

ASSIGNATURA: DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Química Orgànica

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Farmàcia

Pàgina 1 de 10

CARACTERÍSTIQUES GENERALS*

Tipus: ☐ Formació bàsica, ☒ Obligatòria, ☐ Optativa
☐ Treball de fi de grau, ☐ Pràctiques Tutelades
☐ Pràctiques Orientades a la Menció

Duració: Semestral

Semestre/s: S5

Número de crèdits ECTS: 6

Idioma/es: Català/Castellà

DESCRIPCIÓ

DESCRIPCIÓ BREU I JUSTIFICACIÓ

Es presenten les principals tècniques espectroscòpiques que s'empren en l'actualitat per a l'anàlisi estructural de fàrmacs, majoritàriament compostos orgànics, dedicant especial atenció a espectroscòpia de masses (EM), ressonància magnètica nuclear (RMN) i altres tècniques complementàries, entre altres espectroscòpia d'infraroig (IR). Per a cadascuna de les tècniques, s'explica el fonament físic necessari per al maneig a nivell d'usuari avançat, els tipus d'instruments emprats i el seu funcionament. També es considera la preparació de mostra necessària i els paràmetres espectrals. Es detallen les característiques espectrals dels principals tipus de molècules orgàniques, així com a compostos d'interès farmacològic, amb l'objectiu de consolidar els coneixements mitjançant exercicis específics per a cada tècnica. Finalment, es discuteixen i resolen problemes que precisen l'ocupació conjunt de diverses d'aquestes tècniques, ressaltant el seu caràcter complementari.

COMPETÈNCIES*

Competències bàsiques

- B-4 Que els estudiants puguin transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- B-5: Que els estudiants hagin desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.

* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Química Orgànica

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Farmàcia

Pàgina 2 de 10

Competències generals

- G-1 Identificar, dissenyar, obtenir, analitzar, controlar i produir fàrmacs i medicaments, així com altres productes i matèries primeres d'interès sanitari d'ús humà o veterinari
- G-3: Saber aplicar el mètode científic i adquirir habilitats en el maneig de la legislació, fonts d'informació, bibliografia, elaboració de protocols i altres aspectes que es consideren necessaris per recopilar i interpretar dades com el disseny i avaluació crítica d'assajos pre-clínic i clínic.
- G-17: Tenir destreses informàtiques suficients per manejar processadors de text, fulls de càlcul, bases de dades, presentacions i recerca per internet. Conèixer la situació actual de la telemàtica en relació amb les ciències de la salut.

Competències específiques

- E-Q1 Identificar, dissenyar, obtenir, analitzar i produir principis actius, fàrmacs i altres productes i materials d'interès sanitari.

Competències Transversals

- T-1: Tenir coneixements avançats i demostrar una comprensió dels aspectes teòrics i pràctics i de la metodologia de treball en el seu camp d'estudi amb una profunditat que arribi fins a l'avantguarda del coneixement.
- T-2 Ser capaços de sortir-se'n bé i poder aplicar els seus coneixements i les seves capacitats de resolució de problemes, en àmbits laborals complexos i especialitzats que requereixin l'ús d'idees creatives i innovadores.

REQUISITS PREVIS*

Es recomana tenir coneixements previs de Química General y Química Orgànica.

* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Química Orgànica

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Farmàcia

Pàgina 3 de 10

CONTINGUTS

0.- Introducció a l'anàlisi estructural de fàrmacs

1.- Espectroscòpia: conceptes bàsics

Definició i classificació. Radiació electromagnètica (REM). L'espectre electromagnètic. Interacció radiació-matèria: absorció i emissió.

1.1.- *Espectroscòpia electrònica: UV-visible*. Absorcions característiques de les molècules orgàniques. Cromòfors.

1.2.- *Espectroscòpia infraroja (IR)*: Absorció i tipus de vibracions. Informació estructural i correlacions empíriques. Identificació de grups funcionals. Aplicació a l'anàlisi qualitativa de fàrmacs.

2.- Espectrometria de masses (EM)

Introducció i fonaments. Mètodes d'ionització i instrumentació. Determinació de la massa molecular, tipus de ions i patrons isotòpics. Processos de fragmentació: ruptura homolítica i heterolítica d'enllaços, reordenament. Fragmentacions típiques associades a grups funcionals. Interpretació d'espectres.

2.1.- Acoblament amb tècniques de separació: cromatografia de gasos (GC-MS) i cromatografia líquida d'alta pressió (HPLC-MS i UHPLC-MS). Alta resolució i determinació de la fórmula molecular de fàrmacs.

