

QOR  
2014  
①

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES.  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES.  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA.

**ASIGNATURA: TÓPICOS EN RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR**

**PROGRAMA**

**TRATAMIENTO CUÁNTICO DE LOS EXPERIMENTOS DE PULSOS.**

Representación matricial de autofunciones de espín y operadores asociados. Operadores de transformación. Operadores de rotación. Descripción de sistemas mediante operadores densidad. Sistema de uno y varios espines. Poblaciones y coherencias. Interacción del sistema de espines con campos electromagnéticos. Operadores de pulso. Pulsos compuestos. Cálculos de matrices densidad y magnetización observable para secuencias de pulsos básicas. Spin-Lock: Implementación.

**PROCESOS DE RELAJACIÓN DE ESPINES NUCLEARES:**

Relajación longitudinal y transversal. Tiempos de relajación. Mecanismos de relajación. Tratamiento de Redfield. Interacción dipolar. Tiempos de correlación. Influencia del tiempo de correlación sobre T1 y T2. Relación con las características moleculares. Relajación cuadrupolar. Interacción escalar. Medición de T1: método de inversión-recuperación. Medición de T2: ecos de spin. Relajación cruzada: efecto Overhauser nuclear. NOEs positivos y negativos: relación con los mecanismos de relajación predominantes y las características moleculares. Relación del NOE con el tiempo de correlación. Relación entre NOE y distancia interatómica. Cuantificación del NOE. Espectros NOE-difference.

**TRANSFERENCIA DE POLARIZACIÓN.**

Inversión selectiva de poblaciones. Transferencia selectiva de polarización. Transferencia no selectiva: secuencias INEPT e INEPT reenfocado. Secuencia DEPT. Coherencias cuánticas múltiples. Secuencias de pulsos para generar y seleccionar coherencias cuánticas de distinto orden. Espectros de correlación a través de coherencias cuánticas múltiples. Secuencia INADEQUATE.

**RESONANCIA MAGNÉTICA BIDIMENSIONAL.**

Dimensiones F1 y F2. Origen de la dimensión F1. Transformación de Fourier en dos dimensiones. Distinto tipo de señales: señales diagonales, axiales y de correlación. Clasificación de los diferentes tipos de experimentos RMN 2D. Detección de un espectro 2D. Detección en cuadratura en la dimensión F1. Espectros de valor absoluto. Espectros sensibles a la fase. Método de Redfield (TPPI). Ruido en RMN 2D: simetrización de espectros.

Dra. Rosa Erra Balsells  
Directora  
Depto. Química Orgánica

Aprobado por el CODep. por Unanimidad

## EXPERIMENTOS DE RMN BIDIMENSIONAL.

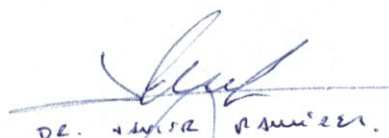
Transmisión de la información mediante pulsos. Espectros de correlación heteronuclear con detección directa: secuencias HETCOR y COLOC. Espectros de correlación heteronuclear con detección inversa: secuencias HMQC y HSQC. Ejemplos. BIRDHMQC y COSY X-H para correlación con núcleos X abundantes ( $^{31}\text{P}$ ). Correlación heteronuclear a larga distancia mediante detección inversa: secuencia HMBC. Espectros de Correlación Homonuclear: COSY. Espines activos y pasivos. COSY 45. COSY alarga distancia. COSY Sensible a la fase. Ciclado de fases. Filtros cuánticos. DQ-COSY. Espectros de correlación total: secuencia TOCSY. Espectros de Correlación por NOE: Secuencia NOESY. Influencia del tiempo de mezcla. NOE en el sistema rotante: experimento ROESY. Gradientes de campo en RMN. Implementación. Descripción y propiedades de los gradientes de campo. Giro de fase: dependencia con el orden de coherencia y constante magnetogirica. Reenfoco por gradientes opuestos. Variantes sensibles a la fase.

## APLICACIONES DE RMN EN QUÍMICA BIOORGÁNICA.

Elucidación estructural de compuestos orgánicos. Asignación de señales en espectros de RMN. Aplicación a problemas estereoquímicos, Adquisición y procesamiento de espectros. Elección de parámetros experimentales.

## BIBLIOGRAFÍA

- Spin Dynamics. M.H. Levitt. Second Edition. 2008, John Wiley & Sons, Ltd.
- NMR Spectroscopy Explained: Simplified Theory, Applications and Examples for Organic Chemistry and Structural Biology. N. E. Jacobsen. 2007, John Wiley & Sons, Ltd.
- Essential Practical NMR for Organic Chemistry. S. A. Richards y J. C. Hollerton. 2011, John Wiley & Sons, Ltd.
- NMR – From Spectra to Structures: An Experimental Approach. T.N. Mitchell y B. Costisella. 2007, Springer-Verlag.
- Organic Structure Determination using 2-D NMR Spectroscopy. J.H. Simpson. 2008, Elsevier Inc.



DR. ROSA ERRA BALSSELLS

Dra. Rosa Erra Balsells  
Directora  
Depto. Química Orgánica

Aprobado por el CODep. por Unanimidad



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 503.710/2014

Buenos Aires, 07 JUL 2014

**VISTO**

la nota presentada por la Dra. Rosa Herra Balsells, Directora del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva información del curso de posgrado **TÓPICOS EN RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR** a dictarse en tre el 19/05/2014 y el 04/07/2014 por el Dr. Javier Alberto Ramírez con la colaboración de la Dra. Andrea Claudia Bruttomesso

**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° 113° del Estatuto Universitario,

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

**Artículo 1°:** Autorizar el dictado del curso de posgrado **TÓPICOS EN RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR** de 60 hs. de duración.

**Artículo 2°:** Aprobar el programa del curso de posgrado **TÓPICOS EN RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR** obrante a fs 3 y 4 del expediente de la referencia.

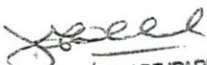
**Artículo 3°:** Aprobar un puntaje máximo de tres (3) puntos para la Carrera del Doctorado.

**Artículo 4°:** Aprobar un arancel de 20 módulos. Disponer que lo recaudado en concepto de aranceles sea utilizado de acuerdo a la Resolución 072/2003.

**Artículo 5°:** Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Orgánica, a la Biblioteca de la FCEN y a la Secretaría de Posgrado (con fotocopia del programa fs 3 y 4). Comuníquese a la Dirección de Alumnos. Cumplido Archívese.

Resolución CD N°  
SP Iga/18/06/2014

1518

  
Dr. JOSÉ CLABE IPARRAGUIRRE  
SECRETARIO DE POSGRADO  
FCEN-UBA

  
Dr. JUAN CARLOS REBOREDA  
DECANO