

Asunto:
Plan docente Curso 2024-25

Código: P/CL009_D002



PLAN DOCENTE DE LA ASIGNATURA

Identificación y características de la asignatura											
Código	400869	C	réditos ECTS	6							
Denominación (español)	Técnicas Avanzadas en química										
Denominación (inglés)	Advanced Techniques in Chemistry										
Titulación	Máster Universitario en Química Sostenible										
Centro	FACULTAD DE CIENCIAS										
Semestre	2º Carácter Optativo										
Módulo	Módulo Específico										
Materia	Especialidad en Química										
Profesor/es											
Nombre	Despacho		Correo-e	Pági	na web						
Juan García de la Concepción	Planta baja (Edi Viguera Lobo)	ficio	jugarco@unex.es								
Profesor pendiente de contratación											
Profesor pendiente de contratación											
Área de conocimiento	Química Orgánica										
Departamento	Química Orgánica e Inorgánica										
Profesor coordinador (si hay más de uno)	Juan García de la Concepción										

Competencias

- 1. CEQ1. Dominio avanzado de conceptos y resultados químicos que, partiendo de la formación recibida en un grado con amplios contenidos de química, le sitúen en disposición de realizar aportaciones originales en el área de Química Orgánica.
- 2. CEQ2. Capacidad de redacción, interpretación científica y comunicación oral a públicos especializados de documentos de química —artículos de revistas especializadas, tesis doctorales, libros o partes de libros de especialización, etc- de una complejidad de nivel de posgrado en el área de Química Orgánica.
- 3. CEQ3. Conocimiento de las principales revistas científicas especializadas en el área de Química Orgánica, de los niveles estándar de los artículos habitualmente publicados en ellas y de algunos grupos de investigación y congresos nacionales o extranjeros más relacionados con las líneas de investigación que se desarrollan en la UEx
- 4. CEQ4. Capacidad de resolución de problemas de Química Orgánica de un nivel de complejidad de segundo ciclo
- 5. CEQ5. Capacidad de comunicación de resultados de química de nivel de grado y máster a alumnos de nivel de posgrado en Química.
- 6. CEQ6. Adquisición de herramientas informáticas especializadas de utilidad en la investigación en química y su divulgación (bases de datos y bibliográficas, hojas de cálculo, software químico, paquetes gráficos, etc...)
- 7. CEQ7. Completar la formación de química obtenida en el grado.

Contenidos

Breve descripción del contenido



Asunto: Cód
Plan docente Curso 2024-25 P/CL00

Código: P/CL009_D002



En esta asignatura se pretende dar una formación complementaria avanzada acerca de las técnicas instrumentales de determinación estructural más utilizadas en el área de Química Orgánica.

Se describen los fundamentos teóricos y aplicación práctica de los principales procedimientos y técnicas experimentales empleadas en la investigación en éste área, complementándose la formación adquirida durante el Grado en Determinación Estructural de Moléculas Orgánicas.

Las líneas de investigación actualmente en desarrollo abarcan aspectos como síntesis y reactividad química, química sostenible, química supramolecular, nuevos materiales, química teórica y computacional, catálisis.

Temario de la asignatura

Denominación del tema 1: **Técnicas espectroscópicas de interacción radiación electromagnética**materia.

Contenidos del tema 1: - Espectroscopia ultravioleta-visible. Introducción teórica. Prácticas.

- Dicroísmo Circular y Dispersión Óptica Rotatoria. Introducción teórica. Prácticas.
- Complementos de Espectroscopía IR. Interpretación de Espectros. Registro de espectros.
- Espectroscopía Raman. Introducción Teórica. Interpretación de Espectros. Registro de espectros.
- -Espectroscopía de Resonancia de spin electrónico. Introducción Teórica. Interpretación de Espectros.
- Complementos de ¹H- y ¹³C-RMN. RMN avanzada. RMN Multidimensional.
- RMN dinámica. RMN a temperatura variable. RMN de otros núcleos. Prácticas.

