

**FICHA IDENTIFICATIVA****DATOS DE LA ASIGNATURA****Código:** 44997**Nombre:** Resolución de problemas mediante técnicas espectroscópicas**Ciclo:** Máster Universitario Oficial**Créditos ECTS:** 5**Curso académico:** 2026-27**TITULACIONES**

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

MATERIAS

| Titulación | Materia | Carácter |
|--|-------------------------------------|-------------|
| 2249 - Máster Universitario en Química | Aplicaciones de la Química Orgánica | OBLIGATORIA |

COORDINACIÓN

SAEZ CASES JOSE ANTONIO

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.

tas 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 / RESULTADOS DE APRENDIZAJE****2249 - Máster Universitario en Química**

Adquirir experiencia en el empleo de herramientas de información y así como en la gestión de la información obtenida.

Ampliar y profundizar en los conocimientos de espectroscopia, RMN y EM y sus aplicaciones, que permitan resolver problemas de interés industrial.

Aplicar los conocimientos adquiridos en el máster para identificar oportunidades de empleo o emprendimiento en el sector químico.

Aplicar los conocimientos teórico-prácticos avanzados adquiridos de las distintas especialidades de la química a la I+D+i.

Poseer la capacidad de planificar y gestionar tiempo y recursos y adquirir experiencia en la toma de decisiones.

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 capaces de abordar cualquier tipo de investigación en el ámbito de la química y/o de la industria química, como especialista.

Ser capaces de diseñar, realizar, analizar e interpretar experiencias y datos complejos, como especialista.

Ser capaz de defender posturas en debates y coloquios de forma rigurosa y razonada.

Ser capaz de presentar y defender públicamente los resultados obtenidos en una investigación científica o como resultado del trabajo en una industria química.

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

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 (HORAS)

ACTIVIDADES PRESENCIALES

| Actividad | Horas |
|--------------------|--------------|
| Tutorías | 10,00 |
| Teoría | 40,00 |
| Total horas | 50,00 |

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

| Actividad | Horas |
|---|-------|
| Asistencia a otras actividades | 0,00 |
| Elaboración de trabajos individuales o en grupo | 0,00 |
| Estudio y trabajo autónomo | 75,00 |
| Preparación de clases | 0,00 |
| Preparación de actividades de evaluación | 0,00 |



| | |
|-------------------------------|--------------|
| Resolución de casos prácticos | 0,00 |
| Total horas | 75,00 |

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.

puestas.

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.

n correspondiente.

BIBLIOGRAFÍA

- 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.
- 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