



### Nombre de la UNIDAD/Técnica: Técnicas Instrumentales / RMN

**Responsable:** Carmen Force Redondo

**Técnico:** Sandra Carralero Arribas

**Teléfono:** 914 887 347

**Email:** [cat.rmn@urjc.es](mailto:cat.rmn@urjc.es)

[carmen.force@urjc.es](mailto:carmen.force@urjc.es)

[sandra.carralero@urjc.es](mailto:sandra.carralero@urjc.es)

### Principios de la Técnica

La Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es una técnica no destructiva que estudia el comportamiento de núcleos atómicos con spin nuclear distinto de cero en presencia de un campo magnético externo ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^31\text{P}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{23}\text{Na}$ ,  $^{27}\text{Al}$ ,  $^{29}\text{Si}$ , etc.) y permite resolver problemas en el campo de investigación química.

En estado líquido esta técnica es muy eficiente y útil para el estudio de la estructura y dinámica de moléculas en disolución, a partir del análisis del espectro de RMN adquirido se obtiene información acerca de la estructura del compuesto problema.

En estado sólido, donde la movilidad de los átomos y moléculas se encuentra muy restringida, la resolución de la técnica es menos resolutive. Esto es debido a la existencia de diferentes orientaciones en los spins nucleares y a otros tipos de interacciones tales como; anisotropía del desplazamiento químico, acoplamiento dipolares (homo y heteronucleares) y acoplamiento cuadrupolares. Los espectros que se obtienen muestran señales más anchas y proporcionan información única acerca de la estructura y la dinámica de los materiales objeto de estudio.

En resumen, la técnica de Resonancia Magnética Nuclear comprende aplicaciones como son: elucidación estructural, determinación conformacional, establecimiento de equilibrios químicos, cinéticas químicas, cuantificación de mezclas, control de calidad, análisis conformacionales y estereoquímicas, entre otros.

### Descripción del Servicio/Ensayos que ofrece

El laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear dispone de tres espectrómetros multinucleares superconductores.

Dos de ellos específicos para compuestos en estado líquido con intensidad de campo 9.4 Teslas ( $^1\text{H}$ , 400 MHz) y 11.7 Teslas ( $^1\text{H}$ , 500 MHz), en estos equipos los ensayos se realizan con muestras solubles en disolventes deuterados.

Además, el laboratorio cuenta con un espectrómetro de RMN de estado sólido donde se realizan estudios en muestras insolubles.

En el Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear se pueden obtener espectros en una dimensión de todos los núcleos susceptibles de ser estudiados por RMN, principalmente  $^1\text{H}$  y  $^{13}\text{C}$  y DEPT. También se realizan espectros en dos dimensiones: COSY, NOESY, HSQC, HMBC, ROESY, TOCSY, DOSY etc. Para muestras en estado sólido experimentos HETCOR, WISE.

Existe también, la posibilidad de realizar ensayos a temperatura variable cuando la investigación así lo requiere.

### Equipos Disponibles

**Espectrómetro AVANCE NEO – 400** de estado líquido. Cuenta con sonda de detección directa i PROB de alta resolución de 5mm y sonda de detección inversa de banda ancha, ambas barren frecuencias entre 15N-31P (162-40.5 MHz). Este equipo cuenta con un sistema de Difusión de Alta potencia con gradientes pulsados que dispone de una sonda de difusión BBI. Tiene incorporado un muestreador Automático Sample Case de 24 muestras lo que permite la agilización en la obtención de resultados. Cuenta además con estación de trabajo y programa TopSpin con más de 700 experimentos, unidad BCU-I para bajar temperatura hasta 0 grados sin necesidad de criogénicos y sistema de baja temperatura con nitrógeno líquido



**Espectrómetro Bruker AVANCE III HD-WB – 400 MHz**, Equipo específico para muestras sólidas con sistema neumático de control de rotación de la muestra hasta 25 kHz. Cuenta con sondas 2,5 mm (162-40.5 MHz)/1H-19F (400-376.5 MHz), 4 mm 31P-13C (162-100 MHz) /19F (376.5 MHz) y 7,5 mm de Varian adaptadas a Bruker (162-40.5MHz) con caja de baja frecuencia para analizar núcleos low gamma (40-10 MHz). Todas con temperatura variable (-80°C-130°C).

**Espectrómetro Bruker Ultrashield 500 Plus** consola Advance III, 500 MHz: Equipo específico para muestras líquidas, con intensidad de campo de 11,74 Teslas. Con Unidad de temperatura hasta 130°C. Sondas BABBI (<sup>1</sup>H, BB) de 5 mm, equipada con gradientes. Y sonda PASEX de detección directa selectiva para 13C (PASEX 10 mm).

