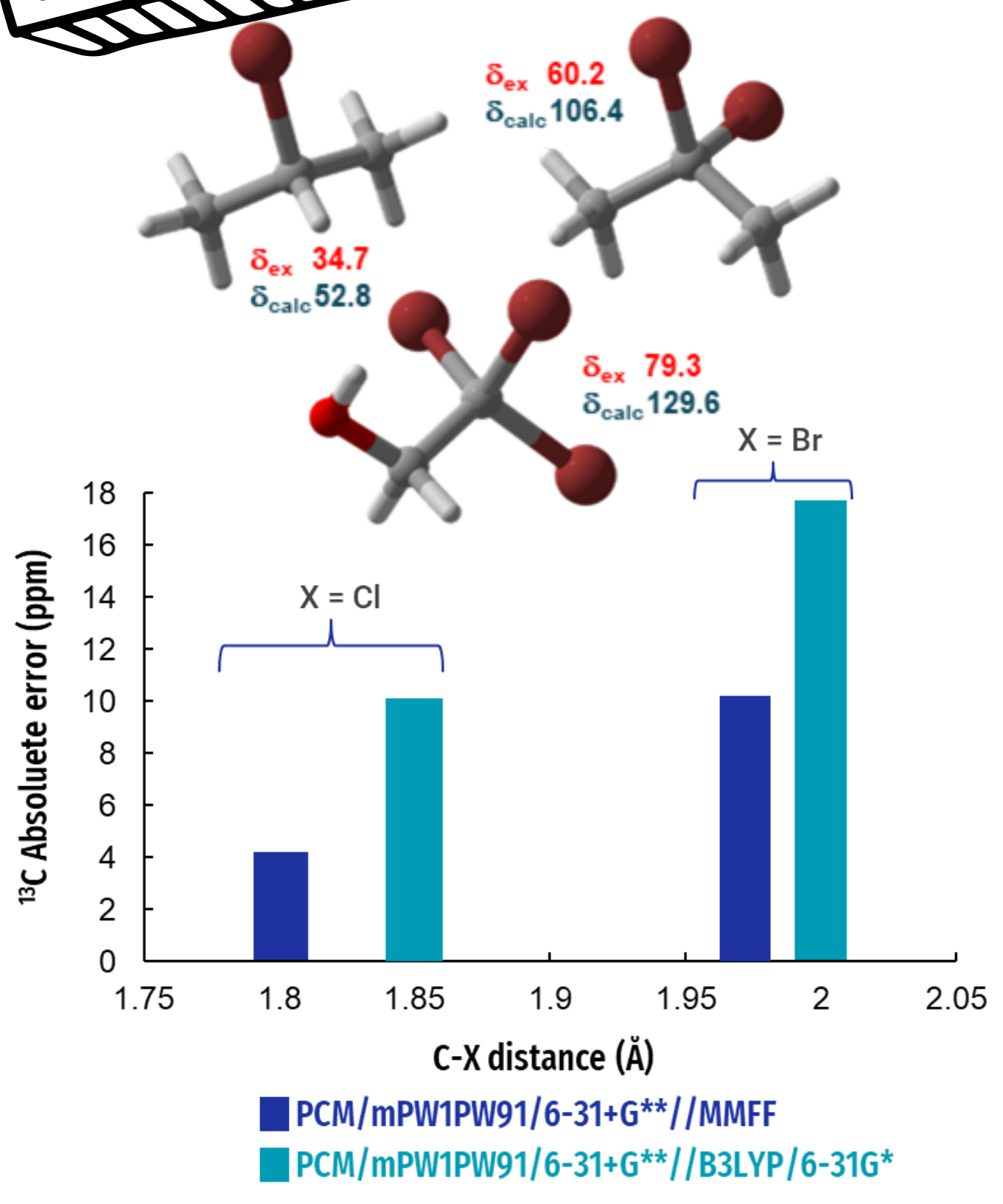


FQO-085

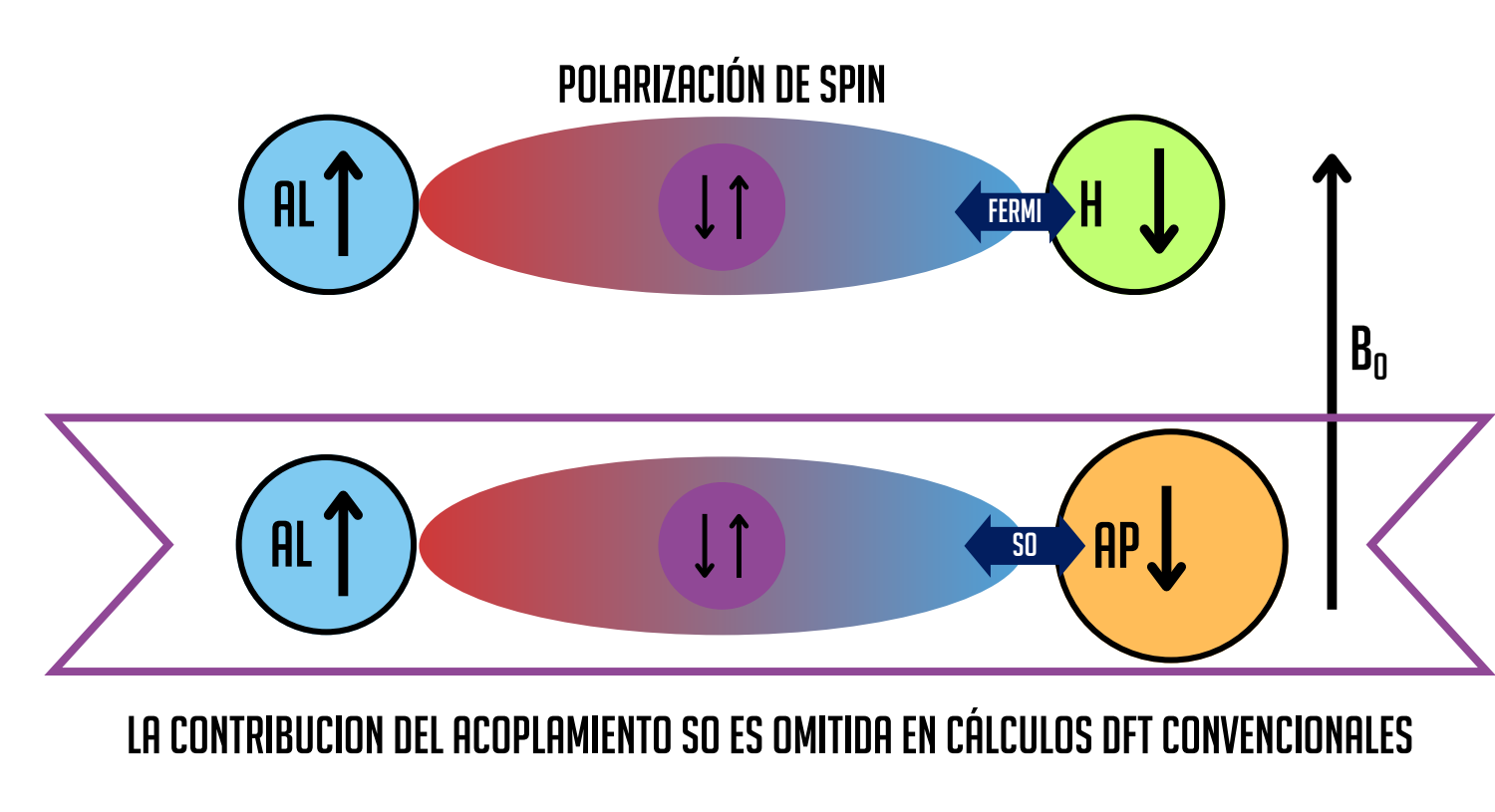
ESTUDIO DEL EFECTO DEL ÁTOMO PESADO EN EL CÁLCULO DE DESPLAZAMIENTOS QUÍMICOS DE RMN Y SU IMPACTO EN LA ASIGNACIÓN ESTEREOQUÍMICA POR DP4+

