



## 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:** <https://www.uclm.es/grupos/nanomateriales>**Código:** 13318**Créditos ECTS:** 6**Curso académico:** 2022-23**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 | Martes, miércoles y jueves de Lunes a Viernes de 16.00 h a 18.00 h previa cita por e-mail |
| 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 Lunes a Viernes de 16.00 h a 18.00 h previa cita por e-mail |
| Profesor: MARIA JOSE GOMEZ-ESCALONILLA ROMOJARO - Grupo(s): 40 |                               |           |                         |                                                                                           |
| Edificio/Despacho                                              | Departamento                  | Teléfono  | Correo electrónico      | Horario de tutoría                                                                        |
| Sabatini, despacho 0.5                                         | QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ. |           | mariajose.gomez@uclm.es | Martes, miércoles y jueves de Lunes a Viernes de 16.00 h a 18.00 h previa cita por e-mail |
| 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 Lunes a Viernes de 16.00 h a 18.00 h previa cita por e-mail |

## 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:  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , 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. Métodos bidimensionales**

**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. Imaging y MS-MS**

**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                                                           | 1.08 | 27    | S  | N  | También se trabajará la competencia G5 ya que se desarrollarán 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                                                       | 0.72 | 18    | S  | N  | También se trabajará la competencia G5 ya que se desarrollarán estrategias y habilidades de aprendizaje necesarias para la determinación estructural de moléculas con interés bioquímico                                                                                                                                                                                                                                           |
| Pruebas de progreso [PRESENCIAL]               | Resolución de ejercicios y problemas | E01 E14 T10                                                       | 0.08 | 2     | 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                                                       | 0.32 | 8     | 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. La asistencia a las prácticas se considera como una actividad obligatoria y no recuperable para poder superar la asignatura. La evaluación de las mismas sí será recuperable, ya sea en la convocatoria extraordinaria o especial de finalización. |
|                                                |                                      |                                                                   |      |       |    |    | Se trabajarán las competencias G5 y G6 ya que se introducirá al alumno en el manejo de bases de datos de                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |

|                                                  |                  |             |                                         |     |   |   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|--------------------------------------------------|------------------|-------------|-----------------------------------------|-----|---|---|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Enseñanza presencial (Prácticas)<br>[PRESENCIAL] | Prácticas        | E01 E14 T10 | 0.08                                    | 2   | S | S | elucidación estructural de moléculas orgánicas con interés bioquímico. La asistencia a las prácticas se considera como una actividad obligatoria y no recuperable para poder superar la asignatura. La evaluación de las mismas sí será recuperable, ya sea en la convocatoria extraordinaria o especial de finalización |
| Estudio o preparación de pruebas<br>[AUTÓNOMA]   | Trabajo autónomo | E01 E14 T10 | 3.6                                     | 90  | 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           | 10.00%              | 0.00%                   | En el aula se resolverá un problema tipo examen que permitan la aplicación de las diferentes técnicas estudiadas en clase. Será necesario obtener una nota superior o igual a 4.0 para que esta nota pueda ser ponderada en la calificación final de la asignatura.<br>No obligatoria, evaluable y recuperable realizando alguna pregunta extra en el examen de las convocatorias oficiales. Esta nota no se tiene en consideración en cursos posteriores, solo se tiene en cuenta en la convocatoria ordinaria y/o extraordinaria de este curso                                                    |
| Realización de prácticas en laboratorio   | 10.00%              | 15.00%                  | Este 10% será la nota obtenida en el crédito práctico de la asignatura que corresponde a las prácticas de ordenador y al resto de las actividades programadas como prácticas de la asignatura. Será necesaria una nota mínima de un 4.0 para poder considerar las prácticas aprobadas y poder ser ponderada en la nota final de la asignatura.<br>La asistencia a las prácticas se considera como una actividad obligatoria y no recuperable para poder superar la asignatura. La evaluación de las mismas sí será recuperable, ya sea en la convocatoria extraordinaria o especial de finalización |
| Prueba final                              | 80.00%              | 85.00%                  | Será necesario una calificación mínima de 4.0 para poder sumar la calificación obtenida en el resto de las actividades. Los exámenes constarán de varias preguntas tanto de carácter teórico como práctico, que abarquen la materia explicada. Para hacer media entre las dos partes (teoría y problemas) es necesario tener una calificación mínima de 4.0 en cada una de ellas.<br>Obligatoria, evaluable y recuperable.<br>En todo caso, la asignatura solo se considerará superada si el conjunto de todas las actividades evaluables resulta en una nota de un 5 o superior (sobre 10).        |
| <b>Total:</b>                             | <b>100.00%</b>      | <b>100.00%</b>          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |

\* 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 notas obtenidas en la realización de las prácticas se guardarán durante dos cursos.

Las notas obtenidas por la resolución de problemas serán tenidas en cuenta tanto en la convocatoria ordinaria como en la extraordinaria de un mismo curso. Y recuperable contestando a varias preguntas que se incluyan en los exámenes de las convocatorias oficiales. El alumno únicamente tendrá dos oportunidades de aprobar la actividad.

Será necesario una calificación mínima de 4.0 en la prueba final para poder sumar la calificación obtenida en el resto de las actividades. En todo caso, la asignatura solo se considerará superada si el conjunto de todas las actividades evaluables resulta en una nota de un 5 o superior (sobre 10).

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

La modalidad asignada por defecto al estudiante será la evaluación continua. Cualquier estudiante podrá solicitar el cambio a la modalidad de evaluación no continua (antes de la finalización del período de clases) mediante un mail al profesor, siempre que no haya realizado el 50% de las actividades evaluables.

##### Evaluación no continua:

Las notas obtenidas en la realización de las prácticas se guardarán durante dos cursos.

Será necesario una calificación mínima de 4.0 en la prueba final para poder sumar la calificación obtenida en las prácticas realizadas. En todo caso, la asignatura solo se considerará superada si el conjunto de todas las actividades evaluables resulta en una nota de un 5 o superior (sobre 10).

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

**Particularidades de la convocatoria extraordinaria:**

Las notas obtenidas en la realización de las prácticas se guardarán durante dos cursos.

Las notas obtenidas por la resolución de problemas serán tenidas en cuenta tanto en la convocatoria ordinaria como en la extraordinaria de un mismo curso. El alumno únicamente tendrá dos oportunidades de aprobar la actividad.

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

Será necesario una calificación mínima de 4.0 en la prueba final para poder sumar la calificación obtenida en el resto de las actividades.

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

Para hacer media entre las dos partes es necesario tener una calificación mínima de 4.0 en cada una de ellas. En esta convocatoria no se tendrá en cuenta la nota obtenida por el alumno en la convocatoria ordinaria en alguna de las partes (teoría y problemas) debiéndose 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, siempre y cuando se hayan realizado las prácticas y obtenido una nota mínima de 4.0 en esta actividad obligatoria.

**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 |
|---------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|-----------|-------------------|------|-------------|
| Antonio Randazzo                                              | Guía Práctica para la interpretación de espectros de RMN. Ejercicios para la determinación estructural de pequeñas moléculas orgánicas | Loghia        |           | 9788895122441     | 2018 |             |
| E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera, R. Martínez | Determinación 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                                                                                | Sintesis      |           | 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, L. D. Field, 4ª edición                                                                               | Wiley         |           | 978-0-470-31926-0 | 2008 |             |
| T. E. Lee,                                                    | 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 |             |