

Resolución Consejo Directivo

Número:

Referencia: EX-2023-04754991- -UBA-DMESA#FCEN - POSTGRADO - Sesión
06/11/2023

VISTO:

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado Procesamiento de Datos en Resonancia Magnética Nuclear (DOC8800754) para el 2024,

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado,

lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada el día 06 de noviembre de 2023,

en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD
DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES**

R E S U E L V E:

ARTÍCULO 1º: Aprobar el dictado del curso de posgrado Procesamiento de Datos en Resonancia Magnética Nuclear (DOC8800754) de 30 horas de duración, que será dictado por Dra. Rosana I. Misico, con la colaboración del Dr. Cristian R. Rodríguez.

ARTÍCULO 2º: Aprobar el programa del curso de posgrado Procesamiento de Datos en Resonancia Magnética Nuclear (DOC8800754) que como anexo forma parte de la presente Resolución, para su dictado del 19/02/2024 al 01/03/2024.

ARTÍCULO 3º: Aprobar un puntaje máximo de un (1) punto para la Carrera del Doctorado.

ARTÍCULO 4º: Establecer un arancel de CATEGORÍA 2 estableciendo que dicho arancel estará sujeto a los descuentos y exenciones estipulados mediante la Resolución CD N° 1072/19. Disponer que los fondos recaudados ingresen en la cuenta presupuestaria habilitada para tal fin, y sean utilizados de acuerdo a la Resolución 072/03

ARTÍCULO 5º: Disponer que, de no mediar modificaciones en el programa, la carga horaria y el arancel, el presente Curso de Posgrado tendrá una vigencia de cinco (5) años a partir de la fecha de la presente Resolución.

ARTÍCULO 6º: Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, a la Dirección de Estudiantes y Graduados, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Secretaría de Posgrado con copia del programa incluida. Cumplido, pase QORGANICA#FCEN y resérvese.

ANEXO

PROGRAMA

Módulo 1

El experimento de RMN. Excitación con pulsos de RF. Detección de la señal: condición de Nyquist, sobre muestreo y filtrado digital.

Módulo 2

Procesamiento de datos. Transformación de Fourier, métodos “no-Fourier” de reconstrucción, predicción lineal,

funciones de pesado y apodización. Corrección de fase.

Módulo 3

Experimentos de RMN 1D y 2D utilizados frecuentemente. Descripción breve del experimento y sus antecedentes teóricos. Representación gráfica del esquema de pulsos. Uso del experimento para resolver problemas estructurales, ventajas y limitaciones. Ejemplos.

Experimentos ^1H

RMN ^1H de un pulso, Desacoplamiento selectivo ^1H { ^1H }, Experimento de espectroscopía de correlación total (TOCSY), ^1H { ^1H } Nuclear Overhauser (NOE)

Experimentos de ^{13}C

Experimento de ^{13}C , DEPT ^{13}C , ^{13}C T1 Inversión-Recuperación.

Experimentos 2D Homonucleares $^1\text{H}/^1\text{H}$

COSY- $^1\text{H}/^1\text{H}$, TOCSY- $^1\text{H}/^1\text{H}$, NOESY- $^1\text{H}/^1\text{H}$, ROESY- $^1\text{H}/^1\text{H}$, J-Resolved $^1\text{H}/^1\text{H}$

Experimentos 2D Heteronucleares $^1\text{H}/^{13}\text{C}$

HMQC, HSQC, HMBC

Módulo 4

Introducción a los programas de procesamiento de datos. Programas disponibles para el procesado de espectros de RMN: Usos, licencias y requerimientos técnicos. Instalación del programa.

Preprocesamiento de datos. Principales funciones, menús y barras de herramientas. Administración de archivos: Apertura, cierre, importación y exportación de archivos.

Módulo 5

Visualización e impresión de espectros RMN 1D. Menú y comandos principales para la visualización de espectros 1D. Pasos básicos de procesamiento con espectros 1D: Calibración. Listado de picos. Integración: automática y manual. Análisis de espectros simples: constantes de acoplamiento y multipletes. Diseño e impresión del espectro: límites espectrales, listado de picos, intensidades, niveles de los contornos, tamaño del gráfico, escalas, colores y gráficos adicionales, zonas de impresión e impresión final.

Módulo 6

Visualización e impresión de espectros RMN 2D. Menú y comandos principales para la visualización de espectros 2D. Niveles de colores. Procesado básico de espectros de 2D: Calibración, listado de picos, integración manual. Diseño e impresión del espectro: límites espectrales, listado de picos, intensidades, niveles de los contornos, tamaño del gráfico, escalas, colores, gráficos adicionales, vistas previas, zonas de impresión, impresión final.

Módulo 7

Procesamiento de espectros de 1D avanzado. Parámetros TD y SI, corrección de fase de espectros 1D. Deconvolución.

Procesamiento de espectros de 2D avanzado. Corrección DC. Apodización. Transformada de Fourier F2. Transformada de Fourier F1. Espectros en modo magnitud.

Funciones de pesado, filtrado, predicción lineal en la dimensión F1, corrección de fase, eliminación de ruido en t1y simetrización en espectros de 2D. Proyecciones.

Bibliografía

-NMR Spectroscopy: Processing Strategies. 2nd Updated Ed. Peter Bigler. Wiley-VCH Verlag GmbH, 2000.

-NMR Spectroscopy: data Acquisition. Christian Schorn. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2002.

-High Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. 2nd Ed., T. D. W. Claridge Ed.. Elsevier, 2009.

-Solving problems with NMR Spectroscopy. 2nd Ed. Atta-ur-Rahman, Muhammad I. Choudhary, Atia-tul- Wahab. Elsevier Inc, 2016.

-Practical NMR Spectroscopy Laboratory Guide: Using Bruker Spectrometers. John S. Harwood & Huaping Mo. Elsevier Inc. 2016.