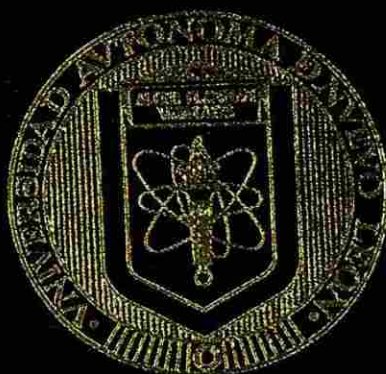


UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON

FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS



SINTESIS DE INDOLOQUINOLIZINAS
SUSTITUIDAS EN EL ANILLO "A"
UTILIZANDO LA REACCION DE TEUBER.

Por

L.Q.I. ESAUL VILLARREAL PLATAS

Como requisito parcial para obtener el Grado de
MAESTRIA EN CIENCIAS CON ESPECIALIDAD
EN QUIMICA ORGANICA

ENERO, 2001

SINTESIS DE INDOLOQUINOLIZINAS

SUSTITUIDAS EN EL ANILLO "A"

UTILIZANDO LA REACCION DE TUBBER.

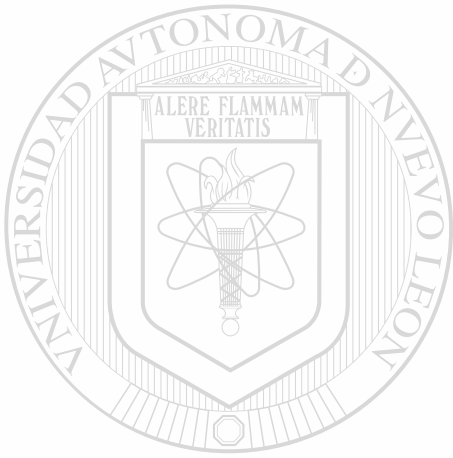
TM

Z5521

FCQ

2001

V5



UANL

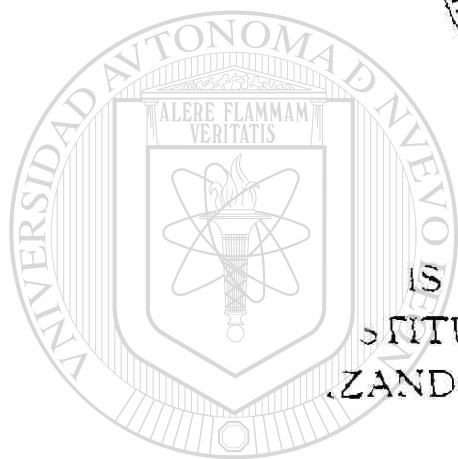
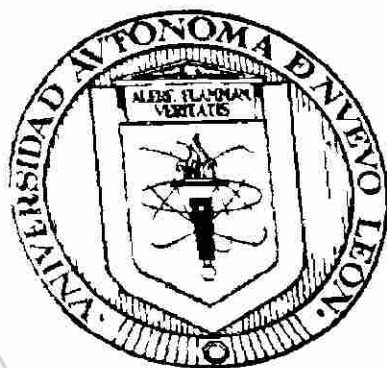
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON

FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS



IS DE INDOLOQUINOLIZINAS
SITUIDAS EN EL ANILLO "A"
ZANDO LA REACCION DE TEUBER

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

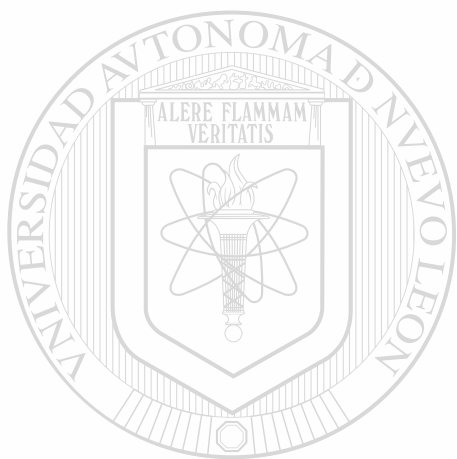
Por

DIRECCIÓN ESAUL VILLARREAL PLATASCAS

Como requisito parcial para obtener el Grado de
MAESTRIA EN CIENCIAS CON ESPECIALIDAD
EN QUIMICA ORGANICA

ENERO. 2001

M
2558
FQQ
201
Vs



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



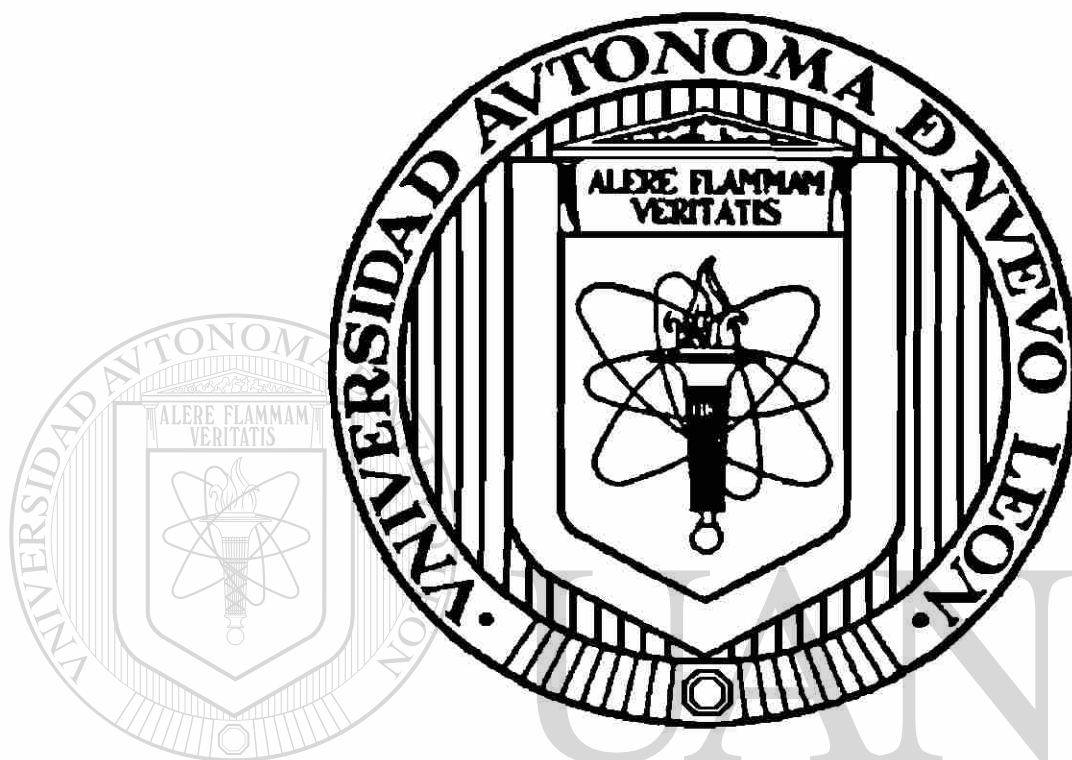
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



FONDO
TESIS

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS



**SÍNTESIS DE INDOLOQUINOLIZINAS SUSTITUIDAS EN
EL ANILLO "A" UTILIZANDO LA REACCIÓN DE
TEUBER.**

**DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS
Por**

L.Q.I. Esaúl Villarreal Platas

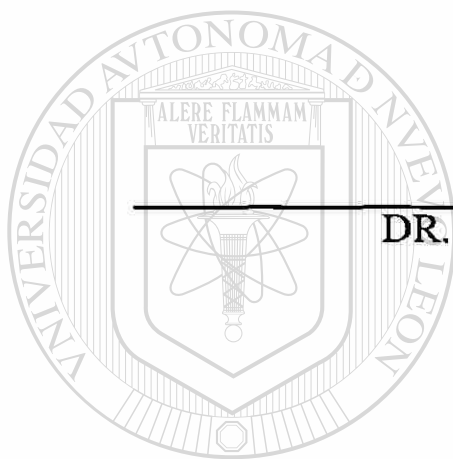
**Como requisito parcial para obtener el grado de
MAestrÍA EN CIENCIAS CON ESPECIALIDAD EN
QUÍMICA ORGÁNICA.**

Enero, 2001

**SÍNTESIS DE INDOLOQUINOLIZINAS SUSTITUIDAS EN
EL ANILLO "A" UTILIZANDO LA REACCIÓN DE TEUBER.**

Aprobación de la comisión de tesis:

DR. RAMIRO QUINTANILLA LICEA
Asesor de tesis



DR. JOSE MA. VIADER SALVADO
Comisión de tesis



DR. JAVIER MACOSSAY TORRES
Comisión de tesis

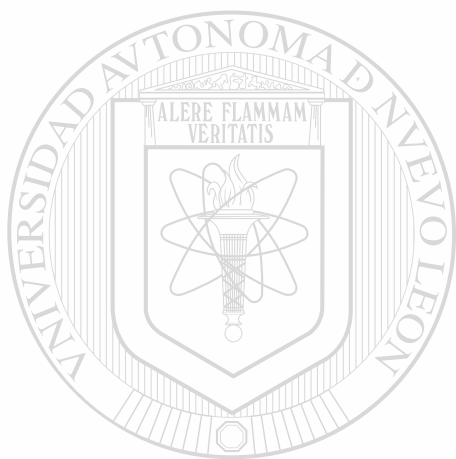
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

M. C. MARTHA SUAREZ HERRERA
Coordinadora de la Maestría en Ciencias

DEDICATORIA

A la memoria de Maria de los Ángeles Platas González, que por mucho tiempo sufrió la enfermedad a la que este trabajo pretende aportar una solución.

A mis padres, hermanos y familiares en general.



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

AGRADECIMIENTOS

A Dios.

A mis padres por apoyarme en cada una de las metas que me he propuesto.

A mis hermanos, Norma Rubí (La Perrucha) y Daniel (Sascuash), por estar ahí cuando los necesito y, aunque ellos no lo crean, por hacerme pasar buenos momentos.

A toda mi familia en general que siempre me han alentado a superarme y han contribuido a que llegara a este punto.

A Dora Estela Hernández e Imelda Xochitl Padilla por aguantarme todo el tiempo que estuve en la facultad y dejarme calentar la comida en el microondas.

Al Dr. Ramiro Quintanilla Licea por la paciencia que a lo largo de más de 3 años ha tenido para conmigo y por lo que de él he aprendido.

Al Dr. Javier Macossay por la colaboración prestada para el desarrollo de este trabajo y sus comentarios alentadores.

Al Dr. José Ma. Viader por los comentarios y correcciones hechos a este trabajo.

