

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

<b>Codi</b>	44997
<b>Nom</b>	Resolució de problemes mitjançant tècniques espectroscòpiques
<b>Cicle</b>	Màster
<b>Crèdits ECTS</b>	5.0
<b>Curs acadèmic</b>	2023 - 2024

**Titulació/titulacions**

<b>Titulació</b>	<b>Centre</b>	<b>Curs</b>	<b>Període</b>
2249 - Màster Universitari en Química	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

**Matèries**

<b>Titulació</b>	<b>Matèria</b>	<b>Caràcter</b>
2249 - Màster Universitari en Química	4 - Aplicacions de la Química Orgànica	Obligatòria

**Coordinació**

<b>Nom</b>	<b>Departament</b>
SAEZ CASES, JOSE ANTONIO	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'APRENENTATGE**

- 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.



- Saber aplicar els coneixements adquirits per contribuir als Objectius de Desenvolupament Sostenible (ODS's) com la gestió sostenible de l'aigua, matèries primes i fonts d'energia (ODS 6 i 7) i desenvolupar una tasca professional amb el menor impacte ambiental i aprofitant matèries primeres alternatives (ODS 11, 14 i 15)

## 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
<b>TOTAL</b>	<b>125,00</b>	

**METODOLOGIA DOCENT**

L'assignatura s'impartirà en modalitat en línia asíncrona. Entre altres activitats formatives, es resoldran problemes pràctics aplicats orientats a avaluar la comprensió de l'assignatura per part de l'alumne. A més, es farà ús de la plataforma Aula Virtual, espai virtual on 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 presencials (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. Suposaran el 60% de la nota. Per a aprovar l'assignatura es requereix una nota mínima en aquest apartat de 4,5 (sobre 10).

-Avaluació contínua de l'activitat desenvolupada per l'estudiant mitjançant l'exposició de treballs, resolució de problemes, etc... Aquest apartat suposarà un 40% de la nota global.

Segona convocatòria:

La qualificació de l'assignatura, en segona convocatòria serà 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 espectroscòpicos 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