GUÍA DOCENTE

DENOMINACIÓN DE LA ASIGNATURA

Denominación: **DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL ORGÁNICA Y FARMACOQUÍMICA**
Código: 100472
Plan de estudios: **GRADO DE QUÍMICA** Curso: 3
Denominación del módulo al que pertenece: APLICADO
Materia: QUÍMICA (OPTATIVA 1)
Carácter: OPTATIVA Duración: SEGUNDO CUATRIMESTRE
Créditos ECTS: 6.0 Horas de trabajo presencial: 60
Porcentaje de presencialidad: 40.0% Horas de trabajo no presencial: 90
Plataforma virtual: http://moodle.uco.es/m2223/

DATOS DEL PROFESORADO

Nombre: MARINAS ARAMENDIA, ALBERTO (Coordinador)
Departamento: QUÍMICA ORGÁNICA
Área: QUÍMICA ORGÁNICA
Ubicación del despacho: Campus Universitario de Rabanales. Edificio Marie Curie (C3)
E-Mail: qo2maara@uco.es Teléfono: 957212065

Nombre: PINEDA PINEDA, ANTONIO
Departamento: QUÍMICA ORGÁNICA
Área: QUÍMICA ORGÁNICA
Ubicación del despacho: Campus Universitario de Rabanales. Edificio Marie Curie (C3)
E-Mail: q82pipia@uco.es Teléfono: 957218622

REQUISITOS Y RECOMENDACIONES

Requisitos previos establecidos en el plan de estudios

El estudiante podrá matricularse de asignaturas optativas una vez que haya superado los 60 créditos de formación básica, y al menos otros 30 créditos obligatorios.

Recomendaciones

Ninguna especificada

GUÍA DOCENTE

COMPETENCIAS

CB4	Conocimiento de una lengua extranjera.
CB6	Resolución de problemas.
CB10	Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
CE4	Las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo la espectroscopia.
CE15	Estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos.
CE16	Estudio de las técnicas instrumentales y sus aplicaciones.
CE22	Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
CE23	Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
CE24	Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
CE26	Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.
CE28	Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
CE30	Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
CE31	Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

OBJETIVOS

Esta asignatura de carácter optativo tiene un doble objetivo:

Por un lado, introducir al estudiante en la Química Farmaceútica haciendo especial hincapié en la farmacocinética, farmacodinámica y metabolismo (toxicología) de fármacos. Se presentarán, asímismo, las diferentes metodologías para el estudio de las relaciones estructura-actividad en fármacos. Finalmente, se abordará el diseño racional de fármacos y se estudiarán algunos casos en relación a los procesos de síntesis de fármacos.

Por otro lado, completar la formación adquirida por los estudiantes en la asignatura de carácter obligatorio Ampliación de Química Orgánica en la que se hace una introducción de las cuatro técnicas espectroscópicas básicas (UV-Visible, Infrarroja, Resonancia Magnética Nuclear y Masas) utilizadas por el químico para la caracterización de los compuestos orgánicos. Con esta asignatura optativa el estudiante alcanzará un mayor conocimiento de IR, RMN y Espectrometría de Masas y abordará la resolución de problemas de mayor grado de dificultad.

CONTENIDOS

1. Contenidos teóricos

Determinación Estructural Orgánica

Tema 1.- Espectroscopía Infrarroja (IR). Técnicas de Reflectancia Difusa (DRIFT) y de Reflectancia Total Atenuada (ATR). Aplicaciones de la espectroscopía IR en Química Orgánica.

Tema 2.- Técnicas avanzadas de Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear aplicadas al estudio de sustancias orgánicas. El experimento DEPT. Introducción a los métodos espectroscópicos en dos dimensiones. La técnica COSY. La técnica HETCOR. RMN del estado sólido. Introducción a las técnicas de RMN para el estudio de moléculas adsorbidas.

Tema 3.- Espectrometría de Masas aplicada al estudio de sustancias orgánicas.

