

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	42933
Nombre	Determinación estructural mediante RMN
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	2.0
Curso académico	2023 - 2024

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2109 - M.U. en Técnicas Experimentales en Química 11-V.2	Facultad de Química	1	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2109 - M.U. en Técnicas Experimentales en Química 11-V.2	1 - Laboratorio avanzado de Técnicas Experimentales en Química	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
PARDO MARIN, EMILIO JOSE	320 - Química Inorgánica

RESUMEN

Asignatura de laboratorio dedicada al aprendizaje de metodologías de trabajo avanzadas utilizadas en la determinación estructural, basadas en el empleo de la resonancia magnética nuclear y la interpretación de espectros

CONOCIMIENTOS PREVIOS**Relación con otras asignaturas de la misma titulación**

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.



Otros tipos de requisitos

Se requieren los conocimientos previos sobre química y trabajo experimental en el laboratorio de química que se imparten en las titulaciones indicadas en el perfil de ingreso recomendado para el estudiante del Máster.

COMPETENCIAS

2109 - M.U. en Técnicas Experimentales en Química 11-V.2

- Ser capaces de trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional o investigadora.
- Ser capaces de acceder a la información necesaria (bases de datos, artículos científicos, etc.) y tener suficiente criterio para su interpretación y empleo.
- Ser capaces de seleccionar y optimizar las variables instrumentales para obtener los mejores parámetros analíticos en las técnicas experimentales estudiadas.
- Ser capaces de emplear las herramientas básicas para el tratamiento de datos experimentales en el laboratorio.
- Realizar estudios relacionados con el análisis y/o la caracterización de sustancias químicas tales como: control de calidad, diseño de protocolos de trabajo para laboratorios, diseño e implementación de procesos de acreditación y validación, diseño y desarrollo de proyectos I+D+I, emisión de informes, certificaciones y/o dictámenes, etc.
- Ser capaces de planificar y gestionar los recursos disponibles de un laboratorio químico, teniendo en cuenta los principios básicos de la calidad, prevención de riesgos, seguridad y sostenibilidad.
- Seleccionar la instrumentación química comercializada apropiada para el estudio a realizar y de aplicar sus conocimientos para utilizarla de manera correcta.
- Elaborar una memoria clara y concisa de los resultados de su trabajo y de las conclusiones obtenidas.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Al finalizar el proceso de enseñanza-aprendizaje, el estudiante deberá ser capaz de:

1. Calcular constantes de acoplamiento en un espectro.
2. Explicar la necesidad de diversos pulsos.
3. Calcular la duración de un pulso de 90 grados.
4. Calcular tiempos de relajación.
5. Interpretar un espectro monodimensional.
6. Interpretar espectros bidimensionales.
7. Interpretar los mecanismos de fluxionalidad de las moléculas.
8. Establecer los parámetros termodinámicos de estos procesos.
9. En relación a los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODSs) en esta asignatura se espera que el alumnado sea capaz de saber aplicar los conocimientos aprendidos para contribuir a garantizar una educación inclusiva, equitativa y de calidad y promover oportunidades de aprendizaje durante toda



la vida para todos (ODS 4), de adquirir una sensibilidad especial por una gestión sostenible del agua (ODS 6), de las materias primas y de las fuentes de energía (ODS 7) así como por un desarrollo sostenible y compatible con el medio ambiente (ODSs 11, 12, 13, 14 y 15), además de poder diseñar, seleccionar y/o desarrollar productos, procesos químicos y/o metodologías analíticas eficientes (ODS 7) y que minimicen su impacto sobre el medio ambiente (ODSs 14 y 15), aprovechen materias primas alternativas y generen una menor cantidad de residuos (ODS 11).

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Aspectos experimentales de la RMN

- Elección de disolvente(s) y condiciones de trabajo.

2. Obtención e interpretación de espectros

- Obtención de espectros monodimensionales de las muestras, abarcando diferentes núcleos de interés (1H, 13C, 19F, 31P).
- Obtención de espectros bidimensionales homonucleares (COSY). Obtención de espectros bidimensionales heteronucleares (HSQC, HMBC).
- Obtención de espectros a diferentes temperaturas.
- Obtención de espectros de muestras sólidas (núcleos como 11B, 27Al, 29Si).
- Interpretación de los espectros obtenidos.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en laboratorio	20,00	100
Elaboración de trabajos individuales	5,00	0
Estudio y trabajo autónomo	10,00	0
Lecturas de material complementario	4,00	0
Preparación de actividades de evaluación	5,00	0
Resolución de casos prácticos	6,00	0
TOTAL	50,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

Actividades presenciales



Las clases de laboratorio se iniciarán con **seminarios** en los que el profesor realizará una pequeña introducción del objetivo, fundamentos y metodología experimental de las prácticas a realizar.

