



1. DATOS GENERALES

Asignatura: DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL**Tipología:** OBLIGATORIA**Grado:** 341 - GRADO EN BIOQUÍMICA**Centro:** 501 - FACULTAD CC. AMBIENTALES Y BIOQUÍMICA TO**Curso:** 3**Lengua principal de impartición:** Español**Uso docente de otras lenguas:****Página web:****Código:** 13318**Créditos ECTS:** 6**Curso académico:** 2020-21**Grupo(s):** 40**Duración:** Primer cuatrimestre**Segunda lengua:** Inglés**English Friendly:** S**Bilingüe:** N

Profesor: RUBEN CABALLERO BRICEÑO - Grupo(s): 40				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Edificio 21/INAMOL despacho 1.03	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.	926051833	Ruben.Caballero@uclm.es	
Profesor: MARIA PILAR DE CRUZ MANRIQUE - Grupo(s): 40				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Sabatini, despacho 0.5	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.		pilar.cruz@uclm.es	Martes, miércoles y jueves de 16.00 a 18.00 h
Profesor: ROCÍO DOMÍNGUEZ MARTÍN - Grupo(s): 40				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Edificio 21/INAMOL Despacho 1.03	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.	926051820	Rocio.Dominguez@uclm.es	
Profesor: FERNANDO LANGA DE LA PUENTE - Grupo(s): 40				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Sabatini/0.11	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.		fernando.langa@uclm.es	Martes, miércoles y jueves de 16.00 a 18.00 h

2. REQUISITOS PREVIOS

Es recomendable tener aprobadas las asignaturas de Química Orgánica y Metodología e Instrumentación bioquímicas

3. JUSTIFICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS, RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS Y CON LA PROFESIÓN

Introducir al estudiante en el estudio de la correlación entre la estructura de los compuestos orgánicos y los datos espectroscópicos, así como en las diferentes aplicaciones de las técnicas espectroscópicas en la caracterización de compuestos con interés en el campo de la Bioquímica.

Se pretende además que el alumno:

- Adquiera los conocimientos adecuados y necesarios que le permitan identificar sustancias orgánicas a partir de una serie de espectros o datos espectroscópicos dados.
- Adquiera el suficiente conocimiento para resolver un determinado problema de determinación estructural obteniendo la información que proporciona o aporta los espectros obtenidos por las diferentes técnicas espectroscópicas estudiadas.
- Conozca las aplicaciones y limitaciones de las diferentes técnicas espectroscópicas.

4. COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN QUE LA ASIGNATURA CONTRIBUYE A ALCANZAR

Competencias propias de la asignatura

Código	Descripción
E01	Expresarse correctamente con términos biológicos, físicos, químicos matemáticos e informáticos básicos.
E14	Saber interpretar la información que aportan las técnicas de caracterización estructural más habituales en Bioquímica y Biología Molecular.
T01	Dominio de una segunda lengua extranjera, preferiblemente el inglés, en el nivel B1 del Marco Común Europeo de Referencia para las Lenguas.
T03	Una correcta comunicación oral y escrita.
T05	Capacidad de organización y planificación.
T06	Capacidad de diseño, análisis y síntesis.
T10	Capacidad de autoaprendizaje y de obtener y gestionar información bibliográfica, incluyendo recursos en Internet.

5. OBJETIVOS O RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPERADOS

Resultados de aprendizaje propios de la asignatura**Descripción**

Saber deducir la estructura de las macromoléculas de acuerdo a la información aportada por las principales técnicas de determinación estructural estudiadas.

Resultados adicionales

- Correlacionar el espectro UV-Vis con la estructura y reconocer los diferentes cromóforos. Aprender y conocer el manejo de las tablas.
- Correlacionar el espectro IR-Raman con los diferentes grupos funcionales. Conocer las modificaciones en el espectro que introducen las variaciones estructurales de los diferentes grupos funcionales.

