



Asignatura/ **Course Title:** **Química Orgánica Estructural / Structural Organic Chemistry**

Código / **Course number:** **32535**

Centro / **Center:** Universidad Autónoma de Madrid

Titulación / **Qualification:** Máster Interuniversitario en Química Orgánica / Interuniversity Master's Degree in Organic Chemistry

Nivel / **Level:** 1

Tipo / **Type:** Obligatoria / **Compulsory subject**

Nº de créditos / **Credit allotment:** 6.0

## ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

**Química Orgánica Estructural / Structural Organic Chemistry**

### 1.1. Código / **Course number**

32535

### 1.2. Materia / **Content area**

Química Orgánica/ **Organic Chemistry**

### 1.3. Tipo / **Course type**

Obligatorio / **Compulsory subject**

### 1.4. Nivel / **Course level**

Máster / **Master**

### 1.5. Curso / **Year**

Primero/ **First course**

### 1.6. Semestre / **Semester**

Primero/ **First semester**

### 1.7. Idioma / **Language**

Español. Se emplea también Inglés en material docente / **In addition to Spanish, English is also extensively used in teaching material**

### 1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

Grado en Química, preferiblemente con orientación a la Química Orgánica / **Grade in Chemistry, preferably oriented towards Organic Chemistry**



Asignatura/ **Course Title:** **Química Orgánica Estructural /  
Structural Organic Chemistry**

Código / **Course number:** **32535**

Centro / **Center:** Universidad Autónoma de Madrid

Titulación / **Qualification:** Máster Interuniversitario en Química Orgánica /  
Interuniversity Master's Degree in Organic Chemistry

Nivel / **Level:** 1

Tipo / **Type:** Obligatoria / **Compulsory subject**

Nº de créditos / **Credit allotment:** 6.0

## 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases de teoría es recomendable / **Attendance to the theoretical courses is strongly recommended**

La asistencia a los seminarios y tutorías es recomendable / **Attendance to the seminars and the tutorials is highly recommended**

## 1.10. Datos del equipo docente / **Faculty data**

Docente / **Lecturer** Antonio Urbano Pujol (Coordinador)

Departamento de Química Orgánica/ **Department of Organic Chemistry**

Facultad Ciencias/ **Faculty Sciences**

Despacho 5ª planta - Módulo 01/ **Office 5th floor - Module 01**

Teléfono / **Phone:** +34 91 4977679

Correo electrónico/**Email:** antonio.urbano@uam.es

Página web/**Website:** <http://www.uam.es/gruposinv/quinonso>

Horario de atención al alumnado/**Office hours:** Previa petición de hora por correo electrónico / **Upon appointment request E-mail**

Docente / **Lecturer** Ana María Martín Castro

Departamento de Química Orgánica/ **Department of Organic Chemistry**

Facultad Ciencias/ **Faculty Sciences**

Despacho 403 - Módulo 01/ **Office 403 - Module 01**

Teléfono / **Phone:** +34 91 4974717

Correo electrónico/**Email:** martin.castro@uam.es

Página web/**Website:** <http://www.uam.es/gruposinv/organomet>

Horario de atención al alumnado/**Office hours:** Previa petición de hora por correo electrónico / **Upon appointment request E-mail**

Docente / **Lecturer** Ramón Gomez Arrayás

Departamento de Química Orgánica/ **Department of Organic Chemistry**

Facultad Ciencias/ **Faculty Sciences**

Despacho 601 - Módulo 01/ **Office 601 - Module 01**

Teléfono / **Phone:** +34 91 4972772

Correo electrónico/**Email:** ramon.gomez@uam.es

Página web/**Website:** <http://www.uam.es/gruposinv/stereo>

Horario de atención al alumnado/**Office hours:** Previa petición de hora por correo electrónico / **Upon appointment request E-mail**



Asignatura/ **Course Title:** **Química Orgánica Estructural /  
Structural Organic Chemistry**

Código / **Course number:** 32535

Centro / **Center:** Universidad Autónoma de Madrid

Titulación / **Qualification:** Máster Interuniversitario en Química Orgánica /  
Interuniversity Master's Degree in Organic Chemistry

Nivel / **Level:** 1

Tipo / **Type:** Obligatoria / **Compulsory subject**

Nº de créditos / **Credit allotment:** 6.0

### 1.11. **Objetivos del curso / Course objectives**

Conocimiento de las técnicas espectroscópicas y espectrométricas básicas y su aplicación a la elucidación estructural de compuestos orgánicos, con especial énfasis en las técnicas no rutinarias de la espectrometría de masas y la Resonancia Magnética Nuclear, incluidos algunos aspectos estereoquímicos vinculados a la estructura tridimensional de las moléculas. El alumno deberá ser capaz de desarrollar métodos adecuados para el análisis de estructuras químicas complejas.