INTRODUCCIÓN

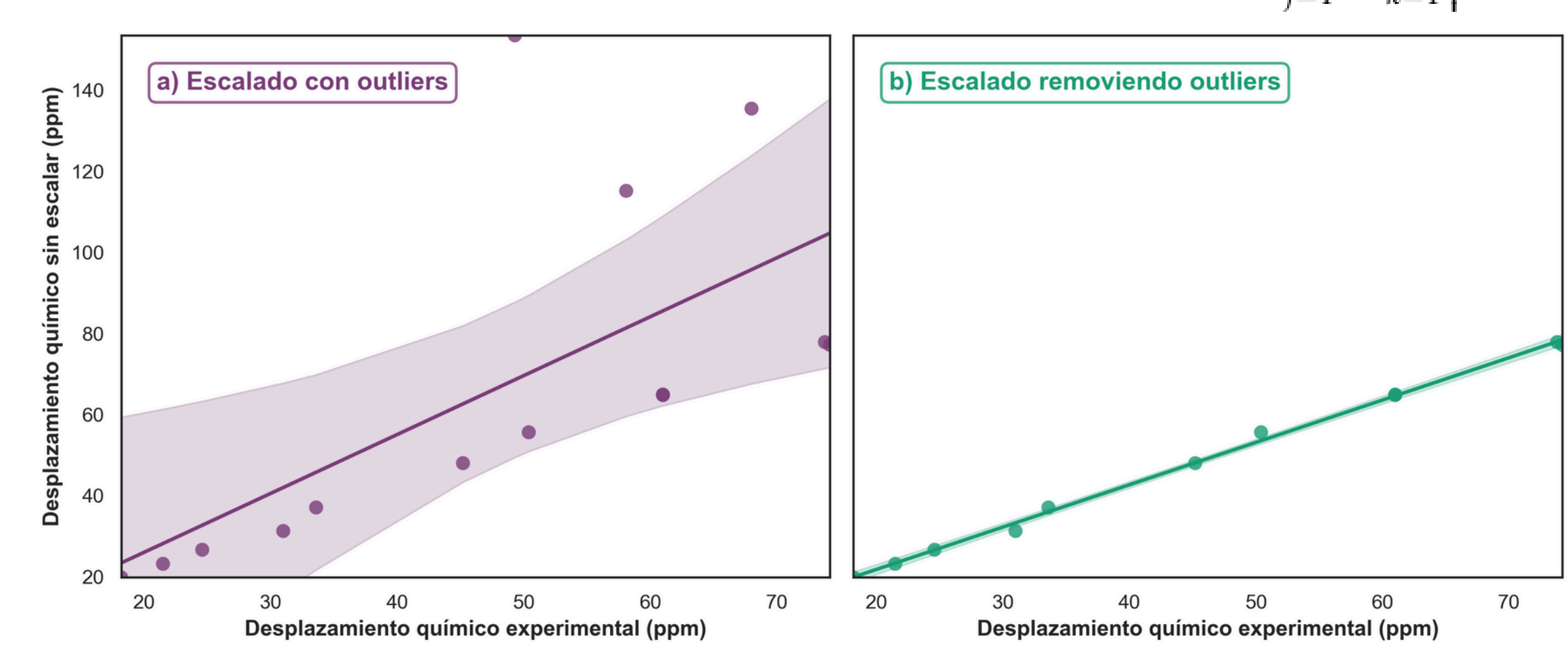
IMPACTO DE HALA EN RMN



La elucidación estructural asistida por cálculos de desplazamientos químicos de RMN, como el método DP4+, se ha consolidado como una herramienta eficaz para la determinación stereoquímica. Sin embargo, en moléculas que contienen átomos pesados como S, P, Cl o Br, el efecto HALA (Heavy Atom on Light Atom) puede modificar los desplazamientos químicos de los núcleos ligeros vecinos, afectando la confiabilidad de los cálculos y su interpretación.