Al L.Q.I. José Juan Gutiérrez por las sugerencias hechas durante el desarrollo de este trabajo

A Enrique, Margarita, Ruth, Aidé, Virginia, la maita (Nohemí), mi compadre Oscar, Colunga y Walter, con quienes compartí mucho tiempo en el laboratorio y me la pasé muy bien.

A la Q. I. Blanca Neri Segura por sus comentarios de aliento y pláticas tan amenas.

Al personal de Reacciones Químicas, en especial al departamento de Gerencia Técnica y al de Sistemas, que contribuyeron a la realización de este trabajo.

A Verónica Rivas y Adolfo Caballero por su gran disponibilidad y la ayuda prestada en la obtención de los espectros de RMN.

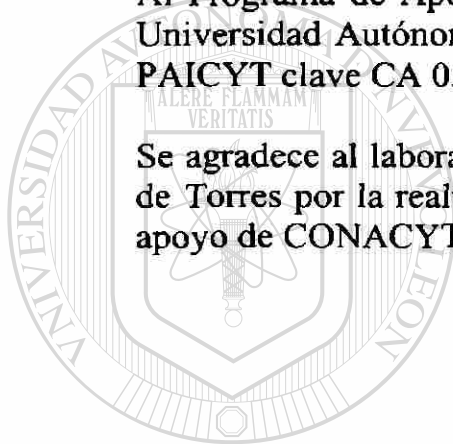
Al Departamento de Servicios Profesionales de la Facultad de Ciencias Químicas por permitirme usar su equipo de Infrarrojo.

A todos mis amigos, que gracias a Dios son muchos, y que no nombro por temor a omitir algún nombre.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca otorgada, a través del proyecto No. 1139P-A9507.

Al Programa de Apoyo a la Investigación Científica y Tecnológica de la Universidad Autónoma de Nuevo León por la beca obtenida del proyecto PAICYT clave CA 058-98.

Se agradece al laboratorio de RMN dirigido por la Dra. Nohemí Waskman de Torres por la realización de los espectros. Este equipo se instaló con el apoyo de CONACYT según convenio F512-N9306.



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

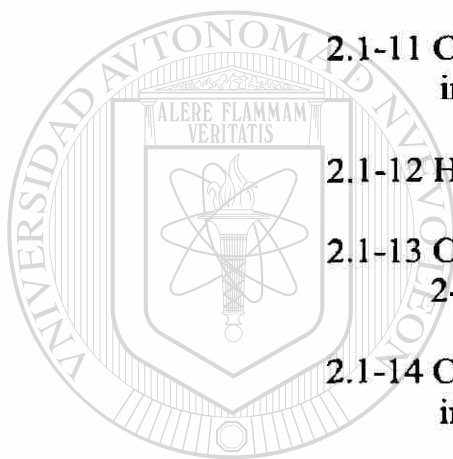
TABLA DE CONTENIDO

Capítulo	Página
1. INTRODUCCIÓN	
1.1 Generalidades	1
1.2 Antecedentes	2
1.3 Objetivos	3
1.4 Metodología	4
1.5 Esquema sintético	5
1.6 Fundamento	6
2. PARTE TEÓRICA	
2.1 Discusión de los resultados experimentales	
2.1-1 Síntesis del hidrocloreuro de triptamina	15
2.1-2a Síntesis del cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	16
2.1-2b Síntesis del cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio usando metanol como solvente	17
2.1-3 Síntesis del cloruro de 3-acetil-2-metil-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	20
2.1-4 Hidrocloreuro de 5-nitrotriptamina	21
2.1-5 Hidrocloreuro de 5-metoxitriptamina	22

2.1-6 Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-9-metoxi-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	23
2.1-7 Cloruro de 3-acetil-2-metil-9-metoxi-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	23
2.1-8 Hidrocloruro de 5-isopropiltriptamina	24
2.1-9 Hidrocloruro de 5-fluortriptamina	25
2.1-10 Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-9-fluor-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	26
2.1-11 Cloruro de 3-acetil-9-fluor-2-metil-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	29
2.1-12 Hidrocloruro de 5-bromotriptamina	30
2.1-13 Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-9-bromo-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	31
2.1-14 Cloruro de 3-acetil-9-bromo-2-metil-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	33

2.2 Discusión de espectros

2.2-1 Hidrocloruro de triptamina	35
2.2-2a Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	38
2.2-2b 1,3,5-triacetilbenceno	42
2.2-3 Cloruro de 3-acetil-2-metil-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	44
2.2-4 Fenilhidrazona de la <i>p</i> -nitrofenilhidrazina y el γ -aminobutiraldehído	47
2.2-5 Hidrocloruro de 5-metoxitriptamina	49

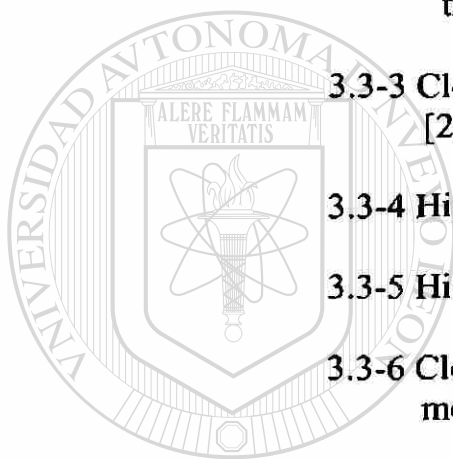


2.2-6 Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-9-metoxi-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	52
2.2-7 Cloruro de 3-acetil-2-metil-9-metoxi-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	55
2.2-8 Hidrocloruro de 5-isopropiltriptamina	57
2.2-9 Hidrocloruro de 5-fluortriptamina	57
2.2-10a Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-9-fluor-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	61
2.2-10b Cloruro de 18-acetil-10-fluor-19-metil-3, 4, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21-dehidroyohimbano	64
2.2-11 Cloruro de 3-acetil-9-flúor-2-metil-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	66
2.2-12 Hidrocloruro de 5-bromotriptamina	68
2.2-13a Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-9-bromo-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	71
2.2-13b Cloruro de 18-acetil-10-bromo-19-metil-3, 4, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21-dehidroyohimbano	73
2.2-14 Cloruro de 3-acetil-9-bromo-2-metil-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	76

3. PARTE EXPERIMENTAL

3.1 Descripción de lo reactivos	78
3.2 Material y equipo	79

3.3 Procedimientos	
3.3-1 Hidrocloruro de triptamina	80
3.3-2a Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	81
3.3-2b Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio usando metanol como solvente	83
3.3-2c Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio a partir de triptamina	84
3.3-3 Cloruro de 3-acetil-2-metil-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	85
3.3-4 Hidrocloruro de 5-nitrotriptamina	86
3.3-5 Hidrocloruro de 5- metoxitriptamina	89
3.3-6 Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-9-metoxi-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	91
3.3-7 Cloruro de 3-acetil-2-metil-9-metoxi-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	92
3.3-8 Hidrocloruro de 5-isopropiltriptamina	94
3.3-9 Hidrocloruro de 5-fluortriptamina	96
3.3-10a Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-9-fluor-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	97
3.3-10b Cloruro de 18-acetil-10-fluor-19-metil-3, 4, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21-dehidroyohimbano	99
3.3-11 Cloruro de 3-acetil-9-flúor-2-metil-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	100



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

®

3.3-12	Hidrocloruro de 5-bromotriptamina	101
3.3-13a	Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-9-bromo-2-metil-6 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	102
3.3-13b	Cloruro de 18-acetil-10-bromo-19-metil-3, 4, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21-dehidroyohimbano	104
2.3-14	Cloruro de 3-acetil-9-bromo-2-metil-12 <i>H</i> -indolo[2,3- <i>a</i>]quinolizinio	105

4. CONCLUSIONES

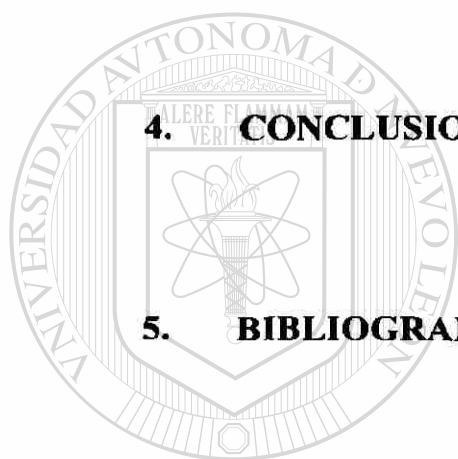
106

5. BIBLIOGRAFÍA

109

6. APÉNDICE A: ESPECTROS DE INFRARROJO.

7. APÉNDICE B: ESPECTROS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR.



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

RESUMEN

L.Q.I. Esaúl Villarreal Platas

Fecha de graduación: Enero, 2001

Universidad Autónoma de Nuevo León

Facultad de Ciencias Químicas

Título del Estudio: SÍNTESIS DE INDOLOQUINOLIZINAS SUSTITUIDAS EN EL ANILLO "A" UTILIZANDO LA REACCIÓN DE TEUBER.

Número de páginas: 113

Candidato para el grado de Maestría en Ciencias con Especialidad en Química Orgánica.

Área de Estudio: Química Orgánica.

Propósito y método de estudio: Se sintetizaron los cloruros de 9-flúor-, 9-bromo- y 9-metoxi-indoloquinolizino mediante una secuencia de cuatro pasos, partiendo de los hidroccloruros de fenilhidrazina correspondientes, obteniéndose rendimientos globales que oscilan entre el 10 y el 17 %. Se lograron aislar tres subproductos durante la síntesis de las dihidro-indoloquinolizinas fluorada y bromada. Se proponen estructuras así como un mecanismo de reacción para la formación de cada uno de estos compuestos. Se intentó la síntesis, sin éxito, de los hidroccloruros de 5-nitro-, 5-metoxi- y 5-isopropil-triptamina, utilizando una modificación de la síntesis de indol de Fischer. La síntesis del cloruro de dihidro-indoloquinolizino mediante la reacción de Teuber usando metanol como solvente, se discute en el presente trabajo, así como el uso de triptamina básica como reactivo de partida en la misma reacción. Todos los compuestos mencionados anteriormente se caracterizaron por medio de espectroscopía de infrarrojo y de resonancia magnética nuclear; de esta última se obtuvieron espectros de protones, carbono-13, COSY, DEPT 135, HMBC y HMQC.

