

Guía docente

Identificación de la asignatura

Asignatura / Grupo	11352 - Resonancia Magnética Nuclear Avanzada / 1
Titulación	Máster Universitario en Ciencia y Tecnología Química
Créditos	3
Período de impartición	Primer semestre
Idioma de impartición	Castellano

Profesores

Horario de atención a los alumnos

Profesor/a	Hora de inicio	Hora de fin	Día	Fecha inicial	Fecha final	Despacho / Edificio
Gabriel Martorell Crespi (Responsable) biel.martorell@uib.es						Hay que concertar cita previa con el/la profesor/a para hacer una tutoría
María del Carmen Rotger Pons (Responsable) carmen.rotger@uib.es						Hay que concertar cita previa con el/la profesor/a para hacer una tutoría

Contextualización

PROFESSORAT

Gabriel Martorell es doctor en Química por la Universitat de les Illes Balears (UIB). Actualmente es Jefe de Sección de los Serveis Cientifictècnics (SCT) de la UIB. Durante los últimos 18 años ha sido el responsable del Servicio de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de los SCT. Ha realizado varias estancias post-doctorales en el National Institute for Medical Research (Londres) donde ha profundizado en el conocimiento de la aplicación de la RMN en la elucidación estructural de biomoléculas. Actualmente es co-autor de 17 artículos publicados en revistas internacionales, en la mayoría de los cuales la contribución de las técnicas de RMN es fundamental. Des de el curso 2008-2009 ha impartido clases en el Máster de Ciencia y Tecnología Química en la asignatura: 10150 - Tècniques per a l'Experimentació en Química.

ASIGNATURA

La asignatura "Resonancia Magnética Nuclear Avanzada" forma parte del módulo obligatorio "Técnicas Instrumentales". Se trata de un módulo formado por 12 créditos, durante el cual se explicarán conceptos básicos y avanzados sobre diferentes técnicas espectroscópicas y cromatográficas, las cuales constituyen una de las herramientas más importantes en el desarrollo actual de la profesión de químico. Tres de estos créditos se destinarán a la Resonancia Magnética Nuclear (RMN), técnica que, actualmente, resulta imprescindible para la elucidación estructural de nuevas moléculas orgánicas o biomoléculas.

Esta asignatura guarda una estrecha relación con otras que se imparten en este Máster como pueden ser "Química, Estructura y función de las Proteínas", "Química Supramolecular", "Síntesis y Catálisis Asimétrica" y "Sólidos Porosos Nanoestructurados" entre otras. Esta relación se fundamenta en la principal aplicación que tiene la RMN, la determinación de estructuras de compuestos químicos. Durante el transcurso de la

Guía docente

asignatura se relacionará la utilidad de la RMN con campos tan diversos de la química, como los anteriormente mencionados.

Además, esta asignatura está muy relacionada con la que se imparte en el Grado en Química "Determinación Estructural" donde se proporciona el conocimiento básico sobre distintas técnicas instrumentales y su aplicación práctica para la obtención de información y determinación de estructuras de los compuestos químicos. Obviamente, los conocimientos proporcionados en esta asignatura tendrán un carácter avanzado, incidiendo en los avances de la RMN multidimensional aplicados a la elucidación estructural de biomoléculas.

El objetivo central de esta asignatura consiste en que los alumnos adquieran la información necesaria para conocer los principales experimentos multidimensionales que se utilizan en la determinación estructural de biomoléculas, comprender sus fundamentos básicos, adquirir el criterio necesario para seleccionar el experimento más adecuado en función de la información que se necesite y conocer el protocolo para obtener la estructura tridimensional de proteínas.

Requisitos

Para poder matricularse en la asignatura es necesaria la autorización previa de la Comisión Académica del Máster en Ciencia y Tecnología Química que es el órgano competente para la admisión del alumnado al programa de postgrado.

Esenciales

Tener conocimientos básicos sobre Resonancia Magnética Nuclear.

Recomendables

Resulta conveniente para conseguir el seguimiento adecuado de la asignatura:

- Buena comprensión de inglés escrito.
- Informática a nivel de usuario (Word, PowerPoint o software similar)

Competencias

Específicas

- * E1: Desarrollar habilidades teórico-prácticas en el manejo y aplicación de técnicas analíticas instrumentales de amplio espectro (espectroscopía óptica, espectrometría de masas, técnicas de separación, etc.).
- * E2: Comprensión y dominio de las técnicas de caracterización de compuestos moleculares y capacidad para relacionar las características espectroscópicas con la estructura molecular.
- * E3: Capacidad para la aplicación de metodologías analíticas instrumentales a la resolución de problemáticas medioambientales, biológicos y agroalimentarios.
- * E4: Capacidad de planificar la experimentación de acuerdo con los modelos teóricos y los procedimientos experimentales establecidos.