GUÍA DOCENTE

Farmacoquímica

Tema 4.- Introducción a la farmacoquímica. Definiciones: droga, fármaco y medicamento. Orígenes de la farmacología. Nomenclatura y Clasificación de fármacos. Panorama actual de la industria farmacéutica. Aspectos comerciales/industriales de la industria farmacéutica

Tema 5.- Propiedades fisicoquímicas de los fármacos. Propiedades fisicoquímicas de fármacos. Fármacos con propiedades ácidas. Fármacos con propiedades básicas. Coeficiente de partición octanol/agua.

Tema 6.- Farmacocinética y Farmacodinámica. Procesos que ocurren durante la acción de un fármaco. Fase farmacéutica. Fase Farmacocinética: absorción y distribución de fármacos. Biodisponibilidad. Fase farmacodinámica. Receptores farmacológicos. Agonismo y antagonismo farmacológico. Clasificación de fármacos: fármacos específicos e inespecíficos estructuralmente.

Tema 7.- Características estructurales y acción farmacológica. Conceptos básicos de estereoisomería. Isomería óptica y acción farmacológica. Isomería geométrica y acción farmacológica. Análisis conformacional y actividad farmacológica. Isostería química. Bioisostería. Bioisosterismo clásico y no clásico.

Tema 8.- Metabolismo de fármacos. Definiciones. Principios básicos de toxicología. Evolución histórica de la toxicología. Sinergia, potenciación y antagonismo. Relación dosis-respuesta. Sustancias xenobióticas y endógenas. Química toxicológica. Metabolismo de fármacos. Profármacos. Reacciones metabólicas en Fase I y en Fase II. Rutas metabólicas para fármacos comunes.

Tema 9.- Diseño racional de fármacos. Métodos de diseño de fármacos. Farmacomodulación. Métodos QSAR de diseño de fármacos. Ecuación de Hammett. Ecuación de Taft. Método de de Hansch. Método de Free-Wilson. Metodologías QSAR-3D.

Tema 10.- Química Verde en la Industria Farmacéutica. Orígenes de la Industria Farmacéutica. Idoneidad de un proceso de síntesis: Economía Atómica. Industria Farmacéutica y residuos contaminantes: Factor E. Síntesis orientada a las funciones (FOS). Química verde y desarrollo sostenible en la industria farmacéutica. La catálisis en la Industria Farmacéutica. Los disolventes en la Industria farmacéutica. Estudio de casos en la Industria Farmacéutica.

2. Contenidos prácticos

Seminarios de Problemas.

Se abordarán problemas de determinación estructural de compuestos y materiales orgánicos de mayor complejidad a los realizados en la asignatura de Ampliación de Química Orgánica, resolviendo los correspondientes espectros de IR, RMN de protón y carbono-13 (mono y bidimensional) y masas.

Prácticas de Laboratorio.

Práctica 1. Reacción de Biginelli. Síntesis de una dihidropirimidinona, fármaco antihipertensivo.

Práctica 2. Síntesis de fenacetina, un analgésico.

OBJETIVOS DE DESARROLLO SOSTENIBLE RELACIONADOS CON LOS CONTENIDOS

Salud y bienestar

Agua limpia y saneamiento

Acción por el clima

GUÍA DOCENTE

METODOLOGÍA

Adaptaciones metodológicas para alumnado a tiempo parcial y estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales

Las adaptaciones para los estudiantes a tiempo parcial y necesidades educativas especiales se realizarán de acuerdo con la normativa de la Universidad de Córdoba y atendiendo a la casuística de los estudiantes afectados, se establecerán en reuniones entre el profesorado y los alumnos interesados a fin de personalizar los posibles casos que se presenten.

Actividades presenciales

Actividad	Grupo completo	Grupo mediano	Total
Actividades de evaluación	3	-	3
Laboratorio	-	6	6
Lección magistral	30	-	30
Seminario	-	21	21
Total horas:	***33***	***27***	***60***

Actividades no presenciales

Actividad	Total
Búsqueda de información	10
Consultas bibliográficas	10
Estudio	35
Problemas	35
Total horas:	***90***

MATERIAL DE TRABAJO PARA EL ALUMNO

Cuaderno de Prácticas - *http://moodle.uco.es/m2223/*
Dossier de documentación - *http://moodle.uco.es/m2223/*
Ejercicios y problemas - *http://moodle.uco.es/m2223/*
Manual de la asignatura - *http://moodle.uco.es/m2223/*

Aclaraciones

El estudiante dispondrá de todo aquel material necesario para seguir las explicaciones teóricas así como de los ejercicio, problemas y guiones de prácticas en la plataforma Moodle.

