

DATOS DE LA ASIGNATURA

Denominación:	Identificación de Compuestos Orgánicos en Alimentos		Código:	58128	
Clase:			Curso:	2º	
Carácter:	Optativa en CyTA y de libre configuración para LQ		Cuatrimestre:	2º	
Créditos LRU:	4.5	Teóricos:	3	Prácticos:	1.5
Créditos ECTS:	4	Horas totales asignatura:	100		
Descriptor(es): (BOE)	Espectrometría de Masas y Resonancia Magnética Nuclear				

Departamento: Química Inorgánica, Orgánica y Bioquímica

Área de conocimiento: Química Orgánica

PROFESORADO

	<i>Nombre</i>	<i>Ubicación</i>	<i>Horario tutorías</i>
Responsable(s):	Andrés Moreno Moreno	Facultad de Ciencias Químicas. Edif. San Alberto Magno	L, X y V 10h-12h
Otros:			

PLANIFICACIÓN DOCENTE

1. OBJETIVOS DE LA ASIGNATURA

Los objetivos de la asignatura se centran en:

- 1.- Dar a conocer a los alumnos del segundo curso de la Licenciatura en Ciencia y Tecnología de los Alimentos y a los alumnos último curso de la Licenciatura en Química las posibilidades de las técnicas de EM (con o sin separación previa) y RMN en la caracterización de aditivos y constituyentes orgánicos de los alimentos y en la determinación de fraudes y adulteraciones de los alimentos.
- 2.- El alumno deberá ser capaz de deducir la estructura de un compuesto orgánico a partir de sus datos espectroscópicos y del análisis de espectros.
- 3.- A partir de una estructura determinada el alumno deberá poder predecir las características más significativas de los correspondientes espectros.

La asignatura se ha planificado con un enfoque fundamentalmente práctico con objeto de proporcionar al alumno una formación básica sobre los métodos experimentales de determinación estructural y su utilización, aspectos de gran importancia en la formación actual de un Licenciado en Ciencia y Tecnología de los Alimentos o como asignatura de libre configuración de un Licenciado en Química.

2. COMPETENCIAS Y DESTREZAS TEÓRICO-PRÁCTICAS A ADQUIRIR POR EL ALUMNO

De conocimiento

- ☑ Comprender los conceptos, principios y teorías esenciales que relacionan la espectroscopia con las distintas áreas de la Química de Alimentos.
- ☑ Manejar con precisión los conceptos y fundamentos de las diferentes técnicas.
- ☑ Manejar con propiedad la terminología específica.
- ☑ Relacionar los conocimientos proporcionados por la asignatura con los adquiridos previamente en otras disciplinas relacionadas con ella.

De procedimiento

- ☑ Utilizar las técnicas EM, IR y RMN para determinar la estructura de compuestos orgánicos.
- ☑ Capacidad para obtener información de tablas y gráficos.

De actitud

- ☑ Mantener una actitud de curiosidad permanente en el aprendizaje de la asignatura
- ☑ Fomentar el espíritu crítico y mejorar la capacidades de síntesis y análisis.
- ☑ Fomentar la precisión en el planteamiento de preguntas y aprender a elegir lo esencial de cada técnica.

Recomendaciones para los alumnos:

Para cursar Identificación de Compuestos Orgánicos en Alimentos se aconseja haber superado previamente la materia de primer ciclo de Química Orgánica.

3. TEMARIO TEÓRICO-PRÁCTICO

INTRODUCCIÓN

Métodos generales de determinación de estructuras: métodos químicos y métodos físicos. Espectroscopias y Espectrometría: Introducción. Principales métodos espectroscópicos utilizados en análisis de alimentos.

ESPECTROMETRÍA DE MASAS

Tema 1. Espectrometría de Masas (I). Introducción. Fundamentos y desarrollo histórico. Técnicas experimentales en espectrometría de masas. Poder de resolución. Registro del espectro. Tipo de información que suministra el espectro de masas.

Tema 2. Espectrometría de Masas (II). Tipos de fragmentos en espectrometría de masas. Reglas de fragmentación de compuestos orgánicos. Fragmentaciones de algunos grupos orgánicos significativos.