- Correlacionar los espectros de RMN de núcleos de interés orgánico con la estructura. Interpretar espectros. Aprender el manejo de las tablas.
- Correlacionar espectros de masas y sistemas de ionización. Reconocer el ion molecular y los satélites isotópicos. Conocer las principales fragmentaciones.
- Interpretar los datos experimentales obtenidos mediante las técnicas de dicroísmo circular y Rayos X.
- Conocer y usar las bases de datos espectroscópicas, su manejo, aplicaciones y limitaciones. Usar programas para el cálculo teórico de espectros.
- Consultar y utilizar la bibliografía propuesta para el desarrollo del curso.

6. TEMARIO

Tema 1: Espectroscopia Ultravioleta-visible (UV-vis). Fundamentos de la espectroscopia UV-Vis. Regiones del espectro UV-Vis. Técnica experimental. Transiciones electrónicas: Cromóforo. Intensidad de la absorción: Reglas de Selección, Ley de Beer-Lambert. Desplazamiento de bandas de absorción. Principales cromóforos. Aplicaciones de la técnica UV-Vis.

Tema 2: Espectroscopia Infrarroja (IR). Introducción. Absorción y tipos de vibraciones moleculares. Reglas de selección en IR. Instrumentación. Regiones del espectro Infrarrojo. Frecuencias de grupo: análisis cualitativo de grupos funcionales orgánicos. Espectroscopia Raman

Tema 3: Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Fundamentos de la espectroscopia de RMN. El fenómeno físico de RMN. Spin Nuclear e influencia de un campo magnético. Condición de Resonancia. Núcleos más estudiados: ^1H , ^{13}C , otros núcleos. Espectroscopia de pulsos. Fenómenos de relajación. Instrumentación. Aspectos experimentales. Espectro e Integración. El desplazamiento químico. Factores que afectan al desplazamiento químico. Multiplicidad de las señales. Constante de acoplamiento. Sistemas de spines. Técnicas de desacoplamiento. Desplazamiento de carbono-13. Correlaciones empíricas. Cálculo de los desplazamientos químicos de protón y carbono-13 de los principales grupos funcionales orgánicos. Técnicas de desacoplamiento. Manejo de tablas y programas de simulación.

Tema 4: Espectrometría de Masas (EM). Fundamentos de la Espectrometría de Masas: Introducción. Instrumentación. Introducción a técnicas de ionización química. CI, FAB, APCI, ESI. Aplicaciones. Ionización. Iones estables y metaestables. Reacciones de fragmentación. Transposiciones. Isomerizaciones. Aplicaciones de la Espectrometría de Masas: Determinación de la masa molecular. Iones moleculares. Determinación de la fórmula molecular. Picos isotópicos. Tipos de Fragmentaciones.

Tema 5: Determinación estructural mediante la aplicación conjunta de técnicas UV-vis, IR, RMN y EM. Resolución de ejercicios. Bases de datos

Tema 6: Dicroísmo Circular (DC). Introducción. Instrumentación. Actividad óptica y su relación con el DC. Interpretación de los espectros de DC. Aplicaciones y usos de CD. Comparación de DC con UV-VIS.

Tema 7: Difracción de Rayos X. Introducción. Principios de la difracción de Rayos-X. Instrumentación. Adquisición de datos. Información estructural de la difracción de Rayos-X. Aplicaciones.

Tema 8: SESIONES DE PRACTICAS. Preparación de muestras. Realización de espectros de diferentes técnicas. Tratamiento de espectros mediante software específico.

COMENTARIOS ADICIONALES SOBRE EL TEMARIO

La realización de espectros se llevará a cabo en los equipos de investigación del área por lo que el experimento será realizado por los profesores responsable de las prácticas.

