

ESPECTROSCOPIA AVANZADA

MÓDULO/MATERIA	ASIGNATURA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	CARÁCTER
Avances en Química	Espectroscopia Avanzada	1º	1º	3	OPTATIVO
PROFESOR(ES)		DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.)			
Obdulio López Mayorga		Dpto. Química Física, 1ª planta-Edificio Química I, Facultad de Ciencias Teléfono: 958244076 Correo electrónico: olopez@ugr.es			
		HORARIO DE TUTORÍAS Lunes, Martes y Miércoles de 12:00-14:00			
MÁSTER EN EL QUE SE IMPARTE		OTROS MÁSTERES A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR			
Ciencias y tecnologías químicas, KHEMIA					
PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)					
Conocimientos fundamentales de Física, Mecánica Cuántica y estructura molecular.					
BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL MÁSTER)					
Medida y procesamiento de las señales espectroscópicas. Dispersión de luz y sus aplicaciones. Espectroscopia infrarroja de transformada de Fourier (FT-IR). Espectroscopias UV-visible y de Luminiscencia. Resonancia magnética nuclear (RMN).					
COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS DE LA ASIGNATURA					
* Competencias <u>básicas</u> (CB): - CB06: 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. - CB07: 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. - CB08: 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 - CB10: Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que					



habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

* Competencias transversales (CT):

- CT02: Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación).
- CT06: Trabajo en equipo.

* Competencias específicas (CE):

- CE01: Poseer y comprender conocimientos químicos avanzados, tanto a nivel teórico como de su aplicación práctica.
- CE02: Aplicar conocimientos teórico-prácticos a la resolución de problemas científico-técnicos relacionados con las ciencias y tecnologías químicas.
- CE03: Comprender, analizar y solucionar problemas avanzados relacionados con la Química mediante el uso de las herramientas y metodologías aprendidas.
- CE12: Aplicar metodologías para la caracterización y análisis de productos químicos.

OBJETIVOS (EXPRESADOS COMO RESULTADOS ESPERABLES DE LA ENSEÑANZA)

* Tras cursar esta asignatura, el estudiante sabrá/comprenderá:

- (1) Las características espectrales básicas, tales como anchura de línea espectral y resolución, relación señal/ruido y los métodos para su optimización.
- (2) Diferenciar entre los diferentes tipos de dispersión de la radiación electromagnética (REM).
- (3) Los fundamentos avanzados de la transformada de Fourier y su aplicación en técnicas espectroscópicas como la espectrometría infrarroja.
- (4) Los fundamentos teóricos de la Resonancia Magnética Nuclear (RMN) a través de las descripciones mecano-clásica, no relativista, y mecano-cuántica.
- (5) La instrumentación de los modernos espectrómetros de RMN, sus características y requerimientos experimentales.
- (6) Las diferentes etapas de un experimento RMN: preparación de las muestras, edición de parámetros espectrales, selección del programa de pulsos, adquisición de datos, apodización, transformación rápida de Fourier (FFT), corrección de fase y línea base, etc.

* A su vez será capaz de:

- (a) Comprender cualquier parámetro característico de una REM.
- (b) Predecir los resultados de la interacción entre la REM y la materia.
- (c) Aplicar métodos de optimización de las características espectrales de las bandas de cualquier tipo de espectro, para mejorar la sensibilidad (relación señal/ruido), la resolución (anchura de línea espectral), etc.
- (d) Aplicar correctamente cualquiera de las ecuaciones derivadas de los fundamentos de la RMN.
- (e) Describir los componentes fundamentales y su interrelación en un moderno espectrómetro RMN.
- (g) Procesar de forma completa la atenuación libre de la inducción (FID) como señal en el dominio del tiempo de un experimento sencillo para obtener el espectro monodimensional correcto.
- (h) Analizar experimentos bidimensionales COSY, NOESY, TOCSY, etc.



TEMARIO DETALLADO DE LA ASIGNATURA

I. Introducción a los métodos experimentales espectroscópicos. Concepto de espectroscopía. Absorción, Emisión y Dispersión de la radiación electromagnética. La radiación electromagnética. Modelos y regiones del espectro. Modelo ondulatorio o electromagnético clásico. Modelo corpuscular de la radiación electromagnética. Regiones del espectro electromagnético. Descripción de la interacción de la REM con la materia. Descripción clásica y descripción mecano-cuántica. Características espectrales. Anchura de línea espectral y resolución, relación señal/ruido.

II. Espectroscopía y Transformada Rápida de Fourier (FFT). Revisión de los conceptos de serie de Fourier y su límite La transformada de Fourier. El algoritmo "Fast Fourier Transform (FFT)". Dominios de los parámetros espectroscópicos y variables conjugadas. Principales casos de espectroscopías basadas en la FFT.