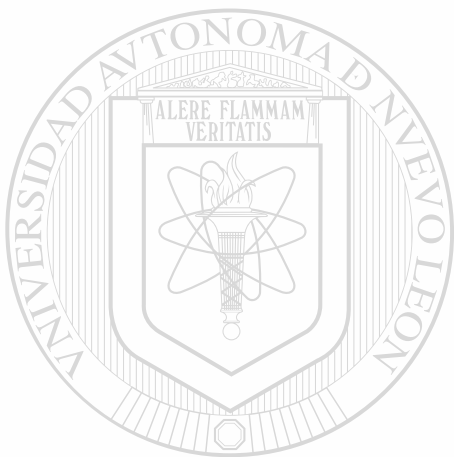
Contribuciones y conclusiones: En este trabajo se lograron obtener y caracterizar los cloruros de 9-flúor, 9-bromo y 9- metoxi-indoloquinolizino.

FIRMA DEL ASESOR:

Dr. Ramiro Quintanilla Licea

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



1.1 GENERALIDADES

El objetivo fundamental de la quimioterapia¹ del cáncer debería ser el uso de compuestos que destruyan selectivamente *in vitro* e *in vivo* la capacidad proliferativa de células cancerosas sin afectar notablemente la multiplicación y supervivencia de células normales. Los efectos laterales indeseables de prácticamente todas las drogas anticancer usadas en el tratamiento de esta enfermedad, son su toxicidad para los tejidos y el daño particularmente severo que causan sobre las células hematopoiéticas.

El potencial mutagénico y/o carcinógeno de estas drogas observado en células eucariotas y animales, señala claramente la necesidad de una nueva generación de drogas anticancerígenas que posean mayor selectividad.

La búsqueda de sustancias producidas por la naturaleza o sintetizadas químicamente que tengan una gran afinidad por el ADN de células cancerosas se ha llevado a cabo en gran escala², algunas de estas sustancias se enlazan a las bases del ADN. Su interacción con este último resulta en la inhibición preferencial ya sea de la transcripción del ADN en ARN o en la replicación del ADN. Varias drogas usadas en la terapia del cáncer tienen tales propiedades pero también actúan como mutágenos (como lo hacen los carcinógenos) hacia las células normales.

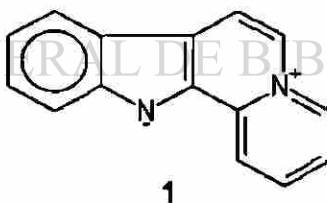
Se ha mostrado que el ADN de células, cancerosas y no cancerosas, de mamíferos y de plantas, exhibe un patrón de actividad diferente, *in vitro*.

Así, en un ensayo bioquímico (oncotest), fue posible demostrar que los carcinógenos estimulan preferentemente, y en gran medida, la síntesis *in vitro* del ADN de células cancerosas; mientras que el estímulo en la síntesis del ADN de células normales es muy pequeño.

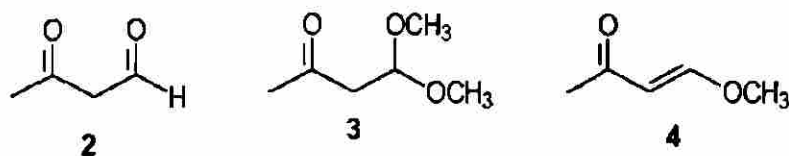
La conducta diferente del ADN canceroso y normal frente a las drogas anticancer es debida a las áreas relativamente desestabilizadas del primero, las cuales conducen a la aparición de cadenas simples que ofrecen más sitios para enlazarse a esas sustancias. Algunas de ellas se enlazan selectivamente a este tipo de ADN y consecuentemente previenen la replicación de éste.

1.2 ANTECEDENTES

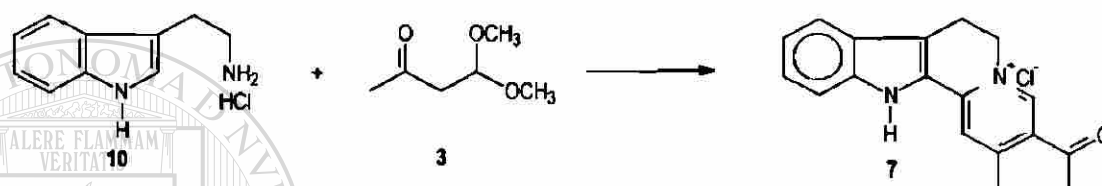
Las indoloquinolizinas,²⁷ de estructura general **1**, son compuestos tetracíclicos relacionados con los alcaloides indólicos las cuales pueden aislarse en forma de sales o de compuestos zwitteriónicos.



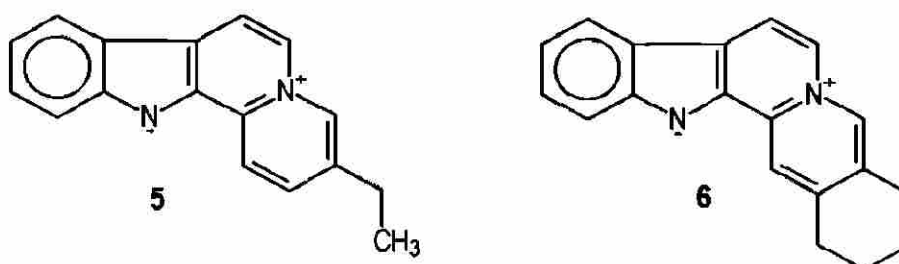
A partir de 1960, Teuber³⁻⁶ y sus colaboradores iniciaron el estudio de los diferentes derivados del acetilacetaldehído, **2**, (especialmente de la 4,4-dimetoxi-2-butanona, **3**, y la 4-metoxi-3-buten-2-ona, **4**) con aminas aromáticas y biogénicas, así como con derivados indólicos.



Una de las reacciones más importantes de este estudio y que constituye la parte medular de este trabajo, es la síntesis de sales de dihidro-indoloquinolizino partiendo del hidrocloruro de triptamina y derivados del acetilacetaldehído.



El pequeño grupo de alcaloides de interés biogénico que incorporan el sistema anular zwitteriónico de indolo[2,3-*a*]quinolizina **1**³¹, ha recibido una limitada atención en el campo de la síntesis^{7, 29}. El descubrimiento hecho por Beljanski^{1,2} en los años 80's de que algunos de estos alcaloides, tales como la flavopereirina, **5**, y la sempervirina, **6**, poseen actividad antitumoral, justifica el interés por la síntesis de indoloquinolizinas sustituidas en el anillo "A", utilizando la reacción descubierta por Teuber, para posteriormente investigar su posible actividad antineoplásica.



1.3 OBJETIVOS

Sintetizar y caracterizar por medio de técnicas espectroscópicas (IR y RMN) un conjunto de hidroclouros de triptamina substituidos en el anillo bencénico utilizando la síntesis de indol de Fischer.

Sintetizar y caracterizar por medio de técnicas espectroscópicas (IR y RMN) una serie de dihidro-indoloquinolizinas substituidas en el anillo 'A' partiendo de los hidroclouros de triptamina anteriores usando la reacción de Teuber y posteriormente llevar a cabo una reacción de deshidrogenación en el anillo C.

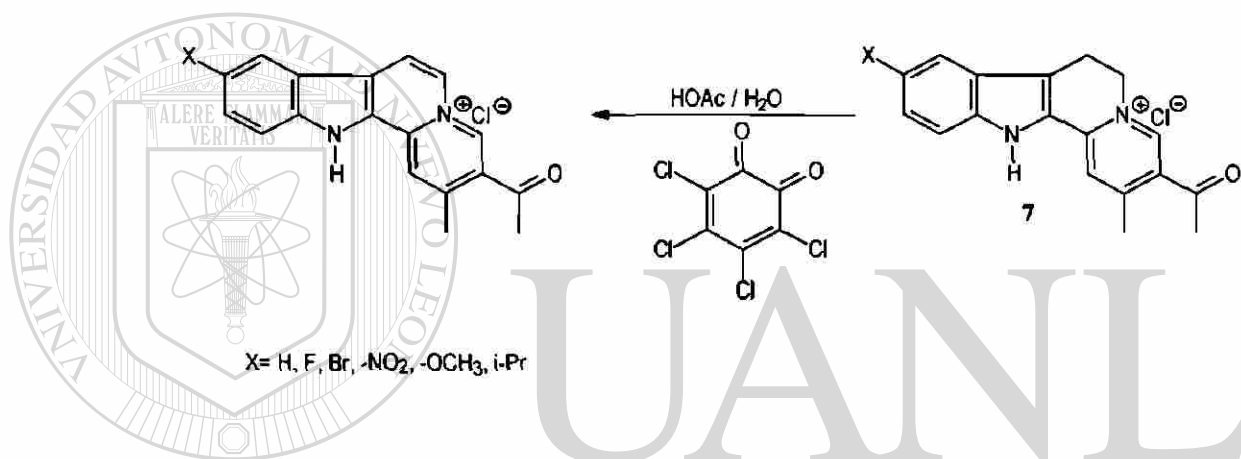
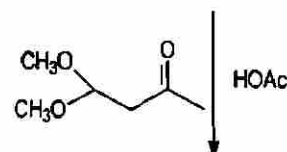
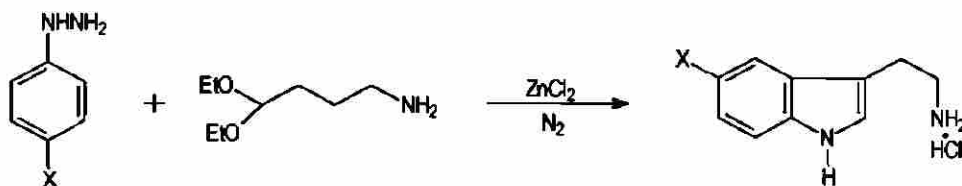
1.4 METODOLOGÍA

Sintetizar una serie de hidroclouros de triptamina usando la reacción de ciclación de Fischer partiendo de fenilhidrazinas *p*-substituidas.

Posteriormente, proceder a la formación de los sistemas tetracíclicos dihidrogenados, con estructura general 7, empleando la reacción de Teuber.[®] (Ver 1.6 Esquema Sintético)

Por último, llevar acabo la oxidación (deshidrogenación) de los compuestos obtenidos en el paso anterior mediante el uso de tetracloro-*o*-benzoquinona (*o*-cloranilo) con el fin de obtener un sistema completamente aromatzado.