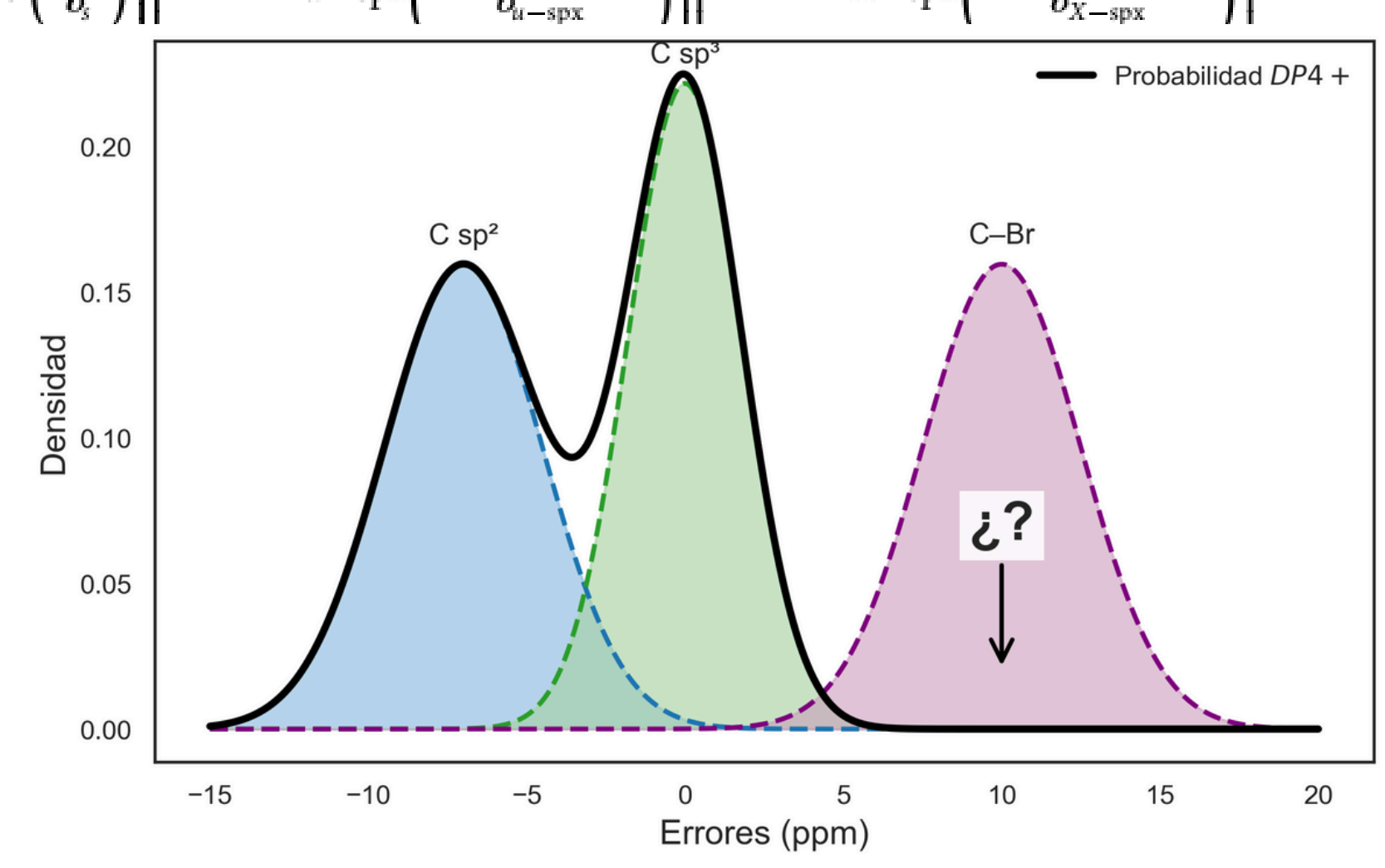


EFFECTO SOBRE DP4+



IMPACTO DE ERRORES GRANDES SOBRE PROBABILIDAD ESCALADA Y NO ESCALADA

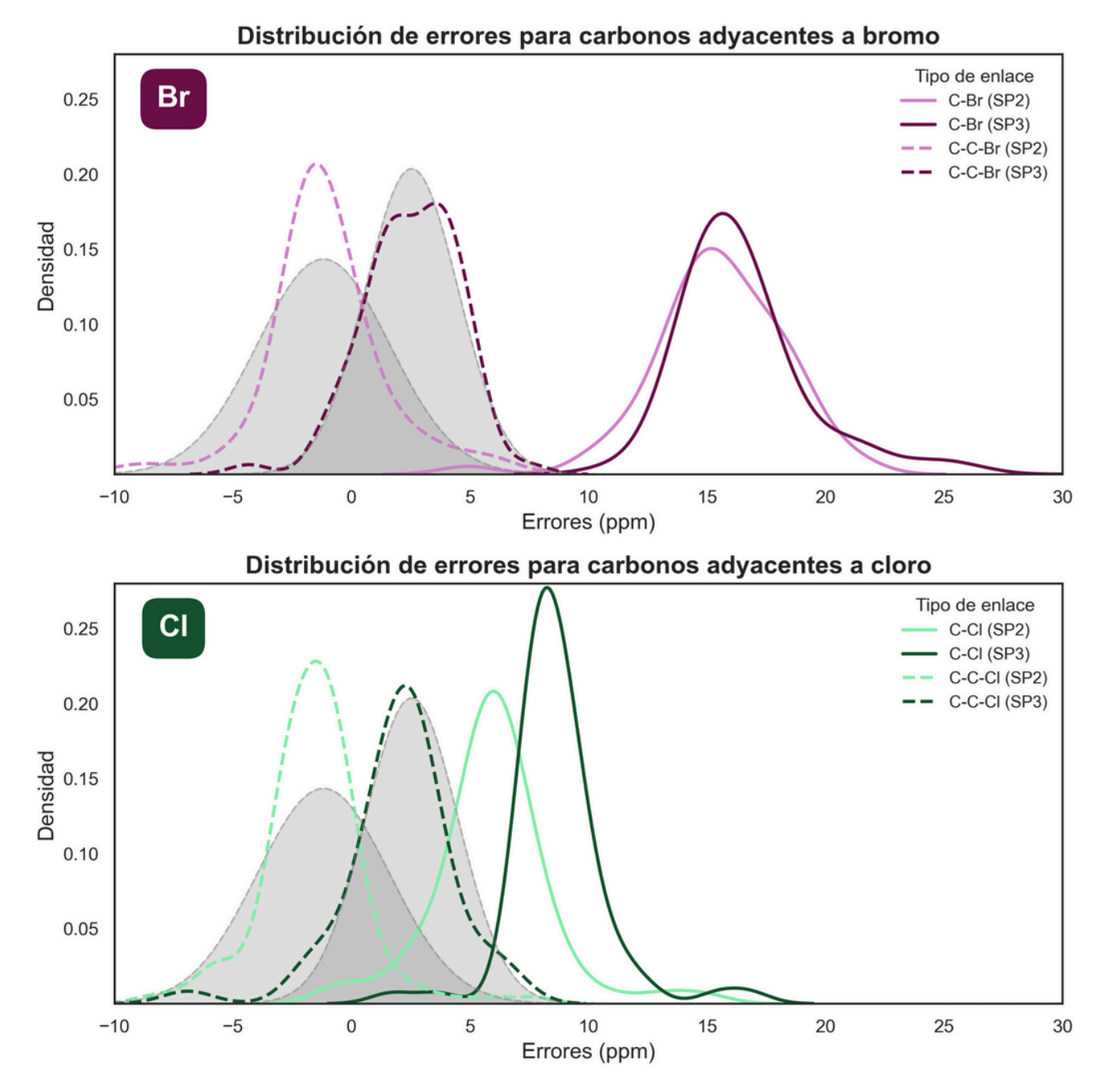
$$P(i) = \frac{\prod_{k=1}^N \left[1 - T_s^{\nu} \left(\frac{\epsilon'_{s,k}}{\sigma_s} \right) \right] \left[1 - T_{u-spx}^{\nu} \left(\frac{(\epsilon'_{s,k} - \mu_{u-spx})}{\sigma_{u-spx}} \right) \right] \left[1 - T_{X-spx}^{\nu} \left(\frac{(\epsilon'_{s,k} - \mu_{X-spx})}{\sigma_{X-spx}} \right) \right]}{\sum_{j=1}^m \prod_{k=1}^N \left[1 - T_s^{\nu} \left(\frac{\epsilon'_{s,k}}{\sigma_s} \right) \right] \left[1 - T_{u-spx}^{\nu} \left(\frac{(\epsilon'_{s,k} - \mu_{u-spx})}{\sigma_{u-spx}} \right) \right] \left[1 - T_{X-spx}^{\nu} \left(\frac{(\epsilon'_{s,k} - \mu_{X-spx})}{\sigma_{X-spx}} \right) \right]}$$



