

## ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Identificación y Caracterización Estructural

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

### CARACTERÍSTICAS GENERALES\*

**Tipo:**  Formación básica,  Obligatoria,  Optativa

Trabajo de fin de grado,  Prácticas externas

**Duración:** Semestral

**Semestre/s:** 1

**Número de créditos ECTS:** 5

**Idioma/s:** Castellano, Catalán, Inglés

### DESCRIPCIÓN

**BREVE DESCRIPCIÓN Y JUSTIFICACIÓN** (del sentido de la asignatura en relación a los estudios. Entre 100 y 200 palabras.)

Esta asignatura aporta a los estudiantes los conocimientos y habilidades necesarios para comprender, escoger y utilizar los experimentos de RMN adecuados para establecer la estructura de compuestos químicos, así como conocimientos de las técnicas de difracción de Rayos X y análisis térmicos apropiados para caracterizar sustancias sólidas, centrado sobre todo en las moléculas de tipo orgánico pero utilizable para el trabajo avanzado y la investigación con otros tipos de compuestos, como las biomoléculas. Se insistirá especialmente en la utilidad de las principales técnicas, junto con aspectos experimentales tales como la preparación de las muestras. Del mismo modo, se incluirán aspectos relacionados con el coste económico de los equipos y métodos y temas de seguridad de los mismos.

**COMPETENCIAS** (de la asignatura puestas en relación con las competencias preasignadas en la materia.)

- 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 (**CB6**).
- Que los 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 (**CB7**).
- Que los 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 (**CB8**).
- Que los 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 (**CB9**).

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## **ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL**

**MATERIA:** Identificación y Caracterización Estructural

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

- Poseer conocimientos avanzados de RMN, difracción de rayos X y análisis térmico (**E1**).
- Capacidad para interpretar los resultados obtenidos con RMN, difracción de rayos X y análisis térmico para identificar y determinar la estructura de compuestos químicos (**E2**).
- Capacidad para valorar el impacto del uso de la química en el desarrollo sostenible de la sociedad (**T3**).

**REQUISITOS PREVIOS\*** (módulos, materias, asignaturas o conocimientos necesarios para el seguimiento de la asignatura. Pueden hacerse constar asignaturas que deben haberse cursado.)

Los alumnos que accedan al máster desde titulaciones de Grado o Licenciatura en Química no precisaran ningún Complemento Formativo adicional. Los que accedan desde otras titulaciones, deberán haber cursado previamente materias que incluyan contenidos básicos de química orgánica y de determinación estructural (incluyendo IR, RMN y EM).

**CONTENIDOS** (como relación de los apartados que constituyen el temario de la misma, hasta un detalle de segundo nivel.)

1. ANÁLISIS ELEMENTAL ORGÁNICO.
  - 1.1. Fundamento.
  - 1.2. Aplicaciones.
2. RMN AVANZADA.
  - 2.1. Perspectiva histórica y compendio de experimentos.
  - 2.2. El núcleo atómico.
  - 2.3. Magnetismo nuclear.
  - 2.4. Resonancia.
  - 2.5. Niveles energéticos y espectros.
3. ASPECTOS EXPERIMENTALES DE LA RMN
  - 3.1. El espectrómetro.
  - 3.2. Preparación de muestra.
  - 3.3. Adquisición del espectro.
4. PROCESADO DE ESPECTROS DE RMN.
  - 4.1. Espectros 1D-RMN.
  - 4.2. Espectros 2D-RMN.
5. ESPECTROS DE  $^1\text{H}$ -RMN.
  - 5.1. El experimento.
  - 5.2. Parámetros espectrales.
  - 5.3. Ejercicios.

