

Resúmenes de los módulos

Métodos de Síntesis y Preparación de Sólidos

María Retuerto Millán

Maria Retuerto <mretuerto@icmm.csic.es>

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid,

Consejo Superior de Investigaciones Científicas,

Cantoblanco, Madrid, España

En este seminario introduciré los diferentes métodos de síntesis utilizados para la preparación de sólidos. Resumiré las características, particularidades y dificultades de la síntesis de compuestos en estado sólido. La utilización de uno u otro método de síntesis depende de muchos factores como son los estados de oxidación de los elementos, la estabilidad de la fase a preparar, la probabilidad de formación de fases binarias o ternarias termodinámicamente muy estables, la estabilidad térmica de los materiales... Por ello es importante conocer y controlar los compuestos que vamos a preparar para saber qué método de síntesis utilizar. Posteriormente pasaré a definir diferentes métodos de síntesis utilizados en función del tipo de compuesto que pretendamos obtener. Entre ellos detallaré diferentes métodos de síntesis como el método cerámico, el método de los citratos o la síntesis bajo presión. Además pondré ejemplos concretos para la preparación de diferentes compuestos como los óxidos con estructura tipo perovskita, pirocloros o compuestos con estructura RM_2O_5 que poseen propiedades muy diversas.

BIBLIOGRAFÍA

GENERALES

- F. A. Cotton, G. Wilkinson, "Advanced Inorganic Chemistry" 4th Ed. John Willey & Sons. NY, 1980
- J.E. Huheey, E.A. Keiter, R.L. Keiter, "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity" 4th Ed. Harper Collins, 1993
- E. Gutierrez Rios, "Química Inorgánica" 2^a Ed. Reverté, 1984
- N. N. Greenwood, A. Earnshaw, "Chemistry of the Elements" 2nd Ed. Butterworth-Heinemann. Oxford, UK, 1997

ESTADO SÓLIDO

- A.R. West, "Solid State Chemistry and Its Applications" 2nd Ed. Wiley, Chichester, 1999
- L. Smart, E. Moore, "Solid State Chemistry", Stanley Thornes Ltd., Cheltenham, 1998
- C. N. R. Rao, J. Gopalakrishnan, "New Directions in Solid State Chemistry" 2nd Ed. Cambridge University Press, Cambridge, 1997
- A. F. Wells, "Structural Inorganic Chemistry" 5th Ed. Oxford University Press, Oxford, UK, 1984

PREPARACIÓN DE MUESTRAS

- P. Hagenmuller "Preparative Methods in Solid State Chemistry" New York, Academic Press, 1972
- J.P. Jolivet, "Metal Oxide Chemistry and Synthesis: From Solution to Solid State" Wiley, John & Sons 1994

CARACTERIZACIÓN

- R. Jenkins, "Introduction to X-Ray Powder Diffractometry. Chemical Analysis: A Series of Monographs on Analytical Chemistry and Its Applications" Wiley, John & Sons 1996
- B. D. Cullity, "Elements of x-Ray Diffraction" 2nd Ed. Addison-Wesley 1978
- G. E. Bacon, "Neutron diffraction" 3rd Ed. Clarendon Press, Oxford 1975

Cristalografía y Orden Magnético por Difracción de Neutrones

Ángel Muñoz Castellanos

Angel Muñoz <amunoz@fis.uc3m.es>

Departamento de Física, Escuela Politécnica Superior

Universidad Carlos III de Madrid

Avda de la Universidad, 30 28911-Leganés, Madrid, España

En este seminario se presentarán los conceptos básicos relacionados con el uso de la técnica de difracción de neutrones para el estudio del orden magnético en materiales magnéticos. Cuando un haz de neutrones incide sobre un material magnético tienen lugar dos tipos de interacciones: una interacción nuclear entre el neutrón y el núcleo de los átomos del material y una interacción magnética entre el momento de spin del neutrón y el momento magnético de los átomos portadores de momento. En el caso de que la experiencia tenga lugar por debajo de la temperatura de orden magnético, T_C , la interacción magnética da lugar a reflexiones magnéticas, a partir de las cuales es posible determinar el orden tridimensional de los momentos magnéticos del material.