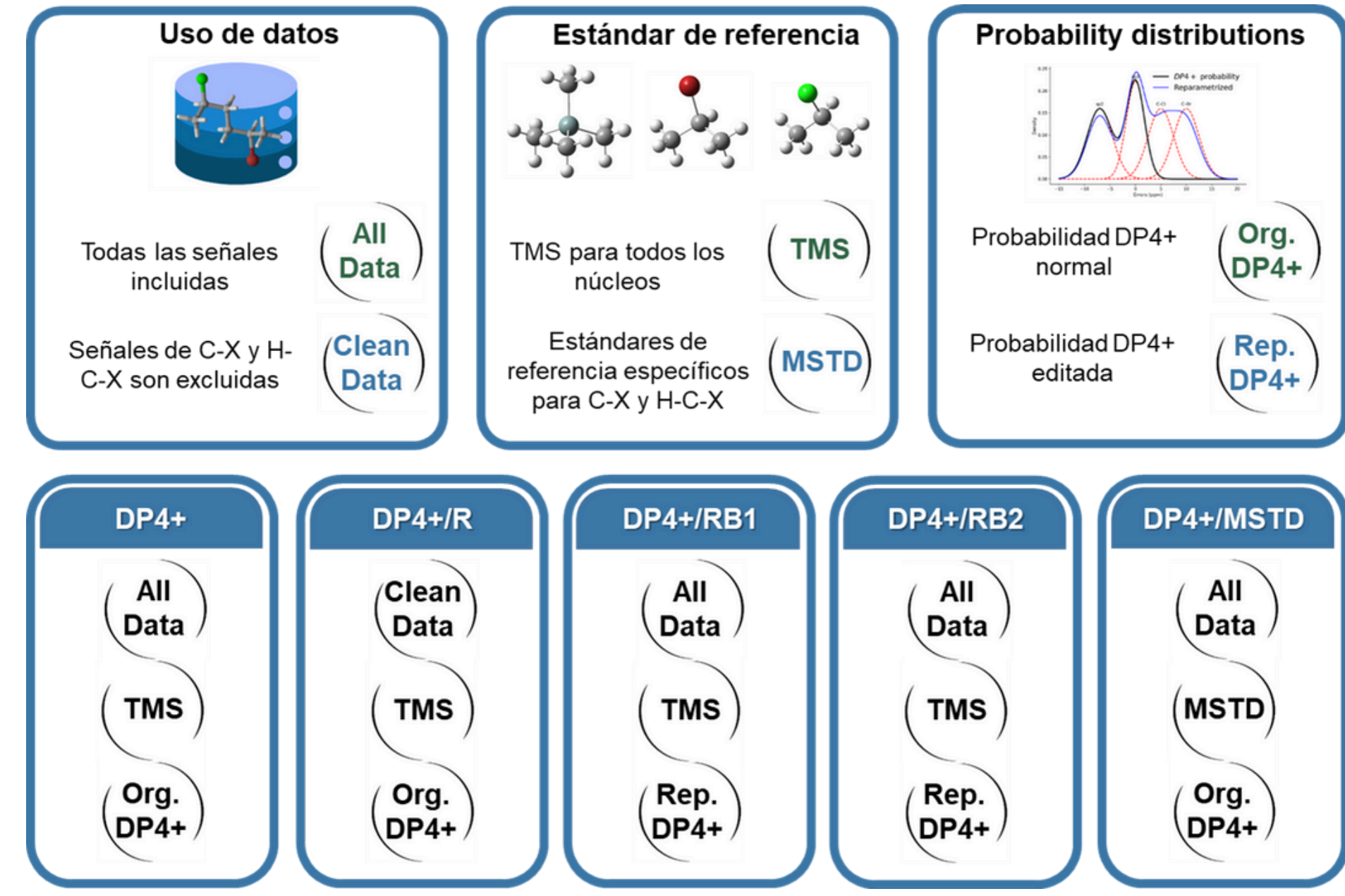
HALÓGENOS

FLUOR

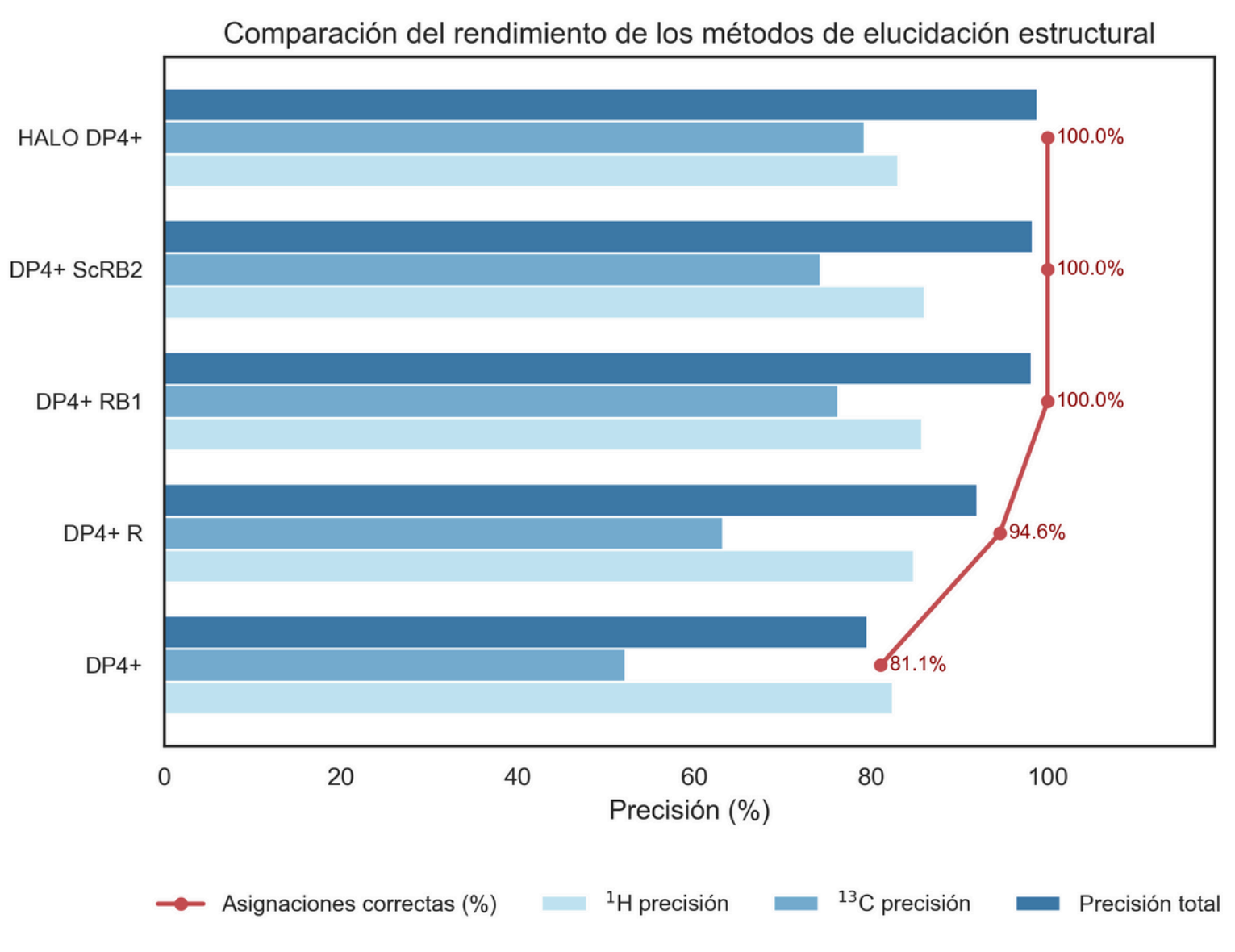
DISTRIBUCIÓN DE ERRORES NO ESCALADOS



