

UNIDAD: <b>IZTAPALAPA</b>		DIVISIÓN <b>CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA</b>	
NIVEL: <b>LICENCIATURA</b>		EN <b>QUÍMICA</b>	
CLAVE: <b>2141131</b>	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: <b>RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR</b>		TRIM: <b>VII-XII</b>
HORAS TEORÍA: <b>3</b>	SERIACIÓN		CRÉDITOS: <b>9</b>
HORAS PRÁCTICA: <b>3</b>	<b>2141095</b>		OPT/OBL: <b>OPT.</b>

**OBJETIVO(S):**

**GENERALES**

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Comprender el concepto de la interacción del momento magnético nuclear con un campo magnético intenso que da origen al efecto Zeeman.
- Describir el fenómeno de Resonancia Magnética Nuclear, comprender y utilizar los observables, tales como la anisotropía química, desplazamiento químico, acoplamiento dipolar, acoplamiento escalar, etc.
- Interpretar espectros de  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , y de otros núcleos diferentes y que sean magnéticamente activos.
- Evaluar parámetros físico-químicos (ejemplo: dinámica molecular).

**ESPECÍFICOS**

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Tema 1. (a) Comprender como interactúa el momento magnético nuclear con un campo magnético intenso (efecto nuclear de Zeeman). (b) Comprender la interacción de la magnetización macroscópica con los pulsos de radiofrecuencia generando las coherencias observables. (c) Comprender la precesión del vector de magnetización, el libre decaimiento de la energía, la adquisición del FID y su Transformada de Fourier (FT).
- Tema 2. (a) Comprender el efecto de apantallamiento de los electrones sobre el campo magnético efectivo ejercido sobre el núcleo de  $^1\text{H}$ . (b) Comprender el efecto de la presencia de otros núcleos y su contribución en el desdoblamiento de las señales debido al acoplamiento escalar. (c) Utilizar la información del desplazamiento químico, la multiplicidad por acoplamiento escalar y la intensidad de las señales para proponer una estructura química compatible con los datos espectrales. (d) Comprender y correlacionar los efectos de la relajación con la dinámica molecular.

<b>NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA</b>		<b>2/5</b>
<b>CLAVE 2141131</b>	<b>UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR</b>	

- Tema 3. (a) Comprender los efectos que contribuyen al desplazamiento químico del  $^{13}\text{C}$  y su utilidad en la determinación estructural de compuestos así como la identificación de posibles grupos funcionales. (b) Comprender y utilizar los efectos del acoplamiento con el  $^1\text{H}$ , en los diferentes esquemas de desacoplamiento heteronuclear, así como el incremento de la sensibilidad debido al efecto nuclear Overhauser. (c) Comprender la transferencia de polarización y su utilidad en la edición espectral de los experimentos DEPT.
- Tema 4. (a) Comprender el uso de las distintas secuencias de pulsos para generar experimentos bidimensionales y su utilización en la determinación de estructuras de los compuestos químicos. (b) Diferenciar y utilizar la información proporcionada por los experimentos bidimensionales de correlación homonuclear COSY para la determinación estructural de los compuestos, así como el uso de los experimentos NOESY para la posible asignación estereoespecífica y tridimensional de dichos compuestos. (c) Utilizar los diferentes experimentos de correlación heteronuclear (HSQC, HMBC) en la determinación de las estructuras químicas.

Tema 5. (a) Comprender los alcances y las limitaciones de los desplazamientos químicos de otros núcleos magnéticamente activos, en la determinación de las estructuras de los distintos compuestos químicos. (b) Comprender las similitudes y diferencias en la RMN en disolución y en estado sólido.

#### **CONTENIDO SINTÉTICO:**

A) RMN de líquidos.

##### 1. Principios Básicos de RMN

- 1.1 Fundamentos. Modelo clásico.
- 1.2 Niveles de energía y poblaciones
- 1.3 Magnetización Macroscópica
- 1.4 Condición de Resonancia
- 1.5 Saturación y relajación de núcleos
- 1.6 Caída libre de inducción y Transformada de Fourier

##### 2. Resonancia Magnética Nuclear de $^1\text{H}$

- 2.1 Desplazamiento químico
- 2.2 Acoplamiento espin-espin
- 2.3 Relajación Longitudinal (T1), Relajación Transversal (T2)
- 2.4 Movilidad Molecular
- 2.5 Efecto Nuclear Overhauser
- 2.6 Determinación de Tiempos de relajación transversal (T1)
- 2.7 Métodos de supresión de disolvente ( $\text{H}_2\text{O}$ )
- 2.8 Interpretación de espéctros de RMN de  $^1\text{H}$

<b>NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA</b>		<b>3/5</b>
<b>CLAVE 2141131</b>	<b>UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR</b>	

