



DEPARTAMENTO DE BIOLOGIA, BIOQUÍMICA Y FARMACIA

PROGRAMA DE: ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO DE FÁRMACOS

CODIGO: 6023

**HORAS DE CLASE**

**PROFESOR RESPONSABLE**

TEÓRICAS

PRÁCTICAS

Por semana

Por  
cuatrimestre

Por semana

Por  
cuatrimestre

Dra. Viviana Dorn

4

40

2

24

**ASIGNATURAS CORRELATIVAS PRECEDENTES**

APROBADAS

CURSADAS

Química Orgánica IIF (6156)

Fisicoquímica F (6008)

Química Orgánica IIF (6156)

Fisicoquímica F (6008)

**DESCRIPCION**

La asignatura tiene como objetivo brindar al estudiante las herramientas necesarias para la elucidación de estructuras de moléculas orgánicas que conforman diferentes fármacos, a partir de sus características espectroscópicas.

Se desarrollan las bases teóricas de espectroscopias de absorción (Infrarrojo, Resonancia Magnética Nuclear) y de Espectrometría de Masas, considerando el uso de Cromatografía en Fase Gaseosa y Líquida de Alta Performance, como forma de introducción de mezclas en el espectrómetro.

El desarrollo de las clases prácticas coloca al estudiante frente a problemas reales de laboratorio. Mediante la resolución de los mismos, en base a los conocimientos adquiridos, el estudiante se introduce en el campo de la elucidación de estructuras orgánicas a través del uso de técnicas espectroscópicas combinadas.

**CONTENIDOS CURRICULARES**

TEMA 1: ESPECTROSCOPIA INFRARROJA y RAMAN. Fundamento general. Aplicaciones.

TEMA 2: ESPECTROMETRÍA DE MASAS. Fundamento general. Aplicaciones.

TEMA 3: ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR. Fundamento general. Aplicaciones. RMN BIDIMENSIONAL. Aplicaciones. RMN DE SÓLIDOS. Aplicaciones.

VIGENCIA AÑOS	2024	2025				
---------------	------	------	--	--	--	--



DEPARTAMENTO DE BIOLOGIA, BIOQUÍMICA Y FARMACIA

PROGRAMA DE: ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO DE FÁRMACOS

CODIGO: 6023

### OBJETIVOS

Introducir a las/los estudiantes en los conceptos fundamentales de las técnicas espectroscópicas/espectrométricas mencionadas.

Adquirir habilidades para interpretar los espectros correspondientes

Fomentar el desarrollo de capacidades relacionadas con la habilidad de establecer que técnica espectroscópica/espectrométrica es más adecuada en función de la muestra o en función de la característica estructural que se desee conocer.

Como objetivo final, se espera que el estudiante sea capaz de comprender las técnicas y predecir las estructuras de las moléculas a partir de los respectivos espectros.

### PROGRAMA

#### TEMA 1: Espectroscopia Infrarroja (MIR – NIR) y Raman.

El espectro infrarrojo medio (MIR). Fundamentos. Absorciones características. Obtención de espectros según el estado de agregación de la muestra. El espectro infrarrojo cercano (NIR). Sobretonos y bandas de combinación. Espectroscopia Raman. Efecto Raman. Reglas de selección. Aplicaciones. Preparación de muestras. Interpretación de espectros.

#### TEMA 2: Espectrometría de Masas.

Fundamento. Equipo: introducción de sustancias puras, formas de ionización, analizadores. Cromatografía Gaseosa y Cromatografía Líquida de Alta Performance (HPLC): introducción de mezclas o sustancias impuras en un espectrómetro de masas. Ión molecular. Pico base. Patrones de isotopía. Regla del nitrógeno. Ionización mediante impacto electrónico: principales fragmentaciones. Interpretación de espectros.

#### TEMA 3: Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear.

Propiedades magnéticas de los núcleos. Número de espín. Momento magnético. Distribución en niveles de energía. Frecuencia de resonancia. Espectro de RMN. Unidades. Núcleo de  $^1\text{H}$ . Desplazamiento químico y factores que lo afectan. Multiplicidad de las señales. Constantes de acoplamiento. Protones intercambiables. Efecto de la temperatura.

VIGENCIA AÑOS	2024	2025				
---------------	------	------	--	--	--	--



DEPARTAMENTO DE BIOLOGIA, BIOQUÍMICA Y FARMACIA

PROGRAMA DE: ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO DE FÁRMACOS

CODIGO: 6023

Núcleo de  $^{13}\text{C}$ . Desplazamiento químico y factores que lo afectan. Doble resonancia. Espectro DEPT. Simulación de espectros. Otros núcleos de interés farmacológico:  $^{19}\text{F}$ ,  $^{15}\text{N}$ . RMN bidimensional. RMN de sólidos. Ángulo mágico de rotación. Preparación de muestras. Interpretación de espectros.

Empleo de bases de datos en línea para descarga de espectros.

**PRÁCTICAS DE LABORATORIO:** El trabajo de laboratorio consta de la IDENTIFICACION DE COMPUESTOS ORGÁNICOS presentes en formulados farmacéuticos aplicando los diferentes métodos espectroscópicos desarrollados en el curso.

**TP N° 1. Identificación de paracetamol (acetaminofén) en Tafirol®.** NIR: Preparación de la muestra. Asignación de bandas.

