

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	44711
Nombre	Resonancia magnética nuclear avanzada
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	3.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2226 - M.U. en Química Orgánica	Facultad de Química	1	Anual

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2226 - M.U. en Química Orgánica	7 - Resonancia magnética nuclear avanzada	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
DEL POZO LOSADA, CARLOS	325 - Química Orgánica

RESUMEN

Esta asignatura, junto con la de Técnicas Espectroscópicas en Química Orgánica, pretende situar al/la alumno/a en disposición de resolver la estructura de moléculas de distinto tamaño a través de la medida y análisis de sus datos espectrales de diferentes tipos

La relevancia, amplitud y complejidad de la técnica de resonancia magnética nuclear y la densidad de información estructural que proporciona le confieren un papel especial dentro de las técnicas analíticas. Ello ha hecho conveniente dedicar específicamente a esta temática una asignatura de cuatro créditos. En la asignatura Resonancia Magnética Nuclear Avanzada, se estudian desarrollos modernos y aplicaciones de la técnica con el objeto de profundizar en el conocimiento de las estructuras de biomoléculas y de las interacciones de éstas con los fármacos, sabiendo luego utilizar estos datos para el diseño de fármacos.



CONOCIMIENTOS PREVIOS

Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

Si bien las técnicas espectroscópicas no guardan relación directa con la reactividad de las moléculas orgánicas, la comprensión de las relaciones existentes entre los ambientes químicos de los núcleos, claves para la interpretación de sus propiedades espectrales, y su localización espacial dentro de una molécula sólo es factible si se dominan las bases fundamentales de la Química Orgánica. Consiguientemente, son imprescindibles para un buen seguimiento de las enseñanzas propias de la materia:

-Conocimien

COMPETENCIAS

2226 - M.U. en Química Orgánica

- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Utilizar las distintas técnicas de exposición -oral, escrita, presentaciones, paneles, etc- para comunicar sus conocimientos, propuestas y posiciones.
- Ser capaces de acceder a herramientas de información en otras áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente.
- Saber participar en debates y discusiones, dirigirlos y coordinarlos y ser capaces de resumirlos y extraer de ellos las conclusiones más relevantes y aceptadas por la mayoría.



- Poseer habilidades sociales, un buen nivel de comunicación oral y escrita, así como capacidad para trabajar en equipo y con personas de diferentes procedencias.
- Competencias de gestión tales como la capacidad para la planificación y gestión de tiempo y recursos, así como para dirigir y tomar decisiones.
- Utilización de los datos proporcionados por la espectroscopia de RMN para profundizar en el conocimiento de las estructuras de moléculas, biomoléculas y de las interacciones de las últimas con los fármacos, y su aplicación para el diseño de fármacos.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los resultados a conseguir en esta asignatura se resumen en los siguientes puntos:

Que el/la alumno/a profundice en los principios fundamentales en los que se basa la RMN en la determinación estructural de compuestos orgánicos.

Que tenga un concepto claro del lenguaje de la RMN moderna y una percepción amplia de la misma como herramienta de elucidación estructural aplicable en ámbitos muy diversos

Que sepa obtener información de tipo estructural, entendiendo por ello no solo la conectividad atómica sino también las relaciones estereoquímicas, especialmente de biomoléculas y de las interacciones de éstas con los fármacos, sabiendo luego utilizar estos datos para el diseño de fármacos.

Que sepa combinar los datos de RMN con los obtenidos mediante técnicas de química computacional y de modelado molecular para comprender, a escala atómica, los requerimientos estructurales de procesos de reconocimiento molecular ligando-receptor con interés biomédico y así avanzar en el diseño de fármacos y en la comprensión de procesos biológicos

Diseñar, seleccionar y/o desarrollar productos y procesos químicos eficientes (ODS 7) y que minimicen su impacto sobre el medio ambiente (ODS 14 y 15), aprovechen materias primas alternativas y generen una menor cantidad de residuos (ODS 11).

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. RMN en la determinación de estructuras tridimensionales de biomoléculas

Estrategias para la asignación de espectros de proteínas utilizando muestras en abundancia natural y marcadas. Estructuras basadas en experimentos NOE. Cuantificación del efecto NOE. Difusión de espín. Asignación de NOEs ambiguos. Acoplamiento dipolares residuales (ADR). Métodos de orientación parcial. Medidas de ADR. Análisis de ADR.

