

TÉCNICAS AVANZADAS DE DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL GUÍA DOCENTE CURSO 2020-21

Titulación:	Máster Universitario en Química y Biotecnología			760M
Asignatura:	Técnicas avanzadas de determinación estructural			5119
Materia:	Técnicas Avanzadas en Química			
Módulo:	Tecnología Química			
Modalidad de enseñanza de la titulación:	Presencial	Carácter:	Optativa	
Curso:	1	Créditos ECTS:	5,00	Duración: Semestral (Segundo Semestre)
Horas presenciales:	50,00		Horas estimadas de trabajo autónomo:	75,00
Idiomas en que se imparte la asignatura:	Español			
Idiomas del material de lectura o audiovisual:	Inglés, Español			

DEPARTAMENTOS RESPONSABLES DE LA DOCENCIA

QUÍMICA				R112
Dirección:	C/ Madre de Dios, 53		Código postal:	26006
Localidad:	Logroño	Provincia:	La Rioja	
Teléfono:	941299620	Fax:	941299621	Correo electrónico: dpto.dq@unirioja.es

PROFESORADO PREVISTO

Profesor:	Peregrina García, Jesús Manuel		Responsable de la asignatura
Teléfono:	941299654	Correo electrónico:	jesusmanuel.peregrina@unirioja.es
Despacho:	1218	Edificio:	CENTRO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO Tutorías: Consultar
Profesor:	Berenguer Marín, Jesús Rubén		
Teléfono:	941299646	Correo electrónico:	jesus.berenguer@unirioja.es
Despacho:	1210	Edificio:	CENTRO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO Tutorías: Consultar
Profesor:	Corzana López, Francisco		
Teléfono:	941299632	Correo electrónico:	francisco.corzana@unirioja.es
Despacho:	1116	Edificio:	CENTRO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO Tutorías: Consultar

DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

La materia "Técnicas Avanzadas en Química" estudia los siguientes temas:

- Métodos de difracción χ
- Técnicas de resonancia magnética χ
- Cálculos computacionales. Dinámica molecular, QM/MM

REQUISITOS PREVIOS DE CONOCIMIENTOS Y COMPETENCIAS PARA PODER CURSAR CON ÉXITO LA ASIGNATURA

Recomendados para poder superar la asignatura.

Conocimientos generales sobre Determinación Estructural

Asignaturas que proporcionan los conocimientos y competencias:

- Determinación estructural

CONTEXTO

La asignatura está dividida en 3 bloques, orientados a la determinación de estructuras moleculares mediante métodos de difracción de rayos X (estado sólido), de resonancia magnética nuclear (en disolución) y de computación usando dinámica molecular, respectivamente.

Se trata de técnicas complementarias que ayudan a tener una visión próxima a la realidad acerca de cómo se disponen los átomos de las moléculas en el espacio. Esta información es fundamental dada la estrecha relación existente entre estructura y actividad (SAR).

COMPETENCIAS

Competencias generales

- CG1 - Capacidad de análisis y síntesis a nivel avanzado en el ámbito de la Química y la Biotecnología.
- CG2 - Capacidad de llevar a cabo proyectos de I+D+i relacionados con las materias propias del Máster.
- CG3 - Habilidad para dar un uso avanzado a las herramientas de búsqueda de información relevante en el ámbito de la Química y la Biotecnología.
- CG4 - Habilidad para comunicarse oralmente a nivel avanzado sobre temas de la Química y la Biotecnología, usando la terminología y técnicas aceptadas por los profesionales del sector.
- CG5 - Habilidad para formular por escrito a nivel avanzado temas de la Química y de la Biotecnología usando correctamente diferentes tipos de enfoques académicos relacionados con su campo de estudio.
- CG6 - Capacidad de iniciativa y autonomía para las distintas tareas propias de la actividad investigadora en el ámbito de las materias propias del Máster

Competencias específicas

- CE1 - Conseguir un conocimiento avanzado de las técnicas experimentales y métodos instrumentales de mayor relevancia actual usados en la Química y las Biociencias y aplicar esas técnicas y métodos a casos prácticos, tanto de ciencia básica como de tecnología.
- CE2 - Modelar y diseñar de forma avanzada sistemas químicos y biológicos.
- CE9- Seleccionar y utilizar de manera autónoma los métodos computacionales y las distintas técnicas instrumentales de determinación estructural procediendo a la interpretación y validación de los resultados obtenidos de su uso.

RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

El objetivo de esta materia se centra en el estudio y aprendizaje de tres técnicas instrumentales de determinación estructural de remarcada importancia para los químicos.

El alumno aprenderá los fundamentos de los métodos de difracción, familiarizándose con el proceso de resolución de una estructura a partir de los datos obtenidos en un experimento de difracción de rayos-X sobre monocristal.

El alumno conocerá los fundamentos teóricos de las técnicas de resonancia magnética nuclear, tanto mono- como bidimensional, siendo capaz de interpretar espectros correspondientes a experimentos reales.

El alumno estudiará los fundamentos de distintos métodos computacionales; en especial métodos de dinámica molecular y cálculos mixtos QM/MM, de gran aplicación en biomoléculas y sistemas complejos.

Por último, el alumno deberá ser capaz de seleccionar y utilizar de manera autónoma las distintas técnicas arriba mencionada, así como interpretar de forma crítica y validar los resultados obtenidos de las mismas.

TEMARIO

BLOQUE 1

MÉTODOS DE DIFRACCIÓN

Tema 1- LA TOMA DE DATOS

Toma de datos geométrica. Toma de datos basados en intensidad: Determinación del grupo espacial

Tema 2- PROCESAMIENTO DE DATOS

Teoría de Lorentz y Polarización. Reducción de datos y corrección de absorción. Factor estructura. Ley de Friedel. Síntesis de Fourier

Tema 3- RESOLUCIÓN ESTRUCTURAL

El problema de la fase. Métodos directos. Métodos de Patterson. Métodos de átomos pesados

Tema 4- REFINAMIENTO Y RESULTADOS

Software (Wingx, SHELX, DIRDIF, SIR, PLATON, ORTEP, MERCURY, ENCIFER...). Ficheros cristalográficos. Bases de datos. Sistemas de validación de los resultados

BLOQUE 2

RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Tema 1- RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PULSOS

Introducción. Descripción de un pulso. Fundamento físico. Magnetización macroscópica. RMN de pulsos en la práctica. Transformada de Fourier (FT) en RMN. El espectrofotómetro.

Tema 2- DESPLAZAMIENTO QUÍMICO Y ACOPLAMIENTO *SPIN-SPIN*

Desplazamiento químico e influencias. Acoplamiento y estructura química. Acoplamientos entre núcleos diferentes. Equivalencia magnética y química. Desacoplamiento *spin-spin* homonuclear y heteronuclear.

Tema 3- RELAJACIÓN Y EFECTO NOE

Introducción (relajación transversal y longitudinal). Movimientos moleculares y relajación. Medida de T1 y T2. Fundamentos y aplicaciones del efecto NOE.

Tema 4- RMN DE CARBONO-13 Y TÉCNICAS DE ASIGNACIÓN

Introducción. Constantes de acoplamiento C-H, C-C y C-X. Desacoplamiento. Modulación por la constante de acoplamiento J (APT). Transferencia de polarización

Tema 5- RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE DOS DIMENSIONES

Correlaciones heteronucleares protón-carbono: HMBC, HSQC, HMQC

Correlaciones homonucleares protón-protón: COSY, TOCSY y NOESY

Tema 6- RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DINÁMICA

Concepto. Tipos de procesos. Vida media y anchura de línea. Cálculo de constantes de equilibrio. Estudio de interacciones ligando proteína mediante observación de la transferencia de saturación: Experimentos STD. Experimentos tr-NOESY. Difusión (DOSY)

BLOQUE 3
CÁLCULOS DE MECÁNICA Y DINÁMICA MOLECULAR
Tema 1- ASPECTOS GENERALES DE LA MECÁNICA Y DINÁMICA MOLECULAR
Tema 2- APLICACIÓN AL ANÁLISIS CONFORMACIONAL DE MOLÉCULAS DE INTERÉS BIOLÓGICO
BIBLIOGRAFÍA