Descripción de las actividades prácticas del tema 1: Registro e interpretación de espectros

Denominación del tema 2: Análisis elemental, peso molecular y fragmentaciones

Contenidos del tema 2: - Complementos de Espectrometría de Masas. Avance de las técnicas. Prácticas. Descripción de las actividades prácticas del tema 2: Interpretación de espectros

Actividades formativas											
Horas de trabajo del estudiante por tema		Hora s	Actividades prácticas				Actividad de seguimiento	No presencial			
Tema	Total	GG	СН	L	0	S	TP	EP			
1	120	35				11	6	68			
2	30	11				3	1,5	14,5			
3											
•••											
Evaluación											
TOTAL	150	46				14	7,5	82,5			

GG: Grupo Grande (85 estudiantes).

- CH: Actividades de prácticas clínicas hospitalarias (7 estudiantes).
- L: Actividades de laboratorio o prácticas de campo (15 estudiantes).
- O: Actividades en sala de ordenadores o laboratorio de idiomas (20 estudiantes)
- S: Actividades de seminario o de problemas en clase (40 estudiantes).
- TP: Tutorías Programadas (seguimiento docente, tipo tutorías ECTS).
- EP: Estudio personal, trabajos individuales o en grupo, y lectura de bibliografía.

Metodologías docentes

- 1. Presentación en el aula de los contenidos de las diferentes materias con la ayuda de pizarra o programas informáticos de presentaciones.
- 2. Prácticas en laboratorios científicos, informáticos o de idiomas, en función de los cursos monográficos ofertados.
- 3. Exposición de uno o varios estudiantes con discusión posterior sobre lecturas o trabajos realizados.
- Trabajos realizados por el estudiante de forma independiente bajo la orientación científica,



Código:

P/CL009 D002



bibliográfica, didáctica y metodológica del profesor, con el fin de profundizar o completar las competencias del módulo.

- 5. Lecturas bibliográficas individuales, algunas de ellas en inglés, seleccionadas por el profesor para reforzar o ampliar las competencias del módulo.
- 6. Profesor para guiar a los alumnos en sus lecturas, trabajos, realización de tareas y estudio personal.
- 7. Estudio y trabajo independiente del alumno para la preparación de tareas, trabajos y exámenes.
- 8. Examen final sobre los contenidos de las materias y las prácticas realizadas.

Asunto:

Plan docente Curso 2024-25

Resultados de aprendizaje

- Especializar la formación general adquirida en los grados en Química e Ingeniería Química en al menos una de las áreas relacionadas con la especialidad.
- Adquirir la capacidad de realizar una tesis doctoral en alguna de las líneas de investigación que se oferten en el programa de doctorado cuyo periodo de formación sea el MUI en Ciencias Especialidad en Química.
- Proporcionar al estudiante instrumentos para la transmisión del conocimiento y métodos de la Química y la Ingeniería Química.

Sistemas de evaluación

La modalidad de evaluación será continua.

En la **evaluación continua** los alumnos obtendrán una calificación de la asignatura que será la resultante de aplicar un sistema ponderado en el que las actividades programadas durante el curso, especificadas a continuación, pueden suponer hasta el 100% de la calificación de la asignatura:

- Asistencia y participación activa en las clases teóricas y resolución de problemas por parte del alumno en seminarios: 20% (Actividad no recuperable).
- Elaboración de trabajos: 15% (Actividad no recuperable).
- Exposición oral de un trabajo en clase: 15% (Actividad no recuperable).
- Uno o dos **exámenes parciales optativos**: hasta un 50%. El alumnado que no apruebe alguno de ellos tendrá la oportunidad de recuperarlo en el **examen final** de la convocatoria oficial (hasta un 50%). Estas pruebas se realizarán en un horario que no interrumpa otras actividades académicas programadas (*Actividad recuperable*).

Bibliografía (básica y complementaria)

Tema 1: Técnicas espectroscópicas de interacción radiación electromagnética-materia.

