

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA****Codi:** 44997**Nom:** Resolució de problemes mitjançant tècniques espectroscòpiques**Cicle:** Màster Universitari Oficial**Crèdits ECTS:** 5**Curs acadèmic:** 2025-26**TITULACIONS**

Titulació	Centre	Curs	Període
2249 - Màster Universitari en Química	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

**MATÈRIES**

Titulació	Matèria	Caràcter
2249 - Màster Universitari en Química	Aplicacions de la Química Orgànica	OBLIGATÒRIA

**COORDINACIÓ**

SAEZ CASES JOSE ANTONIO

**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.

grave;cniques.

**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 que s'imparteixen en les titulacions indicades en el perfil d'ingrés recomanat per a l'estudiant de màster.

**COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENTATGE**

**2249 - Màster Universitari en Química**

Adquirir experiència en l'ocupació de ferramentes d'informació i així com en la gestió de la informació obtinguda.

Ampliar i aprofundir en els coneixements d'espectroscòpia, RMN i EM les seues aplicacions, que permeten resoldre problemes d'interés industrial.

Aplicar els coneixements adquirits en el màster per a identificar oportunitats d'ocupació o emprendimiento en el sector químic.

Aplicar els coneixements teoric-pràctics avançats adquirits de les distintes especialitats de la química a la I+D+i.

Posseir la capacitat de planificar i gestionar temps i recursos i adquirir experiència en la presa de decisions.

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 defensar postures en debats i col·loquis de forma rigorosa i raonada.

Ser capaç de presentar i defensar públicament els resultats obtinguts en una investigació científica o com resultat del treball en una indústria química.

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

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 dissenyar, realitzar, analitzar i interpretar experiències i dades complexes, com a especialista.

**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 (HORES)

#### ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Tutories	10,00
Teoria	40,00
<b>Total hores</b>	<b>50,00</b>

#### ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	0,00
Estudi i treball autònom	75,00
Preparació de classes	0,00
Preparació d'activitats d'avaluació	0,00



Resolució de casos pràctics	0,00
<b>Total hores</b>	<b>75,00</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.

vitats 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.  
de l'examen corresponent.

## BIBLIOGRAFIA

- 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. 2<sup>a</sup> edición, Editorial Pergamon, 2009.
- Simpson J. Organic Structure Determination Using 2-D NMR Spectroscopy. 2<sup>a</sup> 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. 3<sup>a</sup> edición, Editorial John Wiley & Sons, 2002
- Colección de publicaciones seleccionadas para el estudio de casos prácticos