



Código	Nombre de la Asignatura	Nº créditos
	DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL MEDIANTE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR Y ESPECTROMETRÍA DE MASAS	4
Datos del Profesorado		Teléfono
Coordinador: Joaquín Altarejos Caballero		953-212743
Profesores: Antonio Ortiz Hernández, Sofía Salido Ruiz, Pablo J. Linares Palomino		
Departamento:		
Química Inorgánica y Orgánica		
Horas de docencia presencial		Horas de aprendizaje autónomas
35 (teoría) + 5 (prácticas)		
Tipo	Secuencia	
Optativa	2º Semestre	
Carácter	Desarrollo	
Metodológica	Presencial	
Objetivos de aprendizaje		
<p>En las últimas décadas, la Resonancia Magnética Nuclear ha pasado de ser una técnica de uso casi exclusivo en Química Orgánica a convertirse en una técnica en evolución continua con aplicaciones casi rutinarias en otras disciplinas (Bioquímica y Medicina) y sectores industriales (Alimentación). Con esta asignatura se trata de profundizar en el conocimiento teórico-práctico de la técnica espectroscópica de RMN. Para ello se hará una descriptiva completa del fundamento teórico de la misma, así como de los aspectos tecnológicos que la convierten en la actualidad en una herramienta de gran utilidad. Se pretende que los alumnos del Máster puedan obtener sus propios espectros de RMN, conocer el fundamento teórico que hay detrás de los mismos y resolver las estructuras de diversas muestras problema. Asimismo, está previsto realizar una visita a una empresa de obtención y análisis de aceites vegetales, a una empresa del sector farmacéutico y a un centro médico.</p>		
Contenidos		
<p>Tema 1. EL FENÓMENO DE LA RMN Propiedades magnéticas de los núcleos atómicos. El espín nuclear y el fenómeno de la Resonancia. Procesos de relajación. Parámetros espectrales. RMN multinuclear. Descripción de la RMN de pulsos. Modelo vectorial.</p> <p>Tema 2. ASPECTOS PRÁCTICOS EN LA RMN DE ALTA RESOLUCIÓN Instrumentación. Tratamiento de muestras reales. Adquisición y procesamiento de datos. Ajuste y preparación del equipo. Calibración. Test de funcionamiento del espectrómetro: resolución y sensibilidad.</p> <p>Tema 3. RMN MONODIMENSIONAL Técnicas de desacoplamiento. Secuencias multipulso. Inversión-recuperación. Eco de espín. Transferencias de polarización selectiva y no selectiva. Otros experimentos.</p> <p>Tema 4. RMN BIDIMENSIONAL Secuencia básica. Experimentos de resolución de J. Correlaciones escalares homonucleares y heteronucleares. Incorporación de gradientes de campo magnético. Experimentos homonucleares (COSY-DQF, TOCSY) y heteronucleares (HMQC, HSQC, HMBC). Correlación a través de coherencia cuántica múltiple: INADEQUATE. Correlaciones espaciales: NOESY, ROESY. Otros experimentos.</p> <p>Tema 5. APLICACIONES DE LA RMN DE ALTA RESOLUCIÓN A LA DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL Desplazamientos químicos, acoplamiento espín-espín y estructura química. Técnicas de apoyo a la interpretación de espectros. Determinaciones estereoquímicas. Resolución de casos reales.</p> <p>Tema 6. OTRAS APLICACIONES DE LA RMN Determinación de contenido graso y humedad en alimentos. Medidas de flujo. Imágenes por RMN.</p>		

Determinaciones en Ciencia de los Materiales. Estudio de muestras sólidas o semisólidas mediante RMN-MAS. Determinación de propiedades físicas o magnitudes termodinámicas.

Tema 7. ESPECTROMETRÍA DE MASAS

Tipos de ionización en espectrometría de masas. Reglas de fragmentación. Ión molecular, picos isotópicos e iones metaestables.

Tema 8. ESPECTROMETRÍA DE MASAS

Tipos de ionización en espectrometría de masas. Reglas de fragmentación. Ión molecular, picos isotópicos e iones metaestables.

Actividades de aprendizaje

Evaluación

Personal docente e investigador

Altarejos Caballero, Joaquín

Profesor Titular de Universidad

Doctor en Ciencias Químicas, Universidad de Granada, 1989

Líneas de investigación:

- Estudio químico y aprovechamiento de aceites esenciales y antioxidantes de origen natural
- Síntesis química de productos de aplicación en perfumería

Ortiz Hernández, Antonio

Profesor Titular de Universidad

Doctor en Ciencias Químicas, Universidad de Jaén, 1997

Salido Ruiz, Sofía

Profesora Titular de Universidad

Doctora en Ciencias Químicas, Universidad de Granada, 1994

Líneas de investigación:

- Estudio químico y aprovechamiento de aceites esenciales y antioxidantes de origen natural
- Síntesis química de productos de aplicación en perfumería

Linares Palomino, Pablo J.

Profesor Contratado Doctor

Doctor en Ciencias Químicas, Universidad de Granada, 1995

Líneas de investigación:

- Estudio químico y aprovechamiento de aceites esenciales y antioxidantes de origen natural
- Síntesis química de productos de aplicación en perfumería