El profesor realizará en el laboratorio las **explicaciones** necesarias sobre el funcionamiento de los instrumentos a utilizar en cada práctica previamente a su uso por parte de los estudiantes y **tutelar** su uso durante la realización de las prácticas, para reforzar los conocimientos sobre las técnicas empleadas.

Los estudiantes **realizarán las prácticas**, siguiendo los **protocolos o guiones de prácticas** de los que dispondrán y que podrán ser más o menos abiertos en función de cada práctica y de los objetivos específicos a adquirir en cada asignatura.

Las **actividades presenciales** realizadas en el laboratorio formarán parte de la **evaluación continua** del estudiante (Actividades formativas del verifica AF2 y Metodología docente del verifica MD1).

Se realizarán **exámenes escritos** en las fechas previstas en la programación de las **pruebas de evaluación**. (Actividades formativas del verifica AF4 y Metodología docente del verifica MD1)

Las competencias a adquirir a partir de las actividades presenciales son las siguientes:

- Básicas y generales: CG1 y CG3
- Específicas: CE2, CE3, CE4, CE5 y CE6

Actividades no presenciales

Los estudiantes realizarán las actividades no presenciales solicitadas por el profesor (memorias, informes de las prácticas, etc.) y las entregarán en la fecha indicada.

Las competencias a adquirir a partir de las actividades no presenciales son las siguientes:

- Específicas: CE7

EVALUACIÓN

1.-Evaluación continua del estudiante en las clases y seminarios (*asistencia participativa, manipulación del material y equipos, organización del trabajo, comprensión y empleo del guión de prácticas, realización de cálculos, trabajo en equipo, etc.*)

Durante las sesiones, centradas en la resolución de casos prácticos, se evaluará la asistencia y la participación de los alumnos de forma individual (bien contestando oralmente o por escrito a las cuestiones planteadas por el profesor, bien planteando preguntas cuya contestación sea relevante para el resto del grupo). Entre otras, dichas preguntas incluirán el diseño de protocolos de trabajo, la selección de variables y las herramientas para el tratamiento de datos (Competencias del verifica CE2, CE3, CE5 y CE6). Las sesiones prácticas se realizarán en grupos de trabajo (Competencia del verifica CG1).



Competencias a evaluar: Específicas: CE2, CE3, CE4, CE5 y CE6

PONDERACIÓN 40 %

2.-Evaluación de las actividades no presenciales (*memorias y/o informes de las prácticas entregados*)

Los informes que emitirán los alumnos incluirán los principales conclusiones derivadas del trabajo en el laboratorio (protocolos de trabajo, selección de variables y tratamiento de datos; competencias del verifica CE2, CE5, CE6 y CE7) y se llevarán a cabo en parejas para fomentar el trabajo en equipo (toma de decisiones consensuadas; competencias del verifica CG1 y CE7).

Competencias a evaluar: Específicas: CE7

PONDERACIÓN 30 %

3.-Exámenes escritos (*basados en los resultados de aprendizaje de la materia y en los objetivos específicos de la asignatura*)

El examen consistirá en la resolución de cuestiones o casos prácticos relacionados con las técnicas estudiadas. (Competencias del verifica CE2, CE4, CE5 y CE6).

Competencias a evaluar: Específicas: CE2, CE4, CE5 y CE6

PONDERACIÓN 30 %

La calificación mínima obtenida en cada una de las partes evaluadas deberá ser igual o superior a 4,5 para poder promediar entre ellas.

La calificación global mínima para aprobar la asignatura es 5,0.

REFERENCIAS

Básicas

- Bakhmutov V.I., Practical NMR relaxation for chemists, Wiley, 2004.
- Duer, M.J., Introduction to solid state NMR spectroscopy, Wiley 2004.4
- Hore P.J., Nuclear Magnetic Resonance. Oxford Science Publication, 1995.
- Hennel, J.W. y Klinowski, J. Fundamentals of Nuclear Magnetic Resonance Longman.
- Keeler J., Understanding NMR Spectroscopy, Wiley, 2005.
- Morris, G. y Emsley, J. Multidimensional NMR methods for the solution state, Wiley 2010.



- Günther, H., NMR spectroscopy: Basic principles, concepts and applications in chemistry, 3rd ed. Wiley-VCH, 2013
- Pregosin, P.S., NMR in Organometallic Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 2012.
- Mitchell, T.N., Costisella, B., NMR- from spectra to structures, Heidelberg, Springer-Verlag, 2007.