3.- Espectroscopia de Ressonància Magnètica Nuclear (RMN): Aspectes generals

Descripció bàsica del fenomen de la RMN. Aspectes experimentals.

3.1.- ^1H RMN: desplaçament químic. Mecanismes d'apantallament. Relacions topològiques i simetria molecular. Altres factors que influeixen en el desplaçament químic: anisotropia magnètica, efectes del dissolvent. Correlacions: hidrògens units a carboni, hidrògens units a altres nuclis. Simulacions espectrals. Exemples.

3.2.- ^1H RMN: acoblament de spin. Conceptes bàsics de la interacció spin-spin, constants d'acoblament i patrons de multiplicitat. Equació de Karplus. Sistemes d'espín. Acoblament heteronuclear. Exemples.

3.3.- ^1H NMR: anàlisi de l'espectre. Fenòmens de relaxació. Simplificacions de l'espectre: modificacions del camp magnètic, desacoblament de spin, reactius de desplaçament. Efecte NOE. Introducció a l'espectroscòpia bidimensional, 2D RMN: correlació

* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Química Orgànica

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Farmàcia

Pàgina 4 de 10

homonuclear a través d'enllaços (COSY) i a través de l'espai (NOESY), correlació heteronuclear a través d'un enllaç (HSQC, HMQC). Exemples.

3.4.- ^{13}C NMR. Mètodes d'adquisició, desacoblaments: banda ampla (BB), off-resonance, DEPT (*Distortionless Enhancement by Polarization Transfer*). Desplaçament químic. Acoblaments de spin-spin. Anàlisi d'espectres. Exemples.

3.5-. RMN d'altres nuclis. ^1H RMN de compostos bio-inorgànics i fàrmacs basats en complexos metàl·lics. ^{31}P RMN, ^{19}F RMN, ^{14}N i ^{15}N RMN.

4.- Altres tècniques analítiques d'utilitat

Tècniques cromatogràfiques: Mètodes cromatogràfics estereoselectius per a l'anàlisi de fàrmacs. Activitat òptica. Difracció de raigs X (monocristall i XRD).

* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Química Orgànica

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Farmàcia

Pàgina 5 de 10

METODOLOGIA

ACTIVITATS FORMATIVES

Activitats Formatives* (Memòria GF)	Activitats Formatives (Sigma)	Crèdits* ECTS	Competències
Sessions teòriques	Sessions d'exposició de conceptes	1,8	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
Resolució d'exercicis o problemes	Sessions de resolució d'exercicis, problemes i casos(1)	0,4	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
Activitats integradores del coneixement: casos, seminaris, treballs dirigits i aprenentatge cooperatiu	Seminaris	-	-
Sessions pràctiques: laboratori o simulacions	Treball pràctic / laboratori	-	-
-	Presentacions (2)	-	-
Estudi personal de l'alumne	Activitats d'estudi personal per part dels estudiants	3,7	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
Activitats d'avaluació	Activitats d'avaluació (exàmens, controls de seguiment...)	0,1	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
	TOTAL	6,0	

GF: Grau en Farmàcia

(1) En el GF els "casos" de Sigma estan inclosos en "Activitats integradores del coneixement"

(2) En el GF les "presentacions" de Sigma estan incloses en "Activitats integradores del coneixement"

* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Química Orgànica

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Farmàcia

Pàgina 6 de 10

EXPLICACIÓ DE LA METODOLOGIA DIDÀCTICA*

Les metodologies docents més adients pel GF són: Mètode d'exposició; Pràctiques en el laboratori; Simulacions; Resolució de casos i problemes; Aprenentatge basat en problemes o casos; Aprenentatge cooperatiu; Activitats d'avaluació; Observació i Aprenentatge de la realitat.

- 1. Mètode expositiu:** lliçó magistral participativa, treball a través de les exposicions dels diferents continguts teòric-pràctics i implicant a l'estudiant amb la combinació d'activitats i exercicis a l'aula, incentivant l'alumne a formular preguntes que comportin un raonament personal. Exposició de continguts, explicació i demostració de capacitats, habilitats i coneixements a l'aula o a través de mitjans audiovisuals.
- 2. Resolució d'exercicis o problemes,** desenvolupant solucions adequades mitjançant la realització de rutines, aplicant fórmules o algorismes i interpretant resultats. Es sol utilitzar com a complement de la lliçó magistral.
- 3. Activitats d'avaluació.** exercicis per avaluar el grau d'assumpció de les competències (coneixements, habilitats, valors) per part dels alumnes, de forma continuada o puntual.

* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Química Orgànica

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Farmàcia

Pàgina 7 de 10

AVALUACIÓ

MÈTODES D'AVALUACIÓ

Mètodes d'avaluació * (Memòria GF)	Mètodes d'avaluació (sigma)	Pes*(2)	Competències*
Examen final	Examen final	50%	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
-	Examen/s parcial/s (1)	-	-
Seguiment de l'aprenentatge (inclou controls, casos, exercicis, problemes, participació, avaluació On-Line, autoavaluació)	Activitats de seguiment	50%	B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2
Treballs y presentacions	Treballs i presentacions	-	-
Treball pràctic o experimental	Treball experimental o de camp	-	-
Avaluació TFG	Projectes	-	-
Pràctiques externes (pràctiques tutelades i pràctiques orientades a la menció)	Valoració de l'empresa o institució	-	-
-	Participació (1)	-	-
		100%	

(1) En el GF els "Examen/s parcial/s" i "la Participació" de Sigma estan inclosos a "Seguiment de l'aprenentatge"

(2) Els valors poden oscil·lar ± 5 % respecte al valor definit a la memòria del GF (sumatori final 100%)

RESULTATS DE L'APRENTATGE *

- Demostrar comprensió i capacitat d'aplicació dels coneixements de Determinació Estructural (IR, RMN, UV-Vis, EM) en la pràctica de la Farmàcia.
- Identificar, formular i resoldre problemes típics de Determinació Estructural.

* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Química Orgànica

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Farmàcia

Pàgina 8 de 10

QUALIFICACIÓ

Primera convocatòria:

L'avaluació de l'assignatura considerarà les qualificacions obtingudes mitjançant els mètodes d'avaluació descrits més amunt. Totes aquestes notes seran sobre 10 i tindran un valor màxim de 10.

Per aprovar l'assignatura, s'han de complir els següents dos requisits:

- A) la qualificació global ha de ser igual o superior a 5
B) han de superar-se els mínims exigits que es detallen a continuació:

B.1: Examen Final 55%

- Al final del semestre es realitza un **examen final (EF)** (teoria + problemes), que representa un 55% de la qualificació de l'assignatura. Per aplicar la fórmula, la nota de l'examen final ha de tenir un valor igual o superior a 5.

B.2: Activitats de seguiment (AS) (total 40%)

- Es realitzaran **dos exàmens de seguiment (ES)** de l'assignatura, aquestes proves es realitzaran en hores de classe i representaran un 40% de la qualificació de l'assignatura (Prova I: 20%), (Prova II: 20%). Els **ES** no alliberen matèria de cara a l'**EF**.
- **Resolució de problemes (RP):** aquesta activitat de seguiment representarà un 5% de la qualificació de l'assignatura. L'activitat consistirà en la resolució de problemes a lliurar.

La nota final s'obté de:

$$NF = EF \cdot 0.55 + \text{prova I} \cdot 0.20 + \text{prova II} \cdot 0.20 + RP \cdot 0.05$$

Si no se superen els mínims requerits, no s'aplicarà la fórmula i la nota final correspondrà a la nota més baixa de totes les obtingudes.

* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Química Orgànica

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Farmàcia

Pàgina 9 de 10

Segona convocatòria:

En cas de no superar amb un mínim de 5 en la primera convocatòria, es realitzarà un examen en una segona convocatòria que avaluarà els continguts teòrics-pràctics en un sol examen.

La qualificació final serà:

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

Següents convocatòries:

$$NF = EF$$

AVALUACIÓ DE LES COMPETÈNCIES

Per a l'avaluació de les competències B-4, B-5, G-1, G-3, G-17, EQ-11, T-1, T-2 s'utilitzarà com a indicador la nota de l'assignatura.

BIBLIOGRAFIA

a) Bibliografia bàsica

- 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.

* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Química Orgànica

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Farmàcia

Pàgina 10 de 10

b) Bibliografia complementària: Problemes

- L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, *Organic Structures from Spectra*, Wiley, Chichester, 2008.
- J. R. Pedro, G. Blay, *200 Problemas De Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos*, Ed. Visión libros, Madrid, 2010.

c) Bibliografia complementària: Taules

- E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera, R. Martínez, *Determinación estructural de compuestos orgánicos*, Springer, Barcelona, 2002.
- E. Pretsch, P. Bühlmann, M. Badertscher, *Structure Determination of Organic Compounds*, Springer, Berlin, 2009.

HISTÒRIC DEL DOCUMENT

MODIFICACIONS ANTERIORS

07 agost 2019, Dra. Ana Belén Cuenca González

08 setembre 2020, Dra. Ana Belén Cuenca González

DARRERA REVISIÓ (Indicar data i autor/s)

28 juliol 2021, Dra. Ana Belén Cuenca González