en las actividades

## Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial

SCHWARZ, J.C.P. "M3todos f3sicos en Qu3mica Org1nica". Ed. Acrilia, Zaragoza, 1968.

\* SIMON, W.; CLERC, T.; SEIBL, J. y PRETSCH, E. "Tablas para la elucidaci3n estructural de compuestos org1nicos por m3todos espectrosc3picos". Ed. Springer Verlag-Ib3rica. Madrid, 1998.

\* WILLIAMS, D.H. y FLEMING, I.A. "M3todos espectrosc3picos en Qu3mica Org1nica. Problemas espectrosc3picos en Qu3mica Org1nica". Ed. Urmo. Bilbao, 1971.

\* SILVERSTEIN, BASSLER y MORRILL. "Spectrometric identification of Organic Compounds". Ed. Wiley, N. Y. 1991.

## Calendario y horario

[http://www5.uva.es/master\\_taq/calendario.html](http://www5.uva.es/master_taq/calendario.html)

## Tabla de Dedicaci3n del Estudiante a la Asignatura/Plan de Trabajo

### Actividades Presenciales

ECTS (horas)

### Actividades no Presenciales

ECTS (horas)

#### Clases te3ricas

0,6 (15)

#### Preparaci3n y estudio personal de los contenidos te3ricos

0,8 (20)

#### Clases de problemas y seminarios

0,4 (10)

#### Preparaci3n y resoluci3n de ejercicios, problemas, presentaciones...

0,4 (10)

#### Asistencia a tutor3as

0,1 (2,5)

#### Estudio y preparaci3n de ex1menes

0,6 (15)

#### Realizaci3n de ex1menes y controles peri3dicos

0,1 (2,5)

### Total horas presenciales

1,2 (30)

### Total horas no presenciales

1,8 (45)

### Total volumen de trabajo

3 (75)

Responsable de la docencia (recomendable que se incluya informaci3n de contacto y breve CV en el que aparezcan sus l3neas de investigaci3n y alguna publicaci3n relevante)

PURIFICACION CUADRADO CURTO; puric@qo.uva.es

puriccuadrado@gmail.com

ALFONSO GONZ1LEZ ORTEGA;

algon@qo.uva.es