ESPECTROSCOPIA INFRARROJA

Tema 3. Fundamentos de la Espectroscopia Infrarroja. Espectro infrarrojo. Teoría de la absorción. Absorción y tipos de vibraciones. Reglas de selección. Análisis cualitativo. Absorción infrarroja de los principales grupos funcionales.

ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Tema 4. Resonancia Magnética Nuclear (I). Introducción. El fenómeno de la RMN. Tipos de espectrómetros de RMN. Procesos de relajación. Desplazamiento químico.

Tema 5. Resonancia Magnética Nuclear (II). Desplazamiento químico y estructura. Reglas de estimación de los desplazamientos químicos. Multiplicidad de las señales. Registro del espectro. Núcleos equivalentes. Resolución de algunos espectros de RMN. Metodología de pulsos. Resonancia de una muestra macroscópica. Adquisición y procesamiento de datos. Transformada de Fourier.

Tema 6. Resonancia Magnética Nuclear (III). RMN de C-13. Introducción. Técnicas de desacoplamiento. Correlaciones desplazamiento-estructura. Otros núcleos de interés en química de alimentos. Fósforo-31, Flúor-19, Nitrógeno-15 y Oxígeno-17

Tema 7. RMN bidimensional. Espectros COSY. Espectros HSQC. Interpretación de espectros bidimensionales.

SEMINARIOS DE COMBINACIÓN DE TÉCNICAS

Utilización conjunta de las diferentes técnicas espectroscópicas estudiadas en la resolución de problemas de determinación estructural de compuestos orgánicos presentes en alimentos.

APLICACIONES DE LA RMN Y MASAS EN LA QUÍMICA DE ALIMENTOS

Tema 8. Aplicación de la Espectrometría de Masas al análisis de alimentos. Introducción. Sustancias naturales en los alimentos. Lípidos. Péptidos y proteínas. Carbohidratos. Vitaminas. Antioxidantes. Aromas. Otras técnicas de EM en el control de calidad de alimentos. Estudio de sustancias xenobióticas en alimentos por EM. Pesticidas. Residuos de drogas. Toxinas. Mezclas naturales y sustancias xenobióticas en alimentos. Determinación de metales en alimentos por EM.

Tema 9. Aplicaciones de la RMN al análisis de alimentos: Aceites de Oliva. Introducción. Estudio de la composición en ácidos grasos por RMN de H-1. Espectroscopia RMN de C-13 en el análisis de aceites de oliva.

Tema 10. Aplicaciones de la RMN al análisis de alimentos: Enología. Introducción. Uso de la RMN de H-1 en el control de autenticidad de un vino. Uso de la RMN de C-13 en el control de autenticidad de un vino. Estudio por RMN de las bacterias lácticas implicadas en la fermentación de un vino.

Tema 11. La RMN en el control de calidad de alimentos. Otras aplicaciones de la RMN en la Química de los Alimentos. RMN de imagen. RMN en estado sólido.

Tema 12. Técnicas isotópicas en el estudio de alimentos. Introducción. Distribución isotópica natural. Bases teóricas de la caracterización isotópica. SNIF-RMN. RMN de deuterio. La SNIF-RMN en Enología. Análisis isotópico por espectrometría de masas. Aplicaciones de la IRMS en Química de los Alimentos. Aplicaciones conjuntas de las técnicas isotópicas RMN y EM.

4. DISTRIBUCIÓN DE ACTIVIDADES

	H O R A S			
	Tiempo presencial	Factor aplicable	Tiempo personal	TOTAL
Clases magistrales	15	1.5	22.5	37.5
Tutorías	2	0	2	2
Seminario / talleres	16	1.5	24	40
Laboratorio	2	0	2	2
Trabajo Individual	1	6	6	7
Evaluaciones continuas	2	3	6	8
Exámenes periodos establecidos	1	3	3	4
Tiempos totales	39		61.5	100.5

5. PLANIFICACIÓN TEMPORAL

Códigos para las tareas: C = clase magistral; T = tutoría; S = seminario; E = evaluaciones continuas; L = laboratorio

Septiembre					Octubre					Noviembre					Diciembre				
Sumas parciales: C = S = T = E =					Sumas parciales: C = S = T = E =					Sumas parciales: C = S = T = E =					Sumas parciales: C = S = T = E =				

