23-24

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA

RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE ALTA RESOLUCIÓN

CÓDIGO 21151200

UNED

23-24

RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE ALTA RESOLUCIÓN

CÓDIGO 21151200

ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN
REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA
EQUIPO DOCENTE
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE
COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE
RESULTADOS DE APRENDIZAJE
CONTENIDOS
METODOLOGÍA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA
IGUALDAD DE GÉNERO

Nombre de la asignatura	RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE ALTA RESOLUCIÓN
Código	21151200
Curso académico	2023/2024
Título en que se imparte	MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA
Tipo	CONTENIDOS
Nº ETCS	6
Horas	150.0
Periodo	SEMESTRE 1
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

Para los químicos, la Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es la herramienta más poderosa para la determinación estructural de las moléculas orgánicas y se pueden deducir de forma rápida, datos sobre la estructura e incluso aspectos tridimensionales de las moléculas con cantidades muy pequeñas de muestra. Cuando se aísla un compuesto a partir de un producto natural que posee importantes propiedades terapéuticas, es necesario determinar su estructura antes de proceder al diseño de su síntesis. Siempre que se lleva a cabo una reacción, se ha de determinar si el producto tiene la estructura deseada. Además, la RMN es una técnica que también tiene aplicaciones en otras ramas de la Ciencia como en Biología, Medicina, Ciencias de los materiales o Geología. Aparte de la determinación estructural, la RMN en Bioquímica es una excelente fuente de información acerca de las propiedades dinámicas de las biomoléculas y también permite conocer cómo las moléculas biológicas interaccionan en la naturaleza.

La asignatura “Resonancia Magnética Nuclear de alta resolución” está dirigida fundamentalmente a aquellos estudiantes que pretendan dirigir su actividad profesional hacia la investigación o hacia la industria química, siendo la formación en RMN de gran utilidad para un futuro Doctor. Por otro lado, a nivel académico, esta asignatura proporciona un conjunto de conocimientos muy interesante que permitirá, a los que pretendan dedicarse a la docencia, desarrollar su profesión con mayor competencia.

La asignatura refuerza la comprensión de los conocimientos de Química Orgánica y proporciona los necesarios para poder determinar las estructuras de compuestos orgánicos a partir de sus espectros de Resonancia Magnética Nuclear ya sea en disolución o en estado sólido.

La asignatura se encuadra en el módulo IV "Química Orgánica" del Máster en Ciencia y Tecnología Química y sus contenidos se complementan con los de otras asignaturas también pertenecientes a este Programa: Química Terapéutica; Química Sostenible. Métodos de Síntesis Orgánica de Bajo Impacto Ambiental; Resolución de Racematos en Estereoisómeros; Química Supramolecular; Catálisis en Química Orgánica; y, Bioespectroscopía.

El profesorado que imparte la asignatura tiene experiencia docente reconocida y su actividad investigadora, que se desarrolla en los campos de la química heterocíclica, interacciones no covalentes, enlaces de hidrógeno, Síntesis y Estudio de Nuevos Fármacos y RMN en disolución y estado sólido, ha dado lugar a publicaciones en revistas y comunicaciones en congresos de prestigio internacional.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

Debido a que el texto base que el equipo docente recomienda para el estudio de la asignatura está escrito en inglés, como ocurre con la mayor parte de la bibliografía sobre RMN, es requisito imprescindible que el estudiante sea capaz de comprender textos en inglés científico.
También es necesario conocimientos fundamentales de Química Orgánica, estereoquímica y determinación estructural a nivel básico.

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos	DOLORES SANTA MARIA GUTIERREZ (Coordinador de asignatura)
Correo Electrónico	dsanta@ccia.uned.es
Teléfono	91398-7336
Facultad	FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento	QUÍMICA ORGÁNICA Y BIO-ORGÁNICA

Nombre y Apellidos	CONCEPCION LOPEZ GARCIA
Correo Electrónico	clopez@ccia.uned.es
Teléfono	91398-7327
Facultad	FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento	QUÍMICA ORGÁNICA Y BIO-ORGÁNICA

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

Los estudiantes, ante cualquier tipo de duda que les pueda surgir, ya sea de contenidos o de funcionamiento general de la asignatura, podrán ponerse en contacto con el Equipo Docente a través de las herramientas de comunicación incluidas en el curso virtual, ya sea a través del correo para consultas privadas o bien a través de los Foros para consultas públicas.
También se podrá contactar con el Equipo Docente por vía telefónica en el horario de guardia de la asignatura, excepto períodos de vacaciones y semanas de celebración de las Pruebas Presenciales.

