

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

Codi	44997
Nom	Resolució de problemes mitjançant tècniques espectroscòpiques
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2021 - 2022

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2249 - Màster Universitari en Química	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2249 - Màster Universitari en Química	4 - Aplicacions de la Química Orgànica	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
COSTERO NIETO, ANA MARIA	325 - Química Orgànica

RESUM

En aquesta assignatura, els alumnes amplien els coneixements adquirits sobre els fonaments de les diferents tècniques espectroscòpiques (IR, UV, RMN, EM) per a poder aplicar-los a casos pràctics d'estudis cinètics, de determinació de l'estructura de compostos d'interès farmacèutic o de catalitzadors heterogenis i a comprendre les aplicacions mèdiques d'algunes d'aquestes tècniques.

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 que s'imparteixen en les titulacions indicades en el perfil d'ingrés recomanat per a l'estudiant de màster.

COMPETÈNCIES

2249 - Màster Universitari en Química

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- Ser capaç de resoldre problemes complexos de química, siga en l'àmbit acadèmic, de la investigació o de l'aplicació industrial a nivell d'especialització o màster
- Posseir la capacitat de planificar i gestionar temps i recursos i adquirir experiència en la presa de decisions.
- Aplicar els coneixements adquirits en el màster per a identificar oportunitats d'ocupació o emprendimiento en el sector químic.
- Adquirir experiència en l'ocupació de ferramentes d'informació i així com en la gestió de la informació obtinguda.
- Ser capaç de defensar postures en debats i col·loquis de forma rigorosa i raonada.
- Ser capaç de dissenyar, realitzar, analitzar i interpretar experiències i dades complexes, com a especialista.
- Ampliar i aprofundir en els coneixements d'espectroscòpia, RMN i EM les seues aplicacions, que permeten resoldre problemes d'interés industrial.
- Aplicar els coneixements teòric-pràctics avançats adquirits de les distintes especialitats de la química a la I+D+i.
- Ser capaç d'abordar qualsevol tipus d'investigació en l'àmbit de la química i/o de la indústria química, com a especialista.
- Ser capaç de presentar i defensar públicament els resultats obtinguts en una investigació científica o com resultat del treball en una indústria química.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

- Ampliar els coneixements adquirits sobre els fonaments de les diferents tècniques espectroscòpiques (IR, UV, RMN, EM).
- Estudiar la cinètica d'una reacció usant diferents tècniques espectroscòpiques.
- Estudiar l'equilibri químic i l'efecte de la temperatura sobre aquest.
- Determinar la configuració o la conformació d'una molècula mitjançant RMN.
- Comprovar l'existència de processos d'associació i reconeixement molecular mitjançant experiments de difusió.
- Conèixer els aspectes bàsics de la RMN de sòlids i les seues aplicacions.
- Comprendre algunes aplicacions mèdiques de la RMN i l'espectrometria de masses.



DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Introducció

Revisió i ampliació dels principis de les diferents tècniques espectroscòpiques. L'espectre electromagnètic i la seua interacció amb la matèria. Introducció a lespectroscòpia de ressonància magnètica nuclear.

Espectroscòpia infraroja i Raman. Espectroscòpia Raman: dispersiva i de transformada de Fourier. Espectroscòpia d'absorció electrònica.

Espectrometria de masses. Aplicacions de les diferents espectroscòpies a la resolució de casos pràctics.

2. Aplicació en estudis cinètics

Estudi de la cinètica d'una reacció utilitzant IR, UV o RMN. Aspectes quantitatius de les espectroscòpies IR, UV i RMN. Aplicacions de les tècniques espectroscòpiques en casos pràctics. Estudi dels processos de coalescència en RMN. Aplicació a la determinació d'equilibris químics complexos.

3. Determinació estructural avançada

Determinació de la conformació o configuració d'un compost mitjançant RMN.

- Efecte NOE. Experiments NOESY i ROESY.
- Aplicació en casos pràctics: indústria farmacèutica.

4. Estudis de processos de reconeixement molecular

Tècniques per a l'estudi de processos de reconeixement molecular. Aplicació a casos pràctics.

5. Ressonància magnètica de sòlids

Principis de la RMN de sòlids. Aplicació a casos pràctics.

6. RMN i espectrometria de masses i la seua aplicació en medicina

Metabolòmica.

- Aplicació a casos pràctics.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	40,00	100
Tutories reglades	10,00	100
Estudi i treball autònom	75,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura s'imparteix mitjançant classes teòriques de tipus lliçó magistral participativa, classes amb activitat pràctica dirigida, seminaris i tallers en què, entre altres activitats formatives, es resolen problemes pràctics aplicats orientats a avaluar la comprensió que de l'assignatura té l'alumne. A més, s'utilitza de la plataforma Aula Virtual, espai virtual en què es deposita tota la informació que es considere oportuna per al desenvolupament de la docència i el control de la participació de l'alumnat en les activitats proposades.

AVALUACIÓ**Primera convocatòria:**

-Proves (exàmens) orals i/o escrites basades en els resultats de l'aprenentatge i dels objectius de cada assignatura, en la seua part teòrica i/o pràctica. Representen el 70% de la nota. Per aprovar l'assignatura, cal una nota mínima en aquest apartat de 4,5 (sobre 10).

-Avaluació contínua de l'activitat desenvolupada per l'estudiant mitjançant l'assistència participativa, l'la exposició de treballs, resolució de problemes, etc. Aquest apartat representa el 30% de la nota global.

Segona convocatòria:

La qualificació de l'assignatura, en segona convocatòria, és la de l'examen corresponent.

REFERÈNCIES**Bàsiques**

- Lambert, J.B., H.E. Shurvell, D.A. Ligther, R. Graham Cooks. Organic Structural Spectroscopy. 2a. edició. Editorial Prentice Hall: 2010
- Hesse M., H. Meier I B. Zeeh. Métodos espectroscópicos en Química Orgánica. 2ª edició. Editorial Síntesis: Madrid, 2005.



- Randazzo, Antonio. Guía Práctica para la Interpretación de Espectros de RMN. Editorial Loghía: 2018.
- Ekman R., J. Silberring, A. Westman-Brinkmalm i A. Kraj. Mass spectrometry (Instrumentation, Interpretation, and Applications. Editorial John Wiley & Sons: 2009
- Apperley, D.C., R.K. Harris i P. Hodgkinson. Solid State NMR: Basic Principles & Practice Solid State NMR. Editorial Momentum Press: 2012.
- Duer, M.J. Solid-State NMR Spectroscopy Principles and Applications. Editorial Blackwell Science Ltd: 2002.

Complementàries

- Pretsch, E.; Clerc, T.; Seibl, J.; Simon, W. Tablas para la determinación estructural por métodos espectroscópicos, Editorial Springer, Barcelona, 1998.
- Claridge, T. D. W. High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. 2ª edición, Editorial Pergamon, 2009.
- Simpson J. Organic Structure Determination Using 2-D NMR Spectroscopy. 2ª edición, Editorial Academic Press, 2012.
- Dass, C. Fundamentals of Contemporary Mass Spectrometry. Editorial John Wiley & Sons, 2007.
- Field L.D., S. Sternhell, J.R. Kalman. Organic Structures from Spectra. 3ª edición, Editorial John Wiley & Sons, 2002
- Colección de publicaciones seleccionadas para el estudio de casos prácticos

ADDENDA COVID-19

Aquesta addenda només s'activarà si la situació sanitària ho requereix i previ acord del Consell de Govern