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## **ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL**

**MATERIA:** Identificación y Caracterización Estructural

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

6. ESPECTROS DE  $^{13}\text{C}$ -RMN.
  - 6.1. Experimentos de  $^{13}\text{C}$ -RMN.
  - 6.2. Parámetros espectrales.
  - 6.3. El experimento APT.
  - 6.4. El experimento DEPT.
  - 6.5. Ejercicios.
7. ESPECTROS 1D-RMN DE OTROS NÚCLEOS CON ESPÍN  $\frac{1}{2}$ .
  - 7.1. Espectros de  $^{19}\text{F}$ -RMN.
  - 7.2. Espectros de  $^{31}\text{P}$ -RMN.
  - 7.3. Espectros de  $^{15}\text{N}$ -RMN.
8. LA SEGUNDA DIMENSIÓN EN RMN.
  - 8.1. Adquisición y tratamiento de datos.
  - 8.2. Espectros 2D-RMN.
9. ESPECTROS 2D-RMN CON CORRELACIÓN ESCALAR HOMONUCLEAR.
  - 9.1. Espectros COSY.
  - 9.2. Espectros TOCSY.
  - 9.3. Espectros INADEQUATE.
10. ESPECTROS 2D-RMN CON CORRELACIÓN ESCALAR HETERONUCLEAR.
  - 10.1. Espectros HSQC y HMQC.
  - 10.2. Espectros HMBC.
  - 10.3. Espectros HETCOR.
11. ESPECTROS 2D-RMN CON CORRELACIÓN A TRAVÉS DEL ESPACIO.
  - 11.1. Relajación y NOE.
  - 11.2. Experimentos de NOE estacionario.
  - 11.3. Experimentos de NOE transitorio.
12. RMN DINÁMICA.
  - 12.1. Intercambio químico y espectros de RMN.
  - 12.2. Movilidad molecular: Espectros DOSY.
  - 12.3. Aplicaciones.
13. PROBLEMAS COMBINADOS DE ESPECTROSCOPIA.
  - 13.1. Problemas de espectros 2D-RMN.
  - 13.2. Problemas combinados de espectroscopia.
14. EL ESTADO CRISTALINO.
  - 14.1. Cristales, celda unidad y sistemas cristalinos.
  - 14.2. Cristales y simetría.
15. DIFRACCIÓN DE RAYOS X.
  - 15.1. Los rayos X.
  - 15.2. Preparación de monocristales.
  - 15.3. Montaje y determinación de la celda.

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Identificación y Caracterización Estructural

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

- 15.4. Determinación de la estructura cristalina.
- 15.5. Difracción de polvo.
- 15.6. Utilidad analítica.
- 16. ANÁLISIS TÉRMICO
  - 16.1. Introducción.
  - 16.2. Termogravimetría.
  - 16.3. Análisis térmico diferencial.
  - 16.4. Calorimetría de barrido diferencial.

### METODOLOGÍA

**ACTIVIDADES FORMATIVAS\*** (Completar la tabla relacionando actividades, carga de trabajo, en créditos ECTS, y competencias.)

Actividades formativas	Horas /Créditos ECTS	Competencias
Sesiones de exposición de conceptos	31 / 1,15	E1, E2, T3, CB6, CB7
Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos	4 / 0,15	E1, E2, T3, CB6, CB7
Seminarios	2 / 0,07	E1, E2, T3, CB7, CB8, CB9
Actividades obligatorias despacho profesor	-	
Trabajo práctico / laboratorio	-	
Presentaciones	4 / 0,15	E1, E2, T3, CB8, CB9
Actividades de estudio personal por parte de los estudiantes	90 / 3,33	E1, E2, T3, CB6, CB7, CB8
Actividades de evaluación (exámenes, controles de seguimiento...)	4 / 0,15	E1, E2, T3, CB9
<b>TOTAL</b>	<b>135 / 5</b>	

**EXPLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA DIDÁCTICA** (justificando los métodos didácticos usados en relación a las competencias y los contenidos de la asignatura. Entre 100 y 200 palabras.)

En las **sesiones de exposición de conceptos** se presentan los conceptos incluidos en el programa, utilizando las *técnicas clásicas: tiza-pizarra y proyecciones*.

