



GUÍA DOCENTE

SJH052 - Técnicas Avanzadas en Química

Curso académico 2020/2021

Titulación: Máster Universitario en Química Sostenible (Plan de 2020)

1. Información general de la asignatura

Departamento: Dep. de Química Inorgánica y Orgánica

Área de conocimiento: Química Orgánica

Departamento: Dep. de Química Inorgánica y Orgánica

Área de conocimiento: Química Inorgánica

Departamento: Dep. de Física

Área de conocimiento: Física Aplicada

Carácter: Optativa

Semestre: Anual

Créditos: 6

Idiomas en los que se imparte la asignatura: Consultar [SIA](#)

Profesor responsable: Belén Altava Benito

Para consultar el listado de profesores que imparte la asignatura hay que consultar el [SIA](#).

Horarios: Consultar apartado de horarios en la [web del estudio](#)

2. Justificación

En esta asignatura se estudiarán las técnicas de caracterización molecular y materiales

3. Conocimientos previos recomendables

Se requieren conocimientos de los conceptos fundamentales de estructura-enlace en los compuestos orgánicos así como conceptos teóricos básicos de espectroscopía. Estos conocimientos se adquieren normalmente en los estudios de grado de las titulaciones de Química, Farmacia, Ingeniería Química y Biología

4. Competencias y resultados de aprendizaje

Competencias genéricas y específicas

CB10 - Que los estudiantes posean habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CB6 - 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.

CB7 - 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.

CB8 - 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.

CB9 - 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.

CG01 - Conocer los principios de la química e ingeniería sostenibles y tener una visión de los avances históricos que han dado lugar al desarrollo de la química verde y otros principios asociados así como los protocolos que permiten su evaluación y aplicación en casos reales.

E2 - Demostrar las ventajas y desventajas de cada una de las denominadas tecnologías sostenibles en el campo de la Química.

E4 - Valorar adecuadamente ejemplos de procesos industriales donde se cumplen los principios de la química sostenible.

E5 - Utilizar las tendencias actuales de la Química Verde para poder realizar un análisis crítico sobre el grado de cumplimiento de los postulados de la Química Sostenible en un determinado proceso industrial.

G2 - Capacidad de organización, comprensión, análisis y síntesis oral y escrita en el ámbito de la química sostenible en la investigación y los procesos industriales.

G3 - Aplicar las herramientas de la química sostenible en la obtención de compuestos de interés en la industria química.

Resultados de aprendizaje

TAQ_01 Adquirir conocimientos en química avanzada tanto teóricos como experimentales.

TAQ_02_Saber caracterizar un compuesto mediante las diferentes técnicas experimentales.

TAQ_03_Saber proponer diferentes rutas sintéticas utilizando diferentes reactivos de partida para obtener un compuesto.

TAQ_04_Saber buscar información bibliográfica.

5. Contenidos

- Preparación de materiales.
- Caracterización de materiales: DRX, SEM, TEM, XPS, UPS, UV-vis.
- Caracterización molecular: RMN, RSE, Masas, IR, UV-vis, CD.
- Nuevos métodos de activación: Microondas, Sonoquímica, Alta Presión.

6. Temario

En función de la línea de investigación o grupo de investigación adscrito se estudiarán las siguientes técnicas:

- Preparación de materiales.
- Caracterización de materiales: DRX, SEM, TEM, XPS, UPS, UV-vis.
- Caracterización molecular: Espectroscopía de FT-IR, Espectroscopía RAMAN, Espectroscopía UV-Vis, Espectrometría de masas, Resonancia magnética nuclear (protón, carbono-13, ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P), Resonancia magnética nuclear en dos dimensiones (COSY, HSQC, NOE...), Resonancia de Espín Electrónico, Difracción de RX, Dicroísmo Circular
- Nuevos métodos de activación: Microondas, Sonoquímica, Alta Presión.

7. Bibliografía

7.1. Bibliografía básica

Métodos espectroscópicos en química orgánica. M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh. Ed. Síntesis, Madrid, 1ª ed. 1997 (2ª ed. 2005).

Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos. E. Prestch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon. Ed. Alhambra, Madrid 1993.

Spectrometric Identification of Organic Compounds. R. M. Silverstein, F. X. Webster. Ed. Wiley, 7ª ed. 2005.

2) E. Breitmaier. Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. A practical Guide, Wiley, 1993.

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.

W. R. Croasmun y R. M. K. Carlson. Two-dimensional NMR spectroscopy. WILEYVCH, 1994.

Determinación estructural de compuestos orgánicos. E. Prestch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera. Ed. Masson, Barcelona, 1ª ed. 2002.

L. M. Jackman y S. Sternhell. Applications of Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy in Organic Chemistry. Pergamon Press, 2nd Edition

Fundamentals of UV-visible spectroscopy, Tony owen 1996

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

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

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.
- 5) N. J. Bunce, J. Chem. Educ., 11, 907.
- 6) "Reactive Intermediates in Organic Chemistry", N. S. Isaacs, Ed. Wiley and Sons, 1974.
- 7) Almanaque de Bruker, 1998.

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.

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 Biological 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 Advent of the 21st Century, Chem. Rev. 2001, 101, 571.
8) Methods of Ion Generation, Chem. Rev. 2001, 101, 361.