Resonancia de Spin Electrónico:

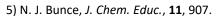
- 1) D. W. Werst y A. A. D. Trifunac, Acc. Chem. Res., 1998, 31, 651.
- 2) H. Kurreck, B. Kirste y W. Lubitz, Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 1984, 23, 173.
- 3) H. W. Wardale, en "An Introduction to spectroscopic Methods for the Identification of Organic Compounds", Ed. Scheinmann, vol. 2, pág. 153, "An Introduction to Electron Spin Resonance Spectroscopy".
- 4) A. Schweiger, Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 1991, 30, 265.



Código:

P/CL009_D002





Asunto:

Plan docente Curso 2024-25

6) "Reactive Intermediates in Organic Chemistry", N. S. Isaacs, Ed. Wiley and Sons, 1974.

RMN Avanzado:

1) R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, Spectrometric Identification of Organic Compounds, Wiley, 2005.

RMN Dinámico:

- 1) L. M. Jackman y S. Sternhell. Applications of Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy in Organic Chemistry. Pergamon Press, 2nd Edition.
- 2) E. Breitmaier. Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. A practical Guide, Wiley, 1993.
- 3) M. Ávalos, R. Babiano, J. L. Barneto, J.L. Bravo, P. Cintas, J.L. Jiménez, and J.C. Palacios, "Can We Predict the Conformational Preference of Amides?", *J. Org. Chem.* **2001**, *66*, 7275.
- 4) W. R. Croasmun y R. M. K. Carlson. Two-dimensional NMR spectroscopy. WILEY-VCH, 1994.
- 5) R. M. Silverstein, F. X. Webster y D. J. Kiemle, Spectroscopy identification of organic compounds. John, Wiley and Sons, 2005.

Espectroscopia IR y Raman:

- 1) R. T. Conley, Espectroscopía Infrarroja, Ed. Alhambra, 1979.
- 2) K. Nakanishi, Infrared Absorptio Spectroscopy, Ed. Holden-Day, 1962.
- 3) J. C. P. Schwarz, Métodos Físicos en Química Orgánica, Ed. Acribia, 1968.

Dicroísmo Circular:

1) N. Beroya, K. Nakanishi, R. W. Woody, Circular Dichroism. Principles and Applications, Wiley-VCH, 2000.

Espectroscopia ultravioleta-visible:

- 1) R. M. Silverstein, F. X. Webster y D. J. Kiemle, Spectroscopy identification of organic compounds. John, Wiley and Sons, 2005.
- 2) J. C. P. Schwarz, Métodos Físicos en Química Orgánica, Ed. Acribia, 1968.

Tema 2: Análisis elemental, peso molecular y fragmentaciones Espectrometría de Masas:

- 1) Molecular Analysis by Mass Spectrometry, Science 1979, 205, 151.
- 2) Some Recent Applications of Field Ionization/Field Desorption Mass Spectrometry to Organic Chemistry, *Tetrahedron* **1982**, *38*, 1125.
- 3) FAB: Mass Spectrometry of Carbohydrates, *Advances in Carbohydrate Chemistry and Biochemistry* **1987**, *45*, 19.
- 4) Detecting Noncovalent Complexes of Bilogical Macromolecules: New Applications of Ion-Spray Mass Spectrometry, *Chemtracts-Organic Chemistry* **1993**, *6*, 1.
- 5) Mass Spectrometry of Aerosols, Chem. Rev. 1999, 99, 3007.
- 6) Mass Spectrometry of Polymers and Polymer Surfaces, Chem. Rev. 2001, 101, 527.
- 7) Mass Analysis at the Adveat of the 21st Century, Chem. Rev. 2001, 101, 571.
- 8) Methods of Ion Generation, Chem. Rev. 2001, 101, 361.

Otros recursos y materiales docentes complementarios

Se entregará a los alumnos diversos trabajos originales de investigación relacionados con cada tema para que analicen la información contenida.

Los alumnos también harán búsquedas bibliográficas relacionadas con los contenidos de los temas.



Asunto: Plan docente Curso 2024-25 **Código:** P/CL009_D002

