

Guía docente de la asignatura

Fecha de aprobación por la Comisión Académica: 20/06/2023

Introducción a la Determinación Estructural y a la Evaluación de Potenciales Fármacos (M38/56/1/48)**Máster**

Máster Universitario en Biotecnología

MÓDULO

Modulo I: Docencia

RAMA

Ciencias

CENTRO RESPONSABLE DEL TÍTULO

Escuela Internacional de Posgrado

Semestre

Primero

Créditos

3

Tipo

Optativa

Tipo de enseñanza

Presencial

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Máster)

En un primer bloque del curso se estudiará la Resonancia Magnética Nuclear y la Espectrometría de Masas, y se aplicarán a determinaciones estructurales de distintos compuestos orgánicos.

En un segundo bloque se realizará una introducción al análisis y cuantificación de fármacos mediante el uso de HPLC y LC-MS.

Se pretende dar un enfoque teórico-práctico al curso, por lo que se realizarán interpretaciones de espectros de RMN, tanto mono- como bidimensionales y se analizarán distintas muestras en LC-masas y HPLC. Se elaboraran curvas de calibración de distintos fármacos y se determinarán las concentraciones de dichos fármacos en muestras problema.

COMPETENCIAS**COMPETENCIAS BÁSICAS**

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de



resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

- CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE03 - Manejar las tecnologías de la información para la adquisición, procesamiento y difusión de resultados en investigación;
- CE04 - Emitir juicios en función de criterios y razonamiento crítico y aprender a reconocer los parámetros de calidad en investigación;
- CE05 - Adquirir las habilidades de creatividad, iniciativa, espíritu emprendedor y liderazgo en la toma de decisiones;
- CE06 - Trabajar en equipo y abordar los problemas de una forma interdisciplinar
- CE09 - Reconocer y adaptarse a la diversidad y multiculturalidad.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

El alumno sabrá/comprenderá:

- Las bases físicas de los dos métodos de análisis estructural.
- Los conceptos básicos de resonancia magnética nuclear y espectrometría de masas
- Los parámetros básicos de un espectro de RMN-1D y los tipos de espectros RMN-1D
- La utilidad de las técnicas bidimensionales de RMN, las interacciones electrónicas a través de enlace:
 - Las Interacciones 1H-1H: H-H COSY, interacciones 1H-13C: H-C COSY, interacciones a corta distancia: HMQC y HSQC, y a larga distancia: HMBC
 - Interacciones espaciales entre núcleos magnéticos: NOESY
- La descripción de las distintas técnicas de ionización para EM y su utilidad para cada tipo de muestra.
- Las características de los espectros de EM según el tipo de ionización.
- Las diferencias entre estructuras de bajo peso molecular y estructuras de alto peso molecular.
- Las técnicas de espectrometría de masas de alta resolución.
- Los tipos de analizadores disponibles para espectrometría de masas y su utilidad para cada tipo de muestra.
- Los conceptos básicos de evaluación enzimática de potenciales fármacos, tipos de ensayos enzimáticos, así como factores que afectan al ensayo.

El alumno será capaz de:

- Resolver casos prácticos sobre resolución de espectros de RMN monodimensionales
- Resolver casos prácticos sobre resolución de espectros de RMN bidimensionales
- Utilizar la Resonancia Magnética Nuclear y la Espectrometría de Masas para la



determinación estructural.

- Resolver casos prácticos sobre la interpretación de espectros de masas.
- Manejar la instrumentación necesaria para medir la actividad enzimática, realizar ensayos espectrofotométricos directos y ensayos acoplados.
- Evaluar potenciales fármacos mediante el uso de ensayos y análisis espectrofotométrico
- Conocer la Resonancia Magnética Nuclear y la Espectrometría de masas y utilizarlas para la determinación estructural.
- Adquirir conocimientos básicos para la evaluación de potenciales fármacos mediante el uso de ensayos enzimáticos y análisis espectrofotométrico.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

TEÓRICO

1. Introducción a la determinación estructural (10,5 h):
 1. Introducción a la Resonancia Magnética Nuclear y la espectrometría de masas (2,5 h)
 2. Interpretación de espectros de masas (7 h):
 1. Tipos de ionización y tipos de muestras. EM de alta resolución (1 h).
 2. Analizadores: tiempo de vuelo, cuádruplo, trampa de iones, otras configuraciones (1 h).
 3. Espectrometría de masas tándem (0.5 h)
 4. Aplicación de la espectrometría de masas en proteómica. (0.5 h)
2. Introducción a la evaluación de potenciales fármacos mediante HPLC y LCMS (12,5 horas):
 1. Cromatografía Líquida. Características generales. (1,5 h)

