Guía docente de la asignatura

Resonancia Magnética Nuclear de Proteínas (M43/56/4/48)

Fecha de aprobación por la Comisión Académica: 27/06/2025

Máster	Máster Universitario en Ciencias y Tecnologías Químicas, Khemia
MÓDULO	Metodologia e Instrumentación
RAMA	Ciencias
CENTRO RESPONSABLE DEL TÍTULO	Escuela Internacional de Posgrado

Semestre	Anual	**Créditos**	3	**Tipo**	Optativa	**Tipo de enseñanza**	Presencial

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

Se recomienda un conocimiento del inglés científico a nivel de comprensión de lectura y traducción.

Se recomiendan conocimientos fundamentales de Química, Bioquímica y en particular un conocimiento básico de fundamentos de Espectroscopía Molecular y de la estructura molecular de las proteínas.

En el caso de utilizar herramientas de IA para el desarrollo de la asignatura, el estudiante debe adoptar un uso ético y responsable de las mismas. Se deben seguir las recomendaciones contenidas en el documento de "Recomendaciones para el uso de la inteligencia artificial en la UGR" publicado en esta ubicación: https://ceprud.ugr.es/formacion-tic/inteligencia-artificial/recomendaciones-ia#contenidoo

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Máster)

- Fundamentos de la espectroscopia de RMN. El fenómeno de la RMN.
- Desplazamientos químicos. Acoplamiento escalar y dipolar.
- La RMN de pulsos. Instrumentación y aspectos prácticos.
- Relajación. Efecto NOE. Intercambio químico.
- RMN bi-dimensional homonuclear y heteronuclear.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:01
Código seguro de verificación (CSV): 8C80C7AA87A776E99DF60B827E444624 Pág. 1 de 6

- RMN de aminoácidos y proteínas.
- Estrategias de asignación de espectros de 1H-RMN de proteínas.
- Identificación de sistemas de espín. Asignación secuencial.
- Asignación de proteínas grandes mediante RMN heteronuclear multidimensional.
- Predicción de estructura secundaria de proteínas.
- Determinación de la estructura terciaria a partir de restricciones de RMN.

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en 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

COMPETENCIAS BÁSICAS

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en 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.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 8C80C7AA87A776E99DF60B827E444624
06/05/2026 - 11:01
Pág. 2 de 6

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

- Conocer los aspectos teóricos fundamentales de la espectroscopia de RMN.
- Familiarizarse con la instrumentación moderna de RMN y los aspectos prácticos fundamentales de su utilización.
- Adquirir habilidades en el procesamiento e interpretación de espectros reales de RMN de péptidos y proteínas.
- Adquirir la capacidad de abordaje de la asignación de espectros de RMN 2D de péptidos sencillos.
- Aprender los pasos necesarios para la determinación de la estructura de una proteína a partir de los espectros de RMN.
- Familiarizarse en el uso de software de difusión libre para el análisis y asignación de espectros y para la determinación y visualización de estructuras de proteínas.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

TEÓRICO

Tema 1: Fundamentos de la espectroscopia de RMN.

- El fenómeno de la RMN.
- Desplazamientos químicos.
- Acoplamiento escalar y dipolar.
- La RMN de pulsos. Instrumentación y aspectos prácticos.
- Relajación en RMN. Efecto NOE.
- RMN bi-dimensional homonuclear y heteronuclear.

Tema 2: Estrategias de asignación de espectros de 1H-RMN de proteínas.

- RMN de aminoácidos y proteínas.
- Identificación de sistemas de espín.
- Asignación secuencial.

Tema 3: Estrategias de asignación de proteínas grandes mediante RMN heteronuclear multidimensional.

- Experimentos 3D de doble resonancia
- Experimentos de triple resonancia
- Predicción de estructura secundaria de proteínas.

Tema 4: Determinación de la estructura terciaria a partir de restricciones de RMN.

- Restricciones en RMN
- Algoritmos de cálculo de estructuras

PRÁCTICO

SEMINARIOS:

- Seminario de demostración de procesamiento de espectros con software libre NMRPipe.
- Seminario tutorial de asignación de espectros de triple resonancia con software libre

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:01
Código seguro de verificación (CSV): 8C80C7AA87A776E99DF60B827E444624 Pág. 3 de 6

CCPNMR.
- Seminario tutorial de determinación de estructura con software libre ARIA.