III. Resonancia Magnética Nuclear de alta resolución para la determinación de estructuras moleculares. Descripción mecano-clásica, no relativista, del fenómeno RMN. Modelo vectorial. Introducción a la descripción mecano-cuántica de la RMN. El experimento RMN en los espectrómetros de Transformada de Fourier. El espectrómetro de RMN de alta resolución. Características instrumentales. Apantallamiento y desapantallamiento electrónico. El desplazamiento químico. La estructura fina del espectro de RMN. Acoplamiento escalar. Procesos de relajación. Efecto Nuclear Overhauser. RMN de pequeñas moléculas. Espectros monodimensionales de ^1H y ^{13}C . RMN bidimensional. Experimentos de correlación homonuclear y heteronuclear. Aspectos generales de la determinación de la estructura de Macromoléculas mediante RMN.

IV. Dispersión elástica y dinámica de la radiación electromagnética. Introducción. Dispersión Elástica o Rayleigh de la radiación electromagnética producida por una molécula aislada. Dispersión Elástica o Rayleigh de la radiación electromagnética producida por un conjunto de partículas. Dispersión Elástica o Rayleigh de disoluciones de macromoléculas. Aplicaciones de las medidas de dispersión elástica o Rayleigh. Dispersión dinámica de la radiación electromagnética (DLS). Introducción. Función de correlación. Función de correlación en dispersión dinámica. Determinación de la función de correlación mediante DLS. Movimiento Browniano. Determinación del coeficiente de difusión mediante DLS. Determinación del tamaño de las partículas en solución. Polidispersidad. Sistema de medida de dispersión dinámica. Aplicación de DLS a la caracterización de macromoléculas.

V. Revisión y aplicaciones de la espectroscopía infrarroja (IR). Introducción y regiones del espectro infrarrojo. Rotaciones y vibraciones moleculares en el origen de la espectroscopía IR. Modelos clásico y cuántico de las vibraciones moleculares. Espectrómetros FTIR (Fourier Transform InfraRed). Relación entre interferograma y espectro IR. Ventajas de la técnica FTIR frente a la técnica IR dispersiva. Aplicaciones generales. Aplicaciones a Proteínas y ADN.

VI. Espectroscopía UV-V. Revisión y Parámetros de los espectros electrónicos. Fundamentos de la espectroscopia electrónica. Transiciones electrónicas que implican electrones π , σ y n . Transiciones electrónicas que implican electrones d y f . Absorción por transferencia de carga. Grupos cromóforos de interés. Aplicaciones generales y aplicaciones en Proteínas y en Ácidos nucleicos.

VII. Espectroscopía de emisión molecular. Relajación no radiativa (Conversión interna y relajación molecular). Relajación radiativa: Fluorescencia, Fosforescencia y Quimioluminiscencia. Tiempos de vida de la fluorescencia, tiempo de vida intrínseco y experimental. Geometría de la medición de fluorescencia y aspectos instrumentales de los fluorómetros modernos. Medición de tiempos de vida, Quenching estático, Quenching dinámico (colisional) y Quenching dinámico por mecanismo de Förster (FRET). Energía de transferencia por resonancia de fluorescencia (Fluorescence Resonance Energy Transfer (FRET)).



BIBLIOGRAFÍA

- Requena, A.; Zúñiga, J. Espectroscopia; Pearson, Prentice Hall: Madrid, 2004.
- Levine, Ira N. Espectroscopia Molecular; AC, D.L.: Madrid 1980.
- Hore, P.J.; Nuclear Magnetic Resonance; Oxford University: Oxford, 1995.
- Derome, Andrew E. Modern NMR Techniques for Chemistry Research. Pergamon: Oxford, 1987.
- Hennel, J. W. & Klinowski, J. Fundamentals of Nuclear Magnetic Resonance. Longman Group UK: Essex, 1993.
- Cavanagh, J.; Fairbrother, Wayne J.; Palmer III, Arthur G. & Skelton, Nicholas J.; Rance, M. Protein NMR Spectroscopy. Principles and Practice; Elsevier Science & Technology: 2007.
- Roberts, Gordon C. K. col. NMR of macromolecules: a practical approach; IRL: Oxford, 1995.
- Clore, G.M.; Gronenborn, A.M. NMR of proteins; Macmillan: 1993.
- Wüthrich, K. NMR of proteins and nucleic acids; John Wiley and Sons: New York, 1986.
- Evans, Jeremy N.S. Biomolecular NMR spectroscopy; Oxford University: Oxford 1995.
- Lambert, Joseph B. & Mazzola, Eugene P. Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy; Pearson, Prentice Hall: New York, 2004.
- van Holde, Kensal E. W.; Johnson, C. y Shing Ho, P. Principles of physical biochemistry; Prentice Hall: 1998.
- Berne, Bruce J.; Pecora, R. Dynamic Light Scattering; Robert E. Krieger: Florida, 1990.
- Cantor, Ch.; Schimmel, P. Biophysical Chemistry Part II: Techniques for the Study of Biological Structure and Function; W.H. Freeman & Co: New York, 1980.
- Lakowicz, J. R.; Principles of Fluorescence Spectroscopy; Kluwer Acad./Plenum Publ.: 1999 (ISBN:9780306460937).
- Albani, J.R.; Structure And Dynamics of Macromolecules: Absorption And Fluorescence Studies, Elsevier Science: 2004 (ISBN 10: 044451449X).

