

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA**

Codi: 44708
Nom: Tècniques instrumentals en química orgànica
Cicle: Màster Universitari Oficial
Crèdits ECTS: 4
Curs acadèmic: 2025-26

TITULACIONS

Titulació	Centre	Curs	Període
2226 - Màster Universitari en Química Orgànica	Facultat de Química	1	Anual

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
2226 - Màster Universitari en Química Orgànica	Tècniques instrumentals en química orgànica	OBLIGATÒRIA

COORDINACIÓ

GIL GRAU SALVADOR

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 exemple, 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 exemple 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'estrategia 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 Raïos X (CRX).



CONEXEMENTS PREVIS

RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ

No s'ha especificat restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

ALTRES TIPUS DE REQUISITS

No s'han 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 són 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 / RESULTATS D' APRENENTATGE

-

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, espectroscòpia ultravioleta, ressonància magnètica nuclear, espectrometria de masses i difracció de rajos X.

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.

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.

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.

Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autòdrida o autònoma.

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 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 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.

Saber aprofitar les dades extraïbles dels diferents tipus d'espectres de molècules orgàniques i transformar-



los en informació de tipus estructural.

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.

Ser capaços d'accedir a ferramentes d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.

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.

Utilitzar les diferents tècniques d'exposició-oral, escrita, presentacions, panells, etc-per comunicar els seus coneixements, propostes i posicions.

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 seua 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 d'altres 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 (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Teoria	20,00
Seminari	20,00
Total hores	40,00

ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	0,00
Estudi i treball autònom	40,00
Preparació de classes	0,00
Preparació d'activitats d'avaluació	10,00
Resolució de casos pràctics	10,00
Total hores	60,00

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'obtindrà 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.

BIBLIOGRAFIA



- Randazzo, A.; Guia Práctica para la Interpretación de Espectros de RMN, Ed. Loghia, 2018.
- Simpson, J. Organic Structure Determination Using 2-D NMR Spectroscopy, 2ªed. Academic Press 2012.
- 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.
- 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.
- Pedro, J. R. y Blay, G., 200 Problemas de Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos, Ed. Visión Libros, 2010.
- 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.