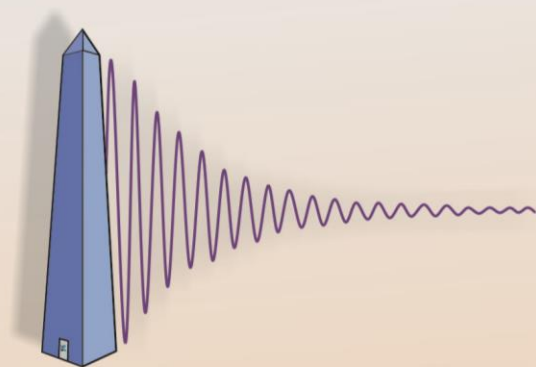


# IV Taller de Resonancia Magnética

6 y 7 de septiembre de 2018

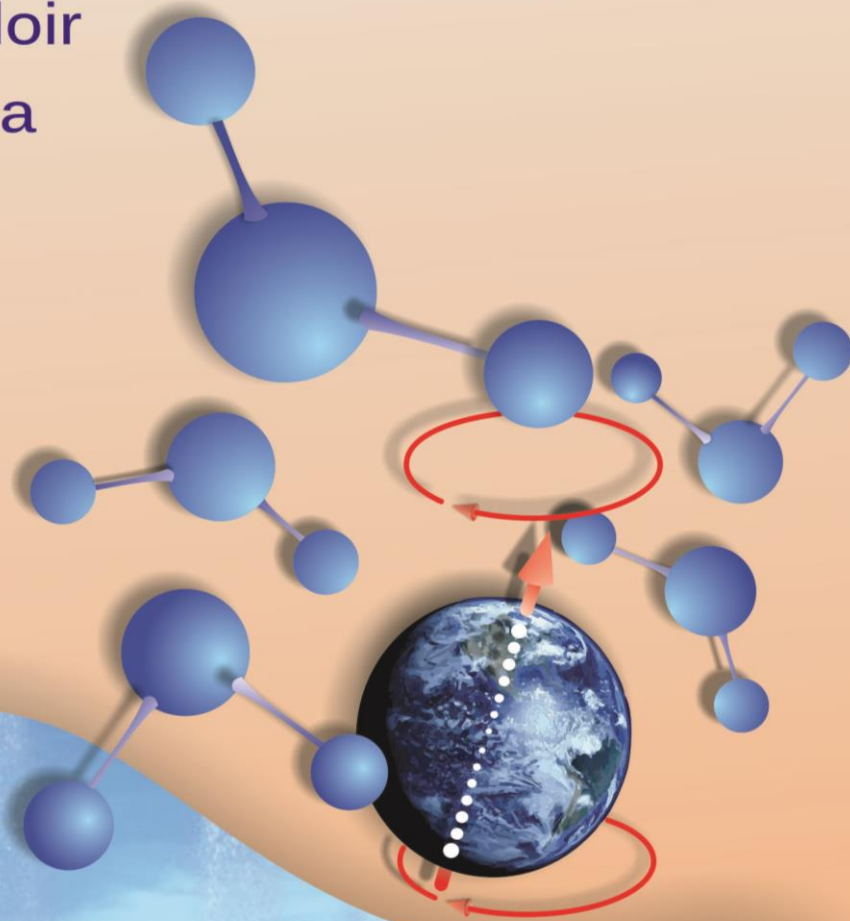


Fundación Instituto Leloir  
Buenos Aires, Argentina

---

Libro de Resúmenes

---



Parque Centenario, Buenos Aires

# IV Taller de Resonancia Magnética

## Comité organizador

**Rosana I. Misico**

UMYMFOR-FCEN, CONICET-UBA  
Buenos Aires, Argentina

**Javier A. Ramírez**

UMYMFOR-FCEN, CONICET-UBA  
Buenos Aires, Argentina

**Pablo A. Hoijemberg**

CIBION-CONICET  
Buenos Aires, Argentina

**Clara Smal**

Fundación Instituto Leloir, IIBBA-CONICET  
Buenos Aires, Argentina

**Martín Arán**

Fundación Instituto Leloir, IIBBA-CONICET  
Buenos Aires, Argentina

## Comité científico

**Gonzalo Álvarez**

Centro Atómico Bariloche, CNEA,  
Bariloche, Argentina

**Ana Gennaro**

FBCB, UNL e IFIS Litoral, UNL-CONICET,  
Santa Fe, Argentina.