Genéricas

- * Esta asignatura no tiene asignada ninguna competencia genérica.

Guía docente

Básicas

- * Se pueden consultar las competencias básicas que el estudiante tiene que haber adquirido al finalizar el máster en la siguiente dirección: http://estudis.uib.cat/es/master/comp_basiques/

Contenidos

Contenidos temáticos

Unidad Didáctica 1. Fundamentos básicos de RMN

- Momento angular y momento magnético nuclear.
- Conducta de los núcleos en un campo magnético. Población de niveles energéticos.
- Condición de resonancia.
- Vector magnetización y RMN de pulsos.
- Transformada de Fourier.

Unidad Didáctica 2. Experimentos monodimensionales

- Parámetros espectrales:
 - * Desplazamiento químico: apantallamiento nuclear, compuestos de referencia y escala delta.
 - * Acoplamiento spin-spin.
 - * Intensidades relativas de las señales.
- Efecto nOE
- Experimentos de supresión del disolvente (H₂O)
 - * Presaturación
 - * Excitación cero.
 - * *Pulsed field gradients*
- RMN heteronuclear

Unidad Didáctica 3. Experimentos bidimensionales (2D-RMN)

- Introducción de los métodos bidimensionales. Generación de la segunda dimensión.
- Principales experimentos homonucleares: COSY, TOCSY, NOESY y ROESY
- Principales experimentos heteronucleares: HSQC, HMQC, HMBC y HOESY.

Unidad Didáctica 4. Experimentos tridimensionales (3D-RMN)

- En este capítulo se explicarán los principios fundamentales de las secuencias de pulsos, la información obtenida y su aplicación en la elucidación estructural de biomoléculas de los siguientes experimentos 3D:
 - * 3D-Doble resonancia: correlación tipo noe (3D-HSQC-NOESY), correlación escalar (3D-HSQC-TOCSY, 3D-HCCH-TOCSY), experimentos específicos de aromáticos (3D(HB)CB(CGCDCE)HE, 3D H(CD)CGCB, 3D HCD(CG)CB), experimentos para medir constantes de acoplamiento (3D-HNHA y 3D-HNHB)

Guía docente

* 3D-Triple resonancia: *backbone* (HNCO, HNCA, HN(CO)CA, HN(CA)CO, HCAN, etc.), *backbone - sidechain* (CBCA(CO)NH, CBCANH, HBHA(CO)NH, HBHANH, etc.), experimentos de correlación tipo noe (3D- 13C-HSQC-NOESY-15N-HSQC)

Metodología docente

En este apartado se describen las actividades de trabajo presencial y no presencial previstas en la asignatura, con el objeto de poder desarrollar y evaluar las competencias establecidas anteriormente.

Actividades de trabajo presencial (0,72 créditos, 18 horas)

Modalidad	Nombre	Tip. agr.	Descripción	Horas
Clases teóricas	Clases Expositivas del Profesor	Grupo grande (G)	El profesor explicará con ayuda de software de presentaciones (PowerPoint) los diferentes aspectos que se recogen en el apartado de contenidos del curso, fundamentalmente aquellos a los que hace referencia la parte teórica de cada unidad didáctica. Se explicará la base teórica de los diferentes temas, incidiendo en aquellos aspectos o conceptos claves para la comprensión de los mismos y se ejemplificará la práctica de los diferentes experimentos expuestos. Los alumnos deberán asistir, como mínimo, al 80% de estas clases.	10
Clases de laboratorio	Prácticas instrumentales	Grupo mediano (M)	El profesor explicará, sobre el propio instrumento de RMN, como preparar alguno de los experimentos que se han explicado en las clases teóricas, la elección adecuada de los parámetros de adquisición y como procesarlos adecuadamente para extraer la información que proporciona cada uno de ellos. Los alumnos deberán asistir, como mínimo, al 80% de estas clases.	6
Evaluación	Presentación oral	Grupo grande (G)	El estudiante dispondrá de material didáctico específico para preparar el contenido de la exposición y el asesoramiento del profesorado. Tanto el profesor como el resto del alumnado podrán realizar preguntas al finalizar la breve exposición, lo que ayudará a la evaluación de la actividad.	2

Al inicio del semestre estará a disposición de los estudiantes el cronograma de la asignatura a través de la plataforma UIBdigital. Este cronograma incluirá al menos las fechas en las que se realizarán las pruebas de evaluación continua y las fechas de entrega de los trabajos. Asimismo, el profesor o la profesora informará a los estudiantes si el plan de trabajo de la asignatura se realizará a través del cronograma o mediante otra vía, incluida la plataforma Aula Digital.