El seminario se iniciará con una introducción a los conceptos básicos de cristalografía, lo que facilitará la comprensión de los conceptos relacionados con la difracción de neutrones. Seguidamente se abordará la interacción neutrón-materia, considerando tanto la interacción nuclear como la interacción magnética. Posteriormente se mostrará como se define una estructura magnética en un material, para lo cual se introducirá el concepto de vector de propagación. Se mostrarán los diferentes tipos de estructura magnética, tanto comensurables como incommensurables que se han encontrado en los materiales. A continuación se indicarán los pasos que deben realizarse para, a partir de un diagrama de difracción experimental realizado a partir de un policristal, determinar la estructura magnética del material. En este último punto se hará un especial énfasis en el uso del método de Rietveld, por ser éste un método ampliamente utilizado en el estudio tanto de las estructuras cristalinas como magnéticas, a partir de experiencias de difracción realizadas con muestras policristalinas.

Bibliografía:

1. C. Kittel, "Introducción a la Física del Estado Sólido", Reverté 1993
2. G.E. Bacon. "Neutron Diffraction". Clarendon press, Oxford 1975.
3. Reviews in Mineralogy, Vol. 20, "Modern Powder Diffraction"
D.L. Bish and J.E. Post Editors, Mineralogical Society of America, 1989
4. R.A. Yound, "The Rietveld Method", Ed., International Union of Crystallography, Oxford Science Publications, 1993
5. Yu. A. Izyumov, V.E. Naish and R.P. Ozerov. "Neutron Diffraction of Magnetic Materials", Plenum Publishing Corporation, New York 1991.
6. J. Rossat Mignod. Magnetic structures. Methods of Experimental Physics, Vol. 23, part C, p69-157. Academic Press 1987.

Introducción a la Espectroscopia Mössbauer del ^{57}Fe

Celia Saragovi

Celia Saragovi <saragovi@cnea.gov.ar>

Grupo de Materia Condensada, Gerencia de Investigaciones y Aplicaciones

Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica Buenos Aires, Argentina

El propósito del curso consiste en ofrecer los conocimientos necesarios para el entendimiento y uso de la Espectroscopia Mössbauer con especial énfasis en la espectroscopia del ^{57}Fe . Este isótopo ejemplifica las transiciones nucleares $I=+3/2 \rightarrow I=+1/2$ que son las mas usadas en experiencias con esta espectroscopia.

Se comenzará con una introducción a los fundamentos del Efecto Mössbauer, efecto que llevó al otorgamiento del Premio Nóbel de Física a Rudolf Mössbauer en 1961. Este efecto es la emisión y absorción resonante de rayos gamma sin retroceso por un núcleo ubicado en redes sólidas. Este efecto es usado para realizar la Espectroscopia Mössbauer

La Espectroscopia Mössbauer del ^{57}Fe es una técnica nuclear que provee información acerca del entorno de la sonda Mössbauer (^{57}Fe). Esta técnica resuelve muy directamente las interacciones hiperfinas que son aquellas provocadas por las interacciones entre las distribuciones de cargas nucleares y los potenciales eléctricos creados por las cargas electrónicas y de la red. Estos campos magnéticos y eléctricos provocan la variación de los niveles nucleares que son observadas a través de los tres parámetros hiperfinos IS, QS y H. En primer lugar, el corrimiento isómerico (IS) da información acerca de la naturaleza de las uniones químicas Fe-ligante. En segundo lugar, la separación cuadrupolar (QS) relacionada con la simetría de la distribución de cargas eléctricas alrededor del núcleo del Fe y en tercer lugar, el campo magnético hiperfino H que da información acerca de los campos magnéticos en el núcleo sonda. Se presentarán los fundamentos de las interacciones hiperfinas y de los parámetros.

El conocimiento de los parámetros característicos hiperfinos permite la identificación de fases que contienen Fe, entendiendo por fases no sólo a las cristalográficas sino a fases magnéticas o de orden-desorden. Además, esta técnica permite la cuantificación de las esas fases.

Se enseñaran las bases experimentales de la espectroscopia, las mediciones y análisis de espectros Mössbauer.

Se discutirán algunas aplicaciones ejemplificando conceptos aprendidos.

Conceptos Básicos de la Resonancia de Espín Electrónico (EPR o ESR)

Carlos Fainstein

Carlos Fainstein <cfainstein@gmail.com>

Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro,

Comisión Nacional de Energía Atómica

Bariloche, Argentina.