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Identificación y Caracterización Estructural

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

**Sesiones de resolución de ejercicios:** Se dispone de colecciones de ejercicios, que se van entregando a los alumnos a lo largo del curso. Con los ejercicios se intenta ayudar al alumno a comprender, profundizar y relacionar los conceptos estudiados en las sesiones de exposición de conceptos. En clase se resuelven *ejercicios-tipo*, poniendo énfasis en aquellos ejercicios que suponen mayores dificultades para los alumnos.

**Seminarios:** Se imparten sobre un tema concreto, o una parte de la asignatura, para reforzarlo o, simplemente, atender las dudas que hayan surgido al estudiar sin la limitación que el factor tiempo impone a los otros tipos de clase.

**Presentaciones:** Presentación oral al profesor y, eventualmente, a otros alumnos, de un trabajo práctico o proyecto encargado al alumno.

**Consultas individuales y en grupo en el despacho del profesor:** Los alumnos pueden efectuar sus consultas al profesor de forma individual o en grupos de dos a cinco personas

**Actividades de evaluación:** Realización por parte del alumno de uno o más controles escritos durante el periodo lectivo de la asignatura y examen final escrito una vez finalizada la misma.

### EVALUACIÓN

**MÉTODOS DE EVALUACIÓN\*** (Completar la tabla relacionando métodos de evaluación, competencias y peso en la calificación de la asignatura.)

Métodos de evaluación	Peso	Competencias
Examen final	48%	E1, E2, T3 CB6, CB7, CB8
Examen/es parcial/es	-	
Actividades de seguimiento	24%	E1, E2, T3 CB6, CB7
Trabajos y presentaciones	24%	E1, E2, T3 CB8, CB9
Trabajo experimental o de campo	-	
Proyectos	-	
Valoración de la empresa o institución	-	
Participación	4%	T3

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## **ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL**

**MATERIA:** Identificación y Caracterización Estructural

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

**RESULTADOS DE APRENDIZAJE** (Explicación de las realizaciones del alumno que permiten la evaluación de competencias, relacionándolos con las competencias y los métodos de evaluación.)

El estudiante debe demostrar su conocimiento de la aplicación de la RMN en la identificación y en la determinación de la estructura de compuestos químicos (CB6, CB7, CB8, E1, E2, T3). Examen final, Actividades de seguimiento, Trabajos y presentaciones, y Participación.

El estudiante debe demostrar su conocimiento de la aplicación de la difracción de rayos X en la identificación y en la determinación de la estructura de compuestos químicos (CB6, CB7, CB8, E1, E2, T3). Examen final, Actividades de seguimiento, Trabajos y presentaciones, y Participación.

El estudiante debe demostrar su conocimiento en la aplicación del análisis térmico en la determinación de la estructura de compuestos químicos (CB6, CB7, CB8, E1, E2, T3). Examen final, Actividades de seguimiento, Trabajos y presentaciones, y Participación.

El estudiante debe saber interpretar los resultados obtenidos con RMN, difracción de rayos X y análisis térmico para identificar y determinar la estructura de compuestos químicos (CB6, CB7, CB8, E1, E2, T3). Examen final, Actividades de seguimiento, Trabajos y presentaciones, y Participación.

El estudiante debe demostrar el conocimiento de las principales propiedades químicas de los productos químicos más importantes, así como las repercusiones derivadas de su uso incorrecto (CB9, T3). Examen final, Actividades de seguimiento, Trabajos y presentaciones, y Participación.

**CALIFICACIÓN** (Explicación del sistema de cómputo de la calificación de la asignatura.)

La calificación de esta asignatura se obtiene:

<b>Examen final:</b>	48%
<b>Actividades de seguimiento:</b>	24%
<b>Trabajos y presentaciones:</b>	24%
<b>Participación:</b>	4%

Las **actividades de seguimiento** evaluarán por escrito los conocimientos que van adquiriendo los alumnos a lo largo del curso.

Los **trabajos y presentaciones** incluyen tareas propuestas durante el curso.

