



1821 Universidad de Buenos Aires

Resolución Consejo Directivo

Número: RESCD-2026-909-E-UBA-DCT#FCEN

CIUDAD DE BUENOS AIRES
Lunes 8 de Junio de 2026

Referencia: EX-2023-04754991- -UBA-DMESA#FCEN - POSGRADO – Sesión
01/06/2026

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 año 2026,

CONSIDERANDO

lo actuado por la Comisión de Doctorado,
lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada el día 01 de junio de 2026,
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 1°: Aprobar el dictado del curso de posgrado **Procesamiento de Datos en Resonancia Magnética Nuclear** (DOC8800754) de 48 horas y 8 semanas de duración, que será dictado por el Dr. Gerardo Burton y la Dra. Rosana Misico.

ARTÍCULO 2°: 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 en el tercer bimestre de 2026.

ARTÍCULO 3°: Aprobar un puntaje máximo de dos (2) 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 QORGANICAN#FCEN y resérvese.

ANEXO

Procesamiento de Datos en Resonancia Magnética Nuclear

PROGRAMA

Objetivos:

- Profundizar el tratamiento de datos de RMN desde una perspectiva metodológica, analítica y crítica.
- Desarrollar criterios para seleccionar y justificar estrategias de procesamiento en espectros unidimensionales y bidimensionales según el objetivo del análisis.
- Capacitar a los/las participantes para evaluar la calidad del dato procesado, reconocer limitaciones y establecer su aptitud para identificación, comparación o cuantificación.
- Aplicar herramientas de procesamiento y análisis de datos de RMN en un entorno de software especializado, con criterios de reproducibilidad, consistencia y trazabilidad.

Programa Analítico:

- Unidad 1.

La señal de RMN y su conversión analógica a digital. Muestreo, sobremuestreo, rango dinámico, resolución digital y relación entre los dominios de tiempo y frecuencia. Aplicación de la transformada de Fourier a datos digitalizados. Formas de línea, fase del espectro y factores experimentales que las afectan. Parámetros de calidad del espectro: ancho de línea a media altura y en la base, relación señal/ruido y resolución. El procesamiento como etapa de construcción del dato analítico. Diferencia entre corrección técnica, mejora visual y preservación de información relevante.

- Unidad 2

Características del ruido en la señal de RMN. Manipulación de la señal en el dominio del tiempo: llenado de ceros, apodización y funciones de pesado. Efecto de las distintas estrategias de pesado sobre resolución y relación señal/ruido. Corrección de señales truncadas: estrategias de predicción lineal. Procesamiento no Fourier: predicción lineal, entropía máxima y covarianza. Procesamiento en el dominio de frecuencias: corrección de fase, corrección de línea de base y eliminación de líneas de solvente. Selección de parámetros de tratamiento según

el objetivo analítico: identificación estructural, análisis comparativo, seguimiento de reacción, control de pureza o cuantificación. Limitaciones de los procedimientos automáticos.

- Unidad 3

Procesamiento general de espectros 2D y multidimensionales. Transformada de Fourier bidimensional, muestreo no uniforme, modulación y formas de línea. Procesamiento en modo magnitud y con información de fase. Discriminación de frecuencias en la dimensión indirecta. Llenado de ceros, predicción lineal, apodización, supresión de ruido en t1, corrección de fase y simetrización. Impacto del procesamiento sobre la validez interpretativa de las correlaciones observadas.

- Unidad 4

Calibración del desplazamiento químico en espectros 1D y 2D. Detección y listado de picos. Determinación de áreas y volúmenes. Análisis de multipletes y medición de constantes de acoplamiento. Visualización crítica de espectros 2D, niveles de contorno y extracción de información relevante. Generación de subespectros a partir de espectros bidimensionales: proyecciones, extracción de filas y columnas y reprocesamiento. Documentación del espectro procesado y criterios para la presentación consistente de resultados.

- Unidad 5

Fundamentos y aplicaciones de la RMN cuantitativa (qNMR). Integración de señales y condiciones para una cuantificación confiable. Consideraciones especiales en qRMN: solapamiento, línea de base, relación señal/ruido, referenciado y consistencia del tratamiento. Deconvolución para señales superpuestas. Criterios de aptitud del espectro para identificación, comparación y cuantificación. Diferenciación entre errores de adquisición, procesamiento e interpretación. Reproducibilidad, trazabilidad y criterios de aceptación, rechazo o reprocesamiento del dato espectral.

Actividades prácticas propuestas:

Las actividades prácticas se desarrollarán principalmente mediante software especializado, de acceso gratuito y ampliamente utilizado para el procesamiento y análisis de datos de RMN.

Análisis de espectros con distinto nivel de calidad; evaluación comparativa del efecto de parámetros básicos de adquisición y procesamiento sobre el resultado final; identificación de problemas de resolución, sensibilidad, fase y línea de base en ejemplos seleccionados.

Procesamiento comparativo de espectros 1D; comparación entre métodos automáticos y manuales; evaluación del efecto de diferentes funciones de ventana y estrategias de predicción lineal; discusión de casos en los que distintas decisiones de procesamiento conducen a lecturas analíticas diferentes.

Procesamiento de espectros 2D seleccionados; comparación entre distintas estrategias de tratamiento; evaluación de artefactos, ruido, resolución y simetría; análisis crítico de correlaciones dudosas.

Calibración y análisis de espectros procesados; determinación de picos, áreas, volúmenes y constantes de acoplamiento; extracción de subespectros y comparación de resultados; elaboración de criterios de documentación y presentación del dato procesado. Procesamiento y análisis de espectros cuantitativos; evaluación del dato para fines cuantitativos; análisis de casos con señales superpuestas y línea de base problemática; elaboración de informes breves justificando el tratamiento aplicado y la validez del resultado.

BIBLIOGRAFIA

- High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, 3ra Ed., T. W. Claridge, Elsevier (2016).
- Manuales del programa Topspin, Bruker GmbH (2024).
- A Handbook of Nuclear Magnetic Resonance 2da Ed., Ray Freeman. Longman (1997).
- NMR Spectroscopy: Processing Strategies. 2nd Updated Ed. Peter Bigler. Wiley-VCH Verlag GmbH (2000).
- 50 and More Essential NMR Experiments. A Detailed Guide. Matthias Findeisen, Stefan Berger. Wiley-VCH Verlag GmbH (2014).
- Understanding NMR Spectroscopy, 2da Ed., J. Keeler J. Wiley & Sons (2010).
- Nonuniform sampling and non-Fourier signal processing methods in multidimensional NMR, M. Mobli y J. C. Hoch, en "Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy" Ed.G. Morris y B. Meier, pp. 21-41, Elsevier (2014).

Digitally signed by MARTI Marcelo Adrian
Date: 2026.06.08 12:26:09 ART
Location: Ciudad Autónoma de Buenos Aires

Marcelo Marti
Secretario
Secretaría de Posgrado
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Digitally signed by DURAN Guillermo Alfredo
Date: 2026.06.08 12:44:49 ART
Location: Ciudad Autónoma de Buenos Aires

Guillermo Alfredo Duran
Decano
Decanato
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales