

Resonancia Magnética Nuclear en Química Orgánica. Teoría y

Aplicaciones

PROGRAMA

Interacción del spin nuclear con un campo magnético

Aspectos básicos de la descripción mecano-cuántica del fenómeno de RMN. El modelo vectorial y sus limitaciones. Precesión y frecuencia de Larmor. Magnetización macroscópica y microscópica. Relajación de un sistema de spins. La señal de RMN.

Técnicas operativas y procesamiento

Componentes básicos de un espectrómetro de RMN. Dominios de tiempo y frecuencia. Excitación con pulsos de RF. Detección de la señal: condición de Nyquist, sobremuestreo y filtrado digital. Procesamiento de datos: Transformación de Fourier, métodos "no-Fourier" de reconstrucción, predicción lineal, funciones de pesado y apodización. Corrección de fase.

Técnicas de RMN en una dimensión

El experimento de un pulso: optimización de la sensibilidad, mediciones cuantitativas. Desacoplamiento de spins: sistemas homonucleares y heteronucleares. Efecto Overhauser Nuclear (NOE), medición mediante espectros NOE-diferencia. Secuencias de pulsos simples: inversión-recuperación y ecos de spin. Ecos modulados por J, experimento APT. Gradientes de campo pulsados. Relajación en el sistema de coordenadas rótante, ROE, "Spin-lock".

Transferencia de polarización

Niveles de energía y poblaciones en sistemas heteronucleares. Transferencias de polarización selectiva y no selectiva: INEPT, INEPT reenfocado, DEPT. Coherencias cuánticas: órdenes de coherencia, coherencias observables, efecto de pulsos de RF y gradientes pulsados en las coherencias, selección de coherencias. Caminos de transferencia de coherencia.

Técnicas de RMN en dos o más dimensiones

Separación de información en varias dimensiones de frecuencia. Codificación de información en la señal de RMN. Experimentos 2D J-resueltos. Etapas de un experimento de RMN 2D. Transformación de Fourier en 2 dimensiones. Métodos de procesamiento "no-Fourier": entropía máxima, covarianza. Detección de la señal, cuadratura en la dimensión indirecta (F1). Espectros en modo magnitud y con información de fase. Procesamiento de datos: funciones de pesado, predicción lineal en la dimensión F1, corrección de fase, eliminación de "ruido t1". Experimentos de RMN con 3 dimensiones de frecuencia (RMN 3D). Muestreo no uniforme (NUS).

Correlación a través de enlaces

Correlación en sistemas homonucleares. El experimento COSY, coherencias y transferencia de coherencia. Selección por ciclos de fase y por gradientes de campo pulsados. Variantes de COSY: COSY-β, COSY-Relay, intensificación de correlaciones por J pequeños. Incorporación de filtros cuánticos: DQF-COSY, TQF COSY, aplicación al

análisis de multipletes complejos. Secuencia TOCSY. Correlación homonuclear de núcleos poco abundantes (^{13}C - ^{13}C), secuencias INADQUATE y ADEQUATE. Aplicaciones.

Correlación en sistemas heteronucleares. Detección directa e inversa. Correlación H-X a través de un enlace: secuencias HSQC y HMQC. Correlación H-X a través de varios enlaces: HMBC. Correlación entre núcleos distintos de H (X-Y), detección directa o a través de ^1H . Aplicaciones.

Secuencias combinadas: HSQC-COSY, HSQC-TOCSY, HSQC-NOESY, HSQC-HMBC. Métodos de covarianza indirecta. Aplicaciones.

Correlaciones a través del espacio

Efecto Overhauser Nuclear transiente. Relación con las distancias internucleares. Espectros NOESY y ROESY. Correlación por intercambio químico, espectros EXSY. Interferencias y falsas correlaciones. Supresión de coherencias de orden cero. Aplicaciones.

Difusión molecular en solución y RMN

Medición de coeficientes de difusión por RMN. Filtros de difusión en RMN, aplicaciones. Espectros DOSY. Aspectos prácticos. Aplicación en sistemas supramoleculares y en el análisis de mezclas complejas.

Métodos experimentales

Pulsos compuestos. Pulsos adiabáticos. Pulsos suaves y excitación selectiva. Supresión de líneas de solvente: presaturación, secuencias de pulsos binomiales, métodos basados en gradientes de campo pulsados, secuencia WATERGATE. Desacoplamiento de banda ancha, secuencias WALTZ y GARP.

Bibliografía

Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear

- Spin Dynamics. Basics of Nuclear Magnetic Resonance. 2nd Ed. M. H. Levitt. J. Wiley & Sons, 2008

- Nuclear Magnetic Resonance. An Introduction to Principles, Applications and Experimental Methods. J. B. Lambert, E. P. Mazzola. Pearson, Prentice Hall.

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


Dra. María Carla Marino
Directora
Dpto. de Química Orgánica



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 506.956/16

Buenos Aires, 13 MAR 2017

VISTO:

la nota de la Dra. María Carla Marino Directora del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado, **RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR EN QUÍMICA ORGÁNICA. TEORÍA Y APLICACIONES** que será dictado durante el primer cuatrimestre de 2017 por el Dr. Gerardo BURton con la colaboración del Dr. Cristian R. Rodríguez,

CONSIDERANDO:

- lo actuado por la comisión de Doctorado,
- lo actuado por la Comisión de Posgrado,
- lo actuado por este Cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,
- en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113º del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
RESUELVE:

Artículo 1º: Autorizar el dictado del curso de posgrado **RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR EN QUÍMICA ORGÁNICA. TEORÍA Y APLICACIONES**, de 96 horas de duración.

Artículo 2º: Aprobar el programa del curso de posgrado **RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR EN QUÍMICA ORGÁNICA. TEORÍA Y APLICACIONES**, obrante a fojas 5 y 6 del expediente de referencia.

Artículo 3º: Aprobar un puntaje máximo de tres (3) puntos para la Carrera del Doctorado.

Artículo 4º: Comuníquese a la Biblioteca de la FCEyN, a la Dirección de Alumnos, a la Dirección del Departamento de Química Orgánica y a la Secretaría de Posgrado, con fotocopia del programa incluida. Cumplido archívese.

Resolución CD N°
SP/qa 02/03/2017

0369

Juan Carlos Parraguirre
JUAN CARLOS PARRAGUIRRE
CURSO DE POSGRADO
FCEyN - UBA

Juan Carlos Reboreda
Dr. JUAN CARLOS REBOREDA
DECANO