

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

Codi	44708
Nom	Tècniques instrumentals en química orgànica
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	4.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2226 - M.U. en Química Orgànica	Facultat de Química	1	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2226 - M.U. en Química Orgànica	4 - Tècniques instrumentals en química orgànica	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
DEL POZO LOSADA, CARLOS	325 - Química Orgànica

RESUM

Hi ha tres vessants fonamentals d'aplicació de les tècniques instrumentals més emprades: 1) La identificació i quantificació de components d'una mescla, es a dir, de substàncies conegudes, amb estructura, propietats físiques i respostes envers la tècnica d'anàlisi ja descrites: com és ara l'anàlisi de pesticides en aliments o aigües residuals. 2) La determinació estructural d'un compost químic desconegut, que requereix una determinació inequívoca de la seua estructura: per eixample, un fàrmac nou o una nova i desconeguda substància natural extreta d'una planta. 3) L'estudi o investigació de la tècnica en si mateixa, de cara al desenvolupament de nous mètodes que milloren per eixample la sensibilitat o resolució de la tècnica o el desenvolupament de tècniques noves derivades de ella.

Els principis físics en que es fonamenta confereixen característiques diferents a cadascuna de les tècniques instrumentals i la fan més o menys adient per a les dues primeres vessants d'aplicació. L'objectiu de la assignatura es ampliar els coneixements adquirits, de les tres vessants, als estudis de Grau, es a dir, introduir els estudiants a les tècniques instrumentals d'anàlisi més modernes que permeten identificar i determinar l'estructura dels diferents productes que poden obtenir d'un procés i/o de la separació dels components de mescleres complexes de reacció. Al mateix temps, a l'assignatura es pretén proporcionar als estudiats els mitjants per a que, front a un problema, puguin dissenyar i dur a terme l'estratègia d'anàlisi estructural més adient per a la resolució del modo més eficaç possible. Aquest



objectiu se abordarà des de tres perspectives: ressonància magnètica nuclear (RMN), espectrometria de masses (EM) i cristal·lografia de Rajos X (CRX).

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

No shan establert restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits:

Si bé les tècniques espectroscòpiques no tenen una relació directa amb la reactivitat de les molècules orgàniques, la comprensió de les relacions entre els àtoms son fonamentals per la interpretació de les seues propietats espectrals i, la seua localització dintre de la molècula sols es factible quan es dominen les bases fonamentals de la Química Orgànica. Per tant, coneixements previs dels

COMPETÈNCIES

2226 - M.U. en Química Orgànica

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- 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.
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Utilitzar les diferents tècniques d'exposició-oral, escrita, presentacions, panells, etc-per comunicar els seus coneixements, propostes i posicions.
- Ser capaços d'accedir a ferramentes d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.
- Saber participar en debats i discussions, dirigir-los i coordinar-los i ser capaços de resumir-los i extraure d'ells les conclusions més rellevants i acceptades per la majoria.



- Posseir habilitats socials, un bon nivell de comunicació oral i escrita, així com capacitat per a treballar en equip i amb persones de diferents procedències.
- Competències de gestió com ara la capacitat per a la planificació i gestió de temps i recursos, així com per a dirigir i prendre decisions.
- Ser capaços de valorar la necessitat de completar la seua formació científica, en llengües, en informàtica, assistint a conferències o cursos i/o realitzant activitats complementàries, autoavaluant l'aportació que la realització d'estes activitats suposa per a la seua formació integral.
- Aprofundir en els principis en què es basen les tècniques físiques i instrumentals.
- Aprofundir en les tècniques instrumentals d'anàlisi qualitativa i quantitatiu de compostos orgànics: espectroscòpia infraroja, espectroscopia ultravioleta, ressonància magnètica nuclear, espectrometria de masses i difracció de rajos X.
- Saber aprofitar les dades extraïbles dels diferents tipus d'espectres de molècules orgàniques i transformar-los en informació de tipus estructural.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

A aquesta assignatura es pretén situar al estudiant en disposició de resoldre la estructura de molècules de grandària mitjana o petita, mitjançant la mesura i anàlisi de les seues dades espectrals de diferents tipus, així com de formar-los per a que, davant un problema, siguin capaços de dissenyar i dur a terme la estratègia d'anàlisi estructural més adient per a la seua resolució de manera eficaç. S'inclouen indicacions per a la preparació de mostres i us dels aparells (IR, UV, RMN, Rajos X, etc.) de manera que en un futur puguin processar les pròpies mostres.