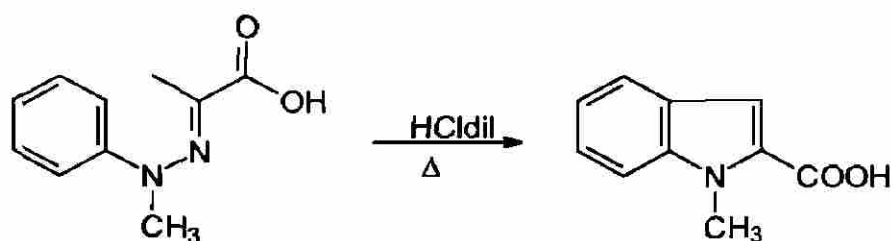
1.5 ESQUEMA SINTÉTICO



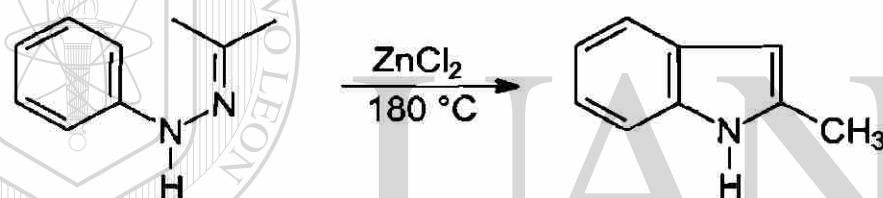
1.6 FUNDAMENTO

REACCIÓN DE FISCHER^{8,9}

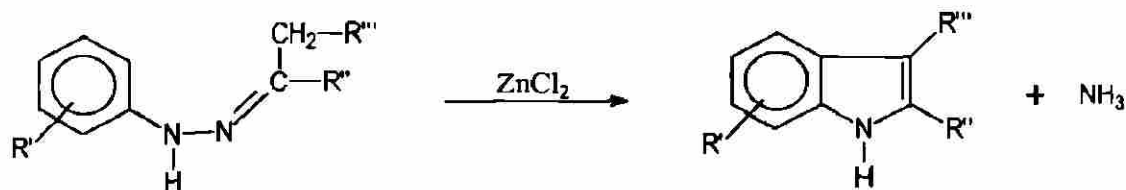
Mediante el calentamiento de la metil-fenilhidrazona del ácido pirúvico en ácido clorhídrico diluido, Fischer y Jourdan^{8,10} obtuvieron en bajo rendimiento una sustancia que identificaron como ácido 1-metilindol-2-carboxílico.



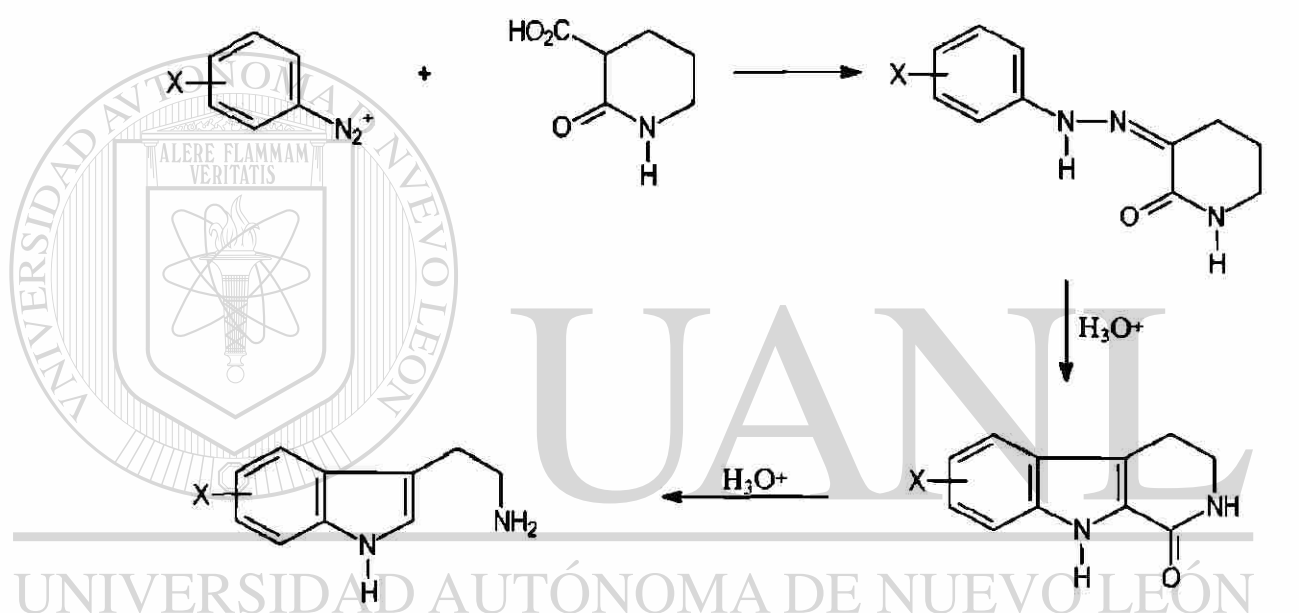
Posteriormente se encontró que los bajos rendimientos obtenidos con ácido clorhídrico diluido, debidos probablemente a la hidrólisis de la hidrazona, se podían evitar utilizando cloruro de zinc como catalizador. Una mezcla de la fenilhidrazona de la acetona con un exceso de 5:1 de cloruro de zinc calentado a 180 °C dio 2-metilindol con un 60% de rendimiento^{8,11}.



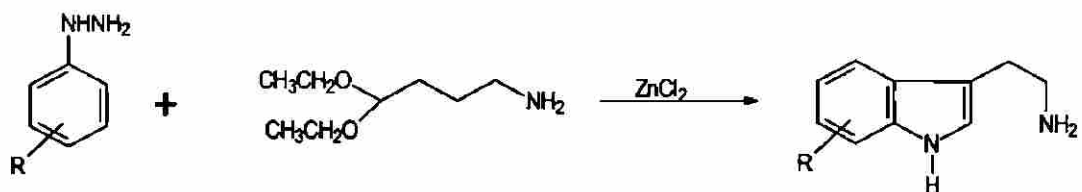
Desde entonces las arilhidrazonas obtenidas de la reacción de muchos compuestos carbonílicos, tales como aldehídos, cetonas, etc. han sido convertidas por una gran variedad de ácidos (de Brønsted y de Lewis), a compuestos que contienen la unidad estructural del indol. Esta conversión de arilhidrazonas a indol, acompañada por la eliminación de amoníaco, se conoce como la síntesis de indol de Fischer y se representa por la siguiente ecuación:



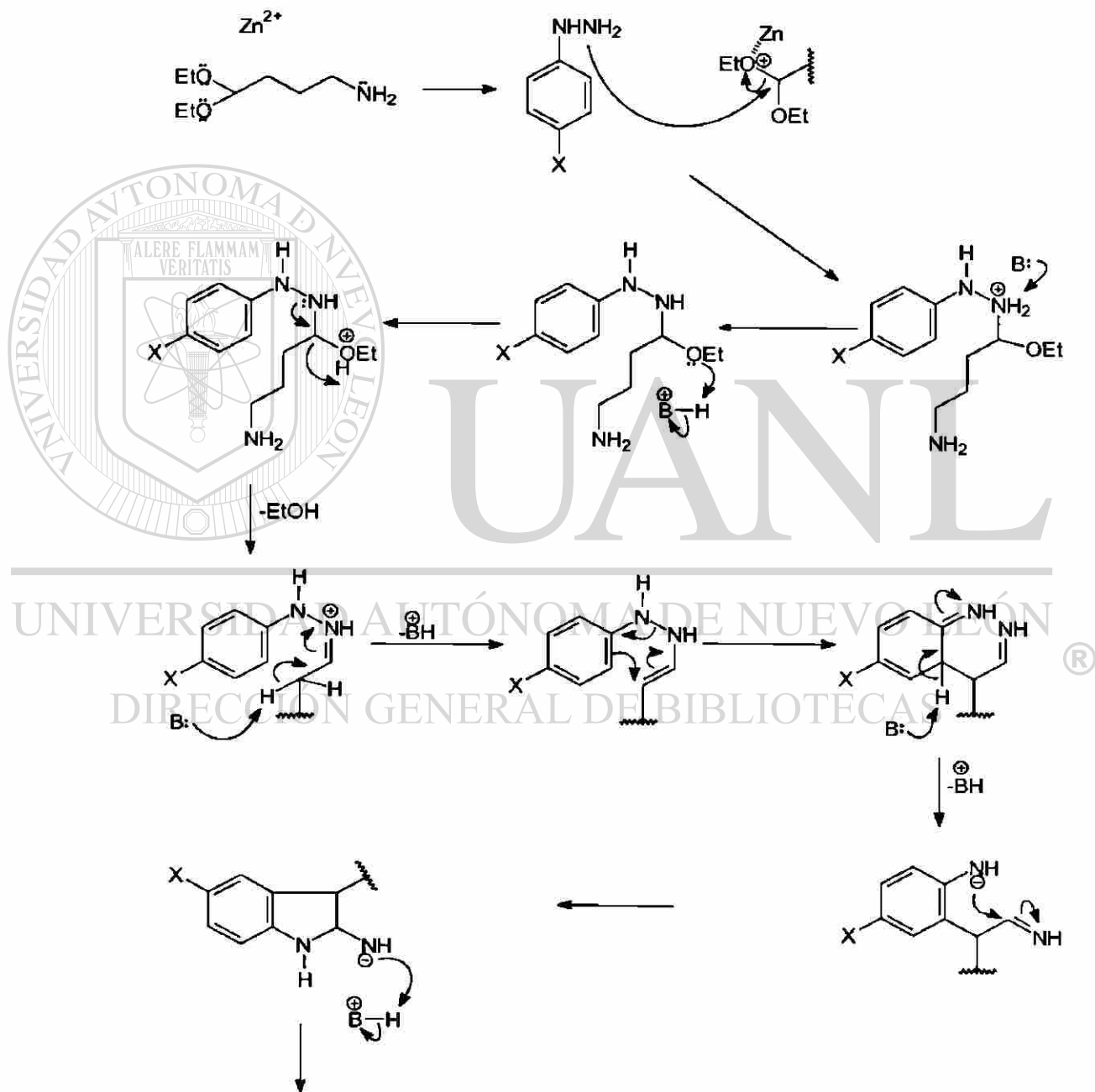
Entre las adaptaciones especiales hechas a la reacción de Fischer, una de las más usadas es el procedimiento de Abramovitch y Shapiro^{9,12}, el cual produce triptaminas sustituidas en tres pasos. Los iones aril diazonio reaccionan con la 3-carboxi-2-piperidona, dando arilhidrazonas de la 3-oxo-2-piperidona. La ciclación de Fischer produce un derivado indólico, el cual da triptamina después de su hidrólisis y descarboxilación.