HORARIO DE ATENCIÓN DEL EQUIPO DOCENTE

Profesorado	Horario de atención	Teléfono	Correo electrónico
Concepción López García	Martes 15:00-19:00 h	91 3987327	clopez@ccia.uned.es
Dolores Santa María Gutiérrez (Coordinadora)	Lunes 15:00-19:00 h	91 3987336	dsanta@ccia.uned.es

Dirección Postal del Equipo Docente:
Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica
Urbanización Monte Rozas
Avenida de Esparta s/n
Carretera de Las Rozas al Escorial km 5
28232 Las Rozas-Madrid

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS BÁSICAS

CB6 - 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

CB7 - Que los 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

CB8 - Que los 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

CB9 - Que los 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

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

CG03 - Adquirir capacidad de estudio y autoaprendizaje

CG04 - Desarrollar capacidad creativa y de investigación

CG05 - Adquirir capacidad de organización y de decisión

CG06 - Comprender y manejar sistemáticamente los aspectos más importantes relacionados con un determinado campo de la química

CG07 - Dominar las habilidades y métodos de investigación relacionados con el campo de estudio CG08 - Adquirir la capacidad de detectar carencias en el estado actual de la ciencia y tecnología

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE01 - Desarrollar la habilidad y destreza necesarias en la experimentación química para aplicar sus conocimientos químicos, teóricos y prácticos en el análisis químico

CE02 - Adquirir la capacidad de la utilización de variables que permiten obtener información químico-analítica.

CE03 - Analizar, interpretar y discutir los resultados obtenidos en la experimentación en el ámbito de la química.

CE05 - Ser capaz de transmitir a públicos especializados y no especializados los conocimientos adquiridos en el ámbito de la química.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

No cabe duda alguna que, hoy en día, la técnica espectroscópica, más utilizada en cualquier laboratorio moderno de investigación, es la RMN ya que además de ser la más versátil es la que proporciona mayor información. Con esta asignatura se pretende que el estudiante profundice en los conceptos generales de la RMN y, fundamentalmente, que se familiarice con las técnicas y experimentos más modernos que son empleados en la actualidad para determinar la estructura y conformación de las moléculas orgánicas.

No sólo se hará referencia a la RMN en disolución sino que, debido a los avances conseguidos en las últimas décadas en la RMN de muestras en estado sólido, es también objetivo que el estudiante conozca las técnicas que se utilizan para obtener espectros de sólidos de alta resolución.

Los resultados de aprendizaje, es decir, lo que se espera que el estudiante sepa, comprenda y sea capaz de hacer al finalizar el estudio de los temas de esta asignatura, son:

- Describir los fundamentos físicos que constituyen la base de la RMN.
- Explicar fenómenos y procesos relacionados con la RMN.
- Describir los principios y aplicaciones de los experimentos mono- y bi-dimensionales de la RMN que son empleados en la actualidad para elucidar la estructura y conformación de las moléculas orgánicas.
- Interpretar y analizar espectros de RMN mono- y bi-dimensionales.
- Describir el comportamiento de la magnetización en los experimentos básicos de RMN mediante el modelo vectorial.
- Reconocer el tipo de información, relativa a las características estructurales y/o dinámicas de las sustancias, que proporciona cada una de las técnicas y/o experimentos de RMN.
- Explicar las técnicas que se utilizan para obtener espectros de sólidos de alta resolución.
- Planificar qué experimentos o conjunto de experimentos son necesarios para obtener la información requerida.
- Utilizar tablas y otros datos espectroscópicos para poder calcular valores teóricos de desplazamientos químicos.
- Desarrollar la capacidad de comprensión de la estructura espacial y de las técnicas y experimentos de RMN que se utilizan para determinar la estructura de los compuestos orgánicos.
- Proponer una estructura molecular a partir de los datos espectrales y asignar en dicha estructura cada valor de desplazamiento químico y constante de acoplamiento medido en el espectro.
- Diferenciar entre la RMN de muestras sólidas y la RMN de disolución.
- Discriminar entre diversas estructuras moleculares en función de los datos y/o espectros de RMN.

