

Autor	Laura Castañar Acedo
Títol	Medida de Acoplamientos Dipolares Residuales en Moléculas Orgánicas
Any d'elaboració	2012
Director del Treball	Dr. Albert Virgili Moya Dr. Teodor Parella Coll
Tipus de treball	Tesina
Titulació	Màster Universitari en Ciència i Tecnologia Químiques
Departament/Centre	Departament de Química/ Facultad de Ciències
Paraules clau	RMN, Constants dipolars residuais, HSQC.
Palabras clave	RMN, Constantes dipolares residuales, HSQC.

Resum

En aquest treball es descriu la preparació i l'ús d'un gel comprimit de polimetilmetacrilat (PMMA) com a mitjà d'alineament anisotròpic necessari per a la mesura de constants d'acoplament dipolars residuais (RDCs) mitjançant espectroscopia de Resonància Magnètica Nuclear (RMN). S'ha estudiat la variació del grau d'ordre del mitjà en funció de la seva compressió axial i s'han implementat diferents versions de l'experiment HSQC amb la intenció de determinar quins mètodes són els més idonis per a la mesura de RDCs en termes de sensibilitat, resolució i precisió. El mètode s'ha aplicat en l'estudi conformacional de l'ibuprofen.

Resumen

En este trabajo se describe la preparación y el uso de un gel comprimido de polimetilmetacrilato (PMMA) como medio de alineamiento anisotrópico necesario para la medida de constantes dipolares residuales (RDCs) mediante espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Se ha estudiado la variación del grado de orden del medio con la compresión axial del mismo y se han puesto a punto diferentes versiones del experimento HSQC con la intención de determinar cuáles son los más idóneos para la medida de los RDCs en términos de sensibilidad, resolución y precisión. Se ha aplicado en la determinación estructural y conformacional del ibuprofeno.