

ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓ I CARACTERITZACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Identificació i Caracterització Estructural

MÒDUL: Mòdul de Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

CARACTERÍSTIQUES GENERALS*

Tipus: Formació bàsica, Obligatòria, Optativa
 Treball de final de grau, Pràctiques externes

Duració: Semestral

Semestre/s: 1

Número de crèdits ECTS: 4

Idioma/es: Castellà, Català, Anglès

DESCRIPCIÓ

BREU DESCRIPCIÓ I JUSTIFICACIÓ (del sentit de l' assignatura en relació amb els estudis. Entre 100 i 200 paraules.)

Aquesta assignatura aporta als estudiants els coneixements i habilitats necessaris per comprendre, escollir i utilitzar els experiments de RMN adequats per establir l'estructura de compostos químics, així com coneixements de les tècniques de difracció de Raigs-X i anàlisis tèrmics apropiats per caracteritzar substàncies sòlides, centrat majorment en les molècules de tipus orgànic, però utilitzable per al treball avançat i la recerca amb altres tipus de compostos, com ara les biomolècules. S'insistirà especialment en la utilitat de les principals tècniques, juntament amb aspectes experimentals tals com la preparació de les mostres. De la mateixa manera, s'inclouran aspectes relacionats amb el cost econòmic dels equips i mètodes i temes de seguretat dels mateixos.

COMPETÈNCIES (de l'assignatura posades en relació amb les competències preassignades en la matèria.)

- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i/o aplicació d'idees, sovint en un context d'investigació (**CB6**).
- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relatius al seu camp d'estudi (**CB7**).
- Que els estudiants siguin capaços d'integrar coneixements i enfrontar-se a la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, inclogui reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis (**CB8**).
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les seves conclusions, i els coneixements i raons últimes que les sustenten, a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats (**CB9**).
- Posseir coneixements avançats de RMN, difracció de Raigs-X i anàlisi tèrmic per aplicar-los en investigació de fàrmacs (**E10**).

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓ I CARACTERITZACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Identificació i Caracterització Estructural

MÒDUL: Mòdul de Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

- Capacitat per interpretar els resultats obtinguts amb RMN, difracció de Raigs-X i anàlisi tèrmic per identificar i determinar l'estructura de compostos químics (**E11**).
- Capacitat per valorar l'impacte de l'ús de la química en el desenvolupament sostenible de la societat (**T3**).

REQUISITS PREVIS* (mòduls, matèries, assignatures o coneixements necessaris per al seguiment de l'assignatura. Poden fer-se constar assignatures que s'hagi d'haver cursat.)

Els alumnes que accedeixin al màster des de titulacions de Grau o Llicenciatura en Química no precisen cap Complement Formatiu addicional. Els que accedeixin des d'altres titulacions, hauran d'haver cursat prèviament matèries que incloguin continguts bàsics de química orgànica i de determinació estructural (incloent IR, RMN i EM).

CONTINGUTS (com a relació dels apartats que constitueixen el temari de la mateixa, fins a un detall de segon nivell.)

1. ANÀLISI ELEMENTAL ORGÀNIC.
 - 1.1. Fonament.
 - 1.2. Aplicacions.
2. RMN AVANÇADA.
 - 2.1. Perspectiva històrica i compendi d'experiments.
 - 2.2. El nucli atòmic.
 - 2.3. Magnetisme nuclear.
 - 2.4. Ressonància.
 - 2.5. Nivells energètics i espectres.
3. ASPECTES EXPERIMENTALS DE LA RMN
 - 3.1. L'espectròmetre.
 - 3.2. Preparació de mostra.
 - 3.3. Adquisició de l'espectre.
4. PROCESSAT D'ESPECTRES DE RMN.
 - 4.1. Espectres 1D-RMN.
 - 4.2. Espectres 2D-RMN.
5. ESPECTRES DE ¹H-RMN.
 - 5.1. L'experiment.
 - 5.2. Paràmetres espectrals.
 - 5.3. Exercicis.
6. ESPECTRES DE ¹³C-RMN.
 - 6.1. Experiments de ¹³C-RMN.
 - 6.2. Paràmetres espectrals.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).