**Gustavo Monti**

Instituto de Física Enrique Gaviola  
(IFEG-FAMAF, CONICET-UNC),  
Córdoba, Argentina

**Guillermo Moyna**

Departamento de Química del Litoral,  
Universidad de la República, República  
Oriental del Uruguay

**Jorge A. Palermo**

UMYMFOR-FCEN, CONICET-UBA,  
Buenos Aires, Argentina

**Rodolfo Rasia**

IBR, UNR-CONICET,  
Rosario, Argentina

**Sede**

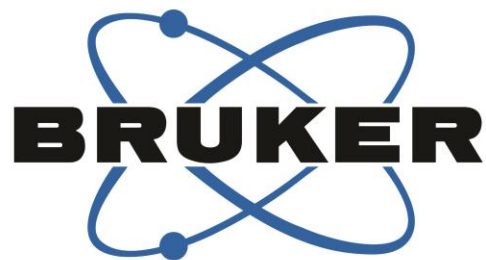
**Fundación Instituto Leloir,**

**Buenos Aires, Argentina**

**Septiembre 2018**

# IV Taller de Resonancia Magnética

## Sponsors



# Programa

## Jueves 6

9:00 - 9:30

**ACREDITACIÓN**

9:30 - 9:40

**APERTURA DEL TALLER**

9:40 - 10:20

**Roderick E. WASYLISHEN**

**C1:** "Solid-State NMR Characterization of Materials used in Perovskite Solar Cells - the Methylammonium Lead Halides"

10:20 – 10:50

**Juan Manuel LÁZARO MARTÍNEZ**

**C2:** "Aplicaciones de la RMN en estado sólido al estudio de materiales"

10:50 – 11:20

**Descanso & Café.**

11:20 – 11:50

**Paula BURDISSO**

**C3:** "Determinación de perfiles metabólicos por RMN  $^1\text{H}$ "

11:50 – 12:20

**Roberto GIL**

**C4:** "Análisis estructural de compuestos orgánicos usando RCSAs medidos en geles y en fases LLC en disolventes orgánicos"

## INTERVALO

14:00 – 14:30

**Yamila GARRO LINK**

**C5:** "NMR Crystallography in Pharmaceutical Compounds"

14:30 – 15:00

**Ariel SAROTTI**

**C6:** "New tools of structural elucidation by quantum NMR calculations"

15:00 – 15:15

**Jimena DÍAZ**

**CO1:** "Determinación de las barreras de enantiomerización de 1-imino-2- arilisoindolinas y 1-aril-2-iminopirrolidinas atropisoméricas empleando RMN dinámico (dNMR) y exchange spectroscopy (EXSY)"

15:15 – 15:30

**Martín E. NOGUERA**

**CO2:** "Caracterización de la dinámica interna e intercambio conformacional de la frataxina humana"

15:30 – 16:30	<b>Pósteres (PO1–PO19) &amp; Café</b>
16:30 – 17:00	<b>María Gabriela RIVAS</b>  <b>C7:</b> "Engineering the Cys-His bridge to evaluate the electron transfer between T1 and T2 copper sites of nitrite reductases"
17:00 – 17:40	<b>Jorge JOVICICH</b>  <b>C8:</b> "Exciting the proton to study and save the brain: resting-state functional connectivity in brain awake surgery"

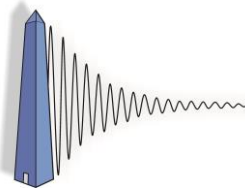
## Viernes 7

9:30 - 10:10	<b>María del Pilar BUERA</b>  <b>C9:</b> "Tiempos de relajación de la magnetización nuclear para interpretar aspectos de las transformaciones y de la estabilidad de alimentos"
10:10 - 10:40	<b>Rodolfo M. RASIA</b>  <b>C10:</b> "Conserved linker length in double dsRBD proteins from plants restricts interdomain motion"
10:40 – 11:10	<b>Descanso &amp; Café.</b>
11:10 – 11:50	<b>Armando NAVARRO VAZQUEZ</b>  <b>C11:</b> "Ajustes multiparamétricos para la determinación de configuración relativa en compuestos orgánicos (CASE-3D)"
11:50 – 12:20	<b>Esteban ANOARDO</b>  <b>C12:</b> "Fast field-cycling NMR technology: present and future perspectives for relaxometry and MRI"

## INTERVALO

14:00 – 14:30	<b>Carolina FONTANA MALAN</b>  <b>C13:</b> "Espectroscopía de RMN de polisacáridos bacterianos: aplicación al estudio de la unidad biológica repetitiva del PS-C de <i>S. Pneumoniae</i> "
14:30 – 15:00	<b>Gonzalo A. ÁLVAREZ</b>  <b>C14:</b> "Tecnologías cuánticas en espectroscopia e imágenes por resonancia magnética nuclear"