Els objectius que es pretén aconseguir a la assignatura es resumeixen en els següents punts:

- Coneixement dels principis fonamentals en els que se basen les tècniques físiques i instrumentals.
- Capacitat per interpretar les dades extretes del diferents tipus d'espectres de molècules orgàniques i transformar-los en informació de tipus estructural, incloent tant la connectivitat atòmica com les relacions estèreoquímiques.
- Coneixement clar del llenguatge de la RMN moderna i una ampla percepció de ella com a eina de elucidació estructural aplicable a molt diversos àmbits, estant en disposició de determinar en cada cas el tipus de dades de RMN necessaris per abordar el problema en estudi.
- Dissenyar, seleccionar i/o desenvolupar productes i processos químics eficients (ODS 7) i que minimitzen el seu impacte sobre el medi ambient (ODS 14 i 15), aprofiten matèries primeres alternatives i generen una menor quantitat de residus (ODS 11).



DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Introducció a la espectroscòpia

Absorció de la radiació electromagnètica per molècules orgàniques. Tipus de tècniques espectroscòpiques. Absorció Infra-Roja i tipus de vibracions. Informació estructural. Espectroscòpia ultraviolada i visible. Excitació electrònica i grups cromòfors . La llei de Lambert - Beer. Aspectes bàsics de la Ressonància Magnètica Nuclear. Relaxació nuclear. El desplaçament químic i la seva mida. Intensitat relativa dels senyals.

2. RMN de hidrògen (^1H).

Factors estructurals que influeixen en el desplaçament químic del protó . Acoblament spin-spin: Tipus i Sistemes d'acoblament. Constants d'acoblament. Acoblament heteronuclear. Equivalències química i magnètica. Tècniques bidimensionals en RMN de protó. Efecte Nuclear Overhauser (NOE). Aplicacions quantitatives.

3. RMN de carboni (^{13}C) i daltres nuclis d'interès.

Factors estructurals que influeixen en el desplaçament químic dels carbonis. Acoblaments del carboni amb hidrogen i amb altres nuclis. Tècniques bidimensionals en RMN de ^{13}C Característiques del senyal de RMN d'altres nuclis més comuns : ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P

4. Espectrometria de Masses

Fonaments . Mètodes d'ionització aplicats a l'anàlisi de molècules orgàniques i bio-orgàniques . Tipus d'analitzadors. Tècniques d'anàlisi acoblades amb els espectròmetres de masses. Espectrometria de Masses en tàndem (MS-MS). Aplicacions i aspectes pràctics de les tècniques.

5. Difracció de raigs X

Simetria cristal·lina. Grups espacials. Difracció i estructura cristal·lina. Resolució i afinament d'estructures cristal·lines (monocristall) . Determinació de configuració absoluta. Determinació del empaquetament cristal·lí : Cristalls moleculars. Determinació d'interaccions intermoleculars i acoblament supramolecular en estat sòlid. Bases de dades.



VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	20,00	100
Seminaris	20,00	100
TOTAL	40,00	

METODOLOGIA DOCENT

Els alumnes disposaran prèviament del material didàctic corresponent al curs.

Activitats presencials: Classes teòriques participatives en les que el professor seleccionarà aquells conceptes clau que constitueixen la línia mestra del tema del que es tracte i que són fonamentals per la comprensió del conjunt de la matèria, i dona una visió global del tema, destacant els conceptes claus per la seua comprensió. Indicarà els recursos més recomanables per a una major preparació del tema per part dels estudiants

Seminaris: Se dedicaran a la resolució, exposició i debat, dels problemes proporcionats prèviament a l'aula virtual o plantejats pel professor. Deuen proporcionar als estudiants la capacitat de reconèixer els fonaments conceptuals que governen l'anàlisi estructural de les molècules orgàniques, relacionar-los entre ells i manejar-los de manera predictiva. Es requereix el treball previ dels estudiants bé de forma individual o en grups.

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants es basarà en :

- 1) els resultats de l'examen escrit (amb una ponderació del 80%).
- 2) els resultats corresponents a la qualitat de l'exposició i / o debat sobre la resolució de problemes teoricopràctics (amb una ponderació del 10 %).
- 3) avaluació contínua (amb una ponderació del 10 %).

En l'expedient de l'estudiant hi figurarà una qualificació del mòdul , no dels apartats que el componen. La qualificació del mòdul s'obté com una mitjana ponderada de les qualificacions emeses pels diferents professors que imparteixen el mateix , tenint en compte referent a això els crèdits que cada un d'ells imparteix. En qualsevol cas, la nota mínima per aprovar serà necessàriament de 4.0 punts en cada apartat.



REFERÈNCIES

Bàsiques

- 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.

Complementàries

- 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 selecció de aplicacions y funcionalidades que permite estudiar, dibujar, formular, modelar y editar estructuras moleculares químicas y biológicas.