

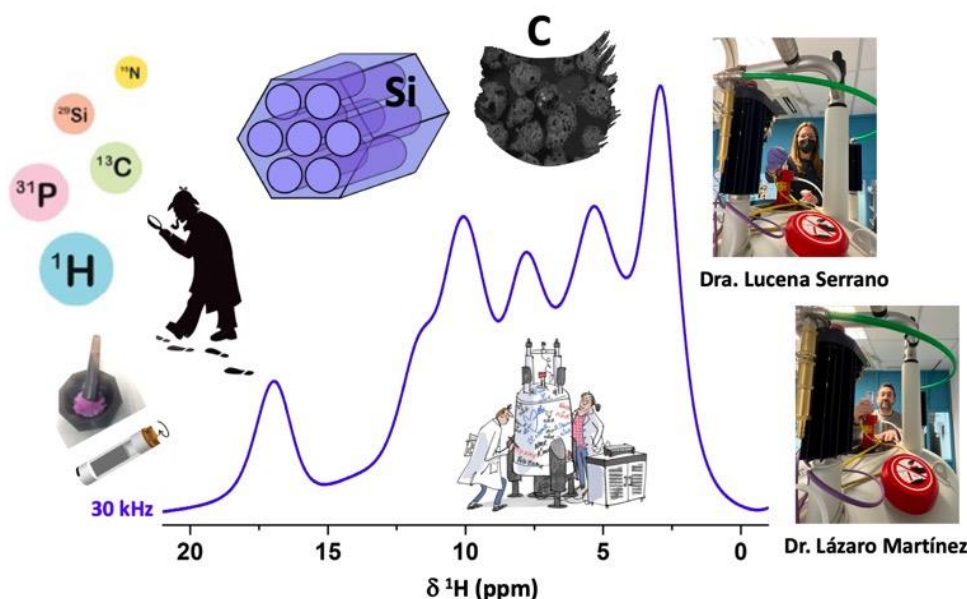
Programa de Doctorado: Química y Tecnologías Químicas. Materiales y Nanotecnología



UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA



Curso: “Resonancia Magnética Nuclear en Sólidos-2022”



El presente curso tiene como objetivo actualizar a profesionales de las más diversas áreas sobre las nuevas técnicas de caracterización a través de la Resonancia Magnética Nuclear (RMN) en estado sólido; abarcando sus numerosas áreas de aplicación. Se abordarán los fundamentos básicos y las aplicaciones de las técnicas actualmente utilizadas en RMN en solución, en estado sólido y de geles, haciendo especial énfasis en compuestos orgánicos, biomoléculas y materiales inorgánicos y/o híbridos. En los talleres de discusión se expondrán diferentes situaciones sobre el quehacer de la disciplina en diversas áreas: química orgánica de productos sintéticos y naturales, catalizadores, materiales poliméricos, compuestos farmacológicos, biomoléculas, entre otras. En las sesiones prácticas se guiará al profesional en la preparación y envasado de muestras, optimización de las condiciones experimentales para la adquisición de espectros de RMN y en el procesamiento de los datos haciendo uso de los softwares apropiados.

- **Fecha:** 2 de marzo de 2022.
- **Horario:** 9:30-13:30 y de 15:00- 19:00. (6 h. teóricas y 2 h. prácticas).
- **Lugar:** Aula M2, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga
- **Aforo limitado.** Tendrán prioridad los alumnos del Programa de Doctorado y los socios de la RSEQ de la Sección Territorial de Málaga y del Grupo Especializado de Química Inorgánica. Se entregará un diploma de asistencia
- **Inscripciones:** Curso gratuito. Escribir a castellon@uma.es

- **Profesorado a cargo del curso:** Dr. Juan Manuel Lázaro Martínez, Investigador Adjunto del CONICET (Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas) y Profesor Asistente de Química Orgánica de la Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina. Dra. Ana Lucena Serrano, Servicio de RMN, SCAI, Universidad de Málaga, Málaga, España.

- **Organización:** Prof. Enrique Rodríguez Castellón. Grupo de Nuevos Materiales Inorgánicos. Departamento de Química Inorgánica, Cristalografía y Mineralogía. Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga.

- **Programa Analítico:**

- ***Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear en Sólidos:***

Fundamentos y generalidades de RMN en solución. Introducción al estado sólido. Estado amorfo y cristalino. Acoplamiento dipolar y escalar. Rotación al ángulo mágico (MAS). Técnicas de polarización cruzada. Anisotropía del desplazamiento químico y factores que la modifican. Técnicas de desacople. Técnicas de adquisición y edición de espectros 1D (^1H estático, ^1H MAS a distintas velocidades de giro, ^1H CRAMPS, ^{13}C CP-MAS, Técnicas de Edición (NQS y CPPI), X ($I = 1/2$) CP-MAS/Polarización directa, ^{27}Al , ^{29}Si , ^{31}P , entre otros núcleos). Espectros 2D (HETCOR, 2D-WISE, BaBa, entre otros) en estado sólido. Aplicaciones a sistemas biológicos, poliméricos, compuestos farmacológicos (polimorfismo) y compuestos inorgánicos (sílices, zeolitas, entre otros). Técnicas de HRMAS (High Resolution Magic Angle Spinning) para el estudio de geles y tejidos. Técnicas avanzadas de caracterización en estado sólido: DNP (Dynamic Nuclear Polarization), fundamentos, equipamiento y aplicaciones.

Adquisición y Procesamiento de espectros de RMN: se brindarán aspectos metodológicos para la preparación de muestra, adquisición y procesamiento de espectros a partir de experiencias prácticas llevadas a cabo en el servicio de RMN en estado sólido, junto a la descripción de los distintos softwares disponibles para tal fin.

Bibliografía:

1. *Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*. Harris R. K. Logman Scientific and Technical, London, 1994.
2. *Solid State NMR of Polymers*. Lon J. Mathias. Plenum Press, New York, 1991.
3. *Multidimensional Solid-State NMR and Polymers*. Schmidt-Rohr K. y Spiess H. W. Academic Press Limited, London, 1996.
4. *Topics in Current Chemistry: New Techniques in Solid-State NMR*. Klinowski Jacek. Springer Berlin Heidelberg New York, 2005.
5. *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*. T. D. W. Claridge; Elsevier, 2004.
6. *Resonancia Magnética Nuclear*. P-J. Hore; Eudeba (edición en español), 2000.
7. *Spectroscopic Methods in Organic Chemistry*. M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh; Georg Thieme Verlag, 1997.
8. *Modern Methods in Solid-state NMR: A Practitioner's Guide*, ed. P. Hodgkinson, The Royal Society of Chemistry, 2018.
9. *Solid State NMR: Basic Principles & Practice Solid State NMR*. David C. Apperley, Robin. K. Harris, and Paul Hodgkinson. Momentum Press, 2012