

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA****Codi:** 44997**Nom:** Resolució de problemes mitjançant tècniques espectroscòpiques**Cicle:** Màster Universitari Oficial**Crèdits ECTS:** 5**Curs acadèmic:** 2026-27**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
Total hores	50,00

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
Total hores	75,00

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