

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA  
FACULTAD DE CC. QQ. Y FARMACIA  
ESCUELA DE QUÍMICA  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA  
"SARA BASTERRECHEA DE MONZÓN"

*Elucidación Estructural de Productos Naturales por Resonancia Magnética Nuclear*  
*Programa del Curso*  
*Código OPT2*

I. *INFORMACIÓN GENERAL*

1.1	<i>DOCENTE:</i>	<i>Dr. Oscar Manuel Cobar Pinto</i>	1.8	<i>LUGAR: Depto. de Química Orgánica</i>
1.2	<i>AUXILIAR:</i>	<i>Fayver De León</i>	1.9	<i>REQUISITOS: Química Orgánica V</i>
1.3	<i>CICLO:</i>	<i>Segundo de 2014</i>		
1.4	<i>FECHA:</i>	<i>14 de Julio al 21 de Noviembre 2014</i>		
1.5	<i>HORARIO:</i>	<i>Martes de 16 a 20 horas.</i>		
1.6	<i>DURACIÓN DEL CURSO:</i>	<i>Un Semestre Académico, 4 Créditos Académicos.</i>		
1.7	<i>DOCENCIA TEÓRICO/PRÁCTICA:</i>	<i>4 Períodos semanales</i>		

## II. DESCRIPCIÓN

Unidad I FUNDAMENTOS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Unidad II TÉCNICAS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE 1D

Unidad III TÉCNICAS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE 2D

Unidad IV APLICACIÓN CONCERTADA DE TÉCNICAS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE 1D Y 2D

## III OBJETIVOS GENERALES

*Lograr que al finalizar el curso el estudiante esté en capacidad de:*

### III.1 NIVEL COGNOSCITIVO

*III.1.1 Integrar los conocimientos adquiridos en cursos anteriores.*

*III.2.2 Desarrollar el criterio analítico y su aplicación a la elucidación estructural de compuestos orgánicos por vía de la técnica de RMN.*

### III.2 NIVEL PSICOMOTRIZ

*III.2.1 Aplicar las destrezas necesarias para efectuar correctamente el análisis estructural de moléculas orgánicas complejas.*

*III.2.2 Aplicar concertadamente las técnicas de RMN de 1D y RMN de 2D en la elucidación estructural de moléculas orgánicas complejas.*

### III.3 NIVEL AFECTIVO

*III.3.1 Resolver correctamente los problemas pertinentes al área de estudio.*

*III.3.2 Organizar y planificar adecuadamente las acciones a tomar para interpretar los espectros de RMN de 1D y 2D.*

IV CONTENIDO SINTÉTICO PONDERADO

UNIDAD	TEMA	%	* Períodos de 1 hora
I	FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR	10	07
II	TÉCNICAS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE 1D	16	10
III	TÉCNICAS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE 2D	16	10
IV	APLICACIÓN CONJUNTA DE TÉCNICAS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE 1D Y 2D	58	37