PERSONA CIÈNCIA EMPRESA
Universitat Ramon Llull

ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓ I CARACTERITZACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Identificació i Caracterització Estructural

MÒDUL: Mòdul de Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

- 6.3. L'experiment APT.
- 6.4. L'experiment DEPT.
- 6.5. Exercicis.
7. ESPECTRES 1D-RMN D'ALTRES NUCLIS AMB ESPIN $\frac{1}{2}$.
 - 7.1. Espectres de ^{19}F -RMN.
 - 7.2. Espectres de ^{31}P -RMN.
 - 7.3. Espectres de ^{15}N -RMN.
8. LA SEGONA DIMENSIÓ EN RMN.
 - 8.1. Adquisició i tractament de dades.
 - 8.2. Espectres 2D-RMN.
9. ESPECTRES 2D-RMN AMB CORRELACIÓ ESCALAR HOMONUCLEAR.
 - 9.1. Espectres COSY.
 - 9.2. Espectres TOCSY.
 - 9.3. Espectres INADEQUATE.
10. ESPECTRES 2D-RMN AMB CORRELACIÓ ESCALAR HETERONUCLEAR.
 - 10.1. Espectres HSQC i HMQC.
 - 10.2. Espectres HMBC.
 - 10.3. Espectres HETCOR.
11. ESPECTRES 2D-RMN AMB CORRELACIÓ A TRAVÉS DE L'ESPAI.
 - 11.1. Relaxació i NOE.
 - 11.2. Experiments de NOE estacionari.
 - 11.3. Experiments de NOE transitori.
12. RMN DINÀMICA.
 - 12.1. Bescanvi químic i espectres de RMN.
 - 12.2. Mobilitat molecular: Espectres DOSY.
 - 12.3. Aplicacions.
13. PROBLEMES COMBINATS D'ESPECTROSCÒPIA.
 - 13.1. Problemes d'espectres 2D-RMN.
 - 13.2. Problemes combinats d'espectroscòpia.
14. CRISTAL·LOGRAFIA I DIFRACCIÓ DE RAIGS-X A LA INDÚSTRIA FARMACÈUTICA.
 - 14.1. Cristal·lografia i monocristalls
 - 14.2. Sistemes cristal·lins.
 - 14.3. Difracció de raigs X de monocristalls
 - 14.4. Difracció de raigs X de pols
15. ANÀLISI TÈRMIC
 - 15.1. Introducció.
 - 15.2. Termogravimetria.
 - 15.3. Anàlisi tèrmic diferencial.
 - 15.4. Calorimetria d'escombratge diferencial.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓ I CARACTERITZACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Identificació i Caracterització Estructural

MÒDUL: Mòdul de Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

METODOLOGIA

ACTIVITATS FORMATIVES* (Completar la taula relacionant activitats, càrrega de treball, en crèdits ECTS, i competències.)

| Activitats formatives | Hores /Crèdits ECTS | Competències |
|--|---------------------|-----------------------------|
| Sessions d'exposició de conceptes | 31 / 1,15 | E10, E11, T3, CB6, CB7 |
| Sessions de resolució d'exercicis, problemes i casos | 4 / 0,15 | E10, E11, T3, CB6, CB7 |
| Seminaris | 2 / 0,07 | E10, E11, T3, CB7, CB8, CB9 |
| Activitats obligatòries despatx professor | - | |
| Treball pràctic / laboratori | - | |
| Presentacions | 1 / 0,04 | E10, E11, T3, CB8, CB9 |
| Activitats d'estudi personal per part dels estudiants | 63 / 2,44 | E10, E11, T3, CB6, CB7, CB8 |
| Activitats d'avaluació (exàmens, controls de seguiment...) | 4 / 0,15 | E10, E11, T3, CB9 |
| TOTAL | 108 / 4,0 | |

EXPLICACIÓ DE LA METODOLOGIA DIDÀCTICA (justificant els mètodes didàctics emprats en relació a les competències i als continguts de l'assignatura. Entre 100 i 200 paraules.)

En les **sessions d'exposició de conceptes** es presenten els conceptes inclosos en el programa, utilitzant les *tècniques clàssiques*: *guix-pissarra* i *projeccions*.

Sessions de resolució d'exercicis: Es disposa de col·leccions d'exercicis, que es van entregant als alumnes al llarg del curs. Amb els exercicis, s'intenta ajudar a l'alumne a comprendre, aprofundir i relacionar els conceptes estudiats en les sessions d'exposició de conceptes. En classe, es resolen *exercicis-tipus*, posant èmfasi en aquells exercicis que suposen majors dificultats per als alumnes.