1. MODELO CLASICO ($S=1/2$)

1.1. Momento magnético y momento angular; torque y energía. Precesión de Larmor. Sistema de Coordenadas Rotante.

1.2. Sistema de momentos magnéticos libres, susceptibilidad magnética. Relajación.

1.3. Resonancia Magnética: Modelo fenomenológico de Bloch. Susceptibilidad compleja. Instrumentación, espectros epr.

2. MODELO CUANTICO ($S>1/2$)

2.1. El átomo de Bohr. El átomo de Hidrógeno. Interacción con campo magnético, efecto Zeeman electrónico y nuclear. Interacción hiperfina.

2.2. Iones en redes cristalinas, espectros epr típicos. El Campo Cristalino: modelo fenomenológico. Espectros epr de polvos.

Comenzando por la descripción de un sistema *paramagnético* constituido por N momentos magnéticos débilmente interactuantes, consideraremos las consecuencias de su interacción con un campo magnético H , fijo y uniforme. Como consecuencia de esta interacción, el sistema magnético resulta estar en condiciones de absorber energía electromagnética, *selectivamente*, dando origen así a un tipo diferente de espectroscopia. Cuando el momento magnético es de origen puramente *electrónico* esta espectroscopia se conoce con el nombre de espectroscopia epr (resonancia electrónica paramagnética).

El modelo de Bloch define los parámetros físicos suficientes para describir el detalle macroscópico del fenómeno de resonancia magnética. Consideraremos sus alcances y limitaciones, resueltas por la introducción de modelos cuánticos.

En el caso de cristales iónicos, espectroscopia epr utiliza los electrones ligados a los iones en la red para estudiar un número de interacciones de carácter magnético y eléctrico, lo que permite determinar una variedad de propiedades electrónicas y nucleares del ion, y también de la red cristalina. En particular discutiremos un modelo del campo cristalino (modelo de cargas puntuales) suficiente para describir el detalle microscópico del mismo.

II. BIBLIOGRAFÍA

1. "The principles of nuclear magnetism". Abragam, A., Oxford, Clarendon, 1961; ISBN: 019852014X

2. "Introduction to magnetic resonance". Carrington, A.; McLachlan, A. D. Nueva York, Harper & Row, 1967

3. "Point Charge Calculations of Energy Levels of Magnetic Ions in Crystalline

Electric Fields.” Hutchings, M.T.. Solid State Physics: Advances in Research and Applications. Volume 16, 1964. Editors: Frederick Seitz and David Turnbull. Academic Press, 1965. Library of Congress Catalog Card Number 55012299.

Magneto Resistencia y Spintrónica

Pablo Levy

Pablo Levy <levy@cnea.gov.ar>

Departamento de Física

Centro Atómico Constituyentes

Comisión Nacional de Energía Atómica

Buenos Aires, Argentina

Electrónica y Spintrónica.

Magneto resistencia en metales, multi-capas de metales, óxidos, junturas, válvulas de spin.

Óxidos de manganeso con valencia mixta: estructura cristalina y electrónica.

Mecanismos acoplamiento: Doble Intercambio. Superintercambio.

Orden de largo alcance: Ferromagnetismo, Orden de Carga, Orden de Orbitales.

Acople entre propiedades eléctricas y magnéticas.

Diagramas de Fase para LaSrMnO, LaCaMnO, PrCaMnO.

Sistemas inhomogéneos artificiales: motivación.

Separación intrínseca de fases: descripción y propiedades.

Magneto resistencia colosal y memoria no volátil.

Física de dispositivos: configuraciones paralela y perpendicular al plano

Métodos de crecimiento "físicos". Litografías.

Junturas metal - óxidos: crecimiento y descripción eléctrica.

Bibliografía:

- "Nanoscale Phase Separation and Colossal Magnetoresistance", E. Dagotto, Springer-Verlag, Berlin, (2002).

- "Oxide Spintronics", Manuel Bibes and Agnès Barthélémy, IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES, VOL. 54, NO. 5, (2007) 1003

- "CMR manganites: physics, thin films and devices", A. Haghiri-Gosnet and J.P. Renard, J. Phys. D: Appl. Phys. 36 (2003) R127-R150.