Tipo:	Título
Básica	Basic one- and two-dimensional NMR Spectroscopy Absys Biba
Básica	NMR spectroscopy and computer modeling of carbohydrates Absys Biba
Básica	The art of Molecular Dynamics Simulations Absys Biba
Básica	Introduction to Practice of Molecular Simulation Absys Biba
Básica	X-ray structure determination. A practical guide Absys Biba
Básica	Fundamentals of crystallography Absys Biba
Complementaria	200 and more NMR experiments : a practical course Absys Biba
Complementaria	NMR spectroscopy of glycoconjugates Absys Biba
Complementaria	Crystal Structure Analysis: Principles and practice Absys Biba

Recursos en Internet

Herramientas para usuarios de la espectroscopia de RMN

<http://www.nmrdb.org/about/>

Cálculo generalizado de constantes de acoplamiento vecinales

<http://www.stenutz.eu/conf/haasnoot.php>

Predicción de espectros

<http://neural.dq.fct.unl.pt/spinus/>

Curso de determinación estructural utilizando RMN

<http://www.chem.wisc.edu/areas/reich/chem605/index.htm>

Curso de RMN on-line

<https://qshare.queensu.ca/Users01/sauriof/www/webcourse/index.htm>

Tutoriales de dinámica molecular utilizando AMBER

<http://ambermd.org/tutorials/>

GLYCAM web

<http://glycam.org/>

Web de cristalografía del CSIC

<http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/>

Unión Internacional de Cristalografía

<http://www.iucr.org/>
METODOLOGÍA
Modalidades organizativas

Clases teóricas

Seminarios y talleres

Clases prácticas

Estudio y trabajo en grupo

Estudio y trabajo autónomo individual

Métodos de enseñanza

Método expositivo - Lección magistral

Estudio de casos

Resolución de ejercicios y problemas

Aprendizaje basado en problemas

Aprendizaje orientado a proyectos

Aprendizaje cooperativo

ORGANIZACIÓN

Actividades presenciales	Tamaño de grupo	Horas
Clases teóricas	Grande	20,00
Seminarios y talleres	Grande	10,00
Clases prácticas	Grande	5,00
Clases prácticas	Informática	15,00
Total de horas presenciales		50,00
Trabajo autónomo del estudiante	Horas	
Estudio y trabajo en grupo	20,00	
Estudio y trabajo autónomo individual	55,00	
Total de horas de trabajo autónomo	75,00	
Total de horas	125,00	

Comentarios

El Plan de contingencias del curso 2020-21 para la adaptación de la actividad docente a los requerimientos de la situación sanitaria ha sido activado para las asignaturas del segundo semestre y anuales. Puede encontrar información sobre la modalidad de impartición de la asignatura en www.unirioja.es/estudiantes/plan_contingencias/plan_contingencias.shtml o consultar el plan de contingencias completo en www.unirioja.es/servicios/opp/plandoc/2021/plancon.shtml.

EVALUACIÓN

Sistemas de evaluación	Recuperable	No Recup.
Técnicas de observación		10%
Trabajos y proyectos		30%
Pruebas escritas	60%	
Total	100%	

Comentarios

Los sistemas y criterios críticos de evaluación podrán ser modificados, previa actualización de esta guía docente, si fuese precisa su adaptación a la modalidad no presencial o semipresencial como respuesta a las medidas, recomendaciones y/o restricciones aprobadas por las autoridades competentes en función de la situación sanitaria real o prevista.

Prueba escrita: RECUPERABLE (60%):

Consistirá en una prueba al final correspondiente a los bloques 2 y 3 y se evaluará con un 30% cada uno de ellos.

Técnicas de observación: NO RECUPERABLE (10%)

Evaluación continua del trabajo individual realizado por los alumnos durante las clases prácticas de aula, así como la actitud y asistencia a clase.

Trabajos y proyectos: NO RECUPERABLE (30%)

Resolución de problemas y cuestiones propuestas por el profesor y relativas al bloque 1.

Criterios críticos para superar la asignatura

Obtener al menos 35 puntos sobre 100 en el sistema de evaluación correspondiente a la prueba escrita.