

“Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de compuestos orgánicos”

Carácter del curso	Optativo
Semestre en que se dicta	Segundo hemisemestre del semestre impar (5° semestre)-Años PARES (Curso bienal)
Número de créditos	6
Carga horaria semanal (hs)	Clases teóricas: 3 clases semanales de 2 horas, en total 6 hs por semana
Previaturas	Qca. Org. 102, Qca. Org. 104
Cupo	Sin cupo

Se presentarán los experimentos más importantes desarrollados hasta el momento en Resonancia Magnética Nuclear de compuestos orgánicos. Se desarrollarán los aspectos fundamentales de los mismos, haciendo énfasis en su utilidad en elucidación estructural. Se le presentará al estudiante la formación e información necesaria para la interpretación de los resultados de los diferentes experimentos para obtener la información estructural necesaria. Se presentarán aplicaciones a través de ejemplos, enfatizando en cada caso la utilidad de los diferentes experimentos, tanto en el área de química orgánica sintética como de productos naturales.

Estructura Responsable:

Departamento de Química Orgánica

Docente Responsable:

Daniela Gamenara

Docentes Referentes:

Daniela Gamenara
Gustavo Seoane
Gonzalo Hernández
Gonzalo Carrau

Objetivos:

El objetivo general del curso es profundizar en técnicas de Resonancia Magnética Nuclear como herramienta para la elucidación estructural de compuestos orgánicos, tomando los conocimientos de espectroscopía adquiridos en el curso previo de Química Orgánica 104.

Objetivos específicos:

- Consolidar los conocimientos de RMN de protón adquiridos en el curso de QO 104 y profundizar algunos aspectos relativos a la técnica.
- Incorporar conocimientos de ^{13}C RMN.
- Adquirir manejo de técnicas especiales de RMN monodimensional (NOE, DEPT).
- Adquirir dominio en técnicas de RMN bidimensional homo- y heteronuclear (COSY, HSQC, HMBC, NOESY).
- Desarrollar competencias para la elucidación estructural de un compuesto dado, en base al análisis de su espectroscopía completa de RMN.

Programa preliminar:

- 1) Espectroscopía de ^1H RMN. Sistemas de spin de primer orden: Desplazamiento químico. Integración. Acoplamiento escalar. Constantes de acoplamiento. (Repaso de conceptos adquiridos durante el curso previo QO 104).
- 2) Sistemas de spin de segundo orden.
- 3) Efecto Nuclear Overhauser (NOE)
- 4) Espectroscopía de ^{13}C RMN.

Fecha	MA-SGC-2-3.x	V.01
Página 2 de 5		

- 5) Correlaciones homo- y heteronucleares a través de enlaces: COSY, TOCSY, HSQC, HMBC
- 6) Integración de todas las técnicas de RMN mediante aplicaciones prácticas de determinación estructural de compuestos orgánicos.
- 7) Determinaciones estereoquímicas mediante ^1H RMN: Empleo de la RMN en la determinación estereoquímica en sistemas cíclicos.
- 8) Estudio de técnicas complementarias auxiliares para la determinación de estereoquímica absoluta en compuestos orgánicos.

Bibliografía:

- 1) "Introduction to Spectroscopy", D. Pavia, G. Lapman, G. Kriz, Hartcourt College Publishers, 3rd edition, 2001.
- 2) "Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy", H. Friebolin, Wiley-VCH, New York, 5^o edición, 2011.
- 3) "NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts and Applications in Chemistry", H. Günther, Wiley-VCH, Weinheim, 3^o edición 2013.
- 4) "Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry: a Practical Guide", E. Breitmaier, John Wiley & Sons, Chichester, 1993.
- 5) "Modern NMR Spectroscopy. A workbook of chemical problems", Sanders, J. K. M.; Constable, E. C.; Hunter, B. K. and Pearce, C. M. 2nd Edition. Oxford University Press, New York, 1995.

- 6) "Two dimensional NMR Spectroscopy. Applications for chemists and biochemists". Eds: Croasmun, W. R.; Carlson, R. M. K. 2nd Edition. VCH Publishers. New York, 1994.
- 7) "Structure elucidation by NMR in organic chemistry" Breitmaier, E. , John Wiley & Sons Ltd. Chichester, UK. 2002.
- 8) "Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. An introduction to principles, applications and experimental methods" Lambert, J. B.; Mazzola, E. P., Pearson Education Inc., New Jersey, 2004.
- 9) "Carbon-13 NMR Spectroscopy". Breitmaier, E.; Voelter, W., 3rd Edition, VCH Verlag, 1989.
- 10) "Organic structures from spectra". Field, L. D.; Sternhell, S.; Kalman, J. R.; 4th Edition. Wiley VCH, 2008.

Modalidad del Curso:

	Teórico	Practico	Laboratorio	Otros (*)
Asistencia Obligatoria	SI			SI
Modalidad Flexible (carga horaria mínima)	NO			

(*) El curso se basa fundamentalmente en trabajo por parte de los estudiantes en modalidad de taller, supervisado por el equipo docente. Adicionalmente, como parte de la ganancia del curso, los estudiantes en la última semana presentan un seminario sobre un trabajo propuesto al inicio del curso.

Régimen de ganancia:

El sistema de ganancia para los estudiantes de grado está integrado con un seminario preparado por los estudiantes en forma grupal, sobre la elucidación de la estructura de un compuesto orgánico dada su espectroscopía, una prueba parcial al final del curso y un rubro de "concepto" que engloba la participación de los estudiantes en clase, y la entrega de los trabajos realizados durante todo el curso. Para los estudiantes de posgrado, el trabajo de

elucidación estructural será individual, y revestirá un grado importante de complejidad. Se mantienen la prueba final y la nota de "concepto", igual que para estudiantes de grado. Se sugiere asignar 6 créditos al curso de grado y 2 créditos adicionales al módulo de posgrado (Total: 8 créditos para el curso de posgrado). Exoneración con el 60% de los puntos.

Por mayor información visitar la página del curso o consultar directamente en la estructura responsable de la asignatura.

Fecha	MA-SGC-2-3.x	V.01
	Página 5 de 5	