

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	42933
Nom	Determinació estructural mitjançant RMN
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	2.0
Curs acadèmic	2023 - 2024

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2109 - M.U. en Tècniques Experimentals en Química 11-V.2	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2109 - M.U. en Tècniques Experimentals en Química 11-V.2	1 - Laboratori avançat de Tècniques Experimentals en Química	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
PARDO MARIN, EMILIO JOSE	320 - Química Inorgànica

RESUM

Assignatura de laboratori dedicada a l'aprenentatge de metodologies de treball avançades utilitzades en la determinació estructural, basades en l'ús de la ressonància magnètica nuclear i la interpretació d'espectres.

CONEIXEMENTS PREVIS**Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació**

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.



Altres tipus de requisits

Es requereixen els coneixements previs sobre química i treball experimental en el laboratori de química que s'impartixen en les titulacions indicades en el perfil d'ingrés recomanat per a l'estudiant del Màster.

COMPETÈNCIES

2109 - M.U. en Tècniques Experimentals en Química 11-V.2

- Ser capaçs de treballar en equip amb eficiència en la seua tasca professional o investigadora.
- Ser capaçs d'accedir a la informació necessària (bases de dades, articles científics, etc.) i tenir prou criteri per a la seua interpretació i utilització.
- Ser capaçs de seleccionar i optimitzar les variables instrumentals per obtenir els millors paràmetres analítics en les tècniques experimentals estudiades.
- Ser capaçs d'usar les eines bàsiques per al tractament de dades experimentals al laboratori.
- Realitzar estudis realacionados amb l'anàlisi i / o la caracterització de substàncies químiques com ara: control de qualitat, disseny de protocols de treball per a laboratoris, disseny i implementació de processos d'acreditació i validació, disseny i desenvolupament de projectes I+D+I, emissió d'informes, certificacions i / o dictàmens, etc.
- Ser capaçs de planificar i gestionar els recursos disponibles d'un laboratori químic, tenint en compte els principis bàsics de la qualitat, prevenció de riscos, seguretat i sostenibilitat.
- Seleccionar la instrumentació química comercialitzada apropiada per a l'estudi a arealitzar i d'aplicar els seus coneixements per utilitzar-la de manera correcta.
- Elaborar una memòria clara i concisa dels resultats del seu treball i de les conclusions obtingudes.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

Al finalitzar el procés d'ensenyança-aprenentatge, l'estudiant haurà de ser capaç de:

1. Calcular constants d'acoplament en un espectre.
2. Explicar la necessitat diversos polsos.
3. Calcular la duració d'un pols de 90 graus.
4. Calcular temps de relaxació.
5. Interpretar un espectre monodimensional.
6. Interpretar espectres bidimensionals.
7. Interpretar els mecanismes de fluxionalidad de les molècules.
8. Establir els paràmetres termodinàmics d'aquests processos.
9. En relació amb els Objectius de Desenvolupament Sostenible (ODS) en aquesta assignatura s'espera que l'alumnat siga capaç de saber aplicar els coneixements apresos per contribuir a garantir una educació inclusiva, equitativa i de qualitat i promoure oportunitats d'aprenentatge durant tota la vida per a tothom (ODS 4), d'adquirir una sensibilitat especial per una gestió sostenible de l'aigua (ODS 6), de les matèries primeres i de les fonts d'energia (ODS 7) així com per un desenvolupament



sostenible i compatible amb el medi ambient (ODSs 11, 12, 13, 14 i 15), a més de poder dissenyar, seleccionar i/o desenvolupar productes, processos químics i metodologies analítiques eficients (ODS 7) i que minimitzen el seu impacte sobre el medi ambient (ODSs 14 i 15), aprofiten matèries primeres alternatives i generen una menor quantitat de residus (ODS 11).

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Aspectes experimentals de la RMN

- Elecció de dissolvent(s) i condicions de treball.