CONTENIDOS

BLOQUE SOBRE RMN EN DISOLUCIÓN

Este bloque está constituido por 8 temas.

TEMA 1. Fundamentos físicos

TEMA 2. El desplazamiento químico. El acoplamiento espín-espín

TEMA 3. Análisis de un espectro. Espectroscopía de RMN Dinámica (RMND)

TEMA 4. Introducción a la RMN de alta resolución

TEMA 5. Técnicas en una dimensión

TEMA 6. Espectroscopía 2D de correlación a través del enlace químico

TEMA 7. Espectroscopía 2D de resolución de J

TEMA 8. Espectroscopía de correlación a través de espacio: El Efecto Nuclear Overhauser (NOE)

BLOQUE SOBRE RMN DE ALTA RESOLUCIÓN EN ESTADO SÓLIDO

Este bloque está constituido por 4 temas.

TEMA 9. Introducción a la RMN en estado sólido

TEMA 10. RMN de alta resolución de núcleos de espín 1/2

TEMA 11. RMN de núcleos cuadrupolares

TEMA 12. Experimentos Bidimensionales

METODOLOGÍA

La usual en la metodología de la UNED, basada fundamentalmente en una enseñanza a distancia de carácter virtual. Los estudiantes dispondrán de la plataforma Open LMS para el aprendizaje y la colaboración a través de internet. Open LMS proporcionará el adecuado interfaz de interacción entre el estudiante y el equipo docente.
La asignatura no tiene clases presenciales, a excepción de las 10 horas de carácter práctico que se realizarán en los laboratorios de la Facultad en Las Rozas de Madrid y en sesión de un único día.
El material para el estudio de los contenidos teóricos se encuentra recogido en los textos que se indican en el apartado de bibliografía básica. No obstante, el estudiante tendrá a su disposición, a través del curso virtual, una serie de documentos que le servirán, bien para el estudio de determinados temas o apartados (que el equipo docente indicará), o como material complementario. También por medio del curso virtual el equipo docente indicará al estudiante la realización de distintas actividades.
El aprendizaje de esta asignatura conlleva una serie de actividades que se pueden distribuir en dos grupos:

•Actividades relativas al trabajo autónomo del estudiante.

•Actividades relativas a la interacción del estudiante en entornos virtuales.

TRABAJO AUTÓNOMO
Lectura y comprensión de los contenidos teóricos recogidos en el texto base.
Realización de Pruebas de Evaluación Continua.
Realización de las prácticas presenciales e informes de las mismas.
INTERACCIÓN EN ENTORNOS VIRTUALES (CURSO VIRTUAL)
Lectura del material complementario del curso virtual.
Interacción con el Equipo Docente por medio de los foros establecidos para ello y por correo electrónico.
Interacción con otros estudiantes en el foro de estudiantes.
Realización de actividades en línea.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL

Tipo de examen: No hay prueba presencial

CARACTERÍSTICAS DE LA PRUEBA PRESENCIAL Y/O LOS TRABAJOS

Requiere Presencialidad: No

Descripción

El sistema de evaluación se lleva a cabo por medio de las Pruebas de Evaluación Continua descritas en el apartado siguiente.

Criterios de evaluación

Ponderación de la prueba presencial y/o los trabajos en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC?: Si,PEC no presencial

Descripción

Para superar la asignatura será necesaria la realización de una serie de Pruebas de Evaluación Continua, diseñadas y seleccionadas de tal forma que permiten valorar el nivel alcanzado por el estudiante en relación con los objetivos planteados.

Así, la evaluación incluirá la realización de manera satisfactoria de Seis Pruebas de Evaluación Continua (PEC) sobre los distintos temas que constituyen el Programa de la asignatura:

PEC-1: constará de dos partes sobre los contenidos de los temas 1-3: una de preguntas tipo test y otra de preguntas de desarrollo .

PEC-2: constará de dos partes sobre los contenidos de los temas 4-5: una de preguntas tipo test y otra de preguntas de desarrollo .

