



1821 Universidad de Buenos Aires

Resolución Consejo Directivo

Número:

Referencia: EX-2023-07155395- -UBA-DMESA#FCEN - POSTGRADO - Sesión
13/10/2025

VISTO:

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Resonancia Magnética Nuclear en Química Orgánica. Teoría y Aplicaciones** (DOC8800604) para el año 2026,

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado,

lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada el día 13 de octubre de 2025,

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

RESUELVE:

ARTÍCULO 1°: Aprobar el dictado del curso de posgrado **Resonancia Magnética Nuclear en Química Orgánica. Teoría y Aplicaciones** (DOC8800604) de 80 horas y 8 semanas de duración, que será dictado por el Dr. Javier Alberto Ramírez.

ARTÍCULO 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Resonancia Magnética Nuclear en Química Orgánica. Teoría y Aplicaciones** (DOC8800604) que como anexo forma parte de la presente Resolución, para su dictado durante 2026.

ARTÍCULO 3°: Aprobar un puntaje máximo de tres (3) puntos para la Carrera de Doctorado.

ARTÍCULO 4°: Establecer un arancel de **CATEGORÍA BAJA**, estableciendo que dicho arancel estará sujeto a los descuentos y exenciones estipulados mediante la Resolución CD N.º 1072/19. Disponer que los fondos recaudados ingresen en la cuenta presupuestaria habilitada para tal fin, y sean utilizados de acuerdo a la Resolución 072/0.

ARTÍCULO 5°: 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 6°: 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 a QORGANICA#FCEN y resérvese.

ANEXO

Resonancia Magnética Nuclear en Química Orgánica. Teoría y Aplicaciones

PROGRAMA

Objetivos

Ampliar y profundizar los principios de la resonancia magnética nuclear (RMN) aplicados a la química orgánica.

Comprender los fundamentos teóricos y experimentales de la técnica.

Conocer y aplicar las principales metodologías de RMN uni- y multidimensional para la elucidación estructural de moléculas orgánicas.

Integrar las herramientas de RMN en problemas de estereoquímica, dinámica molecular y química bioorgánica.

Programa

Unidad 1. Introducción a la RMN

Spin nuclear e interacción con un campo magnético. Modelo vectorial y sus limitaciones. Precesión y frecuencia de Larmor. Magnetización microscópica y macroscópica. Aspectos básicos de la señal de RMN y principios de detección.

Unidad 2. Espectrómetro. Introducción al procesamiento de datos

Componentes de un espectrómetro de RMN. Excitación con pulsos de radiofrecuencia. Dominios de tiempo y frecuencia. Condición de Nyquist, sobremuestreo y filtrado digital. Procesamiento de datos: transformada de Fourier, funciones de pesado y apodización, predicción lineal y corrección de fase. Métodos alternativos de reconstrucción de datos: procedimientos no-Fourier, entropía máxima y covarianza.

Unidad 3. Tratamiento cuántico del spin y pulsos

Representación matricial de autofunciones de espín y operadores asociados. Operadores de transformación y rotación. Descripción de sistemas mediante matrices densidad. Poblaciones y coherencias. Operadores de pulso y evolución de la magnetización observable. Pulsos compuestos, pulsos suaves y adiabáticos. Excitación selectiva.

Unidad 4. Experimentos de RMN unidimensional

El experimento de un pulso: optimización de la sensibilidad y mediciones cuantitativas. Desacoplamiento homonuclear y heteronuclear. Secuencias de pulsos básicas: inversión-recuperación, ecos de spin, ecos modulados por J y experimento APT. Spin-lock y relajación en el sistema rotante. Supresión de la señal de solvente mediante presaturación, secuencias binomiales y métodos basados en gradientes de campo pulsados como WATERGATE.

Unidad 5. Transferencia de polarización y coherencias

Inversión selectiva de poblaciones. Transferencia selectiva y no selectiva de polarización: secuencias INEPT e INEPT reenfoque, secuencia DEPT. Coherencias cuánticas múltiples: definición de órdenes de coherencia, generación y selección mediante pulsos de RF y gradientes. Experimentos INADEQUATE y ADEQUATE. Caminos de transferencia de coherencia.

