

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA**

**Codi:** 42933  
**Nom:** Determinació estructural mitjançant RMN  
**Cicle:** Màster Universitari Oficial  
**Crèdits ECTS:** 2  
**Curs acadèmic:** 2025-26

**TITULACIONS**

Titulació	Centre	Curs	Període
2109 - Màster Universitari en Tècniques Experimentals en Química	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

**MATÈRIES**

Titulació	Matèria	Caràcter
2109 - Màster Universitari en Tècniques Experimentals en Química	Laboratori avançat de Tècniques Experimentals en Química	OBLIGATÒRIA

**COORDINACIÓ**

PARDO MARIN EMILIO JOSE

**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.

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).

**CONEIXEMENTS PREVIS****RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ**



No s'ha especificat 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 / RESULTATS D' APRENTATGE

-

Elaborar una memòria clara i concisa dels resultats del seu treball i de les conclusions obtingudes.

Realitzar estudis relacionats 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.

Seleccionar la instrumentació química comercialitzada apropiada per a l'estudi a realitzar i d'aplicar els seus coneixements per utilitzar-la de manera correcta.

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 d'usar les eines bàsiques per al tractament de dades experimentals al laboratori.

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.

Ser capaçs de seleccionar i optimitzar les variables instrumentals per obtenir els millors paràmetres analítics en les tècniques experimentals estudiades.

Ser capaçs de treballar en equip amb eficiència en la seua tasca professional o investigadora.

### DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

#### 1. Aspectes experimentals de la RMN

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

- Obtenció d'espectres monodimensionals de les mostres, comprnent diferents nuclis d'interés (1H, 13C, 19F, 31P).

- Obtenció d'espectres bidimensionals homonucleares (COSY). Obtenció d'espectres bidimensionals



## 2. Obtenció i interpretació d'espectres

- Obtenció d'espectres monodimensionals de les mostres, comprnent diferents nuclis d'interés (1H, 13C, 19F, 31P).heteronucleares (HSQC, HMBC).
- Obtenció d'espectres a diferents temperatures.
- Obtenció d'espectres de mostres sòlides (nuclis com a 11B, 27Al, 29Si).
- Interpretació dels espectres obtinguts.

### VOLUM DE TREBALL (HORES)

#### ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Seminari	4,00
Laboratori	16,00
<b>Total hores</b>	<b>20,00</b>

#### ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	5,00
Estudi i treball autònom	14,00
Preparació de classes	0,00
Preparació d'activitats d'avaluació	5,00
Resolució de casos pràctics	6,00
<b>Total hores</b>	<b>30,00</b>

### 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 emprades.

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 verifca AF4 y Medologia docent del verifca 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

### PRIMERA CONVOCATÒRIA

**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 verifca CE2, CE3, CE5 i CE6). Les sessions pràctiques es realitzaran en grups de treball (Competència del verifca 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.

### **SEGONA CONVOCATÒRIA**

L'avaluació es durà a terme de la mateixa manera que a la primera convocatòria.

## **BIBLIOGRAFIA**

- 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.

