

## ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Química Orgánica  
**MODULO:** Química  
**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 1 de 10

### CARACTERÍSTICAS GENERALES\*

**Tipos:**  Formación básica,  Obligatoria,  Optativa  
 Trabajo de final de grado,  Prácticas Tuteladas  
 Prácticas Orientadas a la Mención

**Duración:** Semestral **Semestre/s:** S5  
**Número de créditos ECTS:** 6  
**Idioma/s:** catalán, castellano

## DESCRIPCIÓN

### BREVE DESCRIPCIÓN Y JUSTIFICACIÓN

Se presentan las principales técnicas espectroscópicas que se emplean en la actualidad para el análisis estructural de fármacos, en su mayoría compuestos orgánicos, dedicando especial atención a espectroscopía de masas (EM), resonancia magnética nuclear (RMN) y otras técnicas complementarias, entre otras espectroscopía de infrarrojo (IR). Para cada una de las técnicas, se explica el fundamento físico necesario para el manejo a nivel de usuario avanzado, los tipos de instrumentos empleados y su funcionamiento. Se considerará también la preparación de muestra necesaria y los parámetros espectrales. Se detallan las características espectrales de los principales tipos de moléculas orgánicas, así como a compuestos de interés farmacológico, con el objetivo de afianzar los conocimientos mediante ejercicios específicos para cada técnica. Finalmente, se discuten y resuelven problemas que precisan el empleo conjunto de varias de estas técnicas, resaltando su carácter complementario.

### COMPETENCIAS\*

#### Competencias Básicas:

- B-4 Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.
- B-5 Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Química Orgánica  
**MODULO:** Química  
**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 2 de 10

### Competencias Generales:

- G-1 Identificar, diseñar, obtener, analizar, controlar y producir fármacos y medicamentos, así como otros productos y materias primas de interés sanitario de uso humano o veterinario.
- G-3 Saber aplicar el método científico y adquirir habilidades en el manejo de la legislación, fuentes de información, bibliografía, elaboración de protocolos y demás aspectos que se consideran necesarios para recopilar e interpretar datos como el diseño y evaluación crítica de ensayos preclínicos y clínicos.
- G-17 Tener destrezas informáticas suficientes para manejar procesadores de texto, hojas de cálculo, bases de datos, presentaciones y búsqueda por internet. Conocer la situación actual de la telemática en relación con las ciencias de la salud.

### Competencias Específicas:

- E-Q1 Identificar, diseñar, obtener, analizar y producir principios activos, fármacos y otros productos y materiales de interés sanitario.

### Competencias Transversales:

- T-1 Tener conocimientos avanzados y demostrar una comprensión de los aspectos teóricos y prácticos y de la metodología de trabajo en su campo de estudio con una profundidad que llegue hasta la vanguardia del conocimiento.
- T-2 Ser capaces de desenvolverse y poder aplicar sus conocimientos y sus capacidades de resolución de problemas, en ámbitos laborales complejos y especializados que requieren el uso de ideas creativas e innovadoras.

### **REQUISITOS PREVIOS\***

Se recomienda tener conocimientos previos de Química General y Química Orgánica

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Química Orgánica  
**MODULO:** Química  
**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 3 de 10

### CONTENIDOS

#### 0.- Introducción al análisis estructural de fármacos

##### 1.- Espectroscopía: conceptos básicos

Definición y clasificación. Radiación electromagnética (REM). El espectro electromagnético. Interacción radiación-materia: absorción y emisión.

1.1.- *Espectroscopía electrónica: UV-visible*. Absorciones características de las moléculas orgánicas. Cromóforos.

1.2.- *Espectroscopía infrarroja (IR)*: Absorción y tipos de vibraciones. Información estructural y correlaciones empíricas. Identificación de grupos funcionales. Aplicación al análisis cualitativo de fármacos.

##### 2.- Espectrometría de masas (EM).

Introducción y fundamentos. Métodos de ionización e instrumentación. Determinación de la masa molecular, tipos de iones y patrones isotópicos. Procesos de fragmentación: ruptura homolítica y heterolítica de enlaces, reordenamiento. Fragmentaciones típicas asociadas a grupos funcionales. Interpretación de espectros.

2.1.- Acoplamiento con técnicas de separación: cromatografía de gases (*GC-MS*) y cromatografía líquida de alta presión (*HPLC-MS* y *UHPLC-MS*). Alta resolución y determinación de la fórmula molecular de fármacos.

##### 3.- Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear (RMN): Aspectos generales

Descripción básica del fenómeno de la RMN. Aspectos experimentales.

3.1.-  $^1\text{H}$  RMN: Desplazamiento químico. Mecanismos de apantallamiento. Relaciones topológicas y simetría molecular. Otros factores que influyen en el desplazamiento químico: anisotropía magnética, efectos del disolvente. Correlaciones: hidrógenos unidos a carbono, hidrógenos unidos a otros núcleos. Simulaciones espectrales. Ejemplos.