2. Obtenció i interpretació d'espectres

- Obtenció d'espectres monodimensionals de les mostres, comprenent diferents nuclis d'interés (^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P).
- Obtenció d'espectres bidimensionals homonuclears (COSY). Obtenció d'espectres bidimensionals heteronuclears (HSQC, HMBC).
- Obtenció d'espectres a diferents temperatures.
- Obtenció d'espectres de mostres sòlides (nuclis com a ^{11}B , ^{27}Al , ^{29}Si).
- Interpretació dels espectres obtinguts.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Pràctiques en laboratori	20,00	100
Elaboració de treballs individuals	5,00	0
Estudi i treball autònom	10,00	0
Lectures de material complementari	4,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	5,00	0
Resolució de casos pràctics	6,00	0
TOTAL	50,00	

METODOLOGIA DOCENT

Activitats presencials

Les classes de laboratori s'iniciaran amb **seminaris** en què el professor realitzarà una xicoteta introducció de l'objectiu, fonaments i metodologia experimental de les pràctiques a realitzar.



El professor realitzarà en el laboratori les **explicacions** necessàries sobre el funcionament dels instruments a utilitzar en cada pràctica prèviament al seu ús per part dels estudiants i **tutelarà** el seu ús durant la realització de les pràctiques, per a reforçar els coneixements sobre les tècniques empleades.

Els estudiants **realitzaran les pràctiques**, seguint els **protocols o guions de pràctiques** de què disposaran i que podran ser més o menys oberts en funció de cada pràctica i dels objectius específics a adquirir en cada assignatura.

Les **activitats presencials** realitzades en el laboratori formaran part de **l'avaluació contínua** de l'estudiant (Activitats formatives del verifica AF2 i Metodologia docent del verifica MD1).

Es realitzaran **exàmens escrits** de les diferents assignatures en la data prevista en la **programació de les proves d'avaluació** (Activitats formatives del verifica AF4 y Metodologia docent del verifica MD1)

Les competències adquirides a partir de les activitats presencials són les següents:

- Generals: CG1 y CG3
- Específiques: CE2, CE3, CE4, CE5 i CE6

Activitats no presencials

Els estudiants realitzaran les **activitats no presencials** sol·licitades pel professor (memòries, informes de les pràctiques, etc.) i les entregaran en la data indicada.

Les competències adquirides a partir de les activitats presencials són les següents:

- Específiques: CE7

AVALUACIÓ

1.-Avaluació contínua de l'estudiant en les classes i seminaris (*assistència participativa, manipulació del material i equips, organització del treball, comprensió i utilització del guió de pràctiques, realització de càlculs, treball en equip, etc.*)

Durant les sessions, centrades en la resolució de casos pràctics, s'avaluarà l'assistència i la participació dels alumnes de forma individual (bé contestant oralment o per escrit a les qüestions plantejades pel professor, bé plantejant preguntes la resposta sigui rellevant per a la resta del grup). Entre altres, aquestes preguntes inclouran el disseny de protocols de treball, la selecció de variables i les eines per al tractament de dades (Competències del verifica CE2, CE3, CE5 i CE6). Les sessions pràctiques es realitzaran en grups de treball (Competència del verifica CG1).

Competències a avaluar: Específiques: CE2, CE3, CE4, CE5 i CE6

PONDERACIÓ 40 %



2.-Avaluació de les activitats no presencials (*memòries i/o informes de les pràctiques entregats*)

Els informes que emetran els alumnes han d'incloure els principals conclusions derivades del treball en el laboratori (protocols de treball, selecció de variables i tractament de dades; competències del verifica CE2, CE5, CE6 i CE7) i es duran a terme en parelles per fomentar el treball en equip (presa de decisions consensuades; competències del verifica CG1 i CE7).

Competències a avaluar: Específiques: CE7

PONDERACIÓ 30 %

3.-Exàmens escrits

(*basats en els resultats d'aprenentatge de la matèria i en els objectius específics de cada assignatura*)

L'examen consistirà en la resolució de qüestions o casos pràctics relacionats amb les tècniques estudiades. (Competències del verifica CE2, CE4, CE5 i CE6).

Competències a avaluar: Específiques: CE2, CE4, CE5 i CE6

PONDERACIÓ 30 %

La qualificació mínima obtinguda en cadascuna de les parts avaluades haurà de ser igual o superior a 4,5 per poder fer la mitjana entre elles.

La qualificació global mínima per aprovar l'assignatura és 5,0.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- 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.

