

## Curso práctico de técnicas de determinación estructural



### Dirección del curso:

Esteban P. Urriolabeitia

### Secretaría Técnica del curso:

Esteban P. Urriolabeitia (iSQCH)

Teléfono: 976762302

Facultad de Ciencias, Edificio D

Pedro Cerbuna 12, 50009 Zaragoza

<http://www.isqch.unizar-csic.es/iSQCHportal/>

**Cuándo:** 21 a 24 de noviembre y 16 de diciembre de 2022

**Dónde:** Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (iSQCH, Zaragoza)

## Curso de especialización del CSIC

Organizado por el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (iSQCH), instituto universitario mixto CSIC-Universidad de Zaragoza, el curso tiene una duración total de 24 horas, repartidas en 12 sesiones. Habrá 8 sesiones demostrativas, realizadas por personal del curso, seguidas de 4 sesiones en las que los asistentes pondrán en práctica lo aprendido y medirán sus propios espectros.

Todo ello se desarrollará en el el aula 11 de la Facultad de Ciencias (Universidad de Zaragoza), los servicios de masas y RMN del CEQMA, y en los laboratorios del iSQCH los días 21 a 24 de noviembre de 2022 y el 16 de diciembre de 2022. Se expedirá certificado de asistencia por el Departamento de Postgrado del CSIC. Para ello será requisito imprescindible asistir presencialmente a todas las sesiones. El número de plazas está limitado a 25 personas, teniendo preferencia los alumnos del Master en Química Molecular y Catálisis Homogénea. La Universidad de Zaragoza dispone de los locales adecuados para llevar a cabo el curso de forma presencial manteniendo la distancia de seguridad.

Los interesados han de ponerse en contacto con la Secretaría Técnica ([esteban@unizar.es](mailto:esteban@unizar.es)) antes del día 31 de octubre de 2022. Se reservará plaza por riguroso orden de inscripción.



**Espectrómetro de RMN** **Espectrómetro de masas**



**Espectrofotómetro de fluorescencia**

**Espectrofotómetro UV-vis**



**Potenciostato**

## Objetivos del curso

Las técnicas de determinación estructural (TDE) son las herramientas básicas que nos permiten conocer la estructura de las moléculas. En este curso se pretende formar a los asistentes en Resonancia Magnética Nuclear (RMN), Espectrometría de Masas (MS), Técnicas Electroquímicas (TE) y Espectroscopía de absorción y emisión molecular. La RMN es una técnica no destructiva con enorme aplicación en química y biología. Los contenidos del curso muestran los experimentos más habituales, sus parámetros más importantes y los métodos de optimización. La espectrometría de masas es una técnica analítica de elevada sensibilidad y, acoplada a técnicas cromatográficas, constituye una herramienta eficaz para el análisis de mezclas. El curso pretende familiarizar a los asistentes con la preparación de muestras y adquisición de espectros utilizando diferentes sistemas de ionización. Las técnicas electroquímicas representan un complemento a la anterior, e informan de la capacidad de los compuestos para experimentar reacciones de intercambio de electrones (oxidación/reducción) así como de la estabilidad de las especies resultantes. Las técnicas de absorción y emisión moleculares informan sobre procesos electrónicos relacionados con la absorción y emisión de luz, que dependen de la estructura molecular y su interacción con el entorno. Contribuyen a la

comprensión del estado excitado y evolución de especies en diversos rangos temporales.

## Programa

**Bloque 1: demostrativa RMN.** Introducción a 1D, procesado; núcleos accesibles;  $^1\text{H}$  RMN; supresión de disolvente.

**Bloque 2: demostrativa RMN.** Experimentos desacoplados  $^1\text{H}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{11}\text{B}$ ,  $^{119}\text{Sn}$ ,  $^{195}\text{Pt}$ , otros núcleos.

**Bloques 3 y 4: demostrativa RMN.** Introducción al 2D. Experimentos de correlación homonuclear (COSY, NOESY) y heteronuclear (HSQC, HMQC, HMBC).

**Bloques 5 y 6: prácticas RMN.** Práctica 1D y 2D. Muestras conocidas y resolución de problemas.

**Bloque 7: demostrativa Absorción-Emisión.** Partes fundamentales de los equipos de medida. Protocolos y adquisición de espectros de excitación, emisión y medidas de tiempos de vida.

**Bloque 8: práctica Absorción-Emisión.** Diseño de experimentos y medidas de muestras problema

**Bloques 9 y 10: demostrativa y práctica de Masas MALDI y ESI.** Preparación de muestras. Adquisición de espectros MALDI en modo lineal y

reflector. Análisis por infusión en Ion Trap. HPLC-MS de alta resolución

**Bloque 11: demostrativa electroquímica.** Análisis de diversos tipos de VCs: elucidación de mecanismos de reacción. Medidas de VC: preparación de muestras. Influencia de los diversos factores que afectan a la misma.

**Bloque 12: demostrativa Absorción-Emisión.** Protocolos y adquisición de espectros visible-UV, reflectancia difusa y rendimientos cuánticos.

## Desarrollo

### ***Lunes 21 de noviembre de 2022***

Tarde

15:00-16:50: bloque 1; 17:10-19:00: bloque 2

### ***Martes 22 de noviembre de 2022***

Tarde

15:00-16:50: bloque 3; 17:10-19:00: bloque 4

### ***Miércoles 23 de noviembre de 2022***

Tarde

15:00-16:50: bloque 5; 17:10-19:00: bloque 6

### ***Jueves 24 de noviembre de 2022***

Tarde

15:00-16:50: bloque 7; 17:10-19:00: bloque 8

### ***Lunes 16 de diciembre de 2022***

Mañana

9:00-10:50: bloque 9; 11:10-13:00: bloque 10

Tarde

15:00-16:50: bloque 11; 17:10-19:00: bloque 12