<p>3. Resonancia Magnética Nuclear de <math>^{13}\text{C}</math></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>3.1 Aspectos particulares del desplazamiento químico de <math>^{13}\text{C}</math>.</li> <li>3.2 Desacoplamiento heteronuclear</li> <li>3.3 Experimentos “inverse gated” y “gated decoupled”</li> <li>3.4 Experimentos de transferencia de polarización (DEPT)</li> </ul> <p>4. Experimentos multidimensionales</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>4.1 Correlación J-homonuclear (COSY)</li> <li>4.2 Correlación dipolar-homonuclear (NOESY)</li> <li>4.3 Correlación J-heteronuclear (gHSQC, gHMBC, etc.)</li> </ul> <p>5. RMN de otros núcleos diferentes a <math>^1\text{H}</math> y <math>^{13}\text{C}</math>.</p> <p><b>B) EXPERIMENTACIÓN RMN LÍQUIDOS</b></p> <p>1. Aspectos experimentales de RMN</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>1.1 Preparación de Muestras</li> <li>1.2 Instrumentación</li> <li>1.3 Ajuste de sintonía</li> <li>1.4 Ajuste de homogeneidad de campo magnético (shimming)</li> <li>1.5 Ajuste de parámetros de adquisición (secuencia de pulsos, tiempos, pulsos)</li> <li>1.6 Calibración de pulsos</li> </ul> <p>2. Procesamiento de datos</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>2.1 Transformada de Fourier</li> <li>2.2 Corrección de fase</li> <li>2.3 Corrección de línea base</li> <li>2.4 Integración</li> <li>2.5 Predicción lineal</li> </ul> <p><b>C) RMN de sólidos.</b></p> <p>1. Interacciones de espines nucleares en sólidos</p> <p>2. Experimentos de RMN de alta resolución en sólidos</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>2.1 Rotación a ángulo mágico (MAS)</li> <li>2.2 Desacoplamiento de espines abundantes</li> <li>2.3 Polarización cruzada (CP)</li> <li>2.4 Combinación de técnicas MAS/CP/desacoplamiento de alta potencia</li> </ul> <p>3. RMN de núcleos con espín nuclear mayor a <math>\frac{1}{2}</math></p> <p>4. RMN de alta resolución de Silicatos y Zeolitas</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>4.1 RMN de <math>^{29}\text{Si}</math>.</li> <li>4.2 b) RMN de <math>^{27}\text{Al}</math>.</li> </ul>
---

<b>NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA</b>		<b>4/5</b>
<b>CLAVE 2141131</b>	<b>UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR</b>	

**MODALIDADES DE CONDUCCIÓN DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:**

- Exposición oral del profesor de las bases teóricas, introduciendo los conceptos requeridos para la comprensión del fenómeno de resonancia y su utilidad como herramienta esencial en la investigación química.
- Presentación de seminarios por parte de los alumnos en aplicaciones particulares o recientes de la técnica.
- Experimentación en el laboratorio.
- En las sesiones experimentales se buscara que el alumno conozca las partes que integran un espectrómetro de RMN, el correcto uso de los equipos para la adquisición de los datos experimentales, así como su cuidado y los potenciales daños debidos a una manipulación inadecuada de las muestras o del mismo equipo.
- Las sesiones experimentales estarán organizadas con base en la adquisición de los datos necesarios para que el alumno obtenga los espectros adecuados para la determinación estructural de las muestras problema y adquiera la habilidad necesaria para planear los experimentos que requiera en la resolución exitosa de los problemas de determinación de distintos tipos de compuestos que surjan de la investigación química, en la síntesis de nuevos compuestos o de compuesto ya conocidos.

**MODALIDADES DE EVALUACIÓN:**

Evaluación Global:

- Evaluaciones periódicas (cinco exámenes escritos) 80 %
- Seminarios, presentaciones escritas, orales y laboratorio 20 %

Evaluación de Recuperación:

- La UEA podrá aprobarse mediante una evaluación de recuperación global o complementaria a juicio del profesor y requiere inscripción previa.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		5/5
CLAVE 2141131	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR	

**BIBLIOGRAFÍA NECESARIA O RECOMENDABLE:**

1. Dirección en Internet: <http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr>
2. Abraham, Fisher, Loftus. *Introduction to NMR Spectroscopy*, Wiley, 1993
3. Akitt, J. W., *NMR and Chemistry: An Introduction to Modern NMR Spectroscopy*, Chapman and Hall, 1992
4. Creswell Clifford T., *Análisis Espectral de Compuestos Orgánicos*, Ed. Diana 1979
5. Silverstein, R.M., *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, Wiley, 7th Edition, 2005. Disponible digitalmente en el lab. De RMN en formato PDF.
6. Dekker, *NMR Techniques in Catalysis*, 1994
7. E-Breitmaier, *Carbon-13 NMR Spectroscopy VCH*, 1990. Disponible digitalmente en el lab. De RMN en formato PDF.
8. Timothy D. W. Claridge, *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*, Pergamon, Press., 2nd edition, 2009. Disponible digitalmente en el lab. de RMN en formato PDF.