



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS**



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: Determinación estructural de productos naturales por resonancia magnética nuclear (RMN) basado en problemas

Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 6	
Carácter: Optativa de elección		Horas por semana	Total horas/ semana	Total horas/ semestre
Tipo: Curso		Teoría:	3	48
		Práctica:		
Modalidad: Teórica		Duración del programa: 8 semanas		

Actividad académica con seriación antecedente: No aplica

Objetivo general:

Entrenar a las personas estudiantes de posgrado en la elucidación de estructuras químicas de productos naturales, mediante una metodología basada en problemas.

Objetivos específicos:

- Proporcionar las estrategias generales para la resolución de espectros de RMN mediante el uso de problemas de dificultad variable (de menor a mayor), y que puedan ser implementadas en sus proyectos de investigación particulares.
- Proporcionar y resolver espectros uni y bidimensionales de productos naturales, para establecer su estructura y configuración relativa.

Índice temático

Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Confirmación estructural de moléculas simples: -Asignación de espectros de ^1H y ^{13}C . -Obtención e interpretación de constantes de acoplamiento.	6	
2	Confirmación estructural de moléculas complejas: -Asignación de espectros de ^1H y ^{13}C , y obtención e interpretación de constantes de acoplamiento de moléculas más complejas -Interpretación de experimentos bidimensionales para asignación de estructuras.	6	
3	Determinación estructural de moléculas simples -Integración de datos de RMN uni y bidimensional para resolver moléculas simples.	6	
4	Determinación estructural de moléculas complejas -Integración de datos de RMN uni y bidimensional para resolver moléculas complejas. -Interpretación del espectro de HMBC para confirmar la conectividad de las moléculas complejas.	6	
5	Determinación de la configuración relativa mediante métodos de RMN: -Análisis de constantes de acoplamiento para determinar la geometría de dobles enlaces. - Análisis de constantes de acoplamiento para determinar la geometría de sistemas cíclicos. -Interpretación del espectro de NOESY para la asignación de la configuración relativa.	12	

6	Determinación estructural de productos naturales complejos	12	
	-Determinación de estructuras que contengan múltiples centros estereogénicos. -Elucidación <i>de novo</i> de productos naturales complejos.		
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:		0	
Suma total de horas:		48	

Bibliografía básica actualizada:	
-2016. Problems in Organic Structure Determination. A Practical Approach to NMR Spectroscopy. R. G. Linington, P. G. Williams, J. B. MacMillan	
-2016. Modern NMR Approaches to the Structure Elucidation of Natural Products: Volume 2: Data Acquisition and Applications to Compound Classes. R. R. Gil, A. Navarro-Vázquez	
-2015. Modern NMR Approaches to The Structure Elucidation of Natural Products: Volume 1: Instrumentation and Software. A. Williams, G. Martin, D. Rovnyak, A. Williams, G. Martin, D. Rovnyak	
Bibliografía complementaria:	
-2016. High-resolution NMR techniques in organic chemistry. T. D. W. Claridge	
-2012. Organic structure determination using 2-D NMR spectroscopy: a problem-based approach. J. H. Simpson.	
-2010. Understanding NMR spectroscopy. J. Keeler.	
-2010. Organic structure analysis. P. Crews, J. Rodríguez	
-2009. The signal/noise of an HMBC spectrum can depend dramatically upon the choice of acquisition and processing parameters. T. E. Burrow, R. G. Enriquez, W. F. Reynolds. <i>Magnetic Resonance in Chemistry</i> 47.12: 1086-1094	
-2009. Structure determination of organic compounds: tables of spectral data. E. Pretsch, P. Bühlmann, et.al.	
-2005. Spectrometric identification of organic compounds. R. M. Silverstein, F. X. Webster, et al.	
-2004. 200 and more NMR experiments: a practical course. S. Berger, B. Siegmars	
-2002. W. F. Choosing the best pulse sequences, acquisition parameters, postacquisition processing strategies, and probes for natural product structure elucidation by NMR spectroscopy. Reynolds, R. G. Enriquez. <i>Journal of Natural Products</i> 65.2: 221-244.	
-2002. A method for easily determining coupling constant values: an addendum to "a practical guide to first-order multiplet analysis in 1H NMR spectroscopy. T. R. Hoye, H. Zhao. <i>The Journal of Organic Chemistry</i> 67.12: 4014-4016	
-1997. A complete introduction to modern NMR spectroscopy. R. S. Macomber	
-1987. Carbon-13 NMR spectroscopy: high-resolution methods and applications in organic chemistry and biochemistry. E. Breitmaier, W. Voelter	
-1973. Nitrogen NMR. M. Witanowshi	
Sugerencias didácticas:	Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:
Exposición oral ()	Exámenes parciales (X)
Exposición audiovisual ()	Examen final escrito ()
Ejercicios dentro de clas (X)	Trabajos y tareas fuera del aula (X)
Ejercicios fuera del aula (X)	Exposición de seminarios por los alumnos ()
Seminarios ()	Participación en clase (X)
Lecturas obligatorias (X)	Asistencia ()
Trabajo de investigación ()	Seminario ()
Prácticas de taller o laboratorio ()	Otras: ()
Prácticas de campo ()	
Otras: _____ ()	