Seminaris: S'imparteixen sobre un tema concret, o una part de l'assignatura, per reforçar-ho o, simplement, atendre els dubtes que hagin sorgit a l'estudiar sense els límits que el factor temps imposa en altres tipus de classe.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓ I CARACTERITZACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Identificació i Caracterització Estructural

MÒDUL: Mòdul de Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Presentacions: Presentació oral al professor i, eventualment, a altres alumnes, d'un treball pràctic o projecte encarregat a l'alumne.

Consultes individuals i en grup en el despatx del professor: Els alumnes poden efectuar les seves consultes al professor de forma individual o en grups de dos a cinc persones

Activitats d'avaluació: Realització per part de l'alumne d'un o més controls escrits durant el període lectiu de l'assignatura i examen final escrit una vegada finalitzada la mateixa.

AVALUACIÓ

MÈTODES D'AVALUACIÓ* (Completar la taula relacionant mètodes d'avaluació, competències i pes en la qualificació de l'assignatura.)

| Mètodes d'avaluació | Pes | Competències |
|-------------------------------------|-----|-------------------------------|
| Examen final | 48% | E10, E11, T3 CB6, CB7, CB8 |
| Examen/s parcial/s | - | |
| Activitats de seguiment | 24% | E10, E11, T3 CB6, CB7 |
| Treballs i presentacions | 24% | E10, E11, T3 CB8, CB9 |
| Treball experimental o de camp | - | |
| Projectes | - | |
| Valoració de l'empresa o institució | - | |
| Participació | 4% | T3 |

RESULTADOS DE L'APRENTATGE (Explicació de les realitzacions de l'alumne que permeten l'avaluació de competències, relacionant-los amb les competències i els mètodes d'avaluació.)

L'estudiant ha de demostrar el seu coneixement de l'aplicació de la RMN en la identificació i en la determinació de l'estructura de compostos químics (CB6, CB7, CB8, E10, E11, T3). Examen final, Activitats de seguiment, Treballs i presentacions, i Participació.

L'estudiant ha de demostrar el seu coneixement de l'aplicació de la difracció de raigs-X en la identificació i en la determinació de l'estructura de compostos químics (CB6, CB7, CB8, E10, E11, T3). Examen final, Activitats de seguiment, Treballs i presentacions, i Participació.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓ I CARACTERITZACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Identificació i Caracterització Estructural

MÒDUL: Mòdul de Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

L'estudiant ha de demostrar el seu coneixement en l'aplicació del anàlisi tèrmic en la determinació de l'estructura de compostos químics (CB6, CB7, CB8, E10, E11, T3). Examen final, Activitats de seguiment, Treballs i presentacions, i Participació.

L'estudiant ha de saber interpretar els resultats obtinguts amb RMN, difracció de raigs-X i anàlisi tèrmic per identificar i determinar l'estructura de compostos químics (CB6, CB7, CB8, E10, E11, T3). Examen final, Activitats de seguiment, Treballs i presentacions, i Participació.

L'estudiant ha de demostrar el coneixement de les principals propietats químiques dels productes químics més importants, així com les repercussions derivades del seu ús incorrecte (CB9, T3). Examen final, Activitats de seguiment, Treballs i presentacions, i Participació.

QUALIFICACIÓ (Explicació del sistema de càlcul de la qualificació de la assignatura.)

La qualificació d'aquesta assignatura s'obté:

| | |
|----------------------------------|-----|
| Examen final: | 48% |
| Activitats de seguiment: | 24% |
| Treballs i presentacions: | 24% |
| Participació: | 4% |

Les **activitats de seguiment** avaluaran per escrit els coneixements que van adquirint els alumnes al llarg del curs.