ENLACES RECOMENDADOS

En los siguientes enlaces^[1] se indican otros enlaces de interés para el curso.

<http://adela.ugr.es/moodle/>

http://www.ugr.es/~olopez/estruct_macromol/

^[1] Estos enlaces están activos a fecha de la publicación "on-line" de la guía docente

METODOLOGÍA DOCENTE

- Clases magistrales/expositivas.

Las lecciones consistirán en una síntesis rápida que el profesor hará del contenido de los apuntes y guía en los recursos que se ofrecen en la web sobre cada uno de los temas tratados.

- Clases de resolución de problemas.

Las clases de ejercicios de cálculo e interpretación de espectros supondrán un porcentaje elevado de las clases presenciales.

- Seminarios.

Utilizados tanto para aclarar dudas planteadas y abordar aspectos complementarios no tratados en las clases magistrales.

- Tutoría programada.

- Estudio y trabajo autónomo individual o en grupo.



ugr

Universidad
de Granada

La asignatura contempla además una visita al Centro de Instrumentación Científica de la Universidad de Granada donde se visitará en el Servicio de Análisis y Determinación Estructural, concretamente el servicio de RMN.

*** MATERIAL DOCENTE:**

El material docente proporcionado consiste en APUNTES (en formato pdf), EJERCICIOS (ejercicios de cálculo e interpretación de espectros), PRESENTACIONES (de clase), PROGRAMAS (de dominio público útiles para el análisis de estructuras de moléculas, simulación e interpretación de espectros. Rasmol, RasTop131, Chime, Protein Explorer, Spdbviewer, MolMol, VMD, ViewerLite, MestRec, NewFID, NMRSpin, etc). WWW (direcciones de páginas web con contenidos relevantes para la asignatura), INSTRUCCIONES (para el uso del material).

El material se proporciona a través de una plataforma docente basada en Moodle. Dicha plataforma permite además una interacción ágil con el estudiante mediante su participación en foros de discusión, listas de distribución de correo electrónico, cuestionarios e intercambio de material y trabajos.

EVALUACIÓN (INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN, CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y PORCENTAJE SOBRE LA CALIFICACIÓN FINAL, ETC.)

- EVALUACIÓN CONTINUA

(A) Instrumentos de evaluación:

- Prueba escrita (final de la materia). Examen en el que el alumno podrá hacer uso de apuntes, textos, etc. Su contenido y duración serán establecidos de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013.

- Evaluación de asistencia y participación activa. Se valorará tanto el interés del alumno (que se refleja principalmente en la asistencia regular a las clases), como su participación activa en las discusiones que se desarrollan en las mismas. También se considerarán:

- (1) El progreso del alumno en los conocimientos impartidos, que podrá valorarse según su capacidad de abordaje de los problemas que se van proponiendo a medida que se desarrolla el curso.
- (2) La corrección y calidad de la resolución de los ejercicios propuestos.

(B) Criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final:

<u>Criterio de evaluación</u>	<u>% sobre la calificación final</u>
- Conocimientos teóricos adquiridos.....	50
- Valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planeados, en las prácticas de laboratorio o cualquier otra tarea asignada, pudiéndose evaluar, si procede, la capacidad de trabajo en equipo.....	10
- Desempeño en la realización del trabajo experimental, manejo de instrumentación y software, análisis e interpretación de datos experimentales y elaboración de registros e informes de resultados.....	25
- Resolución de ejercicios o proyectos.....	15



- EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

- **Examen final.** Este sistema de evaluación será aplicable únicamente para evaluar a alumnos que, de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013 elijan esta modalidad de evaluación. **Esta opción debe ser comunicada por escrito a la Coordinadora del Máster durante los primeros quince días desde el comienzo de impartición de la materia.** Su formato (preguntas largas, cortas, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia. La puntuación obtenida en este examen constituirá el 100% de la calificación otorgada siguiendo este tipo de evaluación.

INFORMACIÓN ADICIONAL

- Escuela Internacional de Posgrado (Universidad de Granada): <http://escuelaposgrado.ugr.es/>
- Página web del Master: <http://masteres.ugr.es/khemia/>



ugr

Universidad
de Granada