**TP N° 2. Identificación de paracetamol (acetaminofén) en Tetralgin APC® (Aspirina, Paracetamol, Cafeína).** CG-EM: Preparación de la muestra. Análisis del cromatograma: áreas relativas. Espectro de masas: regla del N, ión molecular, principales fragmentaciones.

**TP N° 3. Simulación e interpretación de espectros de  $^1\text{H}$ -,  $^{13}\text{C}$ -RMN de ibuprofeno:** empleando programas computacionales. Asignación de señales, acoplamientos. Comparación con espectros reales. Empleo de bases de datos.

**CLASES DE PROBLEMAS:** Las clases de problemas son grupales y constan del ANÁLISIS DE ESTRUCTURAS ORGANICAS utilizando los diferentes métodos espectroscópicos desarrollados en el curso.

Desarrollan cuatro guías de Problemas: Espectroscopia Infrarrojo, Espectrometría de Masas, Resonancia Magnética Nuclear de  $^1\text{H}$  y  $^{13}\text{C}$ -RMN y técnicas combinadas.

### METODOLOGÍA DE LA ENSEÑANZA

**Clases prácticas:** Trabajos en laboratorio de instrumental y clases de resolución de problemas.

**Clases teóricas:** Clases presenciales dos días a la semana con un total de cuatro horas semanales. Se desarrollan los fundamentos teóricos de los métodos espectroscópicos y espectrométricos involucrados en la asignatura, como también ejemplos concretos de aplicación práctica en Farmacia.

La materia cuenta con material de consulta, videos, clases y apuntes en la plataforma Moodle.

### CONDICIONES DE CURSADO Y DE APROBACIÓN (ALUMNOS REGULARES Y LIBRES)

La asignatura cuenta con un régimen de promoción cuya modalidad se informa al inicio del cuatrimestre.

#### Evaluación de Trabajos Prácticos:

Los estudiantes deben aprobar los informes de los Trabajos Prácticos una vez finalizados.

VIGENCIA AÑOS	2024	2025				



DEPARTAMENTO DE BIOLOGIA, BIOQUÍMICA Y FARMACIA

PROGRAMA DE: ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO DE FÁRMACOS

CODIGO: 6023

La evaluación también abarca dos exámenes parciales de resolución de problemas en los que pueden lograr una nota de promoción o cursado.

En caso de desaprobado alguna instancia, pueden recuperar mediante una evaluación complementaria general al finalizar el cuatrimestre.

**Evaluación de Clases Teóricas:**

Se lleva a cabo mediante dos trabajos prácticos que integran los conceptos desarrollados en las clases prácticas y teóricas, y la exposición oral de un trabajo final en base a una publicación científica vinculada a la investigación en química farmacéutica que aplica las técnicas estudiadas.

En caso de no alcanzar la promoción, los estudiantes pueden aprobar la asignatura a través de un examen final.

**BIBLIOGRAFIA**

- M. HESSE, H. MEIER y B. ZEEH. "Métodos espectroscópicos en Química Orgánica", 2da ed, 1997.  
 R. M. SILVERSTEIN, C. G. BASSLER y J. C. MORRILL. "Spectrometric Identification of Organic Compounds", 7th ed, John Wiley & Sons, 2005.  
 J. M. HOLLAS. "Modern Spectroscopy", 4th ed, John Wiley & Sons, 2004.  
 D. L. PAVIA, G. M. LAMPMAN, G. S. KRIZ y J. A. VYVYAN. "Introduction to Spectroscopy", 4th ed, Wadsworth Publishing Co Inc, 2008.  
 J. B. LAMBERT y E. P. MAZZOLA. "Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy: An Introduction to Principles, Applications, and Experimental Methods", 2nd ed, Wiley, 2019.  
 W. KEMP. "NMR in chemistry: a multinuclear introduction", London, Macmillan, 1992.  
 F. W. MCLAFFERTY. "Interpretación de los espectros de masas", Editorial Reverté S.A., 1970.  
 J. T. WATSON. "Introduction to Mass Spectrometry", 3rd ed, Lippincott Williams and Wilkins, 1997.  
 N.B. COLTHUP, L.H. DALY y S.E. WIBERLEY. "Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy", 3rd ed, Elsevier, 1990.  
 F. ROUESSAC y A. ROUESSAC. "Chemical Analysis. Modern Instrumentation Methods and Techniques", John Wiley & Sons, 2007.  
 K. DETTMER Y W. W. ENGEWALD EDS. "Practical Gas Chromatography", Springer, 2014.  
 S. MOLDOVEANU Y V. DAVID. "Selection of the HPLC Method in Chemical Analysis", 1st ed, Elsevier, 2016.

**OBSERVACIONES**

VIGENCIA DE ESTE PROGRAMA

AÑO	PROFESOR RESPONSABLE (Firma y aclaración)	AÑO	PROFESOR RESPONSABLE (Firma y aclaración)
2024			
2025			

VIGENCIA AÑOS	2024	2025				

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR  
BAHÍA BLANCA



5

5

DEPARTAMENTO DE BIOLOGIA, BIOQUÍMICA Y FARMACIA

PROGRAMA DE: ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO DE FÁRMACOS

CODIGO: 6023

VISADO

COORDINADOR DE ÁREA

SECRETARIO ACADÉMICO

DIRECTOR DEPARTAMENTO

APROB. CONSEJO DEPARTAMENTAL:

RES. BByF:

Fecha:

VIGENCIA AÑOS	2024	2025				
---------------	------	------	--	--	--	--