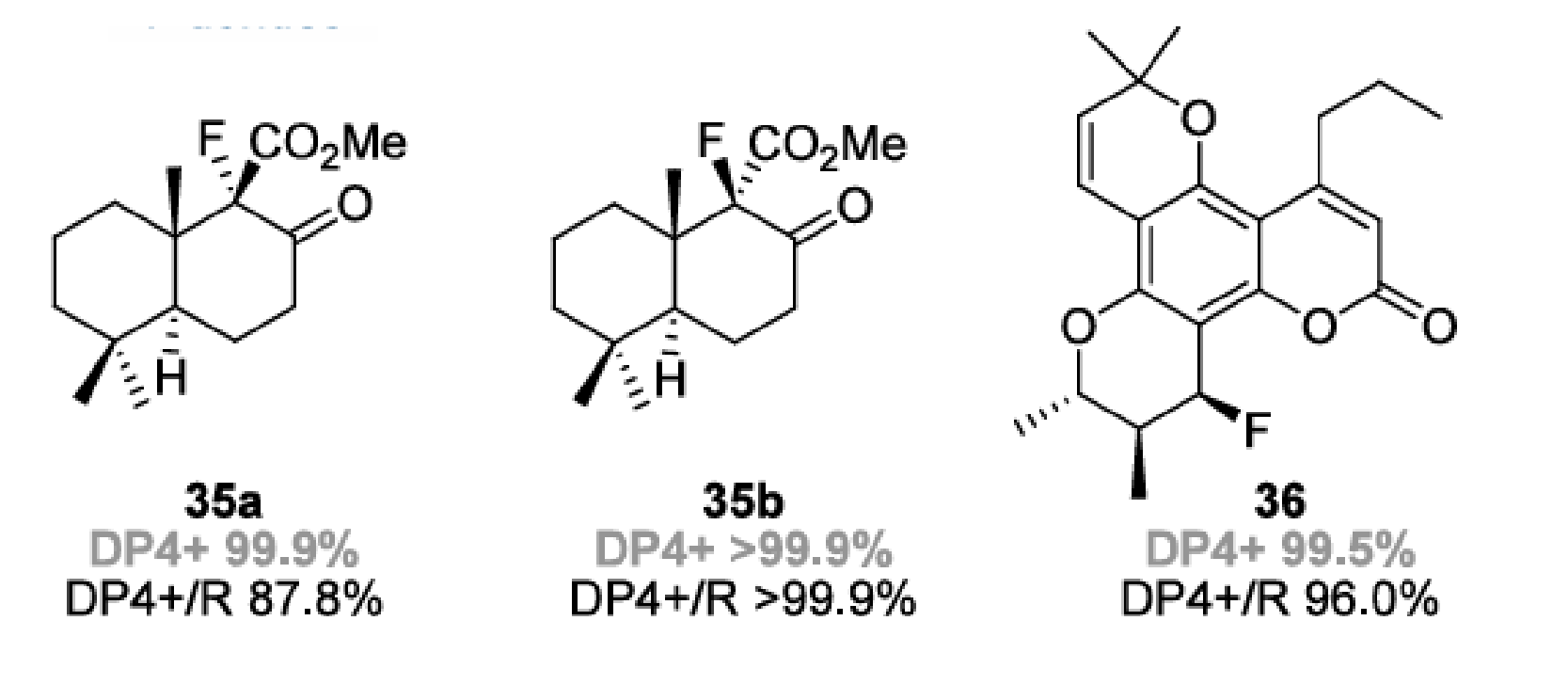
MÉTODOS DE CORRECCIÓN EVALUADOS



RESULTADOS

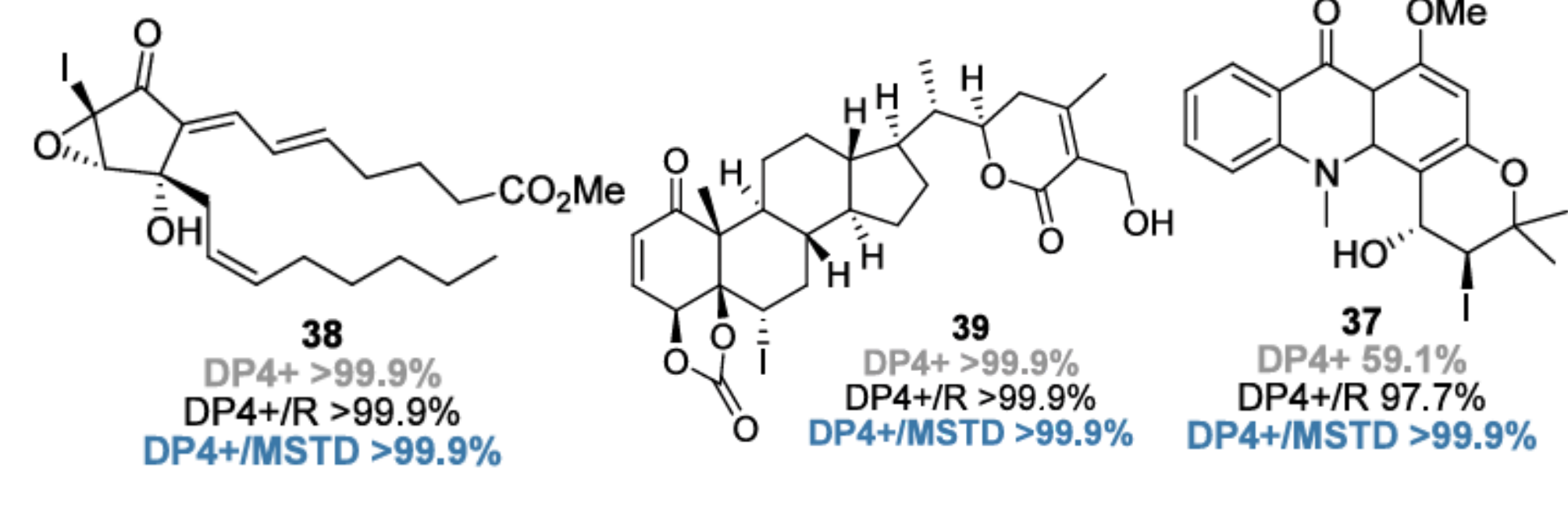


MAE Error no escalado C-F: 1.5 ppm