Els **treballs i presentacions** inclouen tasques proposades durant el curs.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓ I CARACTERITZACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Identificació i Caracterització Estructural

MÒDUL: Mòdul de Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

AVALUACIÓ DE LES COMPETÈNCIES (Definir expressions de càlcul per a cada competència en funció de les activitats d'avaluació corresponents.)

| Competències | Mètodes d'avaluació | Observacions |
|--|---|--|
| Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i/o aplicació d'idees, sovint en un context d'investigació (CB6). | Examen final Activitats de seguiment | Preguntes de Teoria |
| Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relatius al seu camp d'estudi (CB7). | Examen final Activitats de seguiment | Preguntes de Problemes |
| Que els estudiants siguin capaços d'integrar coneixements i enfrontar-se a la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, inclogui reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis (CB8). | Examen final Treballs i presentacions | Preguntes de justificar i interpretar resultats |
| Que els estudiants sàpiguen comunicar les seves conclusions, i els coneixements i raons últimes que les sustenten, a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats (CB9). | Treballs i presentacions | Activitats específiques en seminaris o classe |
| Posseir coneixements avançats de RMN, difracció de Raigs-X i anàlisi tèrmic per aplicar-los en investigació de fàrmacs (E10). | Examen final Activitats de seguiment Treballs i presentacions | Preguntes sobre anàlisi estructural aplicades a sectors concrets. Activitats específiques en seminaris o classe |
| Capacitat per interpretar els resultats obtinguts amb RMN, difracció de Raigs-X i anàlisi tèrmic per identificar i determinar l'estructura de compostos químics (E11). | Examen final Activitats de seguiment Treballs i presentacions | Preguntes de Teoria. Activitats específiques en seminaris o classe |
| Capacitat per valorar l'impacte de l'ús de la química en el desenvolupament sostenible de la societat (T3). | Examen final Activitats de seguiment Treballs i presentacions Participació | Preguntes de Teoria. Activitats específiques en seminaris o classe. |

La qualificació de cada competència es realitzarà aplicant els percentatges indicats en l'apartat "Qualificació" per a cadascun dels mètodes de qualificació especificats en la taula, normalitzant seguidament a 100%.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).



PERSONA CIÈNCIA EMPRESA
Universitat Ramon Llull

ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓ I CARACTERITZACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Identificació i Caracterització Estructural

MÒDUL: Mòdul de Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

BIBLIOGRAFIA (recomenada i accessible a l'alumne.)

- R.M. Silverstein, F.X. Webster y D.J. Kiemle, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 7th edition, John Wiley & Sons, USA, 2005.
- M. Hesse, H. Meier i B. Zeeh, *Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica*, 2^a edición ampliada y actualizada, Ed. Síntesis, Madrid, 2005.
- H. Friebolin, *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, 4th Completely Revised and Updated Edition, Wiley-VCH, Weinheim, 2005.
- J.K.M. Sanders i B.K. Hunter, *Modern NMR Spectroscopy. A Guide for Chemists*, Oxford University Press, Oxford, 1994.
- T.D.W. Claridge, *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*, Pergamon, Oxford, 1999.
- J. Keeler, *Understanding NMR Spectroscopy*, John Wiley & Sons, Chichester, 2005.
- S.A. Richards i J.C. Hollerton, *Essential Practical NMR for Organic Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester, 2011.
- E. Breitmaier, *Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester, 1995.
- E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl i W. Simon, *Tablas para la Determinación Estructural por Métodos Espectroscópicos*, Springer-Verlag Ibérica, Barcelona, 1998.
- W. Clegg, *Crystal Structure Determination* (Oxford Chemistry Primers, 60), Oxford University Press, Oxford, 1998.
- C. Pico, M.L. López i M.L. Veiga, *Cristaloquímica de Materiales*, Ed. Síntesis, Madrid, 2007.
- R.A. Meyers (ed.), *Encyclopedia of Analytical Chemistry. Applications, Theory and Instrumentation*, John Wiley & Sons, Chichester, 2000.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).



PERSONA CIÈNCIA EMPRESA
Universitat Ramon Llull

ASIGNATURA: IDENTIFICACIÓ I CARACTERITZACIÓ ESTRUCTURAL

MATÈRIA: Identificació i Caracterització
Estructural

MÒDUL: Mòdul de Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

HISTÒRIC DEL DOCUMENT

MODIFICACIONS ANTERIORS (Indicar data i autor/s, les més recents primer)

04 de Setembre de 2014, Dr. Xavier Batllori

02 de Setembre de 2016, Dr. Xavier Batllori

ÚLTIMA REVISIÓ (Indicar data i autor/s.)

19 de Juliol de 2018, Dr. Xavier Batllori

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).