

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

Código	44997
Nombre	Resolución de problemas mediante técnicas espectroscópicas
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2023 - 2024

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2249 - Máster Universitario en Química	Facultad de Química	1	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2249 - Máster Universitario en Química	4 - Aplicaciones de la Química Orgánica	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
SAEZ CASES, JOSE ANTONIO	325 - Química Orgánica

RESUMEN

En esta asignatura, los alumnos ampliarán los conocimientos adquiridos sobre los fundamentos de las distintas técnicas espectroscópicas (IR, UV, RMN, EM) para poder aplicarlos a casos prácticos de estudios cinéticos, de determinación de la estructura de compuestos de interés farmacéutico o al estudio de catalizadores heterogéneos. También se estudian las aplicaciones médicas de algunas de estas técnicas.

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 que se imparten en las titulaciones indicadas en el perfil de ingreso recomendado para el estudiante de Master.

COMPETENCIAS**2249 - Máster Universitario en Química**

- Que los/las estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- Ser capaz de resolver problemas complejos de química, sea en el ámbito académico, de la investigación o de la aplicación industrial a nivel de especialización o máster
- Poseer la capacidad de planificar y gestionar tiempo y recursos y adquirir experiencia en la toma de decisiones.
- Aplicar los conocimientos adquiridos en el máster para identificar oportunidades de empleo o emprendimiento en el sector químico.
- Adquirir experiencia en el empleo de herramientas de información y así como en la gestión de la información obtenida.
- Ser capaz de defender posturas en debates y coloquios de forma rigurosa y razonada.
- Ser capaces de diseñar, realizar, analizar e interpretar experiencias y datos complejos, como especialista.
- Ampliar y profundizar en los conocimientos de espectroscopia, RMN y EM y sus aplicaciones, que permitan resolver problemas de interés industrial.
- Aplicar los conocimientos teórico-prácticos avanzados adquiridos de las distintas especialidades de la química a la I+D+i.
- Ser capaces de abordar cualquier tipo de investigación en el ámbito de la química y/o de la industria química, como especialista.
- Ser capaz de presentar y defender públicamente los resultados obtenidos en una investigación científica o como resultado del trabajo en una industria química.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- Ampliar los conocimientos adquiridos sobre los fundamentos de las distintas técnicas espectroscópicas (IR, UV, RMN, EM).
- Estudiar la cinética de una reacción usando distintas técnicas espectroscópicas.
- Estudiar el equilibrio químico y el efecto de la temperatura sobre el mismo.
- Determinar la configuración o la conformación de una molécula mediante RMN.
- Comprobar la existencia de procesos de asociación y reconocimiento molecular mediante experimentos de difusión.
- Conocer los aspectos básicos de la RMN de sólidos y sus aplicaciones.
- Comprender algunas aplicaciones médicas de la RMN y Espectrometría de Masas



- Saber aplicar los conocimientos adquiridos para contribuir a los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS's) como la gestión sostenible del agua, materias primas y fuentes de energía (ODS 6 y 7) y desarrollar una labor profesinal con el menor impacto ambiental y aprovechando materias primas alternativas (ODS 11, 14 y 15)

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Introducción

Revisión y ampliación de los principios de las diferentes técnicas espectroscópicas. El espectro electromagnético y su interacción con la materia. Introducción a la espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear. Espectroscopía infrarroja y Raman. Espectroscopía Raman: dispersiva y de transformada de Fourier. Espectroscopía de absorción electrónica. Espectrometría de masas. Aplicaciones de las distintas espectroscopías a la resolución de casos prácticos.

2. Aplicación en estudios cinéticos

Estudio de la cinética de una reacción empleando IR, UV o RMN. Aspectos cuantitativos de las espectroscopías IR, UV y RMN. Aplicaciones de las técnicas espectroscópicas en casos prácticos. Estudio de los procesos de coalescencia en RMN. Aplicación a la determinación de equilibrios químicos complejos.

3. Determinación estructural avanzada

Determinación de la conformación o configuración de un compuesto mediante RMN. Efecto NOE. Experimentos NOESY y ROESY. Determinación de la configuración absoluta de un estereocentro. Aplicación en casos prácticos: industria farmacéutica.

4. Estudios de procesos de reconocimiento molecular

Técnicas para el estudio de procesos de reconocimiento molecular. Experimentos de difusión. Aplicación a casos prácticos.

5. Resonancia magnética de sólidos

Principios de la RMN de sólidos. Aplicación a casos prácticos

6. RMN y Espectrometría de Masas y su aplicación en medicina

Metabólica. Aplicación a casos prácticos.

**VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	40,00	100
Tutorías regladas	10,00	100
Estudio y trabajo autónomo	75,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

La asignatura se impartirá en modalidad online asíncrona. Entre otras actividades formativas, se resolverán problemas prácticos aplicados orientados a evaluar la comprensión de la asignatura por parte del alumno. Además, se hará uso de la plataforma Aula Virtual, espacio virtual donde se deposita toda la información que se considere oportuna para el desarrollo de la docencia y el control de la participación del alumnado en las actividades propuestas.

EVALUACIÓN**Primera convocatoria:**

-Pruebas presenciales (exámenes) orales y/o escritas basadas en los resultados del aprendizaje y de los objetivos de cada asignatura, en su parte teórica y/o práctica. Supondrán el 60 % de la nota. Para aprobar la asignatura se requiere una nota mínima en este apartado de 4,5 (sobre 10).

-Evaluación continua de la actividad desarrollada por el estudiante mediante la exposición de trabajos, resolución de problemas, etc... Este apartado supondrá un 40 % de la nota global.

Segunda convocatoria:

La calificación de la asignatura, en segunda convocatoria será la del examen correspondiente.

REFERENCIAS**Básicas**

- 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.

Complementarias

- 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