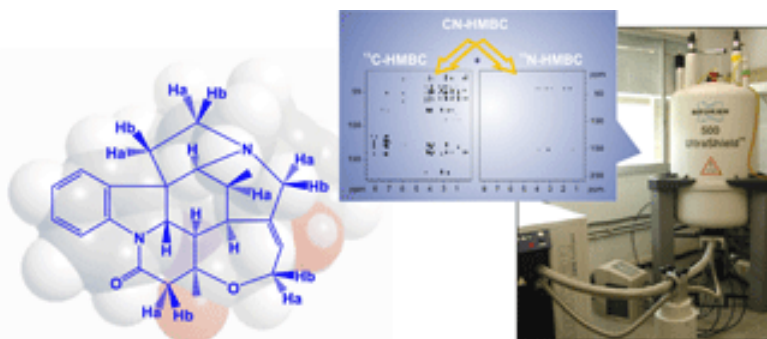


07/2007

Una resonancia magnética nuclear más rápida y efectiva



Conocer la pureza de un fármaco, caracterizar un compuesto nuevo, analizar contaminantes atmosféricos... Éstas son sólo algunas de las cuestiones que puede resolver la Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Investigadores del Servicio de RMN de la UAB han realizado una serie de experimentos para reducir el tiempo necesario para obtener los datos, abaratando además el siempre elevado coste relacionado con el tiempo de medida en el espectrómetro.

¿Cómo conocer la pureza de un fármaco o cómo seguir su ruta metabólica; cómo caracterizar un compuesto nuevo o cómo diferenciar sus isómeros; cómo analizar contaminantes atmosféricos o cómo estudiar la degradación de un colorante en aguas fluviales? Éstas son sólo algunas de las cuestiones que puede resolver la Resonancia Magnética Nuclear (RMN), una técnica multidisciplinar con infinitas aplicaciones, que engloba campos tan diferentes como la biomedicina o la geología y que actualmente consiste en una herramienta esencial en el trabajo diario de médicos, químicos, físicos, biotecnólogos o ambientólogos, entre otros.

Durante los últimos años, el esfuerzo de muchos científicos en el campo de la RMN se dirige hacia el diseño de experimentos que permiten obtener la información deseada en un tiempo mínimo, lo que se conoce como fast-NMR. Estos experimentos no sólo permiten la obtención de datos en un tiempo muy reducido, con la ventaja que esto comporta, sino que permiten el estudio en profundidad de sistemas y procesos con un tiempo de vida medio corto (horas, minutos o incluso segundos), difíciles hasta ahora de abordar desde el punto de vista de la RMN.

Siguiendo esta línea, el grupo de investigación formado por los miembros del Servicio de RMN de la UAB, Drs. Parella, Nolis y Pérez-Trujillo, han desarrollado recientemente una serie de experimentos basados en la adquisición simultánea de datos de RMN correspondientes a diferentes núcleos, *Time Shared (TS) experiments*. La gran ventaja de esta aproximación es que permite hacer dos experimentos totalmente complementarios a la vez, reduciendo en un 50% el tiempo total de obtención de la información, cosa que equivale a un aumento de la sensibilidad por unidad de tiempo de un 41%. Este hecho tiene importancia porque reduce el tiempo necesario para obtener los datos y abarata el siempre elevado coste relacionado con el tiempo de medición en el espectrómetro.

Esta metodología se ha aplicado a experimentos esenciales para la resolución de muchas cuestiones químicas, como la caracterización estructural completa de productos naturales y sintéticos, la diferenciación de regioisómeros, el análisis de productos de degradación, el estudio de equilibrios tautoméricos... A modo de ejemplo, se ha aplicado estos experimentos al estudio estructural de tres moléculas de familias diferentes: un producto natural, el alcaloide estricnina (en la figura), un famoso fármaco, el péptido cíclico ciclosporina, y un complejo organometálico de Ru(II). Esta metodología puede ser aplicada sobre cualquier tipo de molécula que contengan nitrógeno en su estructura y, por tanto, puede tener interesantes aplicaciones en el análisis estructural y dinámico de proteínas y ácidos nucleicos. Además, se puede extrapolar su principio a otros núcleos, en concreto a compuestos que contengan fluor o fósforo, cosa que ofrece interesantes aplicaciones en productos de interés farmacéutico.

Miriam Pérez Trujillo

Servei de Resonància Magnètica Nuclear Universitat Autònoma de Barcelona

miriam.perez@uab.cat

Referencias

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 ^1H , ^{13}C and ^1H , ^{15}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.

[View low-bandwidth version](#)