7. ACTIVIDADES O BLOQUES DE ACTIVIDAD Y METODOLOGÍA

Actividad formativa	Metodología	Competencias relacionadas (para títulos anteriores a RD 822/2021)	ECTS	Horas	Ev	Ob	Descripción
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL]	Método expositivo/Lección magistral	E01 E14	1.02	25.5	N	-	También se trabajará la competencia G5 ya que se desarrollaran estrategias y habilidades de aprendizaje necesarias para la determinación estructural de moléculas con interés bioquímico.
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL]	Resolución de ejercicios y problemas	E01 E14 T10	0.86	21.5	N	-	También se trabajará la competencia G5 ya que se desarrollaran estrategias y habilidades de aprendizaje necesarias para la determinación estructural de moléculas con interés bioquímico.
Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA]	Resolución de ejercicios y problemas	E01 E14 T10	0.6	15	S	N	Se trabajarán las competencias G5 y G6 ya que se introducirá al alumno en el manejo de bases de datos de elucidación estructural de moléculas orgánicas con interés bioquímico
Prueba final [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	E01 E14	0.12	3	S	S	Las pruebas finales son obligatorias para aprobar la asignatura pero no es obligatorio presentarse.
Prácticas en aulas de ordenadores [PRESENCIAL]	Estudio de casos	E01 E14 T10	0.16	4	S	S	Se trabajarán las competencias G5 y G6 ya que se introducirá al alumno en el manejo de bases de datos de elucidación estructural de moléculas orgánicas con interés bioquímico
Enseñanza presencial (Prácticas) [PRESENCIAL]	Prácticas	E01 E14 T10	0.24	6	S	S	Se trabajarán las competencias G5 y G6 ya que se introducirá al alumno en el manejo de bases de datos de elucidación estructural de moléculas orgánicas con interés bioquímico
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA]	Trabajo autónomo	E01 E14 T10	3	75	N	-	
Total:			6	150			
Créditos totales de trabajo presencial: 2.4			Horas totales de trabajo presencial: 60				
Créditos totales de trabajo autónomo: 3.6			Horas totales de trabajo autónomo: 90				

Ev: Actividad formativa evaluable

Ob: Actividad formativa de superación obligatoria (Será imprescindible su superación tanto en evaluación continua como no continua)

8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y VALORACIONES			
Sistema de evaluación	Evaluación continua	Evaluación no continua*	Descripción
Resolución de problemas o casos	5.00%	0.00%	Se entregaran una serie de problemas para que los alumnos los entreguen al profesor para ser evaluados bien correspondientes a cada técnica o problemas que permitan la aplicación de las diferentes técnicas estudiadas, según criterio del profesor. No obligatoria, evaluable y recuperable
Realización de prácticas en laboratorio	15.00%	15.00%	Este 15% sera la nota obtenida en el credito practico de la asignatura que corresponde a las practicas de ordenador y al resto de las actividades programadas como practicas de la asignatura. Obligatoria y evaluable al no ser posible recuperar las sesiones de practicas.
Prueba final	80.00%	85.00%	Será necesario una calificación mínima de 4.5 para poder sumar la calificación obtenida en el resto de las actividades. Los exámenes constarán de varias preguntas tanto de caracter teorico como práctico, que abarquen la materia explicada. Para hacer media entre las dos partes es necesario tener una calificación minima de 4.0 en cada una de ellas Obligatoria, evaluable y recuperable
Total:	100.00%	100.00%	

* En **Evaluación no continua** se deben definir los porcentajes de evaluación según lo dispuesto en el art. 4 del Reglamento de Evaluación del Estudiante de la UCLM, que establece que debe facilitarse a los estudiantes que no puedan asistir regularmente a las actividades formativas presenciales la superación de la asignatura, teniendo derecho (art. 12.2) a ser calificado globalmente, en 2 convocatorias anuales por asignatura, una ordinaria y otra extraordinaria (evaluándose el 100% de las competencias).

Criterios de evaluación de la convocatoria ordinaria:

Evaluación continua:

Las nota obtenida en la realización de las practicas se guardará durante dos cursos.