V. CONTENIDO ANALÍTICO JORNALIZADO

UNIDAD Y CONTENIDO	No. de Conf.
<p><b>I. Fundamentos.</b>                      Fenómeno de RMN. Instrumentación. Número de espín y momento magnético. Orientación de núcleos en un campo magnético. El proceso de resonancia. Precesión. Desplazamiento químico. Efectos de protección. Acoplamiento simple de espín y multiplicidad de señales. Acoplamiento complejo y su interpretación. Reactivos de desplazamiento. Efectos de los centros asimétricos. Desacoplamiento de spin.</p>	1 a 7
<p><b>II. RMN de una dimensión.</b>                      RMN de Protón, su espectro e interpretación. RMN de Carbono Trece, su espectro e interpretación. Técnicas de pulso simple y múltiple. Attached Proton Test –APT-, Distortionless Enhancement by Polarization Transfer –DEPT-, The Nuclear Overhauser Effect –NOE-. Estructura de cada espectro y su interpretación.</p>	8 a 17
<p><b>III. RMN de dos dimensiones.</b>                      La segunda dimensión, ventajas asociadas con métodos 2D-RMN, Espectroscopía de Detección Inversa, experimentos de Correlation Spectroscopy –COSY-, Hetero Multiple Quantum Correlation –HMQC-,Insensitive Nuclei Enhanced by Polarization Transfer –INEPT- y experimentos relacionados, Heteronuclear Multiple Bond Correlation –HMBC-, Nuclear Overhauser Effect Spectroscopy –NOESY- y experimentos relacionados, Incredible Natural Abundance Double Quantum Transfer Experiment –INADEQUATE-. Estructura de cada espectro y su interpretación.</p>	18 a 27
<p><b>IV. Aplicación concertada de técnicas de Resonancia Magnética Nuclear de 1D y 2D.</b>                      Elucidación de la estructura de moléculas orgánicas sencillas y productos naturales complejos vía la interpretación concertada y secuencial de sus espectros de RMN de una y dos dimensiones. Utilización de software para simulaciones de QM-NMR.</p>	28 a 64

## VI. METODOLOGÍA

VI.1 Se utilizarán técnicas de estudio independiente y exposiciones dinimizadas.

VI.2 Se efectuarán tres exámenes parciales en las fechas programadas dentro del calendario oficial de exámenes parciales.

VI.3 Los estudiantes realizarán un trabajo monográfico de investigación y lo presentarán en clase.

VI.4 Semanalmente se dedicarán dos horas a la interpretación de espectros de 1D y 2D.

## VII. OBSERVACIONES

VI.1 Por ningún motivo se realizarán exámenes u otro tipo de evaluación en forma extemporánea.

VI.2 El Programa del Curso, material de clase y tareas asignadas se deberán descargar del sitio electrónico del Departamento de Química Orgánica, o enviarán vía electrónica al estudiante.

VI.3 Para tener derecho al examen final del curso, el estudiante deberá cumplir al menos con el 80% de las actividades programadas del curso.

## VIII. EVALUACIÓN (TOTAL 100 puntos)

Primer examen parcial	12 puntos	Resolución de Espectros	24 puntos
Segundo examen parcial	12 puntos	Trabajo monográficos y Presentación	20 puntos
Tercer examen parcial	12 puntos	Examen final	20 puntos

## IX. REFERENCIAS BÁSICAS

1. Balsi, M. BASIC  $^1\text{H}$ - AND  $^{13}\text{C}$ -NMR SPECTROSCOPY. Elsevier, USA. 2005, 413 pp.
2. Billeter, M.; Orekhov, V. NOVEL SAMPLING APPROACHES IN HIGHER DIMENSIONAL NMR. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2012, 165 pp.
3. Jacobsen, N. NMR SPECTROSCOPY EXPLAINED; Willey, USA. 2007, 685 pp.
4. Lambert, J.; Mazzola, E. NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE SPECTROSCOPY; an Introduction to Principles, Applications and Experimental Methods. Pearson Education Inc. USA. 2003, 357 pp.
5. Michael, T.; Costisella, B. NMR-FROM SPECTRA TO STRUCTURES; AN EXPERIMENTAL APPROACH. Springer, GER. 2007, 219 pp.
6. Rahman, A. SOLVING PROBLEMS WITH NMR SPECTROSCOPY. Academic Press, USA. 1991, 429 pp.
7. Richard, S.; Hollerton, J. ESSENTIAL PRACTICAL NMR FOR ORGANIC CHEMISTRY. John Wiley & Sons. UK. 2011, 216 pp.
8. Silverstein, R. Webster, F.; Kiemle, D. SPECTROMETRIC IDENTIFICATION OF ORGANIC COMPOUNDS. 7th. Ed. John Wiley and Sons, USA. 2005, 502 pp.
9. Simpson, J. ORGANIC STRUCTURE DETERMINATION USING 2D-NMR SPECTROSCOPY; A PROBLEM-BASED APPROACH. Academic press, USA. 2008, 362 pp.