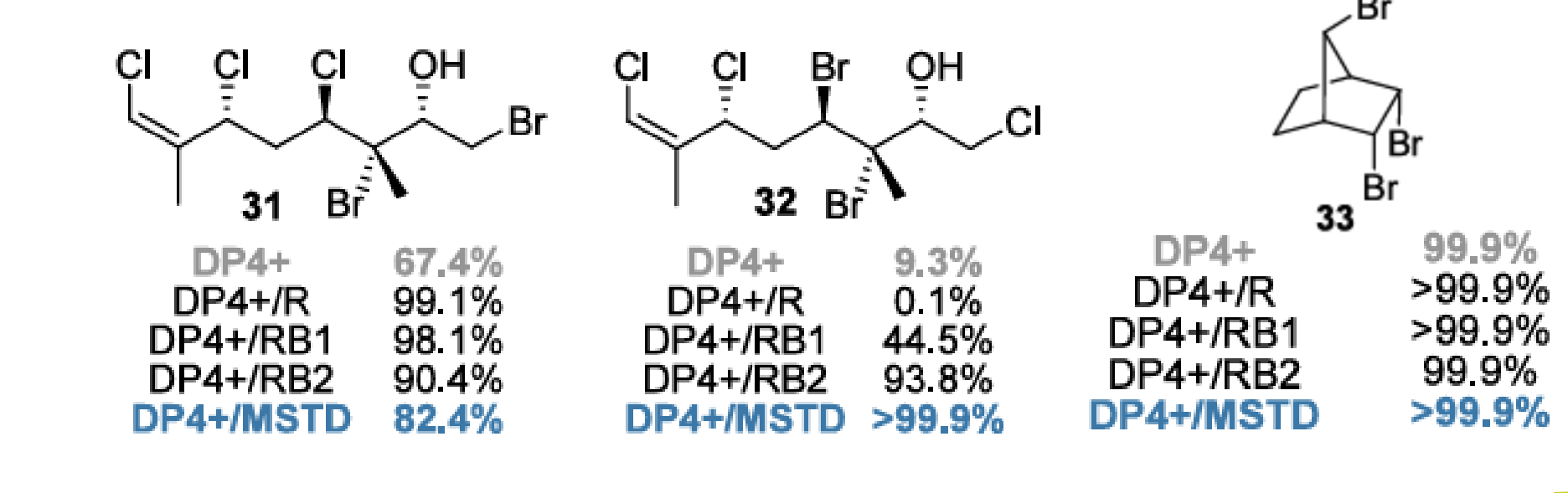


YODO

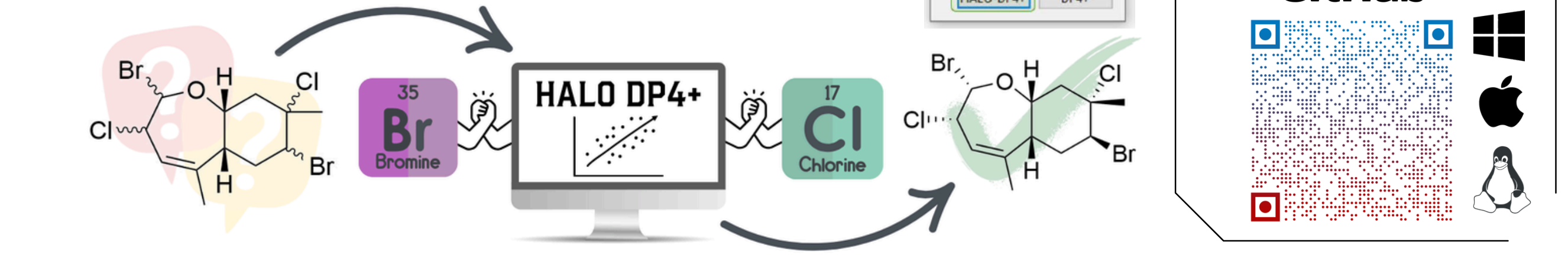
MAE Error no escalado C-I: 35 ppm



EVALUACIÓN DE LOS MÉTODOS SOBRE SISTEMAS DESAFIANTES



AUTOMATIZACIÓN DE HALO-DP4+ COMO DESKTOP APP



AZUFRE

CONCLUSIONES

MOLEC CON S

REF

REF

QR