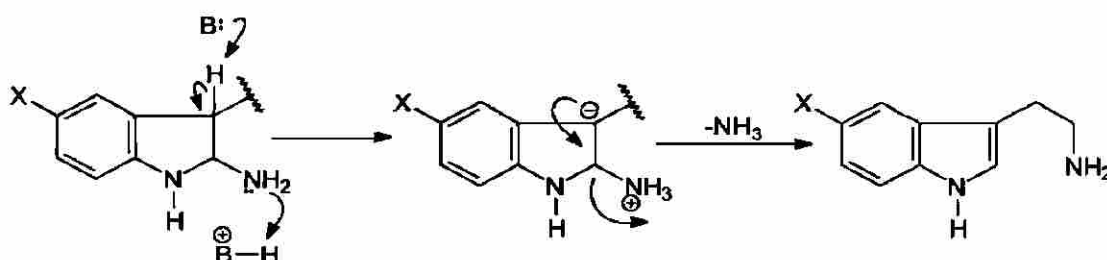


Un método alternativo emplea fenilhidrazonas de γ -aminocetonas o γ -aminoaldehídos^{9,13}, cuya ciclación da los derivados de la triptamina. El compuesto carbonílico más ampliamente usado para este propósito es el dietilacetal del γ -aminobutiraldehído. Históricamente, la primera síntesis de triptamina se llevó a cabo de esta manera. En lo que se refiere al trabajo de esta tesis las triptaminas sustituidas en el anillo bencénico se sintetizarán mediante este último procedimiento.



En el siguiente esquema se muestra el mecanismo de la reacción:

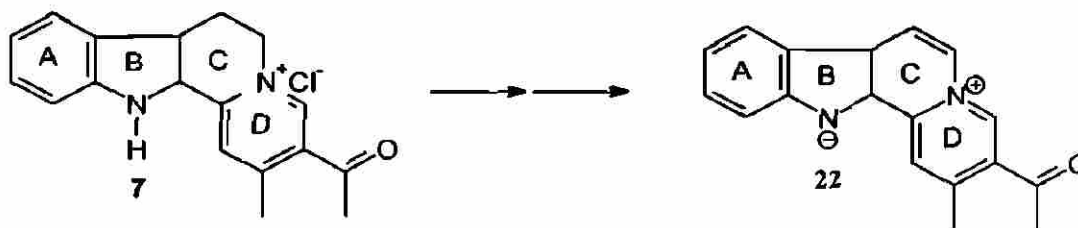




El mecanismo de esta ciclación ha sido objeto de considerable estudio. Desde que fue propuesto por Robinson^{8,9} se ha reunido una gran cantidad de evidencia para este mecanismo: El aislamiento de algunos intermediarios, experimentos de marcaje isotópico¹⁴ con ¹³C y ¹⁵N; más recientemente Hughes y Zhao¹⁵ han estudiado el efecto isotópico y de solvente sobre la reacción; en la Facultad de Ciencias Químicas de la U.A.N.L. se están llevando a cabo también estudios relacionados con el mecanismo de la reacción de ciclación de Fischer^{16,17}.

REACCIÓN DE TEUBER

La reacción de Teuber³ es de gran utilidad en la síntesis de cloruros de indoloquinolizino hidrogenados en el anillo 'C', con estructura general 7, obteniéndose a partir de ellas las indoloquinolizinas correspondientes con carácter zwitteriónico.

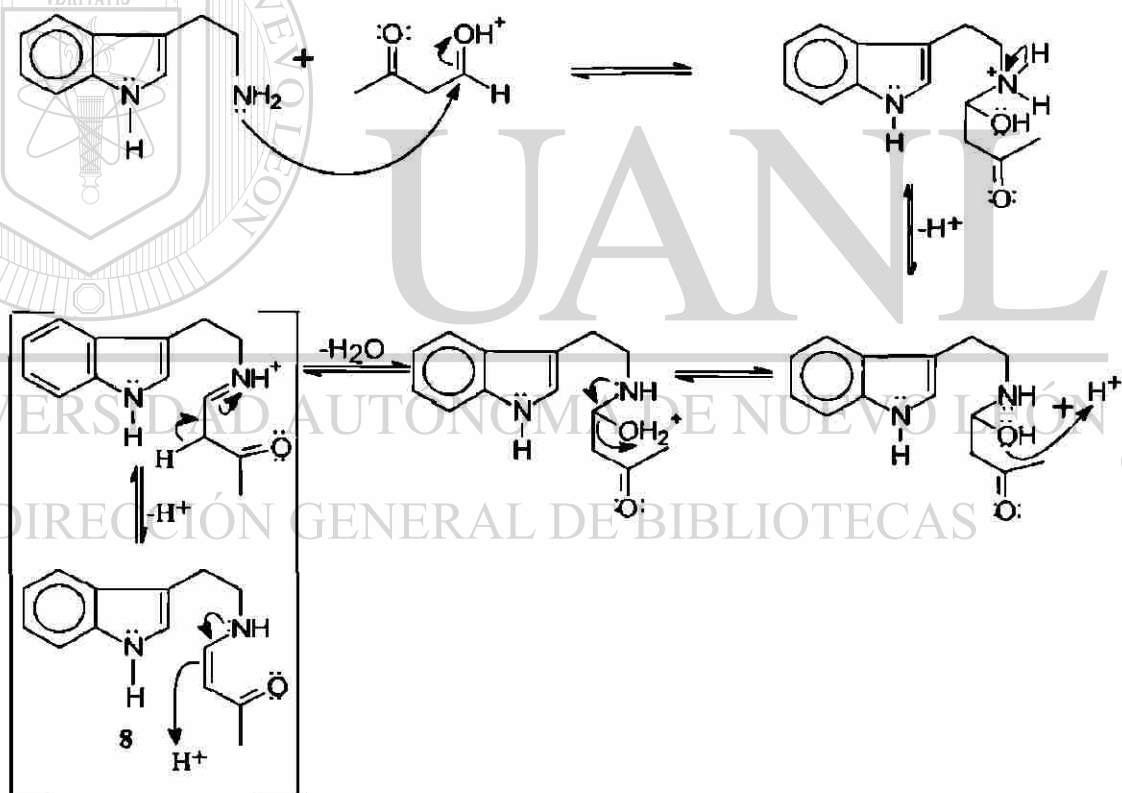


Debido a los reportes mencionados anteriormente sobre la actividad antineoplásica de estas sustancias, la reacción de Teuber adquiere gran

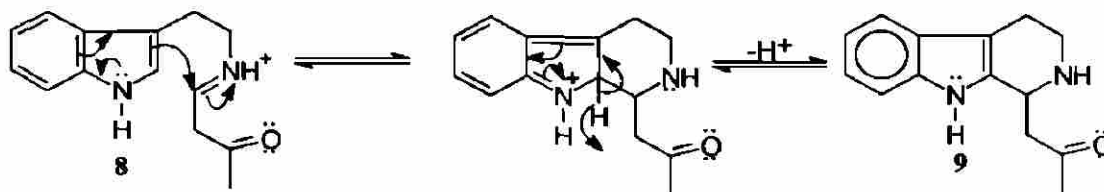
importancia para la obtención de compuestos con potencial farmacológico¹⁸.

Sobre la base de nuestras investigaciones mecanísticas¹⁹, las sales de indoloquinolizinio se forman a partir de las correspondientes triptaminas vía la enamina **8**; esta última sufre una ciclación del tipo Pictet-Spengler²⁴ a la correspondiente tetrahidrocarbolina **9** antes de proceder a la formación de la sal de indoloquinolizinio.

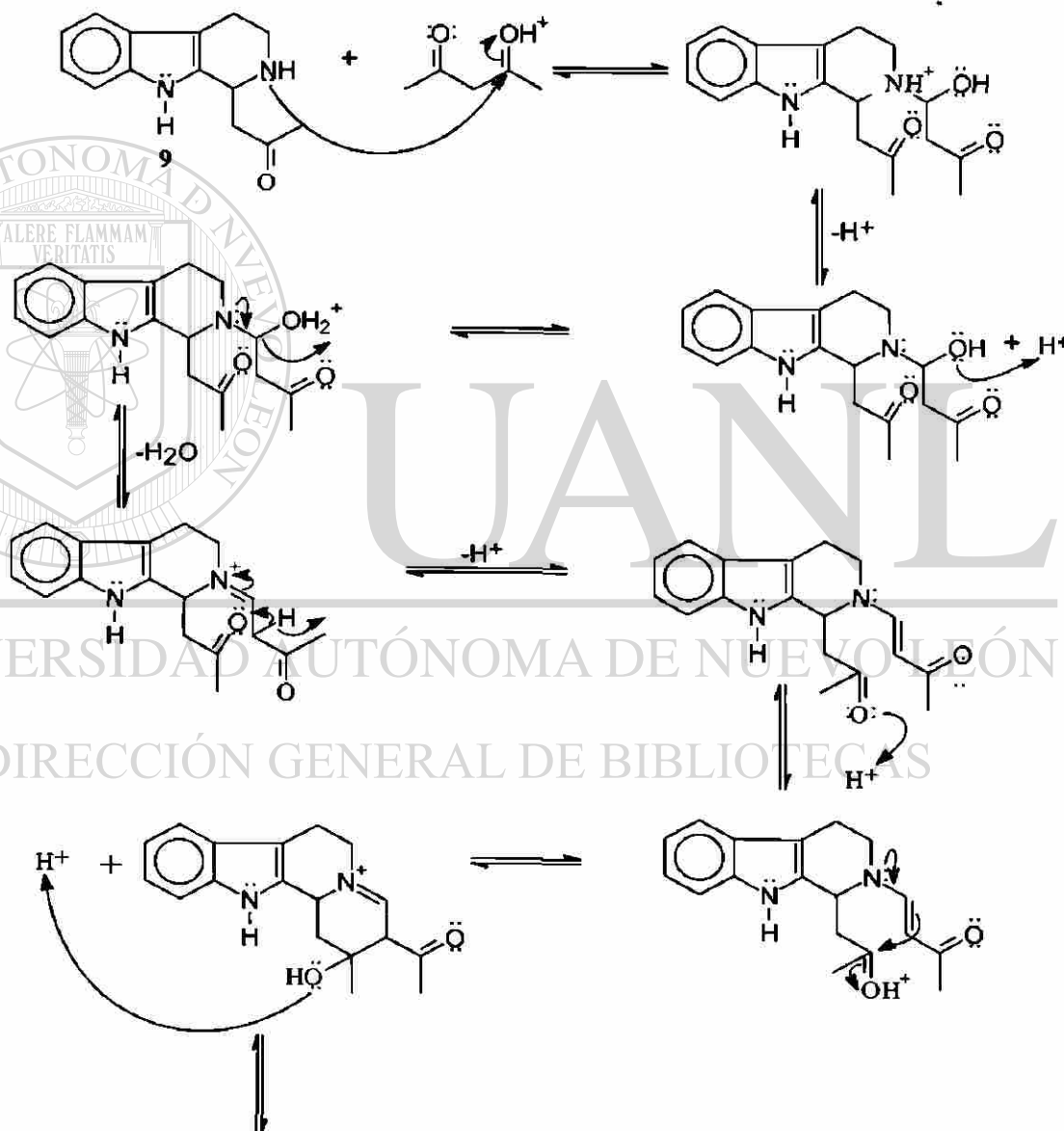
A) FORMACIÓN DE LA AMINA INTERMEDIARIA **8**