PEC-3: constará de preguntas de resolución de problemas de los temas 1-5.

PEC-4: constará de dos partes sobre los contenidos de los temas 6-8: una de preguntas tipo test y otra de preguntas de desarrollo .

PEC-5: constará de preguntas de desarrollo de los temas 9-12.

PEC-6: constará de preguntas de resolución de problemas de los temas 6-12.

Criterios de evaluación

Es de carácter obligatorio la entrega de todas las PEC y para superar la asignatura será necesario obtener, al menos, un 5,0 como nota final ponderada entre las seis PEC, no pudiendo aprobar si se saca una calificación inferior a 4,0 (sobre 10) en alguna de las PEC.

Ponderación de la PEC en la nota final: PEC-1: 15% PEC-2: 15% PEC-3: 20% PEC-4: 15% PEC-5: 10% PEC-6: 15%

Fecha aproximada de entrega: PEC-1: 17/11/2023; PEC-2: 10/12/2023; PEC-3: 08/01/2024; PEC-4: 26/01/2024; PEC-5: 09/02/2024; PEC-6: 28/02/2024

Comentarios y observaciones

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? Si,presencial

Descripción

Asistencia a una Jornada Presencial, sesión única de 10 horas, en la Facultad de Ciencias de la UNED en Las Rozas de Madrid para la realización de las prácticas correspondientes (tendrá lugar a mediados de febrero y se anuncia en el curso virtual con la debida antelación). Esta actividad incluye la realización de las prácticas y la entrega de los informes.

Criterios de evaluación

Se evaluará el trabajo realizado en el laboratorio y la presentación y organización de los contenidos de los informes entregados.

La no asistencia a las prácticas presenciales no impide la superación de la asignatura pero al contribuir con un 10% a la calificación final aquellos estudiantes que no las realicen sólo podrán alcanzar la calificación máxima de 9.

Ponderación en la nota final 10%

Fecha aproximada de entrega Tercera semana de febrero

Comentarios y observaciones

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

CONVOCATORIA ORDINARIA (Evaluación continua)

La calificación final será el resultado de la siguiente ponderación de cada una de las actividades de evaluación:

PEC-1: 15%

PEC-2: 15%

PEC-3: 20%

PEC-4: 15%

PEC-5: 10%

PEC-6: 15%

Prácticas Presenciales: 10%

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

Para poder presentarse a la convocatoria extraordinaria de septiembre, deberá ponerse en contacto con el equipo docente al finalizar el semestre en el que se imparte la asignatura. Dependiendo del porcentaje de evaluación continua realizado y superado, podrá continuar con la misma o bien deberá realizar un examen que contendrá preguntas tanto de desarrollo como de problemas.

El estudiante se descargará el examen a través del curso virtual, tendrá una duración de 4 horas y se entregará a través de la plataforma. El día del examen será en la primera quincena de septiembre existiendo la posibilidad de su realización en horario de mañana o tarde. Antes del mes de julio el equipo docente informará del día y hora del examen.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

El texto base que el equipo docente recomienda para el estudio de los temas correspondientes al Bloque sobre RMN en disolución es: "Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy" del autor Horst Friebolin, siendo igual de válidas las ediciones tercera, cuarta y quinta. Por otra parte, para la resolución de algunos problemas, en el curso virtual estará disponible un documento que contiene las tablas necesarias para los cálculos teóricos de desplazamientos químicos.

•Friebolin, Horst: **Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy**. VCH, Fourth, Completely Revised and Updated Edition, 2004. ISBN: 9783527312337. Fifth, Completely Revised and Updated Edition, 2011. ISBN: 9783527327829.

En lo que respecta a los temas que constituyen el Bloque sobre RMN en estado sólido, el equipo docente pondrá en el curso virtual, para poder descargarse, dos artículos generales o reviews.

•S. P. Brown, L. Emsley. **Solid-State NMR. Handbook of Spectroscopy**, Vo-Dinh and Gauglitz (eds), Wiley (2003).

•D. L. Bryce, G. M. Bernard, M. Gee, M. D. Lumsden, K. Eichele, R. E. Wasylishen. **Review: Practical Aspects of Modern Routine Solid-State Multinuclear Magnetic Resonance Spectroscopy: One-Dimensional Experiments**. Can. J. Anal. Sci. Spectrosc. 2001, 46, 46-82.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

LIBROS

•Berger, S.; Braun, S.: **200 and More NMR Experiments: A Practical Course**. Wiley-VCH, 2004. ISBN: 9783527310678.