GUÍA DOCENTE

EVALUACIÓN

Competencias	Análisis de documentos	Exposición oral	Exámenes	Prácticas de laboratorio	Resolución de problemas
CB10	X	X	X	X	X
CB4	X	X	X	X	X
CB6			X	X	X
CE15	X	X			
CE16		X	X		X
CE22	X		X		X
CE23	X		X	X	X
CE24	X		X	X	X
CE26	X		X	X	X
CE28				X	
CE30			X	X	X
CE31	X		X	X	X
CE4	X	X	X	X	X
Total (100%)	***15%***	***15%***	***30%***	***10%***	***30%***
Nota mínima (*)	***4***	***4***	***4***	***4***	***4***

(*)Nota mínima (sobre 10) necesaria para que el método de evaluación sea considerado en la calificación final de la asignatura. En todo caso, la calificación final para aprobar la asignatura debe ser igual o superior a 5,0.

GUÍA DOCENTE

Método de valoración de la asistencia:

La asistencia y participación activa constituirá un 10% de la calificación final.

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación:

La **asistencia** y participación activa en todas las actividades presenciales (clases magistrales, seminarios y prácticas) serán evaluadas (10% de la calificación final). Este porcentaje es contabilizado en la tabla anterior, un 5% de la calificación total en la parte de exámenes y un 5% de la calificación total en el epígrafe de resolución de problemas.

Las **prácticas de laboratorio** son obligatorias, de modo que para aprobar la asignatura es imprescindible realizarlas y presentar la memoria correspondiente. La calificación obtenida supone el 10% de la calificación final. Una vez superadas, el estudiante no tiene obligación de repetirlas en cursos posteriores.

La parte de **Farmacoquímica** aporta un 30% a la calificación final, desglosado en i) Análisis de documentos (15%) y ii) Exposición oral (15%).

La parte de **Determinación Estructural** aporta un 50% a la calificación final, consistente en exámenes (25% de la calificación final) y resolución de problemas/espectros (25% de la calificación final).

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales:

Las adaptaciones de la evaluación para los estudiantes a tiempo parcial y necesidades educativas especiales se realizarán de acuerdo con la normativa de la Universidad de Córdoba y atendiendo a la casuística de los estudiantes afectados, se establecerán en reuniones entre el profesorado y los alumnos interesados a fin de personalizar los posibles casos que se presenten.

Aclaraciones sobre la evaluación de la primera convocatoria extraordinaria y convocatoria extraordinaria de finalización de estudios:

Mismos criterios que en las convocatorias ordinarias.

Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor:

Se aplicarán los establecidos en el artículo 80.3 del Reglamento de régimen académico de los estudios de grado y máster de la Universidad de Córdoba.

BIBLIOGRAFIA

1. Bibliografía básica

1.- T.L. Lemke, D. A. Williams, **Foye´s principles of medicinal chemistry**, 7th Edition, Wolters Kluwer and Lippincott Williams & Wilkins. Philadelphia. USA. 2013.

2.- D. Cairns, **Essentials of Pharmaceutical Chemistry**, 3rd Ed., Pharmaceutical Press, London, 2008.

3.- J.B. Taylor and P.D. Kennewell, **Modern Medicinal Chemistry**, Ellis Horwood Ltd., Chichester, 1993.

4.- M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh. **Spectroscopic methods in organic chemistry**, Thieme. 2nd Edition 2007.

5.- L. D. Field, S. Sternhell y J. R. Kalman, **Organic Structures from Spectra,** Wiley, 2002.

6.- W. Kemp, **Organic Spectroscopy**, McMillan Education Limited, London, (1992) 3th ed.

7.- R. M. Silverstein, G.C. Bassler and T. C. Morrill, **Spectrometric Identification of Organic Compounds**, J. Wiley,New York (1991) 5th Ed.

8.-C.G. Herbert and R.A. W. Johnstone, **Mass Spectrometry Basics**, CRC Press, Washinton D.C., 2003.