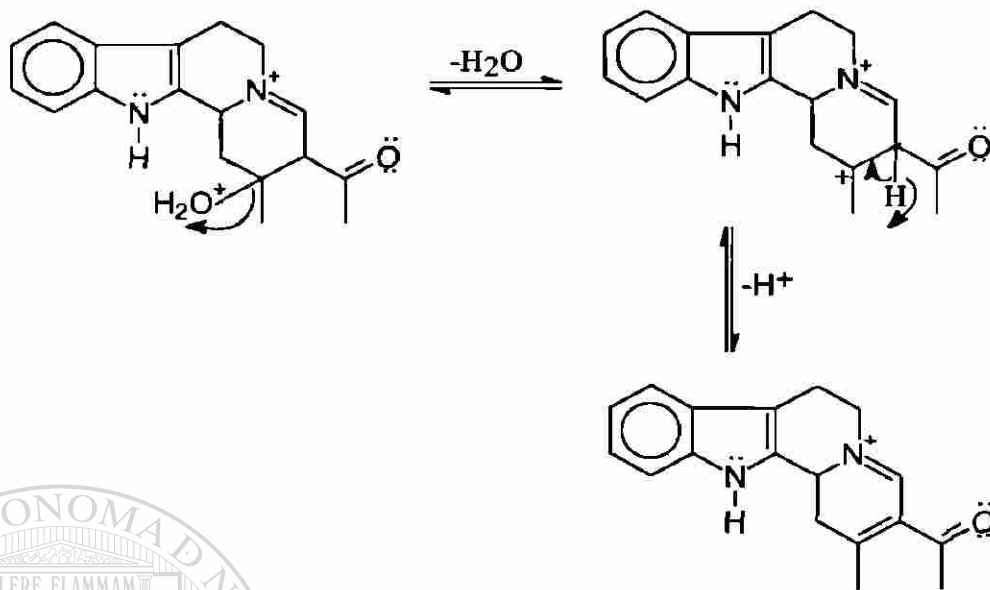


B) CICLACIÓN DE PICTET-SPENGLER²⁴

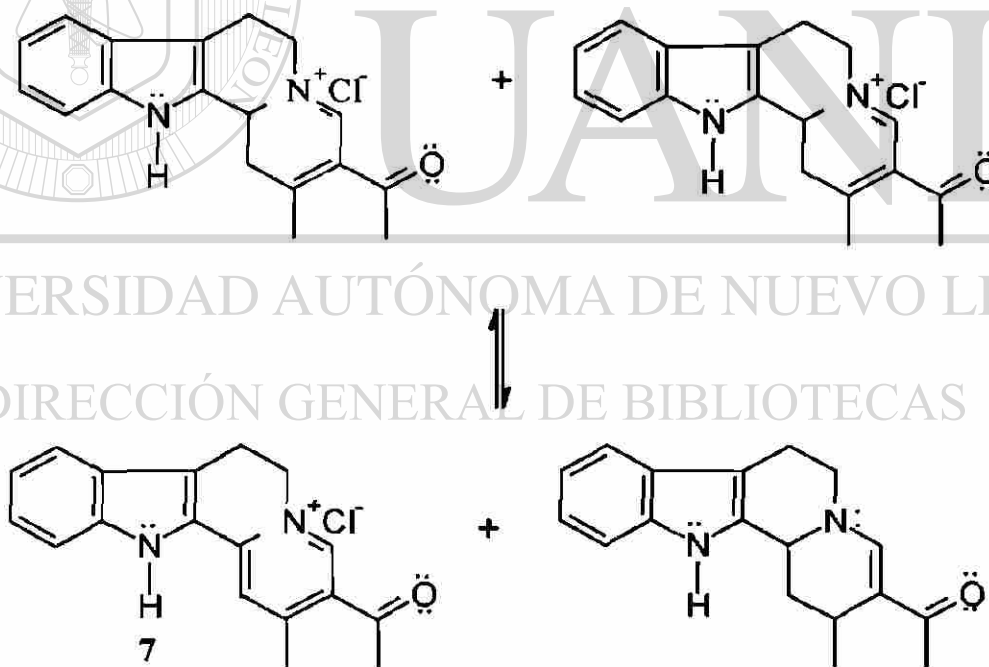


C) FORMACIÓN DE LA DIHIDROPIRIDINA INTERMEDIARIA





D) DESPROPORCIÓN DE LA DIHIDROPIRIDINA INTERMEDIARIA



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

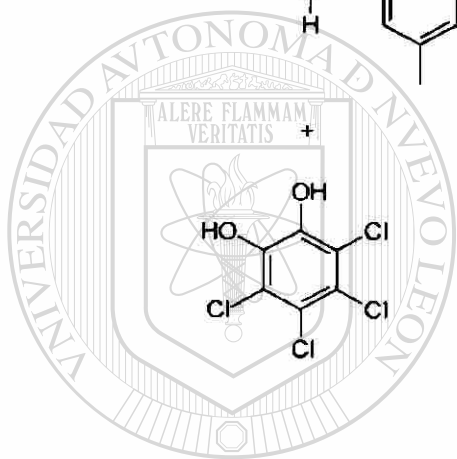
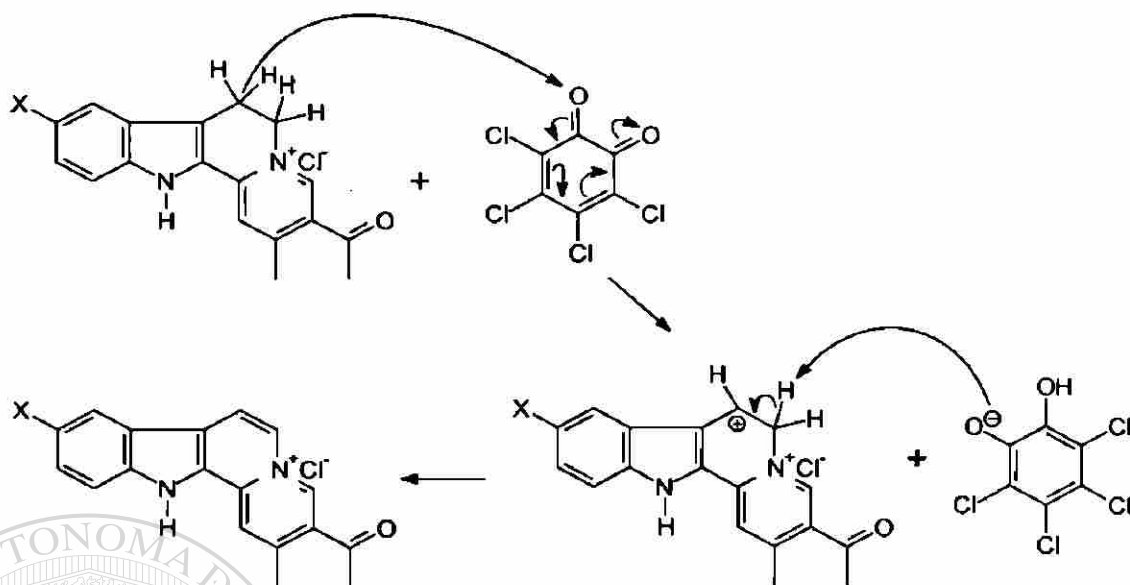
®

DESHIDROGENACIÓN DE DIHIDROINDOLOQUINOLIZINAS.^{14,20}

Los anillos de 6 miembros pueden aromatizarse de varias maneras. La aromatización se lleva a cabo más fácilmente cuando existen uno o dos dobles enlaces en el anillo, o cuando este último se encuentra fusionado con un anillo aromático. La reacción también puede aplicarse a heterocícllos de 5 o 6 miembros. Las cetonas cíclicas son transformadas en fenoles; y los anillos de 7 miembros o más por lo general se isomerizan a anillos aromáticos de 6 miembros.

Entre los reactivos que más frecuentemente se usan para llevar a cabo la aromatización se encuentran los siguientes:

- 1.- Catalizadores para hidrogenación, tales como Pd, Pt, Ni, etc.
- 2.- Otros reactivos utilizados para este propósito son las quinonas, las cuales se reducen a las correspondientes hidroquinonas. Dos quinonas importantes que se utilizan frecuentemente para las aromatizaciones son el *o*-cloranilo (2,3,5,6-tetracloro-1,4-benzoquinona) y DDQ (2,3-dicloro-5,6-diciano-benzoquinona). Este último es más reactivo y se puede usar en casos donde el substrato es difícil de deshidrogenar. El mecanismo propuesto¹⁴ para esta transformación es el siguiente:



UANL

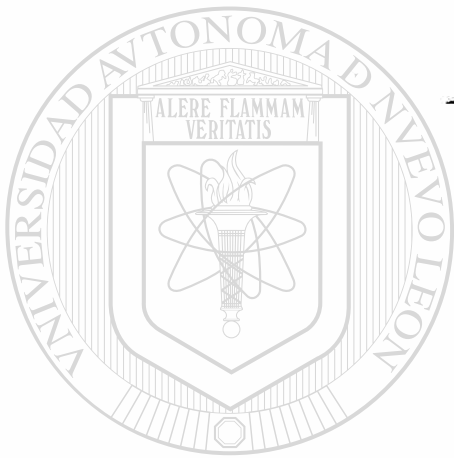
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

CAPÍTULO 2

PARTE TEÓRICA



UANL

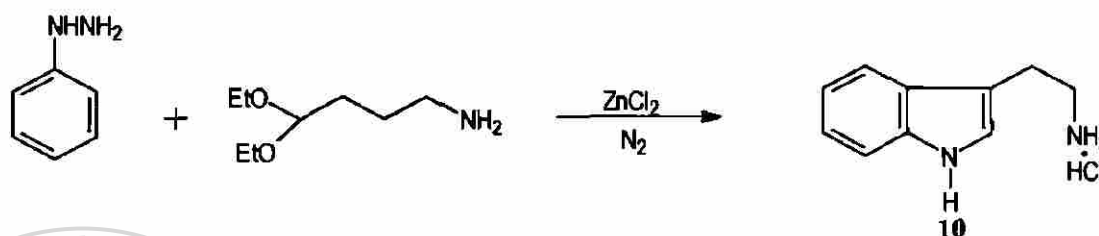
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

2.1 DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES.

2.1-1 Síntesis del hidrocloreto de triptamina¹³ (10).