Fluent knowledge of basic spectroscopic and spectrometric techniques and their application to the structural elucidation of organic compounds. Special attention will be paid to modern non-routine techniques of mass spectrometry and nuclear magnetic resonance, including some stereochemical concepts related to the three-dimensional structure of organic molecules.

The student must acquire skills to analyze complex chemical structures.

### 1.12. **Contenidos del programa / Course contents**

1. Espectroscopía de UV-vis (métodos quirópticos).
2. Espectrometría de masas. Revisión de aspectos básicos y aplicaciones avanzadas.
3. Revisión de los aspectos básicos de espectroscopía de RMN de  $^1\text{H}$  y  $^{13}\text{C}$ . Aplicación conjunta de técnicas espectroscópicas.
4. Espectroscopía de RMN de otros núcleos. Correlación bidimensional homonuclear (COSY, TOCSY, NOESY, INADEQUATE) y heteronuclear (HMQC, HMBC).
5. Aplicaciones prácticas y actuales: Aspectos estereoquímicos en la determinación estructural de compuestos orgánicos. Métodos espectroscópicos para la determinación de composiciones enantioméricas y diastereoisoméricas.

1. UV-vis spectroscopy (chiroptical methods)
2. Mass spectrometry. Revision of fundamentals and advanced applications.
3. Revision of fundamentals of  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR spectroscopy. Application of combined spectroscopic techniques.
4. NMR spectroscopy of other nuclei. Homonuclear two-dimensional correlation spectroscopy (COSY, TOCSY, NOESY, INADEQUATE) and heteronuclear two-dimensional correlation spectroscopy (HMQC, HMBC).
5. Modern practical applications. Stereochemical concepts for organic structural elucidation of organic compounds. Spectroscopic methods for determining the composition of enantiomeric and diastereomeric mixtures.



Asignatura/ **Course Title:** **Química Orgánica Estructural / Structural Organic Chemistry**

Código / **Course number:** **32535**

Centro / **Center:** Universidad Autónoma de Madrid

Titulación / **Qualification:** Máster Interuniversitario en Química Orgánica / Interuniversity Master's Degree in Organic Chemistry

Nivel / **Level:** 1

Tipo / **Type:** Obligatoria / **Compulsory subject**

Nº de créditos / **Credit allotment:** 6.0

### 1.13. Referencias de consulta / **Course bibliography**

Crews, P.; Rodríguez, J.; Jaspers, M. *Organic Structure Analysis*. 2nd Ed. Oxford University Press; New York, 2010.

Pretsch, E.; Bühlmann, P.; Affolter, C.; Herrera, A.; Martínez, R. *Tablas: Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos*, Masson, 2002.

Silverstein, R. M.; Webster, F. X.; Kiemle, D. *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 7th Ed., John Wiley and Sons, 2004.

Field, L. D.; Sternhell, S.; Kalman, J. R. *Organic Structures from Spectra*, 4th Ed., John Wiley, 2008.

Friebolin, H. *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, 5th Ed., John Wiley, 2010.

De Hoffmann, E.; Stroobant, V. *Mass Spectrometry: Principles and Applications*, 3rd Ed., Wiley, 2007.

Eliel, E. L.; Wilen, S. H.; Doyle, M. P. *Basic Organic Stereochemistry*, Wiley, New York, 2001.

## 2. Métodos docentes / **Teaching methodology**

### • **Actividades presenciales / In-class activities**

**Clases magistrales:** Clases presenciales en el aula, donde se explicarán los conceptos y contenidos teóricos de la asignatura. Los conceptos introducidos en estas clases serán la base para la resolución de ejercicios, problemas y casos de las clases de seminarios.