•Claridge, T. D. W.: ***High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry***, 2ª Edición, Elsevier Science, 2009. ISBN: 9780080548180.

•Duddeck, H.; Dietrich, W.; Tóth, G.: **Elucidación Estructural por RMN**. Edición y traducción en español (Antonio Herrera), Springer-Verlag Ibérica, 2000. ISBN: 8407005053.

•Duer, M. J.: ***Introduction to Solid-State NMR Spectroscopy***. Blackwell Publishers, 2004. ISBN: 9781405109147.

•Giménez Martínez, J. J.; Expósito López, J. M.: **RMN para químicos orgánicos.** Universidad de Almería e Instituto de Estudios Almerienses, 1998. ISBN: 9788482401249. Actualmente ya no se edita.

•Günther, H.: ***NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts, and Applications in Chemistry***. 3ª Edición, Wiley-VCH, 2013. ISBN: 9783527330003.

•Macomber, R. S.: ***A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy***. Wiley, 1998. ISBN: 9780471157366.

•Sanders, J. K. M.; Hunter B. K.: ***Modern NMR Spectroscopy***. 2ª Edición, Oxford University Press, 1993. ISBN: 9780198558125.

ARTÍCULOS CIENTÍFICOS DE RMN EN ESTADO SÓLIDO

•Conte, P.; Spaccini, R.; Piccolo, A. ***State of the art CPMAS 13C-NMR spectroscopy Applied to Natural Organic Matter.*** Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy 2004, 44, 215-223.

•Goldbourt, A.; Madhu, P. K. *Invited Review:* ***Multiple-Quantum Magic-Angle Spinning: High-Resolution Solid State NMR Spectroscopy of Half-Integer Quadrupolar Nuclei.*** Monatshefte für Chemie 2002**,** 133, 1497-1534.

•Laws, D. D.; Bitter, H-M. L.; Jerschow, A. ***Review: Solid-State NMR Spectroscopic Methods in Chemistry***. Angew. Chem. Int. Ed. 2002, *41*, 3096-3129.

•Potrzebowski, M. J. ***Microreview: What High-Resolution Solid-State NMR Spectroscopy Can Offer to Organic Chemists***. Eur. J.Org. Chem. 2003, 1367-1376.

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Además de la bibliografía básica y complementaria, la asignatura se encuentra virtualizada, a través de la plataforma Open LMS, lo que supone, para el estudiante, un recurso más de apoyo al estudio y aprendizaje. El curso virtual, además de facilitar la interacción estudiante-equipo docente, permite acceder a documentos en diferentes formatos (texto, presentaciones powerpoint, artículos científicos, direcciones web, etc.) que podrán ser utilizados bien para el estudio, como material complementario o para la evaluación.

Por otra parte, los estudiantes dispondrán de la infraestructura y equipamientos generales del Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica (laboratorios, equipos, etc.) así como

de los fondos bibliográficos y documentales disponibles en las bibliotecas de la UNED, tanto de la Sede Central como de Centros Asociados. También, a través de la web de la Biblioteca Central de la UNED, el estudiante podrá consultar una amplia colección de recursos electrónicos, tales como Bases de Datos, Revistas Electrónicas y Libros Electrónicos.

Webgrafía

•Curso de RMN por Joseph P. Hornak

•Espectroscopía de RMN de ^{1}H y ^{13}C

•El laboratorio de RMN

•Resonancia Magnética Nuclear (Portal QUIMICAORGANICA.ORG)

•Acrónimos en RMN

•Tabla periódica de los elementos

•Nuclear Magnetic Resonance (wikipedia)

•¿Aprendes RMN conmigo? Hasta la RMN 2D y más allá...

•¿Qué información nos da un espectro de resonancia magnética nuclear (RMN)?

•Fundamentos físicos de la resonancia magnética nuclear (RMN)

•Apantallamiento del núcleo de hidrógeno

•Resonancia magnética nuclear. Acoplamiento espín-espín entre núcleos equivalentes

---

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.