

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO DE QUIMICA ORGANICA

ASIGNATURA: ESPECTROMETRIA DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

CARRERA: Doctorado en Química ORIENTACION: Química Orgánica

PLAN:

CARACTER: Optativa

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: a) Teóricas 20 horas b) Problemas 20 horas.

c) Laboratorio ----- d) Seminarios ----- Total: 40 horas

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura en Química o títulos relacionados

PROGRAMA:

Introducción. Dependencia de la magnetización nuclear con el tiempo. Espectrometría de RMN continua y pulsada. Ecuaciones de Bloch. El sistema de ejes de referencia rotante. Análisis y transformación de Fourier.

Relajación del espín nuclear. Inducción libre. Medición de los tiempos de relajación longitudinal (T_1) y transversal (T_2). Métodos de pulsos (espín-eco), Carr-Purcell y Meiboom-Gill. Instrumental requerido.

Mecanismos de relajación. Interacciones espín-red y dipolo-dipolo. Relajación cuadrupolar, escalar, por anisotropía de desplazamiento químico y por rotación-espín.

Sistemas de espín múltiple. Partición por acoplamiento de espín. Teoría elemental, mecanismo de acoplamiento, desdoblamiento de los niveles de energía de los núcleos. Determinación de la multiplicidad de las señales. Caso de dos espines (AB). Análisis de espectros de segundo orden y su cálculo teórico. Sustitución isotópica. Relaciones entre estructura y valor de J. Caso de tres espines (AMX). Diversos tipos de ABC, AB_2 y ABX. Cálculo de los mismos en especial del ABX. Relaciones entre acoplamiento y estereoquímica de compuestos orgánicos. Casos de cuatro espines: AA'BB' y AA'XX'.

Doble resonancia. Teoría elemental y técnicas experimentales. Determinación de los signos relativos de las constantes de acoplamiento y de la disposición de los niveles de energía. El efecto nuclear de Overhauser. Efectos positivos y negativos. Determinación de distancias internucleares.

Aplicaciones prácticas. Espectros protónicos y de carbono-13. Aplicaciones de los valores de T_1 y T_2 para moléculas pequeñas, medianas y grandes. Procesos cinéticos. Dinámica molecular. Reactivos de relajación. Reactivos de desplazamiento. Técnicas de transferencia de polarización. Resonancia magnética nuclear J-bidimensional. Aplicaciones a estudios biosintéticos. Técnicas de observación directa.

BIBLIOGRAFIA.

- T. Farrar y E. Becker, Pulse and Fourier Transform NMR, Academic Press, 1971.
K. Muller y P.S. Pregosin, Fourier Transform NMR techniques; a practical approach, Academic Press, 1976.
E.D. Becker, High Resolution NMR. Theory and Chemical Applications, Academic Press, 1969.

Dr. EDUARDO G. GROS
Director Dto. Química Orgánica