

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA**

Codi: 44711
Nom: Ressonància magnètica nuclear avançada
Cicle: Màster Universitari Oficial
Crèdits ECTS: 3
Curs acadèmic: 2025-26

TITULACIONS

Titulació	Centre	Curs	Període
2226 - Màster Universitari en Química Orgànica	Facultat de Química	1	Anual

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
2226 - Màster Universitari en Química Orgànica	Ressonància magnètica nuclear avançada	OBLIGATÒRIA

COORDINACIÓ

VILA DESCALS CARLOS

RESUM

Aquesta assignatura, juntament amb la de Tècniques Espectroscòpiques en Química Orgànica, pretén situar al/l'alumne/a en disposició de resoldre l'estructura de molècules de diferent grandària a través de la mesura i anàlisi de les seues dades espectrals de diferents tipus

La rellevància, amplitud i complexitat de la tècnica de ressonància magnètica nuclear i la densitat d'informació estructural que proporciona li confereixen un paper especial dins de les tècniques analítiques. Això ha fet convenient dedicar específicament a aquesta temàtica una assignatura de quatre crèdits. En l'assignatura Ressonància Magnètica Nuclear Avançada, s'estudien desenvolupaments moderns i aplicacions de la tècnica a fi d'aprofundir en el coneixement de les estructures de biomolècules i de les interaccions d'aquestes amb els fàrmacs, sabent després utilitzar aquestes dades per al disseny de fàrmacs.

itzar aquestes dades per al disseny de fàrmacs.

CONEIXEMENTS PREVIS**RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ**

No s'ha especificat restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.



ALTRES TIPUS DE REQUISITS

Si bé les tècniques espectroscòpiques no guarden relació directa amb la reactivitat de les molècules orgàniques, la comprensió de les relacions existents entre els γ ambients químics γ dels nuclis, claus per a la interpretació de les seues propietats espectrals, i la seua localització espacial dins d'una molècula només és factible si es dominen les bases fonamentals de la Química Orgànica. Consegüentment, són imprescindibles per a un bon seguiment dels ensenyaments propis de la matèria:

-Coneixements bàsics de química orgànica.

COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENTATGE

-

Competències de gestió com ara la capacitat per a la planificació i gestió de temps i recursos, així com per a dirigir i prendre decisions.

Posseir habilitats socials, un bon nivell de comunicació oral i escrita, així com capacitat per a treballar en equip i amb persones de diferents procedències.

Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.

Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.

Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.

Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.

Que els estudiants siguin capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.

Saber participar en debats i discussions, dirigir-los i coordinar-los i ser capaços de resumir-los i extraure d'ells les conclusions més rellevants i acceptades per la majoria.

Ser capaços d'accedir a ferramentes d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.

Utilització de les dades proporcionats per l'espectroscòpia de RMN per a aprofundir en el coneixement de les estructures de molècules, biomolècules i de les interaccions de les últimes amb els fàrmacs, i la seua aplicació per al disseny de fàrmacs.

Utilitzar les diferents tècniques d'exposició-oral, escrita, presentacions, panells, etc-per comunicar els seus coneixements, propostes i posicions.



DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. RMN en la determinació d'estructures tridimensionals de biomolècules

Estratègies per a l'assignació d'espectres de proteïnes utilitzant mostres en abundància natural i marcades. Estructures basades en experiments *NOE. Quantificació de l'efecte *NOE. Difusió d'espín. Assignació de *NOEs ambigus. Acoblaments dipolars residuals (*ADR). Mètodes d'orientació parcial. Mesures de *ADR. Anàlisi de *ADR.

2. RMN, interaccions i reconeixement molecular.

Aproximacions basades en el lligant. Interacció entre molècules amb diferent temps de correlació. NOE transferit. Transferència de saturació. Garbellat de ligandos. Waterlogsy. Gradients i difusió. Aproximacions basades en el receptor. SAR-by-NMR

3. RMN i disseny de fàrmacs

Més enllà del SAR-by-NMR. El mètode SHAPES. L'ús de fragments. Exemples triats.

4. RMN dels altres nuclis d'interés més freqüent (15N, 19F, 31P)

Ús de molècules etiquetades amb isòtops estables per a deduir l'existència d'interaccions amb receptors.

5. Aspectes instrumentals i metodològics de la RMN

L'espectròmetre de RMN, sondes de mesura, hiperpolarització. Tècniques acoblades. Tècniques d'escombratge únic, adquisició simultània de diferents combinacions d'espectres de RMN, RMN Hadamard.

VOLUM DE TREBALL (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Teoria	16,00
Seminari	14,00
Total hores	30,00

ACTIVITATS NO PRESENCIALS



Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	0,00
Estudi i treball autònom	30,00
Preparació de classes	0,00
Preparació d'activitats d'avaluació	15,00
Resolució de casos pràctics	0,00
Total hores	45,00

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura està plantejada perquè l'estudiant siga el protagonista del seu propi aprenentatge. Des del principi de curs els estudiants disposaran de tot el material didàctic necessari i la docència s'estructurarà de la següent manera:

- **Classes magistrals (presencials).**- En aquestes classes s'introduiran els conceptes bàsics de l'assignatura. Es fomentarà la participació activa de l'alumne mitjançant el plantejament de qüestions relacionades amb l'aplicació de conceptes i coneixements prèviament adquirits per l'alumne.
- **Seminaris.**- Aquesta activitat docent estarà dedicada a la resolució de problemes i qüestions amb la participació activa de l'estudiant.
- **Treballs.**- Addicionalment, quan el professor el considere oportú, es proposaran treballs que consistiran en l'estudi d'un cas pràctic, relacionat amb algun dels temes del programa i descrit en una publicació científica.

ció científica.

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'assignatura es durà a terme d'una forma contínua per part del professorat al llarg del curs i constarà dels següents apartats.

Avaluació directa del professor. Un 10% de la nota procedirà de l'avaluació directa del professor en les classes teòriques i pràctiques. En aquesta avaluació es tindran en compte diferents aspectes, entre els quals cal destacar:

- Assistència i participació raonada i clara en les discussions plantejades.
- Progrés en l'ús del llenguatge característic de la ressonància magnètica nuclear.
- Resolució de problemes i plantejament de dubtes.
- Esperit crític.



-Lliurament d'exercicis.

Avaluació del treball realitzat per l'estudiant. Es valorarà l'adequació de l'article seleccionat al tema proposat així com la capacitat de síntesi i compressió. A la valoració del treball correspondrà un 20% de la nota final.

Exàmens i proves escrites. Un 70% de la nota s'obtindrà a partir dels resultats de les proves escrites. Els exàmens constaran de preguntes teòric-pràctiques relacionades amb la matèria. Les qüestions seran de tal naturalesa que obliguen l'estudiant a relacionar aspectes diferents de l'assignatura d'apareguen en diferents temes. Aquest tema de relació permetrà al professor avaluar tant el coneixement global de l'estudiant com la seua capacitat d'expressió escrita.

bal de l'estudiant com la seua capacitat d'expressió escrita.

BIBLIOGRAFIA

- 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.
- 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.