

CURSO PRÁCTICO AVANZADO DE RMN

1. Conceptos xerais de espectroscopia de RMN e aspectos instrumentais

- 1.1. Orixe. Núcleos activos en RMN. Parámetros observables.
- 1.2. Instrumentación: espectrómetros, sondas.
- 1.3. Conceptos xerais sobre pulsos de radiofrecuencia: calibración e perfís de excitación. Pulsos selectivos.
- 1.4. Caso práctico: calibración de pulsos e bandas de excitación.
- 1.4. Axuste da estabilidade del campo magnético. Calibración da temperatura. Gradientes de campo magnético.

2. Experimentos de RMN dos núcleos activos máis importantes

- 2.1. Procesamento de espectros: aspectos prácticos e de software.
- 2.2. RMN de protón. Constantes de acoplamento: orixe e interpretación. Factores que inflúen nos desprazamentos químicos.
- 2.3. Caso práctico: análises de constantes de acoplamento homonuclear.
- 2.4. RMN de carbono 13. Factores que inflúen nos desprazamentos químicos.
- 2.5. Experimentos de multiplicidade de carbono 13: DEPT.
- 2.6. Experimentos selectivos: 1D-NOE e 1D-TOCSY.
- 2.7. Relaxación: T1 e T2.
- 2.8. Efecto nuclear Overhauser: fundamentos, interpretación e limitacións.
- 2.9. Caso práctico: análise cuantitativa de distancias a partir do NOE.

3. Experimentos de RMN bidimensionais

- 3.1. Introducción á RMN bidimensional. Tipos.
- 3.1. Experimentos homonucleares: COSY, TOCSY, NOESY, ROESY.
- 3.2. Experimentos heteronucleares: HMQC, HSQC, HSQC editado, H2BC, HMBC etc.
- 3.3. Experimentos J-resoltos.
- 3.4. Novos métodos de adquisición e procesado.
- 3.4. Caso práctico: resolución dunha estrutura molecular.
- 3.5. Experimentos para medir constantes de acoplamento heteronucleares: Tipos de experimentos e información práctica obtida. Limitacións.
- 3.6. Uso das constantes de acoplamento heteronucleares. Caso práctico.

4. Experimentos de RMN en macromoléculas

- 4.1. Requisitos da mostra.
- 4.2. Introducción á RMN multidimensional.
- 4.3. Tipos de experimentos. Información obtida. Constantes de acoplamento residuais.
- 4.4. Interacción proteína-ligando: STD, tr-NOE, *Chemical shift mapping*.

4. Outros usos da RMN

- 5.1. Metabolómica: Aspectos xerais. Adquisición e interpretación.
- 5.2. qNMR: Aspectos prácticos. Análise de datos. Caso práctico.
- 5.3. Medida de coeficientes de difusión: DOSY. Aspectos prácticos.