

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Presentación de curso de posgrado

Año	2024	Semestre	Primero		
Indique la denominación del curso (actividad curricular)					
Curso de Posgrado					
Título: <b>Aplicaciones de Resonancia Magnética Nuclear a Estudios de Fisicoquímica Orgánica</b>					
Especificación clara si se lo considera válido para cubrir exigencias del Doctorado					
Solicitamos que el presente curso se considere válido para doctorado					
Indique el/las área/s de Doctorado para las que el curso es dirigido					
Cs. Biológicas		Física		Ciencias Ambientales	
Química	X	Matemática			
Indique si el curso es o forma parte de una materia de grado. Especifique.					
Los contenidos del presente curso no forman parte de ninguna materia de grado de la Facultad de Ciencias Exactas UNLP					
Profesor responsable (indicando cargo docente y/o investigación y las horas que participa del dictado de clases)					
<ul style="list-style-type: none"><li>• Dr. Sergio Luis Laurella - Profesor Adjunto DE (División Química Orgánica) - 10 hs.</li><li>• Dr. Diego Damián Colasurdo - Jefe de Trabajos Prácticos DS / Ayudante Diplomado DE (División Química Orgánica) - 5 hs.</li></ul>					
Docentes participantes (indicando cargo docente y/o investigación y las horas que participa del dictado de clases)					
Característica del curso (Teórico, práctico, teórico-práctico, etc)		Teórico – Práctico (seminario de problemas y práctica computacional)			
Modalidad del curso (presencial, a distancia, combinada). Indicar en porcentaje el dictado a distancia.		Presencial			
Carga horaria semanal		15 hs			
Duración total en horas (distinguir horas de teoría, práctica, teoría/práctica, presencial y a distancia)		15 hs: 8 hs de teoría / 7 hs de seminario de problemas y práctica computacional			

Tipo de evaluación y requisitos de aprobación (máx. 2000 caracteres). Si la evaluación no es presencial indicar los instrumentos y soportes que se emplearán para evaluar los aprendizajes y competencias de los/as alumnos/as.					
Se propone una evaluación remota asincrónica en la cual se proporcionará a los estudiantes un trabajo científico en el cual se hayan aplicado algunas de las técnicas trabajadas durante el curso. El estudiante deberá hacer una lectura crítica y proponer posibles experimentos/cálculos adicionales a dicho trabajo. Se pedirá un informe escrito individual de dicho análisis, el cual será evaluado por los docentes a fin de (luego de las correcciones necesarias) dar por aprobado el curso de posgrado.					
Ámbito o lugar de desarrollo (Instituto, Centro, Laboratorio, cátedra, aula, etc). Si hay más de uno indicar cuántas horas en c/u y qué actividades se desarrollarán en cada lugar					
CEDECOR – Centro de Estudio de Compuestos Orgánicos					
Fecha de dictado		29 y 30 de abril 2024		Cupo de alumnos/as 40	
Breve descripción de los contenidos y su vinculación con los objetivos de la carrera (máx. 1000 caracteres)					
Este curso de posgrado se divide en tres bloques: Estudio de equilibrios químicos por RMN, elucidación de mecanismos de reacción por RMN y análisis de estructuras por RMN combinada con cálculos teóricos. Estos contenidos se relacionan con múltiples áreas de estudio de los planes de trabajo de Tesis Doctorales de esta Facultad: síntesis orgánica e inorgánica, cinética de reacciones, estudio de mecanismos enzimáticos y farmacológicos, degradación de sistemas de interés alimenticio, entre otros.					
Arancelamiento					
NO		SÍ	X	Monto	El equivalente en pesos a U\$S 60 (valor oficial Banco Nación al comienzo del curso) para inscriptos externos a la Carrera de Doctorado de la FCE-UNLP. Gratuito para alumnos de la Carrera de Doctorado de la FCE-UNLP.
Destino de los fondos				Adquisición de espectros RMN para futuras ediciones del curso, de manera de ampliar la gama de moléculas estudiadas.	
Mecanismo de pago y administrador de fondos				Por transferencia a la Fundación Ciencias Exactas	
Describir los objetivos del curso (máx. 2000 caracteres)					
La Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es una de las herramientas de elucidación estructural de moléculas más potentes utilizadas por químicos, bioquímicos, farmacéuticos y afines. Existen sin embargo otras aplicaciones de esta técnica, específicamente al					