Febrero					Marzo					Abril					Mayo				
Sumas parciales: C = 10 S = 2 T = E =					Sumas parciales: C = S = 9 T = 2 E = 1					Sumas parciales: C = 4 S = T = E = L = 6					Sumas parciales: C = 1 S = 5 T = E = 1 L = 2				

6. METODOLOGÍA DOCENTE

Las actividades docentes organizadas por este Departamento para la enseñanza de la asignatura de Identificación de Compuestos Orgánicos en Alimentos consisten en:

Clases teóricas, encaminadas a orientar a los alumnos en el aprendizaje de las teorías y conceptos fundamentales que constituyen el cuerpo de la disciplina. Con este fin se hará uso de las nuevas tecnologías, pudiendo el alumno acceder, si así lo desea, al material utilizado en clase a través de moodle (www.uclm.es).

Seminarios, consistentes fundamentalmente en clases de problemas y aplicaciones prácticas de la teoría y cuya finalidad es afianzar, desarrollar y completar los conocimientos adquiridos en las clases de teoría.

Prácticas de laboratorio, incluidas en el horario de las clases, en las que el alumno se familiarizará con los instrumentos y técnicas explicadas en teoría.

Tutorías, en las que cada alumno podrá dirigirse de forma individual o en grupo al profesor para aclarar cualquier duda conceptual o metodológica surgida en el estudio de la disciplina y no resuelta con las actividades anteriormente citadas.

Otras actividades, el profesor de la asignatura, de forma individual o de acuerdo con los alumnos, podrá programar otras actividades tales como conferencias, proyecciones, etc., con objeto de mejorar al máximo la enseñanza de la asignatura. Todas las actividades anteriormente indicadas tendrán carácter voluntario y serán evaluables.

El Profesor hará uso de todos aquellos medios visuales a su alcance así como de fotocopias, de las que dispondrá el alumno, que permitan un mejor aprovechamiento de las horas y un mejor seguimiento, por parte del alumno, de las clases teóricas. Además, el alumno podrá utilizar la técnica de Espectrometría de Masas y Resonancia Magnética Nuclear (ambas disponibles en el Departamento de Química Orgánica) durante la realización de las prácticas de laboratorio, lo que potenciará extraordinariamente la docencia.

Se comenzará con un tema de iniciación a la espectroscopia, para comenzar con los bloques dedicados a la espectrometría de masas, espectroscopía infrarroja y RMN, lo que será el primer examen parcial de la asignatura.

Seminarios: Aunque se asigna un número de 16 horas a seminarios, que se dedicarán a la resolución de problemas, previamente entregados a los alumnos. Además, algunas de las horas asignadas a laboratorio se dedicarán también a tal fin.

Una vez estudiados los fundamentos de la técnica de RMN, se realizará una práctica de determinación estructural de compuestos orgánicos recurriendo a los diferentes experimentos de la técnica de Resonancia Magnética Nuclear.

En un último bloque se estudiarán las diferentes aplicaciones de las técnicas de Espectrometría de Masas y Resonancia Magnética Nuclear en la química de alimentos, profundizando en técnicas específicas utilizadas en vinos, aceites, etc. Estos serán los contenidos del segundo parcial de la asignatura.

7. CRITERIOS DE EVALUACIÓN

Las resoluciones por escrito a los boletines de problemas que se entregan durante el curso, así como otras actividades programadas contribuirán a un 20% de la calificación global. La evaluación mediante examen escrito (parcial o final) contribuirá al 80% de la calificación total.

En lo que se refiere a las clases teóricas, al ser una Asignatura cuatrimestral se realizará una prueba, en dos convocatorias diferentes.

En lo que se refiere a las clases prácticas, la calificación se realizará de acuerdo con el interés y rendimiento demostrado por el alumno en el laboratorio o en los seminarios. Será necesario haber tomado parte en más de un 20% de las actividades docentes objeto de evaluación (clases teóricas, seminarios, prácticas, tutorías y trabajos).

La calificación obtenida se tendrá en cuenta a la hora de la calificación final de la asignatura.