- "Complexity in Strongly Correlated Electronic Systems", Elbio Dagotto, SCIENCE VOL 309 8 (2005) 257

-Y. Tokura, N. Nagaosa, Science 288, 462 (2000).

- M. Salamon, M. Jaime, Rev. Mod. Phys. 73, 583 (2001).

- N. Mathur, P. Littlewood, Phys. Today 56, 26 (2003).

- K. H. Ahn, T. Lookman, A. R. Bishop, Nature 428, 401(2004).

Magnetismo en Sistemas Nanométricos: Películas Delgadas y Nanopartículas

Roberto D. Zysler

Roberto D. Zysler <zysler@cab.cnea.gov.ar>

Laboratorio Resonancias Magnéticas

Centro Atómico Bariloche – Instituto Balseiro

CNEA – UNCuyo – CONICET

La reducción de tamaño de los materiales magnéticos a tamaños del orden del nanómetro provoca la aparición de nuevas propiedades magnéticas que no son observadas en los materiales masivos. Estas nuevas propiedades son las que son utilizadas en distintas aplicaciones tecnológicas que van desde el almacenamiento magnético de la información a los materiales magnéticos para ser utilizados en imanes o núcleos de bobinas. Dado este impacto tecnológico, el estudio de estos materiales ha tenido un gran crecimiento en los últimos años.

En esta serie de seminarios se presentará una introducción al magnetismo en la nanoescala. Ello implica el estudio de las propiedades magnéticas de películas delgadas y nanopartículas magnéticas por medio de la magnetización, la susceptibilidad magnética y mediciones de resonancia ferromagnética. Se verá la influencia de la anisotropía magnética en la magnetización resultante en estos sistemas. Se discutirán brevemente algunos resultados y modelos de orden magnético en sistemas reales y algunas aplicaciones de estos materiales.

Bibliografía:

- B. D. Cullity, *Introduction to Magnetic Materials*.
- Chikazumi, *Physics of Magnetism*.
- C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley, 1996.
- J.L. Dormann, D. Fiorani, E. Tronc, *Magnetic Relaxation in Fine-Particle Systems*, *Advances in Chemical Physics*, **98**, 283-494 (1997) y sus referencias.

Propiedades magnéticas de Superconductores

Hernán Pastoriza

Hernan Pastoriza <hernan@cab.cnea.gov.ar>

Laboratorio de Bajas Temperaturas

Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, Bariloche, Argentina.

La superconductividad es una fase termodinámica presente a bajas temperaturas en algunos materiales la cual se caracteriza por ser un estado de resistencia eléctrica nula y diamagnético. Las variables termodinámicas externas que determinan su comportamiento son el campo magnético y la temperatura. En el diagrama de fases existe una amplia zona donde el campo magnético penetra dentro del material superconductor en forma “tubos” de campo magnético, denominados vórtices, donde el flujo está cuantificado.

La respuesta electrodinámica de un superconductor está dominada por la dinámica de estos entes y es particularmente relevante ya que su movimiento produce disipación y por lo tanto es un factor limitante en las posibles aplicaciones de los superconductores.

El descubrimiento de los superconductores de alta temperatura crítica ha puesto expuesto la importancia del estudio de la física vórtices ya que particularidades propias de estos materiales y las altas temperaturas potencian el efecto de las fluctuaciones y el desorden.

En estos seminarios se introducirán los conceptos fundamentales y relevantes para la descripción fenomenológica de estos sistemas. Presentaremos las distintas fases que pueden existir dependiendo del grado y tipo de desorden y la anisotropía del sistema. Ahondaremos en los distintos tipos de experimentos que se han realizado para las caracterizaciones de estos estados termodinámicos y sus transiciones.

Bibliografía:

- M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, 2^{da} ed., New York , Wiley ,1996, ISBN: 0070648786
- G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, y V. M. Vinokur, *Vortices in high-temperature superconductors*, Review of Modern Physics, Volume 66 (4), pages: 1125-1388 (1994)

Magnetic Properties of the Matter Studied by X-rays

Magnetic Circular Dichroism

Flavio Garcia

Flavio Garcia <fgarcia@lnls.br>

Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón

Campinas, SP, Brasil

Two fascinating subjects will be put together in these lectures: the magnetism of the matter and some of the X-rays absorption spectroscopy experimental techniques available in synchrotrons radiation sources, namely the X-rays magnetic circular dichroism (XMCD) spectroscopy. The first of these has captured the imagination of humankind for 3000 years; while the XMCD is a relatively new technique, which allows the quantitative measurement of magnetic moments. The main strengths of this technique are the independent determination of the spin and orbital magnetic moments and the elemental specificity.