Los primeros experimentos para sintetizar este compuesto resultaron negativos. El ZnCl_2 se usaba en cantidades de 1-5% molar respecto a la fenilhidrazina y se secaba hasta 120 °C antes de usarlo, no observándose transformación alguna. Posteriormente se usaron cantidades estequiométricas de ZnCl_2 previamente fundido (300 °C) y pulverizado observándose el desprendimiento de NH_3 , como señal de que se estaba llevando a cabo la ciclación de Fischer esperada.

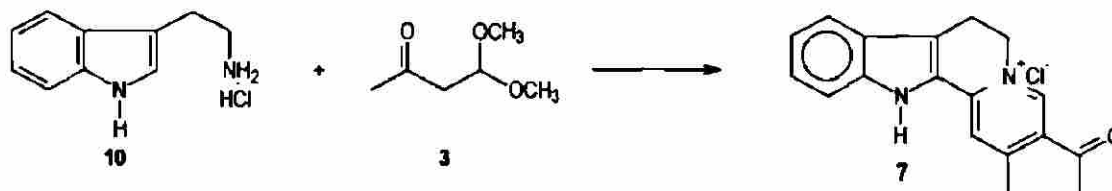
El aislamiento del producto se dificultó ya que éste se encontraba acomplejado con el Zn^{+2} usado en la reacción. La adición de Na_2S a la mezcla de reacción para liberar la amina y formar el hidrocloreto resolvió el problema; este último se obtiene después de filtrar el ZnS precipitado y de concentrar el filtrado en el rotavapor.

Otro inconveniente es la cantidad de hidrocloreto de triptamina que queda atrapado en el ZnS ; por lo que este último se extrae en un soxhlet usando metanol, y la solución resultante se evapora a sequedad para

después juntar el residuo con la solución acuosa del hidrocloreuro. Desgraciadamente, tras concentrar ésta para obtener el producto, también precipita el cloruro de sodio formado al agregar el Na_2S . La solución se puede concentrar hasta un volumen (aproximadamente la mitad), en el que no precipita nada, y dejarla reposar 2 o 3 horas con lo que se forman unos cristales en forma de agujas que son de producto puro. Sin embargo, los rendimientos así obtenidos son muy bajos (10-15%). Para extraer el producto y eliminar el NaCl se hicieron lavados con etanol anhidro a la mezcla de sólidos y la solución se llevó a sequedad con lo que se obtiene un sólido amarillo claro.

Es importante mencionar que esta reacción se llevó a cabo tanto bajo atmósfera de nitrógeno como sin ella, obteniéndose los mismos resultados. Sin embargo, para los análogos fluorado y bromado el empleo de nitrógeno es indispensable, ya que de lo contrario el rendimiento disminuye notablemente debido a la descomposición. Al variar la relación molar ZnCl_2 :fenilhidrazina desde 1:1 hasta 5:1 disminuyó el tiempo de reacción de 3 horas a 8-10 min, pero no aumentó el rendimiento.

2.1-2a Síntesis del cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6H-indolo-[2,3-a]quinolizinio (7).



Tradicionalmente este compuesto se ha obtenido mezclando hidrocloreto de triptamina (10) con el dimetilacetal del acetilacetaldehído (3), usando ácido acético como solvente³, el cual a su vez sirve como catalizador para la reacción de Pictet-Spengler involucrada¹⁹.

El producto se obtiene precipitando del medio de reacción como un sólido amarillo con un rendimiento del 38%. El bajo rendimiento se puede justificar por la baja estabilidad del acetilacetaldehído (2) que se genera *in situ* en el medio y por la formación de la hexahidro-indoloquinolizina obtenida como subproducto en la reacción de auto oxidación-reducción en el último paso del mecanismo.

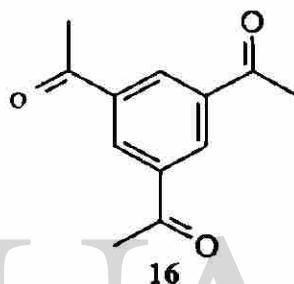
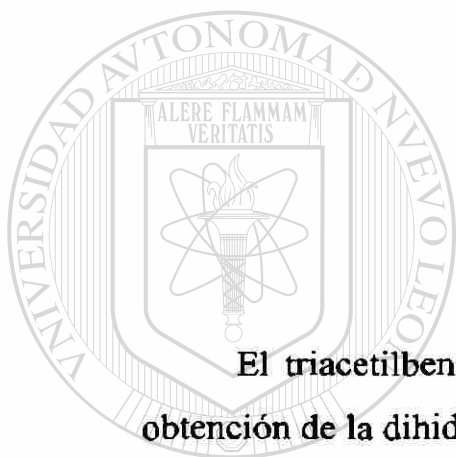
2.1-2b Síntesis del cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6H-indolo[2,3-a]-quinolizinio utilizando metanol como solvente. Discutimos en este mismo punto el empleo de triptamina como reactivo de partida.

Para este trabajo obtuvimos la dihidro-indoloquinolizina (7) de la manera descrita en el punto anterior, sin embargo se realizaron algunos experimentos en otras condiciones con miras a elevar el rendimiento así como a disminuir costos. Para tal efecto llevamos a cabo algunos experimentos usando metanol como solvente y en otros casos se utilizó triptamina en lugar de su hidrocloreto.

En los experimentos en metanol se demostró por TLC que el cloruro de dihidro-indoloquinolizinio (7) se forma en pequeñas cantidades, sin

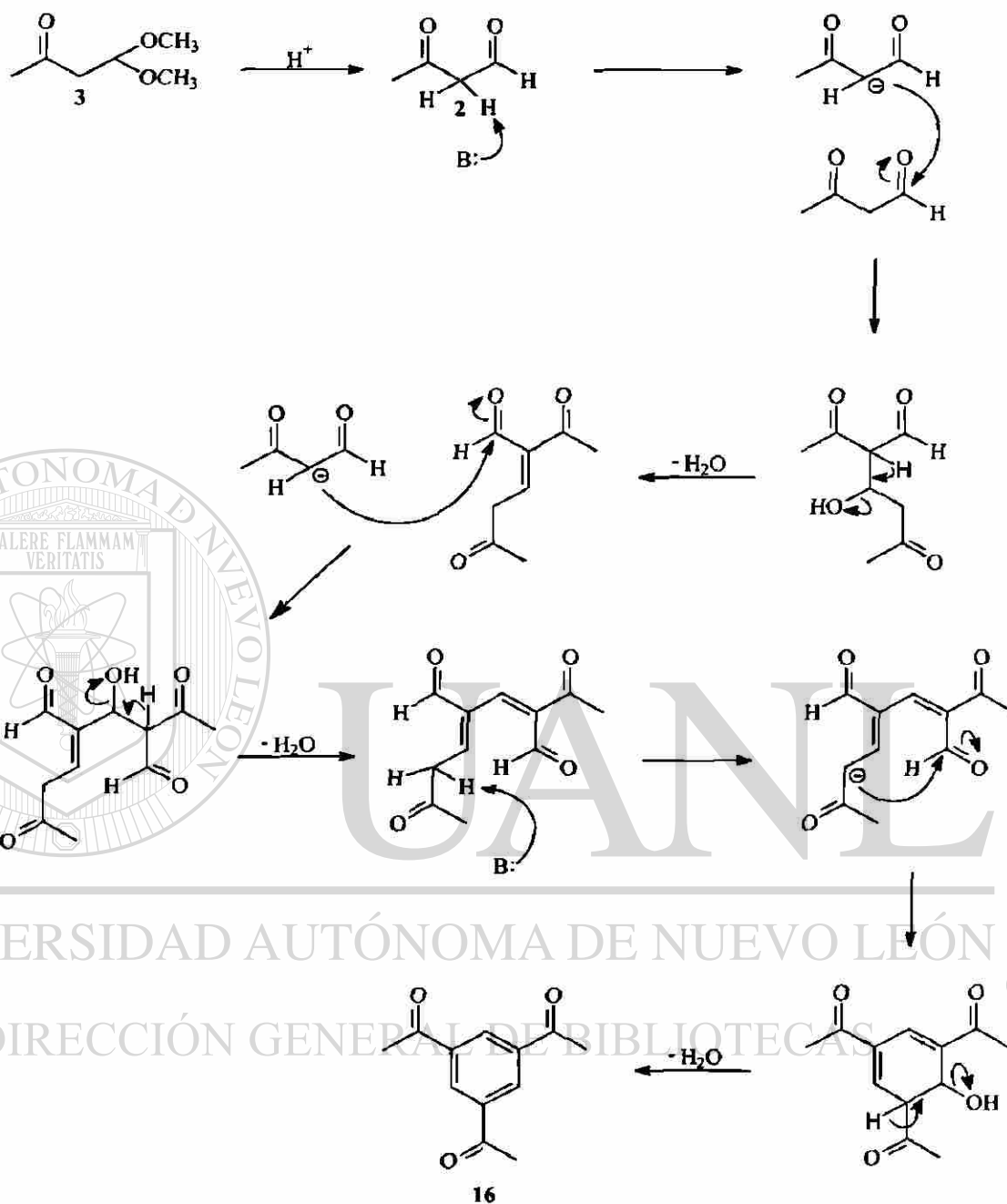
embargo aun después de tiempos de reacción de 10 horas se seguía observando el hidrocloreuro de triptamina como componente principal.

En los experimentos con triptamina en ácido acético también se observó por TLC la formación de una pequeña cantidad del compuesto **7**, la cual no nos fue posible aislar. El producto principal de esta reacción es un compuesto con $R_f = 0.98$ (Acetato de etilo: Ácido fórmico: Metanol; 8:1:1) el cual identificamos como triacetilbenceno (**16**).



El triacetilbenceno se forma también en mayor cantidad durante la obtención de la dihidro-indoloquinolizina fluorada (**17**).

