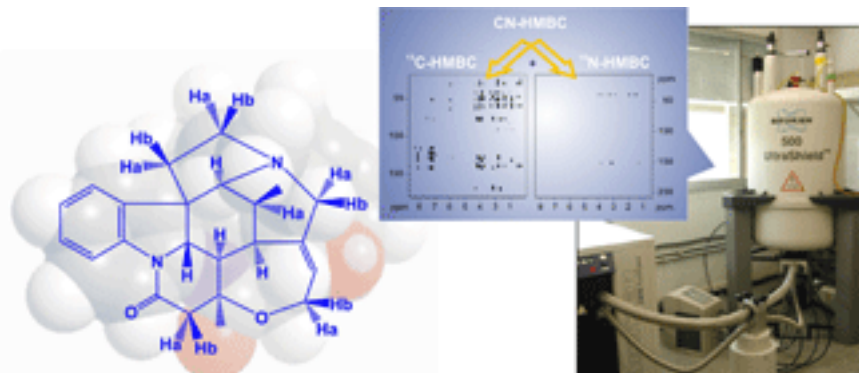


## Una Ressonància Magnètica Nuclear més ràpida i efectiva

07/2007 - **Biologia**. Conèixer la puresa d'un fàrmac, caracteritzar un compost nou, analitzar contaminants atmosfèrics... Aquestes són només algunes de les qüestions que pot resoldre la Ressonància Magnètica Nuclear (RMN). Investigadors del Servei de RMN de la UAB han realitzat una sèrie d'experiments per reduir el temps necessari per obtenir les dades, abaratint a més el sempre elevat cost relacionat amb el temps de mesura en l'espectròmetre.



Com conèixer la puresa d'un fàrmac o com seguir la seva ruta metabòlica; com caracteritzar un compost nou o com diferenciar els seus isòmers; com analitzar contaminants atmosfèrics o com estudiar la degradació d'un colorant en aigües fluvials... Aquestes són només algunes de les qüestions que pot resoldre la Ressonància Magnètica Nuclear (RMN), una tècnica multidisciplinària amb infinites aplicacions, que engloba camps tan diferents com la biomedicina o la geologia i que actualment consisteix en una eina essencial en el treball diari de metges, químics, físics, biotecnòlegs o ambientòlegs entre d'altres.

Durant els últims anys, l'esforç de molts científics en el camp de la RMN es dirigeix cap a el disseny d'experiments que permeten obtenir la informació desitjada en un temps mínim, és el que s'anomena fast-NMR. Aquests experiments no només permeten l'obtenció de dades en un temps molt reduït, amb l'avantatge que això comporta, sinó que permeten l'estudi en profunditat de sistemes i processos amb un temps de vida mitja curt (hores, minuts o inclús segons), difícils fins ara d'abordar des del punt de vista de la RMN.

Seguint aquesta línia el grup de recerca format pels membres del Servei de RMN de la UAB, Drs. Parella, Nolis i Pérez-Trujillo, han desenvolupat recentment una sèrie d'experiments basats en l'adquisició simultània de dades de RMN corresponents a diferents nuclis, *Time Shared (TS) experiments*. El gran avantatge d'aquesta aproximació és que permet fer dos experiments totalment complementaris alhora, reduint en un 50% el temps total d'obtenció de la informació, el que equival a un augment de la sensibilitat per unitat de temps d'un 41%. Aquest fet té importància ja que redueix el temps necessari per obtenir les dades i abarateix el sempre elevat cost relacionat al temps de mesura en l'espectròmetre.

Aquesta metodologia s'ha aplicat a experiments essencials per a la resolució de moltes qüestions químiques, com la caracterització estructural completa de productes naturals i sintètics, la diferenciació de regioisòmers, l'anàlisi de productes de degradació, l'estudi d'equilibris tautomèrics... A mode d'exemple s'han aplicat aquests experiments en l'estudi estructural de tres molècules de famílies diferents: un producte natural, l'alcaloide estriquina (a la figura), un famós fàrmac, el pèptid cíclic ciclosporina, i un complex organometal·lic de Ru(II). Aquesta metodologia pot ser aplicada sobre qualsevol tipus de molècules que continguin nitrogen en la seva estructura i, per tant, pot tenir interessants aplicacions en l'anàlisi estructural i dinàmic de proteïnes i àcids nucleics. A més, es pot extrapolar el seu principi a altres nuclis, en concret a compostos que continguin fluor o fòsfor, la qual cosa ofereix interessants aplicacions en productes d'interès farmacèutic.

Míriam Pérez Trujillo

Servei de Ressonància Magnètica Nuclear Universitat Autònoma de Barcelona

Time-sharing evolution and sensitivity enhancements in 2D HSQC-TOCSY and HSQMBC experiments Pau Nolis, Miriam Pérez and Teodor Parella. *MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY*, 2006, 44, 1031-1036.

CN-HMBC: A powerful NMR technique for the simultaneous detection of long-range  $^1\text{H},^{13}\text{C}$  and  $^1\text{H},^{15}\text{N}$  connectivity. Miriam Pérez-Trujillo, Pau Nolis, and Teodor Parella. *ORGANIC LETTERS*, 2007, 9, 29-32.

Optimizing sensitivity and resolution in time-shared NMR experiments Miriam Pérez-Trujillo, Pau Nolis, Wolfgang Bermel and Teodor Parella. *MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY*, 2007, 45, 325-329.