

## PROGRAMA TÓPICOS EN RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

### 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.

### 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 (<sup>31</sup>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.

  
Dra. Rosa Erra Balsells  
Directora  
Depto. Química Orgánica

*DL JAVIER A. LAMARCA*



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 503.710/2014

Buenos Aires,

30 MAR 2015

**VISTO**

la nota presentada por la Dra. Rosa Erra Balsells, Directora del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva información del curso de posgrado **Tópicos en resonancia magnética nuclear** a dictarse entre el 18/05/2015 y el 03/07/2015 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 magnética nuclear** de 60 hs. de duración.

**Artículo 2°:** Aprobar el programa del curso de posgrado **Tópicos en resonancia magnética nuclear** obrante a fs 15 y 16 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 de Movimiento de Fondos (Tesorería), a la Dirección de Presupuesto y Contabilidad y a la Dirección de Alumnos.

**Artículo 6°:** Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Orgánica, a la Biblioteca de la FCEN y a la Secretaría de Posgrado (con fotocopiá del programa fs 15 y 16). Cumplido Archívese.

Resolución CD N°  
SP /ga / 16/03/15

**0473**

  
Dr. JOSÉ OLABE IPARRAGUIRRE  
SECRETARIO DE POSGRADO  
FCEN-UBA

  
Dr. JUAN CARLOS SERENA  
DECANO