Since of Dispersive X-ray Absorption Spectroscopy (DXAS) beam line opening for external users, in the first semester of 2003, it has been used for scientists from several fields of chemical and physics disciplines, namely magnetism, superconductivity, catalysis and electrical-chemistries. The great advantage of this system, compared to the conventional XAS beamlines, is that it allows measurements of a complete XAS spectrum without any mechanical motion, in a few milliseconds. This is specially suited for in situ XANES and XMCD studies, which require good accuracy and high stability. Fast kinetics, like those occurring in a catalytic or electrochemical reaction, can be tracked by in-situ experiments. The beamline opens the way to the high-pressure community which are used to diamond anvil cells in their studies.

The scope of these lectures will be a succinct presentation of the magnetism properties of the magnetic materials and some interesting magnetic phenomena; also, it will present the background of the XMCD as well as some examples that will display the strength of XMCD method, and show that XMCD spectroscopy is an extremely powerful tool in the analyzing complex magnetic systems. Finally, it will present an overview of the research carried at DXAS beamline, with especial attention to the high pressure opportunities. My talks will be organized as followed: 1) Background of the magnetic materials; 2) Some interesting magnetic systems; 3) Conventional magnetometric techniques; 4) Background of the synchrotron radiation and XAS; 5) introduction on the XMCD; 6) experimental details of the DXAS beamline and others XMCD facilities at LNLS; 7) Some examples of the XMCD experiments; 8) The others research possibilities at DXAS beamline (kinetics XAS and in situ studies under hydrostatic pressure).

References

F. Garcia, PhD thesis, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 2000.

A.P.Guimarães, Magnetism and Magnetic Resonance in Solids, Wiley Interscience Publication.

N. M Souza-Neto, Journal of Synchrotron Radiation (Vol. 12, pp: 168, 2005).

J. C. Cezar, PhD thesis, UNICAMP, 2002.

Resonancia Magnética Nuclear en Sólidos:

Principios Básicos y Aplicaciones

Gustavo Alberto Monti

Gustavo Alberto Monti <monti@famaf.unc.edu.ar, gamonti@gmail.com>

Laboratorio Nacional de Investigación y Servicios de Resonancia Magnética en Sólidos.

Facultad de Matemática, Astronomía y Física

Universidad Nacional de Córdoba.

Córdoba, Argentina

En sus inicios la Resonancia Magnética Nuclear (RMN) en compuestos sólidos, se limitó al estudio de efectos de relajación y formas de líneas de espines nucleares (principalmente protones) en líneas anchas (wide line NMR) [1]. Durante los últimos 20 años hubo un considerable interés en la aplicación de técnicas de alta resolución en RMN de sólidos, para obtener información de naturaleza química de una amplia variedad de materiales sólidos.

En esta presentación introduciremos los conceptos de la RMN en sólidos [2,3] y la aplicación de esta a compuestos de interés farmacéutico y polímeros principalmente.

Describiremos las interacciones internas y externas al sistema molecular que son de interés en RMN de sólidos, y que dan lugar a la pérdida de resolución en los espectros de sólidos comparados con los de líquidos. Mostraremos las principales técnicas de premedicación de estas interacciones las cuales permiten obtener espectros de altas resolución en sólidos.

Introduciremos los conceptos de relajación del sistema de espines nucleares y de difusión de espín.

En base a esos conceptos, mostraremos como la RMN brinda información de la dinámica y la estructura de compuestos sólidos.

En general la RMN es una buena técnica de diagnóstico que provee información de naturaleza química en sólidos, especialmente de aquellos materiales que son amorfos, haciendo poco útil el uso de técnicas de difracción. Trataremos también, en esta discusión, de presentar la RMN en sólidos como una técnica complementaria a las técnicas de difracción en la determinación de estructuras cristalinas. Esto es lo que se conoce como cristalografía por RMN [4], siendo actualmente un tópico emergente y en evaluación.