Unidad 6. Técnicas multidimensionales

Principios de RMN 2D y 3D. Separación de información en distintas dimensiones de frecuencia. Codificación en la dimensión indirecta. Transformada de Fourier en dos dimensiones. Detección en cuadratura en F1, espectros en magnitud y sensibles a la fase. Procesamiento de datos en 2D: funciones de pesado, predicción lineal y supresión de ruido t1. Muestreo no uniforme (NUS). Métodos alternativos de procesamiento en RMN multidimensional: entropía máxima y covarianza.

Unidad 7. Experimentos de correlación homonuclear

Espectros de correlación homonuclear: secuencia COSY y variantes (COSY-45, COSY- β , COSY-Relay, COSY a larga distancia). Intensificación de correlaciones por acoplamientos J pequeños. Incorporación de filtros cuánticos: DQF-COSY y TQF-COSY. Experimentos TOCSY. Correlación homonuclear de núcleos poco abundantes (^{13}C - ^{13}C): secuencias INADEQUATE y ADEQUATE.

Unidad 8. Experimentos de correlación heteronuclear

Correlación heteronuclear con detección directa e inversa. Experimentos HMQC y HSQC para correlación a través de un enlace. Experimento HMBC para correlación a larga distancia. Correlación entre núcleos distintos de hidrógeno (X-Y). Secuencias combinadas: HSQC-COSY, HSQC-TOCSY, HSQC-NOESY y HSQC-HMBC.

Unidad 9. Correlaciones a través del espacio

Efecto Overhauser nuclear transiente y relación con las distancias internucleares. Experimentos NOESY y ROESY. Experimentos de correlación por intercambio químico

(EXSY). Interferencias y falsas correlaciones. Relación entre el tiempo de correlación molecular, el NOE y las distancias internucleares.

Unidad 10. Procesos de relajación nuclear

Relajación longitudinal (T1) y transversal (T2). Mecanismos de relajación: interacción dipolar, interacción cuadrupolar e interacción escalar. Tratamiento de Redfield. Influencia de los tiempos de correlación sobre T1 y T2. Métodos de medición: inversión-recuperación y ecos de spin. Relajación cruzada y efecto Overhauser nuclear: NOEs positivos y negativos y su relación con mecanismos de relajación predominantes y características moleculares.

Unidad 11. Difusión molecular y RMN

Medición de coeficientes de difusión en solución mediante RMN. Filtros de difusión y espectros DOSY. Aspectos prácticos y aplicaciones en química supramolecular y análisis de mezclas complejas.

Unidad 12. Aplicaciones en química bioorgánica

Elucidación estructural de compuestos orgánicos. Estrategias de asignación de señales. Aplicación a problemas estereoquímicos. Selección de parámetros experimentales y procesamiento de espectros en casos prácticos.

BIBLIOGRAFIA

Levitt, M. H. Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance. 2ª ed., Wiley, 2008.

Keeler, J. Understanding NMR Spectroscopy. 2ª ed., Wiley, 2010.

Ivanov, A. A. (y cols.). Two-Dimensional (2D) NMR Methods. Wiley, 2023.

Claridge, T. D. W. High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. 3ª ed., Elsevier, 2016.

Jacobsen, N. E. NMR Spectroscopy Explained: Simplified Theory, Applications and Examples for Organic Chemistry and Structural Biology. Wiley, 2007.

Richards, S. A. y Hollerton, J. C. Essential Practical NMR for Organic Chemistry. Wiley, 2011.

Mitchell, T. N. y Costisella, B. NMR – From Spectra to Structures: An Experimental

Approach. Springer, 2007.

Simpson, J. H. Organic Structure Determination using 2-D NMR Spectroscopy. Elsevier, 2008.

Lambert, J. B. y Mazzola, E. P. Nuclear Magnetic Resonance: Principles and Applications. Pearson, 2004.

Linington, R. G., Williams, P. G., MacMillan, J. B. Problems in Organic Structure Determination: A Practical Approach to NMR Spectroscopy. CRC Press, 2015.