



**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**

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

**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**

<b>Unidad</b>	<b>Tema</b>	<b>Horas</b>	
		<b>Teóricas</b>	<b>Prácticas</b>
<b>1</b>	<b>Confirmación estructural de moléculas simples:</b> -Asignación de espectros de $^1\text{H}$ y $^{13}\text{C}$ . -Obtención e interpretación de constantes de acoplamiento.	<b>6</b>	
<b>2</b>	<b>Confirmación estructural de moléculas complejas:</b> -Asignación de espectros de $^1\text{H}$ y $^{13}\text{C}$ , y obtención e interpretación de constantes de acoplamiento de moléculas más complejas -Interpretación de experimentos bidimensionales para asignación de estructuras.	<b>6</b>	
<b>3</b>	<b>Determinación estructural de moléculas simples</b> -Integración de datos de RMN uni y bidimensional para resolver moléculas simples.	<b>6</b>	
<b>4</b>	<b>Determinación estructural de moléculas complejas</b> -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.	<b>6</b>	
<b>5</b>	<b>Determinación de la configuración relativa mediante métodos de RMN:</b> -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.	<b>12</b>	

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

**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. *Magnetic Resonance in Chemistry* 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. Siegmair
- 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. *Journal of Natural Products* 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. *The Journal of Organic Chemistry* 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:**

Exposición oral	( )
Exposición audiovisual	( )
Ejercicios dentro de clas	(X)
Ejercicios fuera del aula	(X)
Seminarios	( )
Lecturas obligatorias	(X)
Trabajo de investigación	( )
Prácticas de taller o laboratorio	( )
Prácticas de campo	( )
Otras: _____	( )

**Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:**

Exámenes parciales	(X)
Examen final escrito	( )
Trabajos y tareas fuera del aula	(X)
Exposición de seminarios por los alumnos	( )
Participación en clase	(X)
Asistencia	( )
Seminario	( )
Otras:	( )