

**FICHA IDENTIFICATIVA****DATOS DE LA ASIGNATURA****Código:** 42933**Nombre:** Determinación estructural mediante RMN**Ciclo:** Máster Universitario Oficial**Créditos ECTS:** 2**Curso académico:** 2026-27**TITULACIONES**

Titulación	Centro	Curso	Periodo
------------	--------	-------	---------

MATERIAS

Titulación	Materia	Carácter
------------	---------	----------

COORDINACIÓN

FERRANDO SORIA JESUS

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.

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 y procesos químicos y 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).

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 / RESULTADOS DE APRENDIZAJE

2109 -

Elaborar una memoria clara y concisa de los resultados de su trabajo y de las conclusiones obtenidas.

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.

Seleccionar la instrumentación química comercializada apropiada para el estudio a realizar y de aplicar sus conocimientos para utilizarla de manera correcta.

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 emplear las herramientas básicas para el tratamiento de datos experimentales en el laboratorio.

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.

Ser capaces de seleccionar y optimizar las variables instrumentales para obtener los mejores parámetros analíticos en las técnicas experimentales estudiadas.

Ser capaces de trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional o investigadora.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Aspectos experimentales de la RMN

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

- 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.



2. Obtención e interpretación de espectros

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

VOLUMEN DE TRABAJO (HORAS)

ACTIVIDADES PRESENCIALES

Actividad	Horas
Total horas	0,00

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

Actividad	Horas
Asistencia a otras actividades	0,00
Elaboración de trabajos individuales o en grupo	5,00
Estudio y trabajo autónomo	14,00
Preparación de clases	0,00
Preparación de actividades de evaluación	5,00
Resolución de casos prácticos	6,00
Total horas	30,00

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**á 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 verificación AF2 y Metodología docente del verificación MD1).



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

s son las siguientes:

- Específicas: CE7

EVALUACIÓN

La información está en un formato que no se puede convertir

BIBLIOGRAFÍA

- 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.