Actividades de trabajo no presencial (2,28 créditos, 57 horas)

Modalidad	Nombre	Descripción	Horas
Estudio y trabajo autónomo individual	Preparación de las unidades didácticas	Después de la exposición del profesor en las clases teóricas de las unidades didácticas, el alumno habrá de profundizar en la materia. Para facilitar esta tarea se indicará en cada caso la bibliografía que se ha de consultar.	17

Guía docente

Modalidad	Nombre	Descripción	Horas
Estudio y trabajo autónomo individual	Preparación de las exposiciones orales	Cada alumno tendrá un mínimo de dos semanas para preparar la exposición oral del tema seleccionado (conjuntamente entre el alumno y el profesor), el cual deberá estar directamente relacionado con las unidades impartidas en esta asignatura.	20
Estudio y trabajo autónomo individual	Análisis crítico de un trabajo científico	El alumno realizará un informe escrito en el que deberá analizar críticamente un artículo científico asignado individualmente.	20

Riesgos específicos y medidas de protección

Debido a que los instrumentos de RMN están equipados de potentes campos magnéticos no está permitida la entrada al laboratorio de RMN de personas que utilicen un marcapasos.

Evaluación del aprendizaje del estudiante

Fraude en elementos de evaluación

De acuerdo con el artículo 33 del Reglamento académico, "con independencia del procedimiento disciplinario que se pueda seguir contra el estudiante infractor, la realización demostradamente fraudulenta de alguno de los elementos de evaluación incluidos en guías docentes de las asignaturas comportará, a criterio del profesor, una minusvaloración en su calificación que puede suponer la calificación de «suspense 0» en la evaluación anual de la asignatura".

Presentación oral

Modalidad	Evaluación
Técnica	Pruebas orales (no recuperable)
Descripción	El estudiante dispondrá de material didáctico específico para preparar el contenido de la exposición y el asesoramiento del profesorado. Tanto el profesor como el resto del alumnado podrán realizar preguntas al finalizar la breve exposición, lo que ayudará a la evaluación de la actividad.
Criterios de evaluación	Eficacia del formato de presentación para la comprensión de la materia. Adecuación del ritmo de exposición. Adecuación del orden de los contenidos. Claridad de la exposición para la comprensión de la materia. Grado de preparación de la materia para la exposición.

Porcentaje de la calificación final: 70%

Guía docente

Análisis crítico de un trabajo científico

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo individual
Técnica	Trabajos y proyectos (recuperable)
Descripción	El alumno realizará un informe escrito en el que deberá analizar críticamente un artículo científico asignado individualmente.
Criterios de evaluación	Se evaluará la utilización de conceptos y procedimientos propios de la materia. Así como las aportaciones personales que reflejen la adquisición de las competencias específicas de la materia. También se evaluará la presentación de los informes de acuerdo con la calidad y estructura de un trabajo científico.

Porcentaje de la calificación final: 30%

Recursos, bibliografía y documentación complementaria

Bibliografía básica

Friebolin, Horst
Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy
Second edition
VCH Publishers, New York, NY (USA) & VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim (Federal Republic of Germany). 1993
Evans, Jeremy N.S.
Biomolecular NMR Spectroscopy
Oxford University Press, New York. 2004
Wütrich Kurt
NMR of Proteins and Nucleic Acids
Wiley-Interscience Publication, New York. 1986

Bibliografía complementaria

Claridge, Timothy D.W.
High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry
Pergamon. Elsevier Science. 1999
Cavanagh, John; Fairbrother, Wayne J.; Palmer III, Arthur G.; Skelton, Nicholas J.
Protein NMR Spectroscopy. Principles and Practice.
Academic Press. Elsevier Science (USA). 1996.
Jame, Thomas L. and Oppenheimer, Norman J.
Methods in Enzymology. Vol 239. Nuclear Magnetic Resonance. Part C.
Academic Press Limited. London. 1994.