Las nota obtenida por la resolución de problemas serán tenidas en cuenta tanto en la convocatoria ordinaria como en la extraordinaria de un mismo curso.

Será necesario una calificación mínima de 4.5 en la prueba final para poder sumar la calificación obtenida en el resto de las actividades.

Los exámenes constarán de varias preguntas tanto de caracter teorico como práctico, que abarquen la materia explicada. Para hacer media entre las dos partes es necesario tener una calificación minima de 4.0 en cada una de ellas.

Evaluación no continua:

Los criterios de evaluacion se mantienen en este caso ya que las actividades formativas evaluables que se hacen, exceptuando la prueba final no requieren una fecha determinada por lo que alumno se podra organizar para poder desarrollarlas.

Particularidades de la convocatoria extraordinaria:

Las nota obtenida en la realización de las practicas se guardará durante dos cursos.

Las nota obtenida por la resolución de problemas serán tenidas en cuenta tanto en la convocatoria ordinaria como en la extraordinaria de un mismo curso.

En esta convocatoria se dara a los alumnos la posibilidad de recuperar las practicas si las hubiera suspendido siempre que haya asistido a todas las sesiones y unicamente suspendiera el informe.

Será necesario una calificación mínima de 4.5 en la prueba final para poder sumar la calificación obtenida en el resto de las actividades.

Los exámenes constarán de varias preguntas tanto de caracter teorico como práctico, que abarquen la materia explicada.

Para hacer media entre las dos partes es necesario tener una calificación minima de 4.0 en cada una de ellas. En esta convocatoria no se tendrá en cuenta la nota obtenido por el alumno en la convocatoria ordinaria en alguna de las partes (teoría y problemas) debiendose examinar de las dos partes en la convocatoria extraordinaria.

Particularidades de la convocatoria especial de finalización:

Para superar esta convocatoria sólo habrá una prueba final que supondrá el 100 % de la nota, simple y cuando se hayan realizado y superado las prácticas.

9. SECUENCIA DE TRABAJO, CALENDARIO, HITOS IMPORTANTES E INVERSIÓN TEMPORAL	
No asignables a temas	
Horas	Suma horas

10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS					
Autor/es	Título/Enlace Web	Editorial	Población	ISBN	Año Descripción
E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera, R. Martínez	Deteminación estructural de compuestos orgánicos	Springer		84-07-00526-6	2001
H. Günzler, H.-U. Gremlich,	IR Spectroscopy	Wiley		3-527-28896-1	2002
M. Hesse, H. Meier, H., B. Zeeh	Métodos espectroscópicos en Química Orgánica, 2 edición	Síntesis		84-7738-522-X	2005
Miller, Andrew	Essentials of chemical biology : structure and dynamics of b	John Wiley		978-0-470-84530-1	2008
N. E. Jacobsen	NMR Spectroscopy Explained	Wiley		978-0-471-73096-5	2007
Pedro, José Ramón	200 problemas de determinación estructural de compuestos org	Visión Libros		978-84-9983-993-6	2010
R. G. Linington, P. G. Williams, J. B. MacMillan	Problems in Organic Structure Determination: A Practical Approach to NMR Spectroscopy	CRC Press		9781498719629	2015
R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle	Spectrometric Identification of Organic Compounds	Wiley		0-471-39362-2	2005
S. Sternhell, J. R. Kalman	Organic Structures from Spectra,	Wiley		978-0-470-31926-0	2008

T. E. Lee,	L. D. Field, 4ª edición A Beginner's guide to Mass Spectral interpretation	Wiley	0-471-97629-6	1998
Y-C. Ning	Structural identification of Organic Compounds with Spectroscopic Techniques	wiley	3-527-31240-4	2005
H. Friebolin	Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy	Wiley-VCH	9783527327829	2010
E Pretsch, P Bühlmann, M Badertscher	Structure Determination of Organic Compounds: Tables of Spectral Data (4th Edition; revised and enlarged)	Springer	9783540938095	2009