

427  
1986

DEPARTAMENTO: de FISICA

ASIGNATURA: SEMINARIO DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

CARRERA/S: Doctorado

ORIENTACION:

PLAN:

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA: 1 (un) cuatrimestre

HORAS DE CLASE: 2

a) Teóricas:.....	hs.	b) Problemas.....	hs.
c) Laboratorio:.....	hs.	d) Seminarios.....	hs.
		e) Totales.....	hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS:

1. Técnicas de RMN pulsadas: Las ecuaciones de Bloch en el sistema rotante de coordenadas. Efectos de los pulsos de alta frecuencia. El F.I.D. y el espectro de RMN como su transformada de Fourier. Aspectos operacionales de la técnica de Transformada de Fourier. Elaboración de la señal con la computadora. Relajación. Medición de  $T_1$  por recuperación de la inversión. Ecos de spin de Hahn. Medición de  $T_2$ . Experiencias de Carr-Purcell y de Meiboom-Gill. Experiencias de "spin-locking".
2. Secuencias especiales de pulsos: Pulsos en sistemas acoplados. Eliminación de las inhomogeneidades de  $B_0$ . Detección de un protón acoplado a un carbono. Pulsos selectivos. Supresión de picos no deseados (solvente). Polarización cruzada. El experimento INEPT. Espectroscopía bidimensional, principios básicos. Espectroscopía resuelta en J, homo y heteronuclear. Correlación del apantallamiento del  $^{13}C$  y del  $^1H$ .
3. Resonancia magnética nuclear de  $^{19}F$ : Técnicas experimentales. Espectroscopía de correlación. Experiencias INDOE heteronucleares: determinación de signos de las constantes de acoplamiento. Interpretación de espectros fuertemente acoplados. Interferencias conformacionales.
4. Origen electrónico de las constantes de acoplamiento: El uso del propagador de polarización en el cálculo de las constantes de acoplamiento indirecto de spin nuclear. Formalismo del propagador de polarización. Orbitales moleculares localizados. Separación del cálculo de constantes de acoplamiento indirecto en contribuciones individuales. Interpretación de los términos de contacto de Fermi y de interacción orbital. Estudio de los mecanismos de transmisión de las constantes de acoplamiento de spin. Aplicaciones. Algunos ejemplos prácticos.

*Plan*



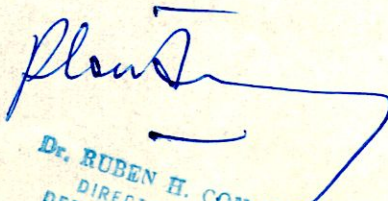
- Localización de orbitales moleculares: Métodos intrínsecos y externos. Distintos métodos de localización partiendo de un cálculo por medio del método de Hartree-Fock. Método de Edmiston y Ruedenberg. Método de magnasco y Perico. Método de Boys. Método de Foster y Boys. Método de Niessen. Criterios de localización para aplicar en moléculas de gran tamaño. Método de Verwoerd. Método de Engelmann. Método de localización por densidad. Comparación entre estos dos últimos métodos. Construcción de orbitales localizados a partir de orbitales híbridos atómicos: Método de McWeeny y Del Re.
6. Introducción a la RMN biomédica: Principios básicos de la formación de imágenes. Componentes de la imagen por RMN. La densidad de protones en la imagen. Influencia de los tiempos de relajación longitudinal ( $T_1$ ) y transversal ( $T_2$ ). Importancia del movimiento del agua en RMN biomédica. Difusión. Efectos para y diamagnéticos. Intensidad, contraste y relación señal-ruido en la formación de imágenes computadas. Mediciones de flujo. Elementos de seguridad de equipo y personal.
7. Estudios conformacionales: Aspectos estereoquímicos de los corrimientos químicos protónicos y de carbono-13. Las constantes de acoplamiento indirecto y su relación con las conformaciones. El método PCILO; fundamentos, características, capacidades y limitaciones.

#### BIBLIOGRAFIA

- NMR Spectroscopy: a Physico-Chemical view, por R.K Harris, Pitman Books, (Londres, 1983).
- Multipulse NMR in liquids, Progress in NMR Spectroscopy, Vol. 16, págs. 311-370 (Pergamon, Press, Londres 1984).
- The signs of the four-bond F-H coupling in methoxyflurane, por P.E. Balonga, V.J. Kowalewski y R.H. Contreras, Spectrochimica Acta 42A, 23 (1986).
- Mechanisms which produce spin-spin coupling in NMR, por R.H. Contreras, M.A. Natiello y G.E. Scuseria. Magnetic Resonance Review, vol. 9, 239 (1985) (Gordon and Breach).
- Localization and delocalization in Chemistry, por O. Chalvet, R. Daudel, S. Diner y J.P. Malrieu, Reidel Publishing Company, (Dordrecht, 1975) Vols. 1 y 2.
- Modern Theoretical Chemistry, Vol 7, editado por Gerald A. Segal, Plenum Press (Nueva York, 1977).
- An Introduction to Biomedical Nuclear Magnetic Resonance, P.A. Rinck, Thieme (Nueva York, 1985).

Firma del Profesor:

Aclaración de Firma:

  
 Dr. RUBEN H. CONTRERAS  
 DIRECTOR INTERINO  
 DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Firma del Director

4 DIC. 1986