

TÉCNICAS INSTRUMENTALES

6 ECTS (45 h teoría+ 12,5 h prácticas + 6 propedéutico RMN + evaluaciones) Obligatoria

Tema	Contenido	Profesores y horas alumno
T1. Elucidación estructural por espectrometría de masas	Fundamentos de la espectrometría de masas (EM). Resolución. Análisis isotópico. Procesos de fragmentación. Tipos de fragmentación asociados a grupos funcionales. Interpretación de espectros.	Dra Ona Illa, 3 h Prof. Dpt. Química, UAB
T2. Cromatografía y espectrometría de masas	Cromatografía de gases. Cromatografía líquida. Espectrometría de masas acoplada a cromatografía. Prácticas de espectrometría de masas elemental mediante ionización de plasma (ICP-MS). Prácticas de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas de impacto electrónico (GC-MS); identificación de sustancias mediante librerías de espectros. Prácticas de cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas de electrospray y alta resolución (LC-MS).	Dra. Alba Eustaquio, 10 h + 6,5 h prácticas Directora técnica SAQ Dr. Ignacio Villarroya, Responsable espectroscopia SAQ Sr. Oscar Palacios, Responsable cromatografía i espectrometría de masas SAQ Sra. M. Jesús Berge, Técnica SAQ
T3. Viscosidad	Viscosidad. Definición. Unidades. Viscosidad de un gas. Viscosidad de un líquido. Viscosidad de un polímero. Medidas de viscosidad.	Dra. Iluminada Gallardo, 3 h Prof. Dpt. Química, UAB
T4. Estado sólido. Técnicas de difracción	El estado sólido. Cristales y sólidos amorfos: consideraciones estructurales y termodinámicas. Polimorfismo y cocristales. Difracción. Geometría e intensidades. Rayos X, neutrones y sincrotrón: instrumentación y aplicaciones. Difracción de monocristal. Determinación estructural. Difracción de polvo. Identificación, análisis cuantitativo, determinación de cristalinidad, análisis estructurales.	Dr. Ángel Álvarez, 7,5 h Director Técnico del Servicio de Difracción de Rayos X
T5. Fundamentos de RMN <i>Curso propedéutico opcional</i>	El método experimental. Aspectos básicos de la RMN: desplazamientos químicos (apantallamiento, anisotropía magnética, efecto del disolvente), rangos y referencias. Acoplamiento spin-spin (constantes de acoplamiento, multiplicidad). Análisis de espectros simples en 1D de ^1H y ^{13}C .	Dra. Ona Illa, 6 h Prof. Dpt. Química, UAB

<p>T6. Determinación estructural mediante RMN</p>	<p>Experimentos de RMN en 1D y 2D para el análisis estructural, estereoquímico y conformacional molecular en solución. Estrategia básica y uso concertado de espectros de RMN. Parámetros de RMN: acoplamientos escalares, dipolares, relajación, difusión. Experimentos heteronucleares.</p> <p>Prácticas: Trabajo experimental <i>in-situ</i> en espectrómetros de RMN. Protocolos para la adquisición y procesamiento de datos de RMN. Análisis e interpretación espectral. Ejecución práctica de experimentos 1D y 2D descritos en la teoría. Elucidación de muestra de origen desconocido</p>	<p>Dr. Teodor Parella, 8 h +6 h prácticas Director Técnico Servicio RMN, UAB Dr. Pau Nolis Técnico del Servicio de RMN, UAB Dra. Eva Monteagudo, Técnica del Servicio de RMN, UAB</p>
<p>T7. Técnicas espectroscópicas y espectrométricas</p>	<p>Espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR), Raman y espectrometría de movilidad iónica (IMS): fundamentos teóricos de las técnicas y del instrumental, presentación de muestra, obtención y tratamiento de la señal analítica, desarrollo del método analítico y ejemplos de aplicaciones en la industria.</p>	<p>Dr. Manel Alcalá, 7,5 h Prof. Dpt. Química, UAB</p>
<p>T8. Validaciones</p>	<p>Procedimientos de validación analítica. Demostración de la idoneidad del procedimiento analítico para su propósito en el laboratorio. Validación de métodos de identificación, control de impurezas y ensayos de cuantificación.</p>	<p>Dr. Manel Alcalá, 6 h Prof. Dpt. Química, UAB</p>