Daremos ejemplos de aplicación de la técnica de RMN en la determinación de polimorfismos, transformaciones entre polimorfos, cuantificación, determinación de estructura, puente hidrógeno. La gran mayoría de estos ejemplos serán mostrados en drogas de interés farmacéutico [5] y polímeros [6,7].

Finalmente mostraremos la instrumentación específica a la técnica de RMN en sólidos.

[1] A. Abragam, *The principles of nuclear magnetism*, Claredon Press, Oxford (reprinted edition 1983).

[2] R. K. Harris, “*Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy: A Physicochemical View*”, ISBN 0-582-44653-8, Ch. 6, Longman Scientific and Technical, Harlow (1994).

[3] *Solid State NMR Spectroscopy*, edited by Melinda J. Duer, Blackwell Science Ltd., Oxford (2002).

[4] Robin K. Harris, *Solid-State NMR and Polymorphism. Diversity amidst Similarity: A Multidisciplinary Approach to Polymorphs, Solvates and Phase Relationships*. 35th International School of Crystallography. (Erice-Italy. 2004).

[5] David E. Bugay, *Advanced Drug Delivery Reviews* **48**, 43-65 (2001).

[6] K. Schmidt-Rohr and H. W. Spiess, *Multidimensional Solid-State NMR and Polymers*, Academic Press Limited, London (2nd printing 1996).

[7] *Solid State NMR of Polymers*, edited by Lon J. Mathias, Plenum Press, New York (1991).

Ressonância Magnética Nuclear e Investigação de Estruturas Moleculares

Ana Carolina Zeri,

Ana Carolina de Mattos Zeri <aczeri@lnls.br>

Centro de Biotecnologia Molecular,

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, Campinas, SP, Brasil

Neste curso apresentaremos uma introdução à técnica de Ressonância Magnética Nuclear e suas aplicações ao estudo de estruturas de macromoléculas, com foco em proteínas. Material introdutório pode ser encontrado em links postados no site WWW.connotea.org/user/anacarolinazeri e principalmente no site <http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/>

Aula 1

1. Princípios da técnica de Espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear
2. Aplicações da Ressonância Magnética Nuclear ao estudo de materiais e em biologia
3. Estudo de estruturas de proteínas

Aulas 2 a 4

1. revisão de métodos utilizados para determinação de estruturas, vantagens e desvantagens de RMN, RMN de proteínas no estado sólido
 - 1a. cristalografia por Xray, necessidade de obtenção de cristais, condições extremas de tampão e aditivos, vantagens
 - 1b. rmn, amostras em condições fisiológicas, possibilidade de estudar dinamica e interações, aplicações a proteínas de membrana.
 - 1c. estratégia: assinalamento de ressonâncias e cálculo de distancias interatômicas, medidas de tempos de relaxação, titulação de ligantes
2. preparo de amostras para rmn de proteínas em solução
 - 2a. proteínas recombinantes, marcação isotópica, protocolos
 - 2b. novas metodologias: produção de proteínas em sistemas "cell-free", seleção de tampões
3. assinalamento de resíduos por RMN homonuclear, experimentos e limitações
 - 3a. COSY, TOCSY, NOESY, o método Wuthrich inicial
padrões de ressonâncias para cada tipo de aminoácido, princípio do assinalamento sequencial
4. assinalamento de resíduos por RMN heteronuclear, principais experimentos e

estratégias para análise de dados

4a. HSQC, HNCA, HNCACB, HNCO, CBCACONH, etc - experimentos out-and-back,

4b. experimentos com dimensionalidade reduzida, GFT-NMR

4c. exemplo de conjunto de experimentos para assinalamento, programas para análise de dados, exemplo com Xeasy e NMRView/Smartnotebook

5. técnicas para determinação de estruturas e investigação dinâmica de macromoléculas

5a. NOESY simultâneo em ^{13}C e ^{15}N e cálculo de estruturas, procedimento para obter assinalamentos e calcular distâncias interatômicas em proteínas

5b. NOESY peak-picking e integração, e cálculo de estruturas com programas semi-automáticos: AutoStructure e Cyana

5c. estratégias para estudo de dinâmica e interações entre proteínas

5d. estratégias para estudo de proteínas maiores que 30kDa: TROSY, deuteração, campos altos, sondas criogênicas