estudio de equilibrios y mecanismos de reacción. El primer objetivo de este curso es acercar a los estudiantes de doctorado al uso de la RMN como herramienta para el estudio (tanto estático como dinámico) de sistemas químicos. Por otro lado, la elucidación estructural de moléculas complejas requiere de la utilización de cálculos teóricos para distinguir entre moléculas muy similares pero cuyas diferencias es preciso distinguir. El segundo objetivo de este curso es proporcionar herramientas prácticas de cálculo que permitan llevar a cabo dichas distinciones con una certeza adecuada.

Indicar los contenidos del curso (máx. 2000 caracteres)

Los contenidos del presente curso se dividen en tres bloques:

**Bloque 1: Estudio de equilibrios por medio de RMN.**

Se estudiarán aspectos prácticos de cómo distinguir entre mezclas de reacción y equilibrios en un espectro RMN. Se analizarán también cuáles son los requisitos indispensables de un sistema químico para su estudio: la posición y tipo de señales, además de consideraciones dinámicas. Se estudiará la medición de constantes de equilibrio en diferentes tipos de espectros ( $^1\text{H}$ RMN,  $^{13}\text{C}$ RMN y XRMN). Se ahondará luego en la información química obtenible a partir de efectos de la concentración, el solvente y la temperatura.

**Bloque 2: Elucidación de mecanismos de reacción por RMN.**

Se comenzará estudiando los aspectos experimentales del uso de RMN en la elucidación de mecanismos de reacción, describiendo los tipos de experimentos y comentando las dificultades y desafíos de la técnica (baja sensibilidad, picos no resueltos y tiempo de mezcla). Se estudiará la información mecanística obtenible a partir de experimentos de RMN: Estudios cinéticos, detección de intermediarios, uso de isótopos, experimentos de pH variable y de temperatura variable.

**Bloque 3: Aplicaciones de cálculo teórico en RMN.**

Se analizarán en principio los requisitos previos a los cálculos de RMN: optimización de estructuras moleculares y cálculo de parámetros termodinámicos. Se detallarán a continuación los datos teóricos obtenibles a partir de cálculo de tensores de apantallamiento por medio del método GIAO y su transformación en desplazamientos químicos por diferentes métodos. Por último, se analizarán los diferentes métodos de comparación entre datos teóricos y experimentales (R2, MAE, CMAE, MP3, DP4+, DP5).

Si corresponde, describir las actividades prácticas previstas, indicando lugar donde se desarrollarán, modalidad de supervisión y modalidades de evaluación (máx. 2000 caracteres).	
Las actividades prácticas de los tres bloques incluyen, por un lado, el estudio de casos concretos de aplicación en trabajos científicos publicados y su posible ampliación/modificación, y por otro, la realización de cálculos teóricos utilizando programas de cálculo computacional (Gaussian, Orca, etc.).	
Si el curso incluye horas a distancia indicar las previsiones metodológicas y pedagógicas, las actividades que se realizarán en las horas presenciales y en las virtuales y el modo en que se articularán, las interacciones docente-estudiantes y estudiantes-estudiantes previstas, y los mecanismos de seguimiento, supervisión y evaluación de esas actividades.	
La modalidad será presencial.	
Contacto con el responsable	
Lugar de Trabajo	CEDECOR (Centro de Estudio de Compuestos Orgánicos) – Fac.Cs.Exactas UNLP
Teléfono	221-559-7171 (Dr. Laurella) / 11-3400-0190 (Dr. Colasurdo)
Correo electrónico	<a href="mailto:sllaurella@quimica.unlp.edu.ar">sllaurella@quimica.unlp.edu.ar</a> / <a href="mailto:diego.colasurdo@quimica.unlp.edu.ar">diego.colasurdo@quimica.unlp.edu.ar</a>