1.- Se valorarán los ejercicios realizados en la pizarra por los alumnos a lo largo del curso. Además, durante el curso se realizarán, de forma voluntaria, ejercicios prácticos que serán

evaluados y calificados por el profesor, así como otras actividades programadas contribuirán con un 20% de la calificación total.

2.- Se realizará un examen parcial en la última semana de marzo, correspondiente a las técnicas de Espectrometría de Masas, Espectroscopía Infrarroja y RMN. Para eliminar materia del examen parcial será necesario obtener un mínimo de 5, y su valor será el 50% de la nota final.

3.- Se realizará un segundo examen parcial, correspondiente a la aplicación de las técnicas a casos concretos de alimentos, en la última semana de curso. Al igual que en el primer parcial será necesario obtener una calificación de 5 para eliminar materia, y su valor será del 30% de la nota final.

4.- Los alumnos que no hayan superado la asignatura por parciales deberán realizar un examen final según el calendario de exámenes fijado por la secretaria de la Facultad.

8. BIBLIOGRAFÍA

No existe ningún libro de texto que se adapte, exactamente, al Programa, por lo que se recomiendan varios, clasificados según su carácter básico o específico.

8.1. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl y W. Simon; Tablas para la elucidación estructural por métodos espectroscópicos. 3ª Edición. Elsevier, 1998.
- E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera, R. Martínez. Determinación estructural de compuestos orgánicos. Springer-Verlag Ibérica 2001.
- J.B. Lambert, H.F. Shurvell, D. Lighter y R.G. Cooks; Introduction to Organic Spectroscopy; MacMillan, 1987.
- D.W. Brown, A.J. Floyd y M. Sainsbury; Organic Spectroscopy; John Wiley & sons; 1988.
- W. Kemp; Organic Spectroscopy; MacMillan, 1991.
- M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh; Métodos espectroscópicos en Química Orgánica, Ed. Síntesis, 1996.
- A. García, E. Teso, Análisis Orgánico, UNED, 1992.

8.2. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Bibliografía específica de EM

- F.W. McLafferty y F. Turecek. Interpretation of Mass Spectra. 4ª Edición. University science Book. 1993.
- M. E. Rose, R. A. W. Johnstone Mass Spectrometry for Chemists and Biochemists. Cambridge U. P. 1982.
- R. Davis, M. Frearson, Mass Spectrometry, John Wiley, 1987.
- J. Seibl., Espectrometría de Masas, Alhambra 1973.
- L. Esteban, La espectrometría de masas en imágenes. ACK. Comunicación, 1993.

Bibliografía específica RMN

- J.J. Giménez Martínez, J.M. Expósito López, RMN para químicos Orgánicos. Monografías de la Universidad de Almería. Servicio de Publicaciones e Instituto Almerienses, Almería, 1998.
- A.E. Derome, Modern NMR Techniques for Chemistry Research, Pergamon Press, 1987.
- T.D.W. Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Pergamon, 1999.
- R.J. Abraham, J. Fischer y P. Loftus; Introduction to NMR Spectroscopy; Wiley, 1988.
- H. Günther y R.W. Gleason; NMR Spectroscopy; Wiley, 1995.

- W.W. Paudler; Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. General Concepts and Applications; Wiley, 1987.
- F. Friebolin; Basic One and Two-Dimensional NMR Spectroscopy; 3ª Edición. VCH, 1998.
- W. Kemp, NMR in Chemistry. A Multinuclear Introduction. MacMillan, 1986.
- E. Breitmaier, W. Voelter, Carbon-13 NMR Spectroscopy, VCH, 1990.
- E. Breitmaier. Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. A Practical Guide John Wiley and Sons, 1993.

Bibliografía específica de alimentos

R.H. Wilson. Spectroscopic Techniques for Food Analysis, VCH, 1994.

P.S. Belton, I. Delgado, A.M. Gil, G.A. Webb, Magnetic Resonance in Food Science. Royal Society of Chemistry, 1995.

Otras fuentes:

<http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/menu-e.html>

<http://www.varianinc.com/cgi-bin/nav?varinc/docs/corp/history>

<http://assign2.chem.usyd.edu.au/thirdyear/organic/field/nmr/>

<http://www.organicworldwide.net/nmr.html>

<http://www.chem.ucla.edu/~webspectra/>

http://www.acdlabs.com/products/spec_lab/