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Identificación y Caracterización Estructural

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

**EVALUACIÓN DE LAS COMPETENCIAS** (Definir expresiones de cálculo para cada competencia en función de las actividades de evaluación correspondientes.)

Competencias	Métodos de evaluación	Observaciones
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 (CB6).	Examen final Actividades de seguimiento	Preguntas de Teoría
Que los 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 (CB7).	Examen final Actividades de seguimiento	Preguntas de Problemas
Que los 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 (CB8).	Examen final Trabajos y presentaciones	Preguntas de justificar e interpretar resultados
Que los 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 (CB9).	Trabajos y presentaciones	Actividades específicas en seminarios o clase
Poseer conocimientos avanzados de RMN, difracción de rayos X y análisis térmico para aplicarlos en investigación de fármacos (E1).	Examen final Actividades de seguimiento Trabajos y presentaciones	Preguntas sobre análisis estructural aplicadas a sectores concretos. Actividades específicas en seminarios o clase
Capacidad para interpretar los resultados obtenidos con RMN, difracción de rayos X y análisis térmico para identificar y determinar la estructura de compuestos químicos (E2).	Examen final Actividades de seguimiento Trabajos y presentaciones	Preguntas de Teoría. Actividades específicas en seminarios o clase
Capacidad para valorar el impacto del uso de la química en el desarrollo sostenible de la sociedad (T3).	Examen final Actividades de seguimiento Trabajos y presentaciones Participación	Preguntas de Teoría. Actividades específicas en seminarios o clase.

La calificación de cada competencia se realizará aplicando los porcentajes indicados en el apartado "Calificación" para cada uno de los métodos de calificación especificados en la tabla, normalizando seguidamente a 100%.

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Identificación y Caracterización Estructural

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

### BIBLIOGRAFÍA (recomendada y accesible al alumno.)

- R.M. Silverstein, F.X. Webster y D.J. Kiemle, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 7<sup>th</sup> edition, John Wiley & Sons, USA, 2005.
- M. Hesse, H. Meier y B. Zeeh, *Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica*, 2<sup>a</sup> edición ampliada y actualizada, Ed. Síntesis, Madrid, 2005.
- H. Friebolin, *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, 4<sup>th</sup> Completely Revised and Updated Edition, Wiley-VCH, Weinheim, 2005.
- J.K.M. Sanders y B.K. Hunter, *Modern NMR Spectroscopy. A Guide for Chemists*, Oxford University Press, Oxford, 1994.
- T.D.W. Claridge, *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*, Pergamon, Oxford, 1999.
- J. Keeler, *Understanding NMR Spectroscopy*, John Wiley & Sons, Chichester, 2005.
- S.A. Richards y J.C. Hollerton, *Essential Practical NMR for Organic Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester, 2011.
- E. Breitmaier, *Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester, 1995.
- E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl y W. Simon, *Tablas para la Determinación Estructural por Métodos Espectroscópicos*, Springer-Verlag Ibérica, Barcelona, 1998.
- W. Clegg, *Crystal Structure Determination* (Oxford Chemistry Primers, 60), Oxford University Press, Oxford, 1998.
- C. Pico, M.L. López y M.L. Veiga, *Cristaloquímica de Materiales*, Ed. Síntesis, Madrid, 2007.
- R.A. Meyers (ed.), *Encyclopedia of Analytical Chemistry. Applications, Theory and Instrumentation*, John Wiley & Sons, Chichester, 2000.

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).



## **ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL**

**MATERIA:** Identificación y Caracterización Estructural

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

### **HISTÓRICO DEL DOCUMENTO**

**MODIFICACIONES ANTERIORES** (Indicar fecha y autor/es, las más recientes primero)

02 de Septiembre de 2016, Dr. Xavier Batllori

04 de Septiembre de 2014, Dr. Xavier Batllori

**ÚLTIMA REVISIÓN** (Indicar fecha y autor/es)

25 d'Octubre de 2017, Dr. Xavier Batllori