



FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	44708
Nombre	Técnicas instrumentales en química orgánica
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	4.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2226 - M.U. en Química Orgánica	Facultad de Química	1	Anual

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2226 - M.U. en Química Orgánica	4 - Técnicas instrumentales en química orgánica	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
DEL POZO LOSADA, CARLOS	325 - Química Orgánica

RESUMEN

Hay tres vertientes fundamentales de aplicación de las técnicas instrumentales más comúnmente empleadas: 1) **La identificación y cuantificación de componentes en una mezcla**, o sea de sustancias conocidas cuya estructura, propiedades físicas y respuesta frente a la técnica de análisis hayan sido descritas: por ejemplo, análisis de pesticidas en alimentos o aguas residuales. 2) **La determinación estructural de un compuesto químico desconocido** cuya estructura debe ser determinada de manera inequívoca: por ejemplo, un nuevo fármaco o una sustancia natural vegetal nueva y desconocida extraída de una planta. 3) **El estudio o investigación de la técnica en si misma** dirigido al desarrollo de nuevos métodos que mejoren por ejemplo la sensibilidad o resolución de la técnica o bien el desarrollo de nuevas técnicas derivadas de la misma.

Los principios físicos en los que se fundamenta confieren a cada técnica instrumental características diferentes que la hacen más o menos adecuada a las primeras dos vertientes de aplicación mencionadas. El objetivo de la asignatura es ampliar los conocimientos adquiridos en los estudios de Grado acerca de las tres vertientes, es decir introducir los estudiantes a las técnicas instrumentales de análisis más modernas que permiten identificar y determinar la estructura de los diferentes productos obtenidos de un proceso y/o la separación de los componentes de mezclas complejas de reacción. Así mismo, en esta asignatura se pretende proporcionar a los estudiantes los medios para que ante un problema dado, sean



capaces de diseñar y llevar a cabo la estrategia de análisis estructural más adecuada para su resolución de la manera más eficaz posible. Este objetivo se abordará desde tres perspectivas: resonancia magnética nuclear (RMN), espectrometría de masas (EM) y cristalografía de Rayos X (CRX).

CONOCIMIENTOS PREVIOS

Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

Si bien las técnicas espectroscópicas no guardan relación directa con la reactividad de las moléculas orgánicas, la comprensión de las relaciones existentes entre los átomos son claves para la interpretación de sus propiedades espectrales, y su localización espacial dentro de una molécula sólo es factible si se dominan las bases fundamentales de la Química Orgánica. Por ello son necesari

COMPETENCIAS

2226 - M.U. en Química Orgánica

- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Utilizar las distintas técnicas de exposición -oral, escrita, presentaciones, paneles, etc- para comunicar sus conocimientos, propuestas y posiciones.
- Ser capaces de acceder a herramientas de información en otras áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente.



- Saber participar en debates y discusiones, dirigirlos y coordinarlos y ser capaces de resumirlos y extraer de ellos las conclusiones más relevantes y aceptadas por la mayoría.
- Poseer habilidades sociales, un buen nivel de comunicación oral y escrita, así como capacidad para trabajar en equipo y con personas de diferentes procedencias.
- Competencias de gestión tales como la capacidad para la planificación y gestión de tiempo y recursos, así como para dirigir y tomar decisiones.
- Ser capaces de valorar la necesidad de completar su formación científica, en lenguas, en informática, asistiendo a conferencias o cursos y/o realizando actividades complementarias, autoevaluando la aportación que la realización de estas actividades supone para su formación integral.
- Profundizar en los principios en los que se basan las técnicas físicas e instrumentales.
- Profundizar en las técnicas instrumentales de análisis cualitativo y cuantitativo de compuestos orgánicos: espectroscopía infrarroja, espectroscopia ultravioleta, resonancia magnética nuclear, espectrometría de masas y difracción de rayos X.
- Saber aprovechar los datos extraíbles de los diferentes tipos de espectros de moléculas orgánicas y transformarlos en información de tipo estructural.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

En esta asignatura se pretende situar al/la alumno/a en disposición de resolver la estructura de moléculas de tamaño pequeño a mediano a través de la medida y análisis de sus datos espectrales de diferentes tipos, así como formarlos para que, ante un problema dado, sean capaces de diseñar y llevar cabo la estrategia de análisis estructural más adecuada para su resolución de la manera más eficaz posible. Se incluyen unas prácticas de preparación de muestras y uso de aparatos de medida (IR, UV, RMN, Rayos X, etc.) que capaciten a los/as alumnos/as en el futuro para medir, procesar y dibujar los espectros de sus propias muestras.

Los objetivos que se pretende conseguir en esta asignatura se resumen en los siguientes puntos:

- Conocimiento de los principios fundamentales en los que se basan las técnicas físicas e instrumentales.
- Capacidad para interpretar los datos extraíbles de los diferentes tipos de espectros de moléculas orgánicas y transformarlos en información de tipo estructural, incluyendo en esta última tanto la conectividad atómica como las relaciones estereoquímicas.
- Conocimiento claro del lenguaje de la RMN moderna y una percepción amplia de la misma como herramienta de elucidación estructural aplicable en ámbitos muy diversos, estando en disposición de determinar en cada caso el tipo de datos de RMN necesarios para abordar el problema en estudio.
- Diseñar, seleccionar y/o desarrollar productos y procesos químicos eficientes (ODS 7) y que minimicen su impacto sobre el medio ambiente (ODS 14 y 15), aprovechen materias primas alternativas y generen una menor cantidad de residuos (ODS 11).



DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Introducción a la espectroscopia.

Absorción de la radiación electromagnética por moléculas orgánicas. Tipos de técnicas espectroscópicas. Absorción Infra-Roja y tipos de vibraciones. Información estructural. Espectroscopia ultravioleta y visible. Excitación electrónica y grupos cromóforos. La ley de Lambert-Beer. Aspectos básicos de la Resonancia Magnética Nuclear. Relajación nuclear. El desplazamiento químico y su medida. Intensidad relativa de las señales

2. RMN de hidrógeno (^1H).

Factores estructurales que influyen en el desplazamiento químico del protón. Acoplamiento spin-spin: Tipos y Sistemas de acoplamiento. Constantes de acoplamiento. Acoplamiento heteronuclear. Equivalencias química y magnética. Técnicas bidimensionales en RMN de protón. Efecto Nuclear Overhauser (NOE). Aplicaciones cuantitativas.

3. RMN de carbono (^{13}C) y otros núcleos de interés.

Factores estructurales que influyen en el desplazamiento químico de los carbonos. Acoplamientos del carbono con hidrógeno y con otros núcleos. Técnicas bidimensionales en RMN de ^{13}C Características de la señal de RMN de otros núcleos más comunes: ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P .

4. Espectrometría de masas

Fundamentos. Métodos de ionización aplicados al análisis de moléculas orgánicas y bioorgánicas. Tipos de analizadores. Técnicas de análisis acopladas con los espectrómetros de masas. Espectrometría de Masas en tándem (MS-MS). Aplicaciones y aspectos prácticos de las técnicas.

5. Difracción de rayos X

Simetría cristalina. Grupos espaciales. Difracción y estructura cristalina. Resolución y afinamiento de estructuras cristalinas (monocristal). Determinación de configuración absoluta. Determinación del empaquetamiento cristalino: Cristales moleculares. Determinación de interacciones intermoleculares y ensamblaje supramolecular en estado sólido. Bases de datos.



VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	20,00	100
Seminarios	20,00	100
TOTAL	40,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

Los alumnos/as dispondrán previamente del material didáctico correspondiente al curso.

Actividades presenciales

Clases teóricas participativas en las que el profesor seleccionará aquellos conceptos claves que constituyen la línea directriz del tema de que se trate y que son fundamentales para la comprensión de la materia en su conjunto, y ofrece una visión global del tema tratado incidiendo en los conceptos clave para su comprensión y en la indicación de los recursos más recomendables para la preparación del tema en profundidad por parte de los estudiantes.

Seminarios: se dedicarán a la resolución de problemas proporcionados previamente en aula virtual o planteados por el profesor, así como a su exposición y debate. Deben proporcionar a los estudiantes la capacidad de reconocer los fundamentos conceptuales que gobiernan el análisis estructural de las moléculas orgánicas, relacionarlos entre sí y manejarlos de una manera predictiva. Necesitan del trabajo previo de los estudiantes de forma individual o en grupo

EVALUACIÓN

La evaluación del aprendizaje de los estudiantes se basará en:

- 1) los resultados del examen escrito (con una ponderación del 80%).
- 2) los resultados correspondientes a la calidad de la exposición y/o debate sobre la resolución de problemas teórico-prácticos (con una ponderación del 10%).
- 3) evaluación continua (con una ponderación del 10%).



En el expediente del estudiante figurará una calificación del módulo, no de los apartados que lo componen. La calificación del módulo se obtendrá como una media ponderada de las calificaciones emitidas por los diferentes profesores que imparten el mismo, teniéndose en cuenta a este respecto los créditos que cada uno de ellos imparte. En cualquier caso, la nota mínima para aprobar será necesariamente de 4.0 puntos en cada apartado.

REFERENCIAS

Básicas

- Hesse, M.; Meier, H. y Zeeh, B. Métodos espectroscópicos en Química Orgánica, 2ª edición, Editorial Síntesis, 2005.
- Duddeck, H.; Dietrich, W.; Toth, G. Elucidación estructural por RMN, Ed. Springer New York, 1989.
- Ekman R., Silberring J., Westman-Brinkmalm A., Kraj A. Mass spectrometry (Instrumentation, Interpretation, and Applications), John Wiley & Sons, 2009.
- Hammond, C. The basics of Crystallography and Diffraction, Oxford University Press (IUCr Texts in Crystallography, 12) 3rd Edition, 2009.
- Massa, W. Crystal structure determination, Springer-Verlag, 2004.

Complementarias

- Pretsch, E.; Clerc, T.; Seibl, J.; Simon, W. Tablas para la determinación estructural por métodos espectroscópicos, Ed. Springer, Barcelona, 1998.
- Claridge, T. D. W. High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, 2nd Edition, Pergamon: Amsterdam, 2009.
- Keeler, J. Understanding NMR Spectroscopy, Wiley: Chichester, 2005.
- Dass, C. Fundamentals of Contemporary Mass Spectrometry, John Wiley & Sons, 2007.
- 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
- ChemBioOffice Ultra, PerkinElmer (CambridgeSoft). Amplia selección de aplicaciones y funcionalidades que permite estudiar, dibujar, formular, modelar y editar estructuras moleculares químicas y biológicas.