3.2.-  $^1\text{H}$  RMN: acoplamiento de espín. Conceptos básicos de la interacción espín-espín, constantes de acoplamiento y patrones de multiplicidad. Ecuación de Karplus. Sistemas de espín. Acoplamiento heteronuclear. Ejemplos.

3.3.-  $^1\text{H}$  NMR: análisis del espectro. Fenómenos de relajación. Simplificaciones del espectro: modificaciones del campo magnético, desacoplamiento de espín, reactivos de desplazamiento. Efecto NOE. Introducción a la espectroscopía bidimensional, 2D RMN:

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Química Orgánica  
**MODULO:** Química  
**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 4 de 10

correlación homonuclear a través de enlaces (COSY) y a través del espacio (NOESY), correlación heteronuclear a través de un enlace (HSQC, HMQC). Ejemplos.

3.4.-  $^{13}\text{C}$  NMR. Métodos de adquisición, desacoplamientos: banda ancha (BB), *off-resonance*, DEPT (*Distortionless Enhancement by Polarization Transfer*). Desplazamiento químico. Acoplamientos de espín-espín. Análisis de espectros. Ejemplos.

3.5.- RMN de otros núcleos.  $^1\text{H}$  RMN de compuestos bio-inorgánicos y fármacos basados en complejos metálicos.  $^{31}\text{P}$  RMN,  $^{19}\text{F}$  RMN,  $^{14}\text{N}$  y  $^{15}\text{N}$  RMN.

### 4.- Otras técnicas analíticas de utilidad

Técnicas cromatográficas: Métodos cromatográficos estereoselectivos para el análisis de fármacos. Actividad óptica. Difracción de rayos X (monocristal y XRD).

## ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Química Orgánica  
**MODULO:** Química  
**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 5 de 10

### METODOLOGIA

#### ACTIVIDADES FORMATIVAS

Actividades Formativas* (Memoria GF)	Actividades Formativas (Sigma)	Créditos* ECTS	Competencias
Sesiones teóricas	Sesiones de exposición de conceptos	1,8	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
Resolución de ejercicios y problemas	Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos (1)	0,4	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
Actividades integradores del conocimiento: casos, seminarios, Trabajos dirigidos y aprendizaje cooperativo	Seminarios	-	-
Sesiones prácticas: laboratorio o simulaciones	Trabajo práctico / laboratorio	-	-
-	Presentaciones (3)	-	-
Estudio personal del alumno	Actividades de estudio personal por parte de los estudiantes	3,7	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
Actividades de evaluación	Actividades de evaluación (exámenes, controles de seguimiento...)	0,1	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
	<b>TOTAL</b>	<b>6,0</b>	

GF: Grado en Farmacia

(1) En el GF el epígrafe de "casos" de la ficha de la asignatura en Sigma está incluido en "Actividades integradoras del conocimiento"

(2) No aplica para el GF, actividades para resolver dudas del alumno están incluidas en el apartado "Estudio personal del alumno"

(3) En el GF el epígrafe "presentaciones" de la ficha de la asignatura en Sigma está incluido en "Actividades integradoras del conocimiento"

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Química Orgánica  
**MODULO:** Química  
**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 6 de 10

### EXPLICACIÓN DE LA METODOLOGIA DIDÁCTICA

- 1. Método expositivo.** Lección magistral participativa, trabajo a través de las exposiciones de los diferentes contenidos teórico-prácticos e implicando al estudiante con la combinación de actividades y ejercicios en el aula. Incentivando al alumno a formular preguntas que comporten un razonamiento personal. Impartición de contenidos, explicación y demostración de capacidades, habilidades y conocimientos en el aula o a través de medios audiovisuales.
- 2. Resolución de ejercicios o problemas,** desarrollando soluciones adecuadas mediante la realización de rutinas, aplicando fórmulas o algoritmos e interpretando resultados. Se suele utilizar como complemento de la lección magistral.
- 3. Actividades de evaluación.** Ejercicios para evaluar el grado de asunción de las competencias (conocimientos, habilidades, valores) por parte de los alumnos. De forma continuada o puntual.

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Química Orgánica  
**MODULO:** Química  
**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 7 de 10

### EVALUACIÓN

#### MÉTODOS DE EVALUACIÓN

Métodos de evaluación * (Memoria GF)	Métodos de evaluación (Sigma)	Peso*(2)	Competencias
Examen final	Examen final	55%	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
-	Examen/es parcial/es (1)	-	-
Seguimiento del aprendizaje (incluye controles, casos, ejercicios, problemas, participación, evaluación On-Line, autoevaluación)	Actividades de seguimiento	45%	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
Trabajos y presentaciones	Trabajos y presentaciones	-	-
Trabajo práctico o experimental	Trabajo experimental o de campo	-	-
Evaluación TFG	Proyectos	-	-
Prácticas externas (prácticas tuteladas y prácticas orientadas a la mención)	Valoración de la empresa o institución	-	-
-	Participación (1)	-	-
		100%	

