

# CAI “QUÍMICA”

## CENTRO DE INVESTIGACIÓN DE RAYOS X Y TÉCNICAS AFINES

### DATOS IDENTIFICATIVOS

**Curso Académico:** 2003-2004

**Ubicación:** Facultad de Farmacia

**Director:** Dr. Manuel Gómez Rubio

### I. PERSONAL

No hay mas personal adscrito a este centro de investigación que el propio director.

### II. FINALIDADES Y OBJETIVOS

La existencia del Centro de Investigación de Rayos-X y Técnicas Afines tiene como finalidad dotar a los Departamentos de Ciencias de la Universidad de Alcalá de medios instrumentales que permitan realizar una investigación de alta calidad y competitividad.

Los objetivos planteados son fundamentalmente tres:

- 1- mantener la operatividad de los equipos existentes mediante actualizaciones que impidan su desfase,
- 2- garantizar el acceso a estos equipos al mayor número posible de usuarios, y
- 3- ampliar el número de medios instrumentales para cubrir el mayor número de necesidades posible.

### III. PRESTACIONES

El equipamiento científico existente en el Centro de Apoyo es sumamente específico en cuanto a la preparación de la muestra y al tipo de información que suministra la técnica, siendo muy diverso su campo de aplicabilidad.

#### ***Espectrómetro visible-ultravioleta, “Lambda 18” Perkin-Elmer.***

Las medidas de absorción de radiación ultravioleta o visible encuentran muchas aplicaciones en el análisis cuantitativo y cualitativo. Una de sus ventajas principales es la de crear una alteración mínima en el sistema en estudio (excepto cuando se produce la descomposición fotoquímica).

La absorción de la radiación ultravioleta o visible, se produce por lo general como consecuencia de la excitación de los electrones de enlace, debido a esto, la longitud de onda de los picos de absorción se puede correlacionar con los tipos de enlace existentes en la especie que se estudia. Por tanto, la espectroscopía de absorción resulta valiosa para la identificación de los grupos funcionales en una molécula.

#### ***Espectropolarímetro de dicroísmo circular “Jasco 715”***

La actividad óptica es una medida de la capacidad de ciertas sustancias para hacer girar la luz polarizada en un plano. El término polarimetría puede definirse como el estudio de la rotación de luz polarizada por sustancias transparentes. La dirección y el grado de rotación es útil para el análisis cualitativo y cuantitativo, y para la elucidación de estructuras químicas.

El dicroísmo circular es un método físico que se basa en la interacción de la radiación polarizada circularmente con una especie ópticamente activa y permite obtener información estructural referente a sistemas orgánicos y biológicos, así como a los complejos metal-ligando.

#### ***Surface Plasmon Resonance “Biacore”***

Método óptico que relaciona cambios de índice de refracción con cambios de masa. La aplicación fundamental del equipo es el análisis de la deposición de masa tanto para polímeros como para moléculas biológicas, lo que permite abarcar un amplio intervalo de valores. Este análisis permite obtener información acerca de las interacciones entre moléculas biológicas o entre polímeros.

#### ***Dipolarímetro “DM01 WTW”***

Aparato diseñado para la medida de los momentos dipolares.

#### ***Balanza magnética “Bruker Magnet B-E15”***

La balanza magnética sirve para medir directamente las susceptibilidades magnéticas y calcular posteriormente el momento magnético de una muestra. Este valor permitirá confirmar el comportamiento paramagnético del compuesto a analizar y obtener información estructural difícil de obtener con el resto de las técnicas disponibles.

#### ***Difractómetro de Rayos-X de monocristal “Enraf Nonius CAD4 FR590” y “Bruker-Nonius KappaCCD”***

Desde su descubrimiento en 1912 por von Laue, la difracción de rayos-X ha proporcionado importante información a la ciencia y a la industria. Mucho de lo que se conoce acerca de la disposición de los átomos en materiales cristalinos se ha deducido directamente de los estudios de difracción. Actualmente, el trabajo de difracción de rayos-X es de principal importancia para la elucidación de las estructuras de productos naturales tan complejos como esteroides, vitaminas y antibióticos.

Los equipos disponibles en el Centro de Investigación permiten el estudio de moléculas orgánicas e inorgánicas, y siempre que cumplan con la condición de cristalizar en forma de monocristal.

***Espectrofluorímetro modular de resolución temporal y estado estacionario  
Modelo FS/FL900de Edinburgh Analytical Instruments.***

En modalidad de estado estacionario, con lámpara de xenón, permite la obtención espectros de excitación y emisión y polarización de fluorescencia. En modo dinámico con lámpara de destellos de N<sub>2</sub> o H<sub>2</sub>, mide tiempos de vida de fluorescencia, espectros TRES y de decaimiento de la anisotropía. En ambos casos las medidas se pueden realizar sobre muestras en estado sólido o en disolución. Campos de aplicación: estudios de reacciones fotofísicas y fotoquímicas en estado excitado o fundamental, formación de complejos, procesos de transferencia de energía electrónica inter- o intramolecular, procesos de difusión, rotación molecular, cambios conformacionales, interacciones entre moléculas o con el medio, etc...

***Polarímetro, Perkin-Elmer modelo 341.***

Esta técnica permite distinguir entre sí los isómeros ópticamente activos, a partir de la medida de la rotación óptica de la sustancia. Además, se puede utilizar como criterio de identidad y pureza, inclusive con fines cuantitativos.

Dispone de dos lámparas, una de sodio y otra de mercurio y las medidas pueden ser termostatazadas.

## **VI. INFRAESTRUCTURA ADQUIRIDA EN EL CURSO**

Polarímetro, Perkin-Elmer, modelo 341, Contrato Programa 2004, CAM, 2003,  
Cantidad concedida: 34.000 €

## **VII. PUBLICACIONES Y OTROS RESULTADOS**

Como Centro de Apoyo a la Investigación en el que los usuarios realizan sus propios experimentos, utilizando las técnicas disponibles en el centro, los resultados y publicaciones se encuentran recogidos en las aportaciones que cada uno de los departamentos implicados comunica al vicerrectorado para la elaboración de la Memoria de Investigación anual.