9.- S. A. Richard y J. C. Hollerton, **Essential Practical NMR for Organic Chemistry**, John Wiley & Sons, Ltd., 2011.

10.- M. Balci, **Basic 1H- and 13C-NMR Spectroscopy**, Elsevier Science B. V., 2005.

11.- N. E. Jacobsen. **NMR Spectroscopy Explained. Simplified Theory, Applications and Examples for**

GUÍA DOCENTE

Organic Chemistry and Structural Biology, John Wiley and Sons, New Jersey, 2007.
12.- E. Breitmaier, **Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. A Practical Guide**, John Wiley and Sons, Ltd., Chischester, 2002.

2. Bibliografía complementaria

Ninguna

CRITERIOS DE COORDINACIÓN

Fecha de entrega de trabajos

CRONOGRAMA

Periodo	Actividades de evaluación	Laboratorio	Lección magistral	Seminario
1ª Semana	0,0	0,0	2,5	0,0
2ª Semana	0,0	0,0	2,5	0,0
3ª Semana	0,0	0,0	1,5	0,0
4ª Semana	0,0	0,0	2,5	0,0
5ª Semana	0,0	3,0	2,5	0,0
6ª Semana	0,0	3,0	2,5	0,0
7ª Semana	0,0	0,0	2,5	3,0
8ª Semana	0,0	0,0	1,0	3,0
9ª Semana	0,0	0,0	2,5	3,0
10ª Semana	0,0	0,0	2,5	3,0
11ª Semana	0,0	0,0	2,5	3,0
12ª Semana	0,0	0,0	2,5	3,0
13ª Semana	0,0	0,0	2,5	3,0
14ª Semana	3,0	0,0	0,0	0,0
Total horas:	***3,0***	***6,0***	***30,0***	***21,0***

Las estrategias metodológicas y el sistema de evaluación contempladas en esta Guía Docente serán adaptadas de acuerdo a las necesidades presentadas por estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales en los casos que se requieran.

PLAN DE CONTINGENCIA: ESCENARIO A

El escenario A, se corresponde con una menor actividad académica presencial en el aula como

GUÍA DOCENTE

consecuencia de medidas sanitarias de distanciamiento interpersonal que limite el aforo permitido en las aulas.

METODOLOGÍA

Aclaraciones generales sobre la metodología en el escenario A

Se adoptará un sistema multimodal o híbrido de enseñanza que combine, en todo lo posible, las clases presenciales en aula y las clases presenciales por videoconferencia (sesiones síncronas) que se impartirán en el horario aprobado por el Centro. La distribución temporal de las actividades que se llevarán a cabo de forma presencial en aula y presencial por videoconferencia estará determinado por el Centro en función del aforo permitido en los espacios docentes y las medidas sanitarias de distanciamiento interpersonal que estén vigentes en cada momento.

EVALUACIÓN

Competencias	Análisis de documentos	Exposición oral	Exámenes	Prácticas de laboratorio	Resolución de problemas
CB10	X	X	X	X	X
CB4	X	X	X	X	X
CB6			X	X	X
CE15	X	X			
CE16		X	X		X
CE22	X		X		X
CE23	X		X	X	X
CE24	X		X	X	X
CE26	X		X	X	X
CE28				X	
CE30			X	X	X
CE31	X		X	X	X
CE4	X	X	X		X
Total (100%)	***15%***	***15%***	***30%***	***10%***	***30%***
Nota mínima (*)	***4***	***4***	***4***	***4***	***4***

(*)Nota mínima (sobre 10) necesaria para que el método de evaluación sea considerado en la calificación final de la asignatura. En todo caso, la calificación final para aprobar la asignatura debe ser igual o superior a 5,0.

Método de valoración de la asistencia (Escenario A):

La asistencia y participación activa constituirá un 10% de la calificación final.

GUÍA DOCENTE

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación (Escenario A):

La **asistencia** y participación activa en todas las actividades presenciales (clases magistrales, seminarios y prácticas) serán evaluadas (10% de la calificación final). Este porcentaje es contabilizado en la tabla anterior, un 5% de la calificación total en la parte de exámenes y un 5% de la calificación total en el epígrafe de resolución de problemas.

