

10 Qca. Org.
1.992

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
DEPARTAMENTO DE QUIMICA ORGANICA

ASIGNATURA: **TOPICOS EN RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR**
CARRERA: ORIENTACION: --
CARACTER: Post-grado, Doctorado PLAN: 1987
DURACION: 3 semanas
HORAS DE CLASE: Teóricas: 20 hs Trabajos Prácticos: 9 hs
Problemas: 30 hs Totales: 59 hs
CORRELATIVAS: ---
N° DE CODIGO: en trámite
RESPONSABLES: Dr. Gerardo Burton

PROGRAMA

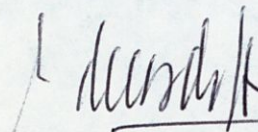
TRATAMIENTO MECANOCUANTICO DE LOS EXPERIMENTOS DE PULSOS.
Representación matricial de funciones de onda y operadores. Las variables de spin. Operadores de transformación. Operadores rotacionales. Descripción de mezclas estadísticas mediante el operador densidad. Aplicación a sistemas de 1 y 2 spins. Concepto de temperatura de spin. Interacción del sistema de spin con pulsos de radiofrecuencia. Operadores pulso. Pulsos compuestos. Cálculos explícitos de matrices densidad y magnetización observable en el sistema rotante para secuencias de pulsos típicas (INEPT, APT, DEPT).

TRANSFORMACION DE FOURIER BIDIMENSIONAL EN RMN.
Principios de FT-2D. Separación de información en las dimensiones F1 y F2. Secuencias básicas de pulsos. Formas de línea. Representación de espectros 2D. Espectros en valor absoluto y con información de fase.

ESPECTROSCOPIA DE ECOS DE SPIN 2D.
Ecos de spin homonucleares. Ecos de spin heteronucleares. Secuencias de pulsos típicas. Espectros 2D-J homo y heteronucleares. Cálculos explícitos de matriz densidad y magnetización.

ESPECTROSCOPIA DE CORRELACION DE DESPLAZAMIENTO QUIMICO.
Correlación a través de acoplamiento escalar (J). Secuencias de pulsos típicas. Espectros COSY homo y heteronucleares. Experimentos relacionadas. Desacoplamiento en la dimensión F1. Cálculos explícitos de matriz densidad y magnetización. Correlación a través de relajación dipolar cruzada (NOESY) y por intercambio químico. Transferencia neta de polarización. Espectros ROESY. Espectros Hartmann-Hahn homonucleares (HOHHA). Correlación a través de redes de acoplamiento.


Dr. Gerardo Burton


Dr. EDUARDO B. BRÁS
DIRECCION UFA QUIMICA ORGANICA

 c) 1189/92

TRANSICIONES CUANTICAS MULTIPLES.

Coherecias cuánticas, características y propiedades. Secuencias de pulsos para generar y seleccionar coherencias cuánticas de distinto orden. Espectros de correlación a través de coherencias cuánticas múltiples. Espectros INADEQUATE. Filtros cuánticos, generación y aplicaciones en RMN 1D y 2D. Detección inversa, espectros HMBQC. Cálculos explícitos de matriz densidad y magnetización.

APLICACIONES DE RMN BIDIMENSIONAL.

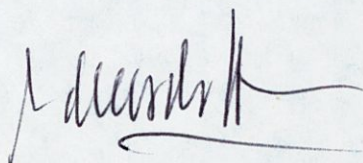
Uso de elucidación estructural de compuestos orgánicos. Asignación de espectros de RMN. Resolución de problemas estereoquímicos. Adquisición de espectros. Elección de parámetros experimentales.

BIBLIOGRAFIA

- . "Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One Two Dimensions", R.E.Ernst, G.Bodenhausen y A.Wokaun, Clarendon Press (1990).
- . "Principles of Nuclear Magnetism", A.Abragam, Oxford University Press (1961).
- . "Modern NMR Spectroscopy, A Guide for Chemists", J.K.M.Sanders y B.K.Hunter, Oxford University Press (1988).
- . "Two-Dimensional NMR Spectroscopy", J.Schraml y J.M.Bellama, J.Wiley (1988).



Dr. Gerardo Burton



Dr. EDUARDO B. BRESS
DIRECTOR DTO QUIMICA ORGANICA