

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	44612
Nom	Caracterització avançada de substàncies químiques
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2218 - M.U. en Química	Facultat de Química	1	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2218 - M.U. en Química	7 - Caracterització avançada de substàncies químiques	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
GIMENO ADELANTADO, JOSE VICENTE	310 - Química Analítica

RESUM

L'assignatura *Caracterització Avançada de Substàncies Químiques* és una assignatura optativa de l'itinerari acadèmic o d'investigació del màster que té com a objectiu ampliar i complementar els coneixements adquirits en les assignatures que componen el mòdul *Química Avançada*, particularment en allò referit a les tècniques més avançades de caracterització de substàncies químiques, i des d'una perspectiva interdisciplinària. En l'assignatura s'aborden diferents tècniques d'especial rellevància en la caracterització de substàncies que per la seua complexitat i/o especialització no s'havien estudiades en profunditat en assignatures del grau ni en el mòdul *Química Avançada*. Així, s'aprofundirà en l'estudi de tècniques com ara la RMN i l'EPR, l'espectroscòpia de masses, tècniques de raigs X, electroquímiques i altres, així com en les principals tècniques utilitzades específicament per a l'anàlisi de superfícies (tècniques de microscòpia TEM i SEM, XPS, microanàlisi). En cada cas s'abordaran els fonaments, aspectes metodològics i instrumentació, així com les principals aplicacions.



CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

Es requereixen els coneixements previs de química que s'imparteixen en les titulacions que sindiquen en el perfil d'ingrés que es recomana per a l'estudiant de màster.

COMPETÈNCIES

2218 - M.U. en Química

- Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Ser capaç de resoldre problemes complexos de química, siga en l'àmbit acadèmic, de la investigació o de l'aplicació industrial a nivell d'especialització o màster
- Posseir les habilitats necessàries per a desenrotllar activitats multidisciplinàries dins de l'àmbit de la química a nivell d'especialització de màster.
- Ser capaços de dissenyar, realitzar, analitzar i interpretar experiències i dades complexes en l'entorn de la química a nivell d'especialització.
- Adquirir coneixements avançats que permeten valorar la importància de la química en la salut, el medi ambient, nous materials i energia.
- Adquirir els coneixements avançats necessaris per a valorar la importància de la química en el desenrotllament econòmic i social en un context d'especialització.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

- Conèixer els fonaments de les principals tècniques instrumentals avançades i les seues aplicacions.
- Saber comparar les diferents tècniques en funció de les seues característiques i seleccionar la que resulte més apropiada d'acord amb el propòsit de l'anàlisi o caracterització, i els paràmetres de qualitat requerits.
- Aplicar les dades proporcionats per l'espectroscòpia de RMN, espectroscòpia de masses, difracció de raigs X, etc..., per al coneixement de l'estructura de las substàncies químiques i les interaccions intermoleculars.



DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Tècniques espectroscòpiques de ressonància magnètica

Fonaments de Ressonància Magnètica Nuclear (RMN) avançada multidimensional homo i heteronuclear per a la determinació estructural de molècules orgàniques complexes, compostos organometàl·lics i biomacromolècules. Tècniques de RMN aplicades a sistemes químics complexos: teixits, cèl·lules i biofluids.

2. Difracció i fluorescència de raigs X

Simetria cristal·lina. Grups espacials. Taules Internacionals de Cristal·lografia. Naturalesa dels Raigs X. Interferència i Difracció. Llei de Bragg. Difracció i estructura cristal·lina. Resolució i afinament d'estructures cristal·lines (monocristall). Cristalls moleculars i determinació d'interaccions intermoleculars i assemblatge supramolecular en estat sòlid. Determinació de configuració absoluta. Bases de dades. Fluorescència de Raigs X. Altres tècniques relacionades: difracció sobre mostres policristal·lines, difracció de neutrons.

3. Espectrometria de masses

Espectrometria de masses inorgànica i orgànica. Fragmentologia. Components instrumentals. Hibridació amb tècniques cromatogràfiques. Modus de treball en hibridació de baixa i alta resolució. Exemples d'aplicacions. Anàlisi isotòpic per espectrometria de masses.

4. Tècniques de superfície

Microscòpia electrònica (SEM, TEM i alta resolució). Espectroscòpia de electrons. Aplicacions.

5. Altres tècniques

Tècniques electroquímiques: voltamperometria de micropartícules i tècniques d'impedància.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	40,00	100
Tutories reglades	5,00	100
Seminaris	5,00	100
Estudi i treball autònom	75,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura s'imparteix a través de lliçons magistrals participatives, seminaris on es duen a terme, entre altres activitats formatives, problemes pràctics aplicats, i classes tutoritzades orientades a avaluar la comprensió de l'assignatura per part de l'alumne. A més fa ús de la plataforma aula virtual per a comunicació i intercanvi d'informació.

AVALUACIÓ**Primera convocatòria**

La qualificació de l'assignatura en primera convocatòria s'obté de les qualificacions obtingudes de l'examen final i les activitats d'avaluació contínua realitzades al llarg del curs. Examen i activitats d'avaluació contínua es mitjanaran d'acord amb els percentatges següents:

- (a) Examen final: 70%.
- (b) Activitats d'avaluació contínua: 30%.

La qualificació mínima en cadascuna d'aquestes dues parts haurà de ser igual o superior a 4.5 per fer la mitjana.

La qualificació global mínima per aprovar l'assignatura serà de 5.0.

Segona convocatòria

La qualificació de l'assignatura en segona convocatòria s'obtindrà aplicant els mateixos criteris que en la primera convocatòria.

REFERÈNCIES**Bàsiques**

- Duddeck H., Dietrich W. y Tóth G.; Elucidación estructural por RMN, Springer, 2000. (traducció de la 3ª edició revisada y ampliada) (ISBN 8407005053)



- Simpson, J. H., Organic Structure Determination Using 2-D NMR Techniques. A Problem Based Approach, 2nd Ed., Academic Press, 2012. (ISBN :9780123849700)
- Hammond, C. The basics of Crystallography and Diffraction. Oxford University Press (IUCr Texts in Crystallography, 12) Third edition, 2009
- Massa, W. Crystal structure determination. Springer-Verlag, 2004
- Jenkins, R. X-ray fluorescence spectrometry. 2nd. edition, Wiley, 1999
- Ríos Castro, A.; Moreno Bondi, M. C.; Simonet Suau, B. M. (Coords.) Técnicas espectroscópicas en química analítica (vol. I y II), Síntesis S. A., Madrid, 2012.
- Goldstein, J.I.; Newbury, D.E.; Echlin, P.; Joy, D.C.; Fioril, Ch.; Lifshin, E. Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis. Plenum Press, Nueva York, 1984.
- Bonnel, D.A. (Ed.) Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy: Theory, Techniques and Applications. 2ª ed., Wiley, Nueva York, 2001.
- Watts J. F, Wolstenholme J. An introduction to surface analysis by XPS and AES. Wiley, Chichester, 2008.
- Taylor H.E., Inductively Coupled Plasma-Mass Spectrometry. Practices and Techniques, Academic Press, San Diego, 2001
- Desiraju G.R., Vittal, J.J., Ramanan, A.; Crystal Engineering: A Textbook, World Scientific Publishing Company, 2011.
- Desiraju, G.R.; Crystal Engineering: The Design of Organic Solids, Elsevier, 1989.
- Müller, P. et al. Crystal Structure Refinement (A crystallographer's guide to SHELXL). IUCr Oxford Science Publications, 2006

Complementàries

- Pretsch, E.; Bühlmann, P.; Affolter, C.; Herrera, A., Determinación estructural de compuestos orgánicos, Masson, 2002. (ISBN: 9788445812150)
- Friebolin H.; Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, 5th, Completely Revised and Updated Edition, Wiley-VCH, 2010.
ISBN: 978-3-527-32782-9
- Hühl, O.; Phosphorus-31 NMR Spectroscopy. A Concise Introduction for Synthetic Organic and Organometallic Chemist, Springer, 2008 (ISBN: 9783540791171)
- Hesse, M.; Meier, H.; Zehe, B., Métodos espectroscópicos en Química Orgánica, (traducción de la 5ª edición de la versión en alemán), 2ª ed. Síntesis, 1999 . (ISBN:847738522X)
- The Cambridge Structural Database (CSD), Comprehensive of the published literature and highly curated, is an essential resource to scientists around the world.
- Mercury - Crystal Structure Visualisation, Exploration and Analysis Made Easy



- Doménech, A.; Doménech, M.T.; Costa, V. Electrochemical methods for archaeometry, conservation and restoration, Springer, Berlin, 2009.
- Doménech, A. Electrochemistry of Porous Materials, Taylor & Francis, Boca Raton, 2010.
- International Tables for Crystallography, Vol. A, 2006 (Space-group symmetry) + Vol A1, 2011 (Symmetry relations between space groups)
- Lifshin, E. (editor) X-ray Characterization of Materials. Wiley-VCH, 1999