GF: Grado en Farmacia

1) En el GF los epígrafes "Examen/es parcial/es" y "la Participación" de la ficha de la asignatura en Sigma están incluidos en "Seguimiento del aprendizaje"

(2) Los valores pueden oscilar  $\pm 5\%$  respecto el valor definido en la memoria del GF (sumatorio final 100%)

#### RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

- Demostrar comprensión y capacidad de aplicación de los conocimientos de Determinación Estructural (IR, RMN, UV-Vis, EM) en la práctica de la Farmacia
- Identificar, formular y resolver problemas típicos de Determinación Estructural

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Química Orgánica  
**MODULO:** Química  
**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 8 de 10

### CALIFICACIÓN

#### Primera convocatoria:

La evaluación de la asignatura considerará las calificaciones obtenidas mediante los métodos de evaluación descritos más arriba. Todas estas notas serán sobre 10 y tendrán un valor máximo de 10.

Para aprobar la asignatura, deben cumplirse los siguientes dos requisitos:

- A) la calificación global debe ser igual o superior a 5
- B) deben superarse los mínimos exigidos que se detallan a continuación:

#### B.1: Examen Final 55%

- Al final del semestre se realiza un **examen final (EF)** (teoría + problemas), que representa un 55% de la calificación de la asignatura. Para aplicar la fórmula, la nota del examen final debe tener un valor igual o superior a 5.

#### B.2: Actividades de seguimiento (AS) (total 40%)

- Se realizarán dos **exámenes** de seguimiento (**ES**) de la asignatura, dichas pruebas se realizarán en horas de clase y representarán un 40% de la calificación de la asignatura (Prueba I: 15%), (Prueba II: 25%). Los **ES** no liberan materia de cara al **EF**.
- **Resolución de problemas (RP):** Esta actividad de seguimiento representará un 5% de la calificación de la asignatura. La actividad consistirá en la resolución de problemas a entregar.

La nota final se obtiene de:

$$NF = EF \cdot 0.55 + \text{prueba I} \cdot 0.15 + \text{prueba II} \cdot 0.25 + RP \cdot 0.05$$

Si no se superan los mínimos requeridos, no se aplicará la fórmula y la nota final corresponderá a la nota más baja de todas las obtenidas.

#### Segunda convocatoria:

En caso de no superar con un mínimo de 5 en la primera convocatoria, se realizará un examen en una segunda convocatoria que evaluará los contenidos teóricos-prácticos en un solo examen.

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).



## ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Química Orgánica  
**MODULO:** Química  
**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 9 de 10

La cualificación final será:

$$NF = EF \cdot 0.95 + RP \cdot 0.05$$

### Siguientes convocatorias:

$$NF = EF$$

### EVALUACIÓN DE LAS COMPETENCIAS

Para la evaluación de las competencias B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2 se utilizará como indicador la nota de la asignatura.

### BIBLIOGRAFÍA

#### a) Bibliografía básica

- D.H. Williams, I. Fleming, *Spectroscopic Methods in Organic Chemistry*, McGraw-Hill, London, 2007.
- R. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, Wiley, New York, 2005.
- P. Crews, J. Rodríguez, M. Jaspars, *Organic Structure Analysis*, Oxford University Press, New York, 2009.
- M. Hesse, H. Meier y B. Zeeh, *Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica*, 2ª edición, Ed. Síntesis, Madrid, 2005. ISBN: 9788477385226.
- Duddeck H., Dietrich W., Tóth G., *Elucidación Estructural por RMN*. Springer-Verlag Ibérica (Traducción de la 3ª Ed. Revisada y actualizada), 2000.
- Ekman R., Silberring J., Westman-Brinkmalm A., Kraj A., *Mass spectrometry (Instrumentation, Interpretation, and Applications)*, John Wiley & Sons, 2009.

#### b) Bibliografía complementaria: Problemas

- L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, *Organic Structures from Spectra*, Wiley, Chichester, 2008.

#### c) Bibliografía complementaria: Tablas

- E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera, R. Martínez, *Determinación estructural de compuestos orgánicos*, Springer, Barcelona, 2002.

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

**MATERIA:** Química Orgánica  
**MODULO:** Química  
**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 10 de 10

- E. Pretsch, P. Bühlmann, M. Badertscher, *Structure Determination of Organic Compounds*, Springer, Berlin, 2009.

## HISTÓRICO DEL DOCUMENTO

### MODIFICACIONES ANTERIORES

28 de julio de 2016, Dra. Ana Belén Cuenca González

21 de junio de 2017, Dra. Ana Belén Cuenca González

### ÚLTIMA REVISIÓN (Indicar fecha y autor/es)

10 de septiembre de 2018, Dra. Ana Belén Cuenca González