**2. RMN, interacciones y reconocimiento molecular.**

Aproximaciones basadas en el ligando. Interacción entre moléculas con distinto tiempo de correlación. NOE transferido. Transferencia de saturación. Cribado de ligandos. Waterlogsy. Gradientes y difusión. Aproximaciones basadas en el receptor. SAR-by-NMR.

3. RMN y diseño de fármacos

Más allá del SAR-by-NMR. El método SHAPES. El uso de fragmentos. Ejemplos escogidos

4. RMN de los otros núcleos de interés más frecuente (15N, 19F, 31P)

Empleo de moléculas etiquetadas con isótopos estables para deducir la existencia de interacciones con receptores.

5. Aspectos instrumentales y metodológicos de la RMN

El espectrómetro de RMN, sondas de medida, hiperpolarización. Técnicas acopladas. Técnicas de barrido único, adquisición simultánea de diferentes combinaciones de espectros de RMN, RMN Hadamard

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	23,00	100
Seminarios	14,00	100
TOTAL	37,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

Desde el principio de curso los estudiantes dispondrán de todo el material didáctico correspondiente al curso. La asignatura está planteada para que el estudiante sea el protagonista de su propio aprendizaje y se estructura de la siguiente manera:

- Clases teóricas (presenciales).- Las clases se dedicarán a discutir con los estudiantes los aspectos más complicados o aquellos en los que hayan tenido más dificultad en el estudio previo del material facilitado.
- Clases de problemas.- En estas clases se llevará a cabo la aplicación específica de los conocimientos que los estudiantes hayan adquirido en las clases de teoría. Los estudiantes deberán, previamente, haber trabajado los problemas que se van a resolver. La resolución de dichos problemas se llevará a cabo alternativamente por el profesor o por los alumnos, bien en grupo, bien de forma individualizada.



- Trabajos.- Una posibilidad adicional que será llevada a cabo será la realización de un trabajo, relacionado con alguno de los temas del programa y descrito en una publicación científica

EVALUACIÓN

La evaluación de la asignatura se llevará a cabo de una forma continua por parte del profesorado a lo largo del curso y constará de los siguientes apartados.

• **Evaluación directa del profesor.** Un 15% de la nota procederá de la evaluación directa del profesor en las clases teóricas y prácticas. En esta evaluación se tendrán en cuenta distintos aspectos, entre los que cabe destacar:

- Asistencia y participación razonada y clara en las discusiones planteadas.
- Progreso en el uso del lenguaje característico de la resonancia magnética nuclear.
- Resolución de problemas y planteamiento de dudas.
- Espíritu crítico.
- Entrega de ejercicios.

• **Evaluación del trabajo realizado por el estudiante.** Se valorará la adecuación del artículo seleccionado al tema propuesto así como la capacidad de síntesis y comprensión. A la valoración del trabajo corresponderá un 25% de la nota final.

• **Exámenes y pruebas escritas.** Un 60% de la nota se obtendrá a partir de los resultados de las pruebas escritas. Los exámenes constarán de preguntas teórico-prácticas relacionadas con la materia. Las cuestiones serán de tal naturaleza que obliguen al estudiante a relacionar aspectos diferentes de la asignatura de aparezcan en distintos temas. Dicho tema de relación permitirá al profesor evaluar tanto el conocimiento global del estudiante como su capacidad de expresión escrita

REFERENCIAS

Básicas

- Croasmun, W. R.; Carlson, R. M. K. (Eds.), Two-Dimensional NMR Spectroscopy. Applications for Chemists and Biochemists. 2nd Edition, VCH: New York, 1994.
- Chary, K. V. R.; Govil, G., NMR in Biological Systems: From Molecules to Human, Springer: Berlin, 2008.
- De Graaf, R. A., In Vivo NMR Spectroscopy: Principles and Techniques, John Wiley: Chichester, 2007.



Complementarias

- Harren, J. H.; Leach, A. (Eds.), Structure-based Drug Discovery, Springer: Berlin, 2007.
- Lees, M. (Ed.), Food Authenticity and Traceability, Woodhead Publishing: Cambridge, 2003
- Shulman, R. G.; Rothman, D. L., Metabolomics by In Vivo NMR, John Wiley: Chichester, 2005.
- Waver, I.; Holzgrabe, U.; Diehl, B., NMR Spectroscopy in Pharmaceutical Analysis, Elsevier: Oxford, 2008.
- Wüthrich, K., NMR of Proteins and Nucleic Acids, John Wiley: New York, 2005.