15:00 – 15:15	<b>Andrés LÓPEZ</b>  <b>CO3:</b> "Aplicación de la metabolómica basada en RMN al estudio del periodo de transición en ganado lechero"
15:15 – 15:30	<b>Ayelén CRESPI</b>  <b>CO4:</b> "Síntesis y caracterización de diversos complejos de cobalto con ligandos de tipo piridínicos"
15:30 – 16:30	<b>Pósteres (PO20-PO38) &amp; Café.</b>
16:30 – 17:00	<b>María Belén FRANZONI</b>  <b>C15:</b> "Estados de vida media prolongada en RMN y su aplicación en medios porosos"
17:00 – 17:40	<b>Teodor PARELLA COLL</b>  <b>C16:</b> "Conceptos modernos en RMN de alta resolución"
17:40 – 18:00	<b>CIERRE DEL TALLER</b>



# IV Taller de Resonancia Magnética

6 y 7 de septiembre de 2018

Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina

PO32.

## ALCANCES Y LIMITACIONES DEL EMPLEO DE DP4+ EN LA ASIGNACIÓN DE CONFIGURACIÓN ABSOLUTA MEDIANTE RMN

María M. Zanardi<sup>1,2</sup> Franco Biglione,<sup>2</sup> Maximiliano Sortino<sup>1</sup> y Ariel M. Sarotti<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Área Farmacognosia, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario, Suipacha 531, Rosario 2000, Argentina <sup>2</sup>Facultad de Química e Ingeniería del Rosario, Pontificia Universidad Católica Argentina, Av. Pellegrini 3314, Rosario 2000, Argentina. <sup>3</sup>Instituto de Química Rosario (CONICET), Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario, Suipacha 531, Rosario 2000, Argentina

Configuración absoluta, modelado molecular, DP4+.

La determinación de la configuración absoluta (CA) es una de las etapas más importantes y desafiantes durante la elucidación estructural de moléculas quirales. Para ello, se dispone de distintos métodos, incluidos análisis por cristalografía de rayos X, espectroscopia quiral, síntesis química, y análisis de RMN. El método más conveniente dependerá de diferentes factores, incluida la funcionalidad que rodea a los centros estereogénicos, equipamiento disponible y cantidad y propiedades de la muestra a analizar. Curiosamente, todos estos métodos poseen ciertas imprecisiones que pueden conducir a una asignación incorrecta, lo que hace que la determinación de CA sea un área de investigación desafiante.

Entre los diferentes enfoques basados en la espectroscopia de RMN, los que involucran agentes de derivatización quirales (ADC) son los más populares. En este caso la estrategia implica una doble derivatización del sustrato con ambos enantiómeros del reactivo quiral; esto permite determinar los  $\Delta\delta_{RS}$  de los núcleos del sustrato que rodean el centro derivatizado, y así mediante la magnitud y signo de los mismos aplicando un modelo conformacional particular es posible determinar la CA de dicho estereocentro. Se ha descrito una amplia variedad de ADC, y en cada caso es necesario aplicar un modelo conformacional preciso y robusto para comprender el apantallamiento selectivo inducido por el grupo aromático típicamente presente en la mayoría de los ADC. Respecto a esto, es importante señalar que cada conformación juega un papel diferente en términos de la fuerza y dirección del efecto anisotrópico del resto aromático sobre los grupos vecinos a ambos lados del estereocentro. Por lo tanto, siempre que el equilibrio conformacional real difiera del modelo conformacional simplificado desarrollado para predecir la CA, el análisis podría conducir a una conclusión errónea. Esto, junto con los pequeños valores e incoherencias de signos, se encuentran entre las fuentes más comunes de errores en la determinación de CA mediante esta estrategia.

Dada la gran capacidad de DP4+ en la asignación estereoquímica<sup>1</sup> nos propusimos estudiar los alcances y limitaciones de esta probabilidad como herramienta de análisis simple y confiable para determinar la CA en compuestos derivatizados con ADC. Se exploraron sustratos con distintos grupos funcionales y una variedad de agentes de derivatización, obteniendo muy buenos niveles de confianza en la correcta asignación de configuración absoluta con simple derivatización y excelentes cuando se emplea una probabilidad combinada DIP para doble derivatización.

### Referencias:

- 1- a) Grimblat, N.; Zanardi, M. M.; Sarotti, A. M. *J. Org. Chem.* **2015**, *80*, 12526. b) Zanardi, M. M.; Suarez, A. G.; Sarotti, A. M. *J. Org. Chem.* **2017**, *82*, 1873.