

TÉCNICAS INSTRUMENTALES (Bienio 2024-2025)

Coordinador: Manel Alcalà (manel.alcala@uab.cat). Tf: 935814899

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

6 curso de RMN propedéutico

MÁSTER EN QUÍMICA FINA Y POLÍMEROS



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 (GC-MS) de impacto electrónico; identificación de sustancias mediante librerías de espectros. Prácticas de cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas (LC-MS) con ionización por electrospray y alta resolución.	Dra. Alba Eustaquio, 10 h (EV*) Directora técnica del SAQ, UAB Prácticas 6,5 h : Dr. Ignacio Villarroya, Responsable espectroscopia SAQ Sr. Oscar Palacios, Responsable cromatografía y espectrometría de masas SAQ Sra. M ^a 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, (EV*) Director técnico del Servei de Difracció de Raigs X, UAB
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

T6. Determinación estructural mediante RMN	<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.</p> <p>Elucidación de muestra de origen desconocido</p>	<p>Dr. Pau Nolis Técnico del SeRMN, UAB, 8 h, (EV*) Prácticas, 6 h Dra. Eva Monteagudo i Dra. Miriam Pérez, Técnicas del SeRMN, UAB</p>
T7. Técnicas espectroscópicas y espectrométricas	<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 Alcalà, 7,5 h Prof. Dpt. Química, UAB</p>
T8. Validaciones	<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 Alcalà, 6 h Prof. Dpt. Química, UAB</p>
S1. Seminario uso SciFinder <i>Seminario opcional</i>	<p>Conexión a la base de datos. Tipos de búsquedas (referencia, sustancia, reacción,...). Refinamiento de las búsquedas.</p>	<p>Dr. Ona Illa, 2 h Prof. Dpt. Química, UAB</p>

EV* evaluación fuera de las horas de clase