**Seminarios:** El material será propuesto por el profesor con antelación. El estudiante tratará de resolver los ejercicios antes de los seminarios, donde se fomentará la participación activa de los estudiantes y el debate.

**Tutorías programadas:** Individuales o en grupo

**Theoretical lectures:** In-class lessons, whereby the theoretical concepts and contents of the course will be disclosed. The contents of these lessons will be applied to solve exercises and problems during seminars.

**Seminars:** Support material will be provided by the lecturer in advance. The student will solve the problems before attending the seminars. Active participation and discussion during seminars will be promoted.

**Scheduled tutorials:** Independent or group work



Asignatura/ **Course Title:** **Química Orgánica Estructural / Structural Organic Chemistry**

Código / **Course number:** **32535**

Centro / **Center:** Universidad Autónoma de Madrid

Titulación / **Qualification:** Máster Interuniversitario en Química Orgánica / Interuniversity Master's Degree in Organic Chemistry

Nivel / **Level:** 1

Tipo / **Type:** Obligatoria / **Compulsory subject**

Nº de créditos / **Credit allotment:** 6.0

### 3. Tiempo de trabajo del estudiante / **Student workload**

Las actividades formativas a desarrollar, tanto presenciales como de trabajo del estudiante, se realizarán de acuerdo con la siguiente **distribución de tiempos:**

The scheduled in-class and independent training activities will be executed in accordance with the following **distribution of working hours:**

		Nº de horas/ N. of hours	Porcentaje / Percentage
Presencial / Compulsory attendance	Clases teóricas / Theoretical lessons	25 h	30%
	Tutorías programadas a lo largo del curso / Scheduled tutorials	3 h	
	Seminarios / Seminars	12 h	
	Realización de exámenes / Exams	4 h	
No presencial / Personal work	Preparación de seminarios / Seminar preparation	26 h	70%
	Estudio semanal (total del curso)/ Weekly study (for the whole course)	50 h	
	Preparación del examen / Exam preparation	30 h	
<b>Carga total de horas de trabajo: 25 horas x 6.0 ECTS</b> <b>Total student workload: 25 hours x 6.0 ECTS</b>		<b>150 h</b>	<b>100%</b>

### 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / **Evaluation procedures and weight of components in the final grade**

La evaluación se basará en:

The weight of components of the final grade will be as follows:



Asignatura/ **Course Title:** **Química Orgánica Estructural /  
Structural Organic Chemistry**

Código / **Course number:** 32535

Centro / **Center:** Universidad Autónoma de Madrid

Titulación / **Qualification:** Máster Interuniversitario en Química Orgánica /  
Interuniversity Master's Degree in Organic Chemistry

Nivel / **Level:** 1

Tipo / **Type:** Obligatoria / **Compulsory subject**

Nº de créditos / **Credit allotment:** 6.0

	Convocatoria ordinaria <b>Ordinary examination session</b>	Convocatoria extraordinaria <b>Extraordinary examination session</b>
Valoración del examen / <b>Final exam</b>	60%	100 %
Evaluación continua (Resolución de problemas y casos prácticos, realización de trabajos, exposición oral)  <b>Continuous evaluation (Problem solving and practical case studies, practical work, oral presentation)</b>	40%	-

## 5. Cronograma\* / **Course calendar\***

<b>Semana Week</b>	<b>Contenido Contents</b>	<b>Horas presenciales Contact hours</b>	<b>Horas no presenciales Independent study time</b>
1	Espectroscopía de UV-vis. Espectrometría de masas. Espectroscopía de RMN de $^1\text{H}$ <b>UV-vis spectroscopy. Mass spectrometry. <math>^1\text{H}</math>-NMR spectroscopy</b>	14	35
2	Espectroscopía de RMN de $^{13}\text{C}$ y de otros núcleos. RMN bidimensional homonuclear. <b><math>^{13}\text{C}</math>-NMR spectroscopy. NMR of other nuclei. Two-dimensional homonuclear correlation spectroscopy</b>	13	35
3	RMN bidimensional heteronuclear. Aspectos estereoquímicos en la determinación estructural de compuestos orgánicos. <b>Two-dimensional heteronuclear correlation spectroscopy. Stereochemical concepts for organic structural elucidation</b>	13	35

\* Este cronograma tiene carácter orientativo.

\* **This calendar is merely indicative.**