PRÁCTICO

1. Interpretación de espectros obtenidos por RMN:
 1. Espectros 1D (4 h)
 2. Espectros 2D (4 h)

PRÁCTICAS DE LABORATORIO:

1. Práctica 1. Preparación y análisis de muestras de laboratorio en EM. Estudio práctico de conceptos. (4 h)
2. Práctica 2. Curvas de calibración y elaboración práctica y aplicación en la cuantificación de fármacos. (5 h).
3. Práctica 3. Evaluación práctica de la metabolización

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- N. E. Jacobsen (2007) NMR Spectroscopy Explained. Simplified Theory, Applications and Examples for Organic Chemistry and Structural Biology. Ed. Wiley
- E. Breitmaier (2002) Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry: A practical Guide. John Wiley & Sons, Ltd.



- J. Keeler (2005). Understanding NMR Spectroscopy. John Wiley & Sons
- PRETSCH, CLERC, SEIBL, SIMON. (2000) Tablas para la determinación estructural por métodos espectroscópicos. Ed. Springer. 3ª Edición.
- K. DOWNARD (2004) Mass Spectrometry. A Foundation Course. Ed. RS-C. 1ª Edición.
- Chhabil Dass (2007) Fundamentals of contemporary mass spectrometry, Wiley-Interscience.
- R. Ekman, J. Silberring, A. Westman-Brinkmalm, A. Kraj (2009) Mass spectrometry. Instrumentation, interpretation, and applications. Ed., Wiley-Interscience.
- S. Hansen, S. Pedersen-Bjergaard, K. Rasmussen (2012) Introduction to Pharmaceutical Chemical Analysis, Ed Wiley.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ENLACES RECOMENDADOS

- Página oficial del Máster de Biotecnología: <http://masteres.ugr.es/biotecnologia/>
- Página oficial del Instituto de Biotecnología: <http://www.ibtugr.es/>
- Página oficial del Departamento de Química Farmacéutica y Orgánica: <http://www.ugr.es/~qfo/inicio.html>

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 Clases magistrales
- MD02 Experimentación
- MD03 Colección, estudio y análisis bibliográfico
- MD04 Ensayo científico

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

El artículo 17 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que la convocatoria ordinaria estará basada preferentemente en la evaluación continua del estudiante, excepto para quienes se les haya reconocido el derecho a la evaluación única final.

Puesto que el Máster tiene carácter presencial, la asistencia a las sesiones presenciales será obligatoria, debiendo justificar adecuadamente las ausencias. En caso de no hacerlo, el curso se calificará como suspenso.

1. Se evaluará el trabajo realizado por el estudiante durante el desarrollo de las clases, su participación en discusiones de clase, en la determinación estructural de compuestos orgánicos y durante la realización de prácticas de hidrólisis enzimática (suponen la



- presencia en el aula-laboratorio): hasta un 65%. Se evaluarán las competencias: CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CE5, CE6, CE9, CEM35 y CEM36.
2. Se evaluará los trabajos-propuestos como actividades no presenciales: hasta un 45%. Se evaluarán las competencias: CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CE3, CE4, CEM35 y CEM36. Se podrá incluir como criterio de calificación la entrega de un cuaderno de laboratorio y/o la realización de una memoria final. Se evaluarán las competencias: CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CE3, CE4, CEM35 y CEM36.

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

El artículo 19 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que los estudiantes que no hayan superado la asignatura en la convocatoria ordinaria dispondrán de una convocatoria extraordinaria. A ella podrán concurrir todos los estudiantes, con independencia de haber seguido o no un proceso de evaluación continua. De esta forma, el estudiante que no haya realizado la evaluación continua tendrá la posibilidad de obtener el 100% de la calificación mediante la realización de un trabajo individual que consistirá en una memoria prácticas de la materia impartida durante el curso y que se regirán por los criterios establecidos por el profesor de la asignatura al principio del curso académico.

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

El artículo 8 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que podrán acogerse a la evaluación única final, el estudiante que no pueda cumplir con el método de evaluación continua por causas justificadas.

Para acogerse a la evaluación única final, el estudiante, en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura o en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de las clases, lo solicitará, a través del procedimiento electrónico, a la Coordinación del Máster, quien dará traslado al profesorado correspondiente, alegando y acreditando las razones que le asisten para no poder seguir el sistema de evaluación continua.

Los alumnos que opten por este sistema tendrán que realizar un trabajo individual que consistirá en una memoria práctica de la materia impartida durante el curso y que se regirán por los criterios establecidos por el profesor de la asignatura al principio del curso académico.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): [Gestión de servicios y apoyos](https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad) (<https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad>).