PRÁCTICAS:

- Ejercicio de asignación de espectros 2D de angiotensina II.
- Ejercicio de asignación de espectros 2D y 3D de ubiquitina.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- “Nuclear Magnetic Resonance” P.J. Hore. Ed. Oxford University Press (2015).
- “Modern NMR Techniques for Chemistry Research”. Andrew E. Derome, Pergamon Press, Oxford (1987).
- “Fundamentals of Nuclear Magnetic Resonance”. J. W. Hennel & J. Klinowski. Longman Group UK Limited (1993).
- “NMR of macromolecules : a practical approach” Roberts, Gordon C. K. col., IRL Press, Oxford (1995)
- “NMR of proteins” G. M. Clore, A. M. Gronenborn, Macmillan Press (1993)
- “NMR of proteins and nucleic acids” Kurt Wüthrich, John Wiley and Sons, New York, (1986)
- “Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy” Joseph B. Lambert & Eugene P. Mazzola. Ed. Pearson, Prentice Hall. N.Y. (2004).
- “Protein NMR spectroscopy: Principles and practice” John Cavanagh et al. Elsevier Science & Technology (2007).

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- “Biomolecular NMR spectroscopy” Jeremy N.S. Evans, Oxford University Press (1995).
- "Methods in Enzymology Nuclear Magnetic Resonance of Biological Macromolecules, James, Thomas L., Dotsch, Volker., Schmitz, Uli. Burlington : Elsevier Science (2001)
- "Biological NMR". Wand, A. Joshua, editor. Cambridge, Massachusetts : Academic Press (2019)

ENLACES RECOMENDADOS

http: //posgrados.ugr.es

http://prado.ugr.es

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:01
Código seguro de verificación (CSV): 8C80C7AA87A776E99DF60B827E444624 Pág. 4 de 6

La evaluación será continua, con un seguimiento del esfuerzo del alumno y sus progresos a lo largo del curso.

Los criterios evaluación se basarán en:

1. La valoración del interés del alumno que se refleja principalmente en la asistencia regular a las clases (15%)
2. La participación activa en las discusiones que se desarrollan en las clases y el progreso del alumno en los conocimientos impartidos, que podrá valorarse mediante tests y problemas que se van proponiendo a medida que se desarrolla el curso (25%).
3. La corrección y calidad de la resolución de los ejercicios y proyectos propuestos para trabajo personal del alumno. (60%).

Estos componentes en la evaluación se consideran suficientes dado que el número de alumnos se espera que sea reducido y permiten una valoración adecuada del grado de aprovechamiento del alumno de los conocimientos y además dan margen de maniobra para la reorientación del curso en caso de que la formación previa del alumno o el propio desarrollo del programa no se ajusten a los objetivos esperados.

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

El artículo 19 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que los estudiantes que no hayan superado la asignatura en la convocatoria ordinaria dispondrán de una convocatoria extraordinaria. A ella podrán concurrir todos los estudiantes, con independencia de haber seguido o no un proceso de evaluación continua.

De esta forma, el estudiante que no haya realizado la evaluación continua tendrá la posibilidad de obtener el 100% de la calificación mediante la realización de un ejercicio práctico propuesto y supervisado por el profesor para el que se proporcionará el material necesario con antelación y se evaluará el grado de progreso y corrección de los resultados alcanzados.

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

El artículo 8 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que podrán acogerse a la evaluación única final, el estudiante que no pueda cumplir con el método de evaluación continua por causas justificadas.

Para acogerse a la evaluación única final, el estudiante, en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura o en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de las clases, lo solicitará, a través del procedimiento electrónico, a la Coordinación del Máster, quien dará traslado al profesorado correspondiente, alegando y acreditando las razones que le asisten para no poder seguir el sistema de evaluación continua.

La evaluación en tal caso consistiría, igual que en la evaluación extraordinaria, en la realización de un ejercicio práctico propuesto y supervisado por el profesor para el que se proporcionará el material necesario con antelación y se evaluará el grado de progreso y corrección de los resultados alcanzados.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:01
Código seguro de verificación (CSV): 8C80C7AA87A776E99DF60B827E444624 Pág. 5 de 6

http://masteres.ugr.es/biotecnologia; http://masteres.ugr.es/khemia

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): Gestión de servicios y apoyos (https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad).

SOFTWARE LIBRE

NMRpipe (https://www.ibbr.umd.edu/nmrpipe/index.html)

CCPN (Computational Project for NMR) (https://ccpn.ac.uk/)

Swiss PDB vierwer (http://spdbv.vital-it.ch/)

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 8C80C7AA87A776E99DF60B827E444624
06/05/2026 - 11:01
Pág. 6 de 6