

## Máster Interuniversitario en Química Aplicada

### DATOS DE LA ASIGNATURA

Fundamental

Especialidad

**Denominación:** Aplicación de técnicas de resonancia a materiales

**Código:**

**Plan de Estudios:** Master Interuniversitario en Química Aplicada

**Créditos ECTS:** 4

**Cuatrimestre:** 2º

**Horas de trabajo presencial:**

**Horas de trabajo no presencial:**

**Idioma en que se imparte:**

**Plataforma virtual:**

### RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Al finalizar el proceso de enseñanza-aprendizaje, el estudiante deberá ser capaz de:

- Explicar la necesidad de diversos pulsos.
- Calcular la duración de un pulso de 90 grados.
- Calcular tiempos de relajación: T1 y T2.
- Establecer las condiciones para la obtención de un espectro en estado sólido.
- Justificar qué tipo de experimentos (MAS, CP-MAS) es recomendable para un determinado compuesto.

### CONTENIDOS

Espectroscopia 2D de correlación homonuclear: Consideraciones generales. Espectros en modo magnitud vs sensibles a la fase. Secuencia de pulsos. Experimentos homonucleares de correlación escalar: COSY y TOCSY. Experimentos de correlación espacial: NOESY vs ROESY.

Espectroscopia 2D de correlación heteronuclear: Introducción. Sensibilidad. Espectroscopia de detección inversa. Correlaciones a un enlace. Correlación heteronuclear de múltiple cuanta HMQC. Correlación heteronuclear a múltiples enlaces HMBC. Espectroscopía 15N, 31P, 11B.

Experimentos selectivos: Introducción. Pulsos selectivos. Eco de espín selectivo. Doble eco de espín selectivo. Aplicaciones homonucleares: 1DCOSY, 1D-TOCSY, 1D-NOESY, 1D-ROESY.

Experimentos de difusión: Introducción. Conceptos de difusión molecular. Métodos de RMN de medida de la difusión: eco de espín estimulado, uso de gradientes bipolares, eliminación de corrientes eddy. La técnica DOSY. La técnica DOSY-2D. Aplicación de las medidas de difusión: interacciones moleculares, enlace y cálculo de constantes de asociación.

RMN de sólidos: Introducción y origen. T1 y T2 en RMN de sólidos. Interacciones en RMN de sólidos (Interacciones dipolares, Interacciones anisotrópicas,...). Núcleos cuadrupolares. Giro al ángulo mágico, secuencia de pulsos para  $^{13}\text{C}$ ,  $^{-31}\text{P}$ ,  $^{27}\text{Al}$  y  $^{29}\text{Si}$ . RMN de sólidos de alta resolución (HRMAS). Ejemplos del RMN de sólidos.

MRI (Magnetic Resonance Imaging): Base teórica: tiempos de relajación, transferencia de saturación. Principios de la MRI. Secuencia de pulsos: definición, trayectoria del espacio-k, secuencia básica de pulsos. MRI de contraste: ponderación de la densidad de protones, T1 ponderado, T2 ponderado, T2\* ponderado. Agentes de contraste: agentes complejantes de Gadolinio, agentes de óxido de hierro, agentes CEST. Ejemplos de la MRI. Ejemplos prácticos: T1 y T2. MRI.

### OBSERVACIONES

Las competencias específicas de esta materia son:

CEM1: Planificar y desarrollar proyectos y experimentos así como relacionar entre sí distintas especialidades científicas (carácter interdisciplinar).

CEM2: Desarrollar la capacidad de transportar conceptos específicos de un área a otros ámbitos científicos-tecnológicos.

### COMPETENCIAS

#### Competencias Básicas y Generales:

Código	Competencia
CG1	Que los estudiantes sean capaces de participar en equipos multidisciplinares encargados del diseño y desarrollo de proyectos científicos y/o profesionales.
CG3	Que los estudiantes sean capaces de adoptar decisiones de forma eficaz en el desarrollo de su labor profesional y/o investigadora.
CG5	Que los estudiantes sepan interpretar los resultados experimentales a la luz de las teorías aceptadas y emitir hipótesis conforme al método científico y defenderlas de forma argumentada.

#### Competencias Transversales:

Código	Competencia
CT1	Que el estudiante conozca la necesidad de completar su formación científica en idiomas e informática mediante la realización de actividades complementarias
CT2	Que el estudiante sepa utilizar herramientas de información y comunicación que permitan plantear y resolver problemas nuevos dentro de contextos relacionados con su área de estudio.

#### Competencias Específicas:

Código	Competencia
CE1	Analizar las necesidades de información que se plantean en el entorno de la aplicación de diferentes metodologías avanzadas en Química.
CE2	Seleccionar la instrumentación química y recursos informáticos adecuados para el estudio a realizar y aplicar sus conocimientos para utilizarla de manera correcta.
CE3	Adquirir la experiencia investigadora para aplicarla en labores propias de su profesión en el ámbito de la I+D+I.
CE4	Capacidad de aplicar y adaptar los modelos teóricos y las técnicas específicas, tanto a problemas abiertos en su línea de especialización como a problemas provenientes de otros ámbitos, ya sean científicos o técnicos.
CE13	Conocer las técnicas de caracterización estructural y su aplicabilidad a la caracterización de compuestos químicos.
CE14	Capacidad de correlacionar la estructura química con las propiedades de los compuestos químicos.

### ACTIVIDADES FORMATIVAS

Clases teóricas	20	100
Seminarios	5	100
Tutorías en grupo	5	100
Trabajo no presencial	70	0

### METODOLOGÍAS DOCENTES

Actividades presenciales (dirigidas y/o supervisadas)  
Actividades no presenciales

### SISTEMAS DE EVALUACIÓN

Sistema de Evaluación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
Evaluación continua	30	40
Examen final	60	70

### BIBLIOGRAFÍA

- M. J. Duer, "Introduction to Solid State NMR Spectroscopy", Blackwell, Publ. Oxford, 2004
- D. Massiot, "High Resolution Solid State NMR" in "High Magnetic Fields: Applications in Condensed Matter Physics and Spectroscopy", LNP Vol 595, eds C. Berthier, L.P. Lévy, G. Martinez, Springer-Verlag, 2002, ISBN 3-540-43979-X
- Rob Schurko's Introductory Solid State NMR Notes:  
[http://mutuslab.cs.uwindsor.ca/schurko/ssnmr/ssnmr\\_schurko.pdf](http://mutuslab.cs.uwindsor.ca/schurko/ssnmr/ssnmr_schurko.pdf)
- A. Merbach, L. Helm, E. Tóth, "The Chemistry of the Contrast Agents in Medicinal Magnetic Resonance Imaging", Wiley, 2013, ISBN 978-1-119-99176-2
- S. Berger, S. Braun, "200 and More NMR Basic Experiments", Wiley-VCH, 2004, ISBN 978-3527310678
- D. Neuhaus, M.P. Williamson "The Nuclear Overhauser Effect in structural and conformational analysis" 2 Ed. John Wiley & Sons, New York (2000)
- S. P. Brown, H. W. Spiess, Chem. Rev. 101 (2001) 4125.
- M. H. Levitt Spin Dynamics. Basics of Nuclear Magnetic Resonance, J. Wiley and Sons, Ltd., Chichester, 2006.