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

Sonoquímica y Microondas:

- 1) J. Clark, D. Macquarrie, Handbook of Green Chemistry and Technology, Wiley-Blackwell, 2002
2) T. J. Mason, Sonochemistry (Oxford Chemistry Primers), Oxford University Press, 2000
3) J. L. Capelo-Martínez, Ultrasound in Chemistry. Analytical Applications, Wiley-VCH, 2009
4) Lindley, J.; Mason, T.J. Chem Soc Rev. 1987, 16, 275.
5) Abdulla, R.F. Aldrichimica Acta 1988, 21, 31.
6) Mason, T. J., Lorimer, J.P. Sonochemistry: Theory, Applications, and Uses of Ultrasounds in Chemistry; Ellis Horwood: Chichester, 1988.
7) Thibaud P. Caulier and Jacques Reisse J. Org. Chem., 1996, 61, 2547.
8) A. Loupy. Microwaves in organic synthesis. A. Loupy. WILEY-VCH, 2002.

Alta presión:

- 1) T. Asano y W. J. le Noble, Chem. Rev., 1978, 78, 407.
2) K. Matsumoto, A. Sera y T. Uchida, Synthesis, 1985, 1.
3) K. Matsumoto y A. Sera, Synthesis, 1985, 999.
4) R. van Eldik, T. Asano y W. J. le Noble, Chem. Rev., 1989, 89, 549.
5) N. S. Isaacs, Tetrahedron, 1991, 47, 8463.
6) G. Jenner, Tetrahedron, 2002, 58, 5185.

7.2. Bibliografía complementaria

7.3. Direcciones web de interés

<http://www.ugr.es/~quiorred/espec/espec.htm> (Espectroscopía general)

<http://www.umass.edu/microbio/chime/ir-spect/> (IR)

<http://www.chem.ucla.edu/~webspectra> (RMN e IR, problemas)

<http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr> (RMN)

<http://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/VirtTxtJml/Spectrpy/spectro.htm#contnt> (Espectroscopía general)

7.4. Otros recursos

8. Metodología didáctica

- a) Sesiones de enseñanzas teóricas. Consistirán en clases magistrales impartidas por el profesor, con utilización de la pizarra y medios audiovisuales. El material necesario para seguir las clases magistrales se encuentra disponible en el aula virtual.
- b) Sesiones de enseñanzas prácticas (problemas). Se entregarán por parte del profesor colecciones de problemas de dificultad creciente
- c) Sesiones de seminarios. Se trabajará conjuntamente con los estudiantes en la resolución de los problemas de las colecciones entregadas.
- d) Sesiones de enseñanzas prácticas (laboratorio)

9. Planificación de actividades

Actividades	Horas presenciales	Horas no presenciales
Enseñanzas teóricas	30	0
Enseñanzas prácticas (problemas)	6	0
Enseñanzas prácticas (laboratorio)	9	0
Seminarios	9	0
Tutorías	5	0
Evaluación	1	0
Trabajo personal	0	63
Trabajo de preparación de los exámenes	0	27
	60	90
Horas totales (núm. créditos * 25)	150	

10. Sistema de evaluación

10.1. Tipo de prueba

Tipo de prueba	Ponderación
Participación en clase	10
Pruebas escritas	40
Trabajos	50
	100

10.2. Criterios de superación de la asignatura

A) Se deberá obtener una nota mínima de 5 sobre 10 en cada una de las pruebas para superarlas. Si no se supera alguna de las pruebas en la segunda convocatoria se examinará solo de la prueba no superada

B) Es obligatoria presentarse a todas las pruebas (trabajos y pruebas escritas)

11. Otra información

12. Software específico

13. Privacidad y tratamiento de datos personales

Las actividades académicas que comporten un tratamiento de datos de personas identificadas o identificables están sometidas a lo previsto en el Reglamento General de Protección de Datos UE 2016/679, de 27 de abril (RGPD) y en la Ley Orgánica 3/2018, de 5 de diciembre, de Protección de Datos Personales y garantía de los derechos digitales (LOPDGDD) además de la legislación vigente específica.

En los espacios docentes físicos y virtuales de la universidad, con carácter general, en ningún caso se podrán realizar actividades que traten datos personales, incluyendo grabaciones, sin el consentimiento expreso previo y libre de las personas afectadas.

No se podrán realizar actividades que conlleven acceso a recursos externos a los medios de la UJI, en Internet u online, que obliguen a los estudiantes a dar sus datos personales o el consentimiento expreso. Se utilizarán exclusivamente datos anónimos.

Este anonimato debe garantizarse en todas las fases del tratamiento. Sólo en el caso de que la información se haya sometido a un procedimiento de disociación, de modo que la información que se obtenga no pueda asociarse a persona identificada o identificable, se estará cumpliendo con la normativa vigente.

Si, excepcionalmente y de manera justificada, a criterio del responsable de la actividad se tratan datos de personas identificadas o identificables, el responsable de la actividad deberá inscribirla en el registro oficial de actividades de tratamiento de la UJI (RAT) y obtener la autorización de la Secretaría General; así mismo elaborará la información que hay que ofrecer a los usuarios, aplicará las medidas de seguridad necesarias y proporcionará la información requerida durante los procesos de auditoría, tomando, en su caso, las medidas correctoras que estas auditorías aconsejen.

Vicerrectorado de Estudios y Docencia