Las **prácticas de laboratorio** son obligatorias, de modo que para aprobar la asignatura es imprescindible realizarlas y presentar la memoria correspondiente. La calificación obtenida supone el 10% de la calificación final. Una vez superadas, el estudiante no tiene obligación de repetirlas en cursos posteriores.

La parte de **Farmacoquímica** aporta un 30% a la calificación final, desglosado en i) Análisis de documentos (15%) y ii) Exposición oral (15%).

La parte de **Determinación Estructural** aporta un 50% a la calificación final, consistente en exámenes (25% de la calificación total) y resolución de problemas/espectros (25% de la calificación total).

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales (Escenario A):

Las adaptaciones de la evaluación para los estudiantes a tiempo parcial y necesidades educativas especiales se realizarán de acuerdo con la normativa de la Universidad de Córdoba y atendiendo a la casuística de los estudiantes afectados, se establecerán en reuniones entre el profesorado y los alumnos interesados a fin de personalizar los posibles casos que se presenten.

PLAN DE CONTINGENCIA: ESCENARIO B

El escenario B, contempla la suspensión de la actividad presencial en el aula como consecuencia de medidas sanitarias.

METODOLOGÍA

Aclaraciones generales sobre la metodología en el escenario B

La actividad docente presencial se llevará a cabo por videoconferencia (sesiones síncronas) en el horario aprobado por el Centro. Se propondrán actividades alternativas para los grupos reducidos que garanticen la adquisición de las competencias de esa asignatura.

GUÍA DOCENTE

EVALUACIÓN

Competencias	Análisis de documentos	Exposición oral	Exámenes	Prácticas de laboratorio	Resolución de problemas
CB10	X	X	X	X	X
CB4	X	X	X	X	X
CB6			X	X	X
CE15	X	X			
CE16		X	X		X
CE22	X		X		X
CE23	X		X	X	X
CE24	X		X	X	X
CE26	X		X	X	X
CE28				X	
CE30			X	X	X
CE31	X		X	X	X
CE4	X	X	X	X	X
Total (100%)	***15%***	***15%***	***30%***	***10%***	***30%***
Nota mínima (*)	***4***	***4***	***4***	***4***	***4***

(*)Nota mínima (sobre 10) necesaria para que el método de evaluación sea considerado en la calificación final de la asignatura. En todo caso, la calificación final para aprobar la asignatura debe ser igual o superior a 5,0.

Herramientas Moodle	Document Analysis	Exams	Laboratory Practice	Oral Presentation	Problem solving
Chat	X	X	X	X	X
Questionnaire	X				
Synchronous tests via videoconference		X			X
Task			X		
Videoconference				X	

Método de valoración de la asistencia (Escenario B):

La asistencia y participación activa constituirá un 10% de la calificación final.

GUÍA DOCENTE

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación (Escenario B):

La **asistencia** y participación activa en todas las actividades presenciales (clases magistrales, seminarios y prácticas) serán evaluadas (10% de la calificación final). Este porcentaje es contabilizado en la tabla anterior, un 5% de la calificación total en la parte de exámenes y un 5% de la calificación total en el epígrafe de resolución de problemas.

Las **prácticas de laboratorio** son obligatorias, de modo que para aprobar la asignatura es imprescindible realizarlas y presentar la memoria correspondiente. La calificación obtenida supone el 10% de la calificación final. Una vez superadas, el estudiante no tiene obligación de repetirlas en cursos posteriores.

La parte de **Farmacoquímica** aporta un 30% a la calificación final, desglosado en i) Análisis de documentos (15%) y ii) Exposición oral (15%).

La parte de **Determinación Estructural** aporta un 50% a la calificación final, consistente en exámenes (25% de la calificación total) y resolución de problemas/espectros (25% de la calificación total).

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales (Escenario B):

Las adaptaciones de la evaluación para los estudiantes a tiempo parcial y necesidades educativas especiales se realizarán de acuerdo con la normativa de la Universidad de Córdoba y atendiendo a la casuística de los estudiantes afectados, se establecerán en reuniones entre el profesorado y los alumnos interesados a fin de personalizar los posibles casos que se presenten.