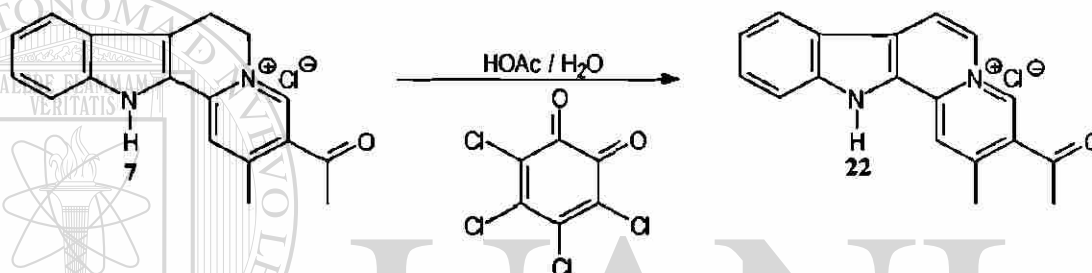
Suponemos que en las reacciones llevadas a cabo con hidrocloreuro de triptamina en metanol así como de triptamina en ácido acético no se tiene la catálisis ácida necesaria para inducir la reacción de Pictet-Spengler entre la amina biogénica y el acetilacetaldehído, dando lugar a productos de descomposición de los reactantes así como a la trimerización del acetilacetaldehído liberado de su acetal. Para este último asumimos el mecanismo propuesto por Franke²⁶:



No obstante las condiciones ácidas del medio, esta reacción puede llevarse a cabo por los equilibrios presentes en solución.

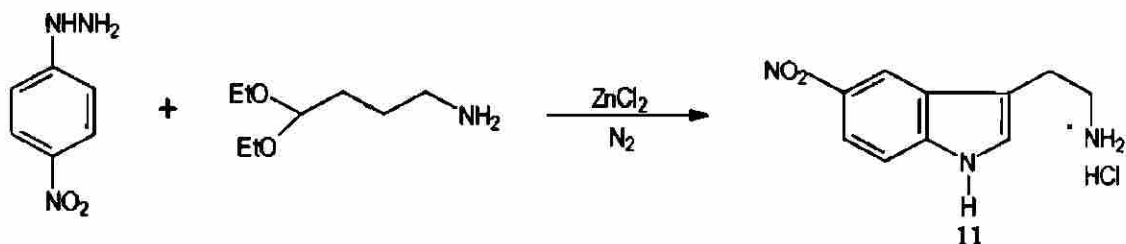
En un intento por aumentar la catálisis ácida se agregó un equivalente de ácido clorhídrico concentrado a un experimento conteniendo triptamina en ácido acético, sin embargo se obtuvo solo una mezcla de diferentes compuestos entre los que se encontraba la dihidro-indoloquinolizina **7** como uno de los componentes minoritarios.

2.1-3 Cloruro de 3-acetil-2-metil-12*H*-indolo [2,3-*a*]quinolizinio (**22**).

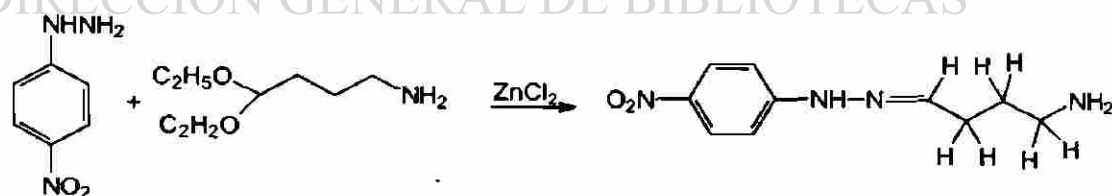


Este compuesto se obtuvo al hacer reaccionar el *o*-cloranilo y el compuesto **7** en una relación 3:1. El reactivo es completamente deshidrogenado al cabo de 10 min., tiempo después del cual se obtiene una mezcla de un sólido amarillo (producto) y un sólido rojo (oxidante en exceso). Este último se elimina haciendo una extracción continua (soxhlet) usando acetato de etilo para dar un sólido amarillo de dos componentes con un rendimiento del 70%. Dicho sólido se puede recristalizar en metanol o ácido acético; sin embargo es muy difícil eliminar la impureza.

2.1-4 Hidrocloruro de 5-nitrotriptamina (11).

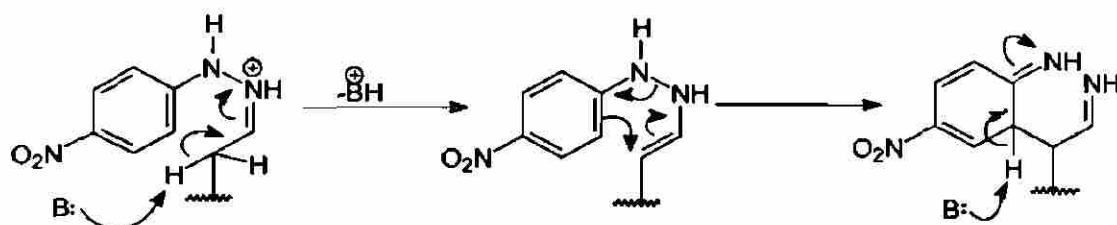


Se hicieron varios experimentos, variando la relación molar $ZnCl_2$:*p*-nitrofenilhidrazina desde 1:1 hasta 10:1 y la de dietilacetal del γ -aminobutiraldehído:*p*-nitrofenilhidrazina de 1:1 hasta 2:1; la temperatura se manejó desde 110 hasta 140 °C (el punto de descomposición de la *p*-nitrofenilhidrazina es de 157 °C); la reacción se llevó a cabo sin solvente así como utilizando tolueno y etilenglicol en algunos casos. En ningún experimento se observó desprendimiento de NH_3 . En el mejor de los casos obtuvimos un aceite de color rojizo (al trabajar sin solvente y en atmósfera de N_2) con al menos 5 componentes, uno de ellos en mayor proporción. Se trató de inducir a la cristalización en varios solventes (metanol, etanol, acetato de etilo, éter etílico), sin lograrlo; la separación por cromatografía en capa fina (sílica gel) nos permitió aislar este componente principal, el cual resultó ser la hidrazona intermediaria y es sumamente inestable: [®]

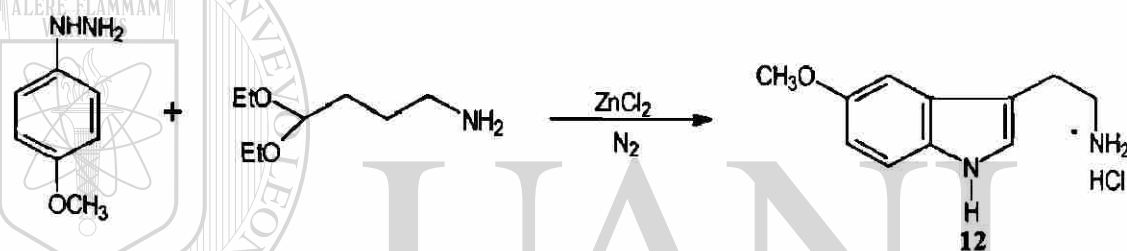


Probablemente, el efecto desactivante del grupo nitro sea la causa de que la reacción no prosiga después de la formación de la hidrazona, bajo las condiciones de reacción empleadas. Uno de los pasos del mecanismo involucra la participación de los electrones del anillo aromático, los cuales

son fuertemente atraídos por este grupo, dando como resultado una disminución en la velocidad del proceso de ciclación y subsecuente formación del anillo indólico.



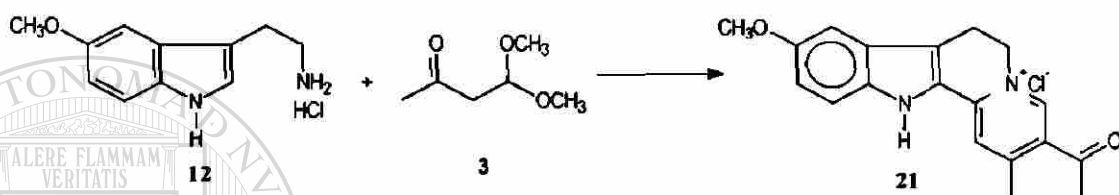
2.1-5 Hidrocloruro de 5-metoxitriptamina (12).



Los intentos por tratar de obtener este compuesto a partir de *p*-metoxifenilhidrazina tampoco dieron buenos resultados. En ninguno de los casos se observó desprendimiento abundante de NH_3 y el resultado, al igual que en el caso anterior, fue un aceite de muchos componentes del cual no pudimos obtener cristales ni separar por TLC. Este aceite se comparó por TLC con un estándar de hidrocloreuro de 5-metoxitriptamina comercial (Aldrich) y se encontró que este último sí estaba presente en la mezcla, pero en una cantidad muy pequeña por lo cual no pudo ser aislado. La relación molar dietilacetal del γ -aminobutiraldehído (DEA):*p*-metoxifenilhidrazina (PMFH) fue 2:1, mientras que la de ZnCl_2 :PMFH se usó desde 1:1 hasta 5:1 sin que mejoraran los rendimientos. La temperatura se varió desde 65 hasta 150 °C (el punto de descomposición de PMFH es

160-162 °C) obteniéndose en todos los casos una mezcla de compuestos. Los experimentos se llevaron a cabo tanto en atmósfera de nitrógeno como sin ella.

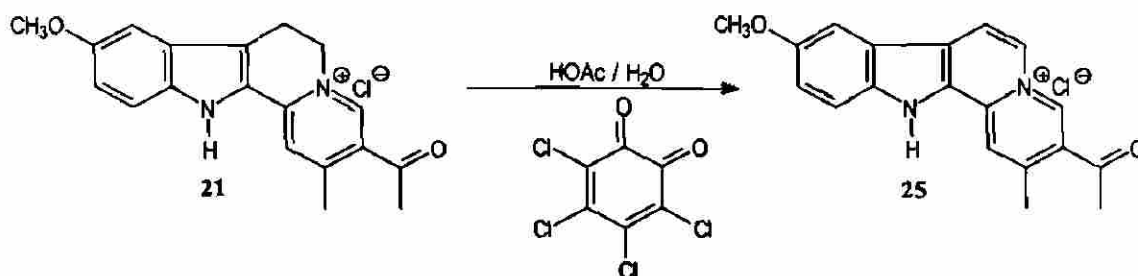
2.1-6 Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-9-metoxi-6H-indolo[2,3-a]quinolizinio (21).



Para esta reacción se utilizó hidrocloreuro de 5-metoxitriptamina comercial (Aldrich). Aquí no se observa la formación de 1,3,5-triacetilbenceno (16) cuando se añade 3 todo al mismo tiempo y no se forma ningún subproducto. Este compuesto se obtiene como un sólido de color dorado con un rendimiento del 40%.

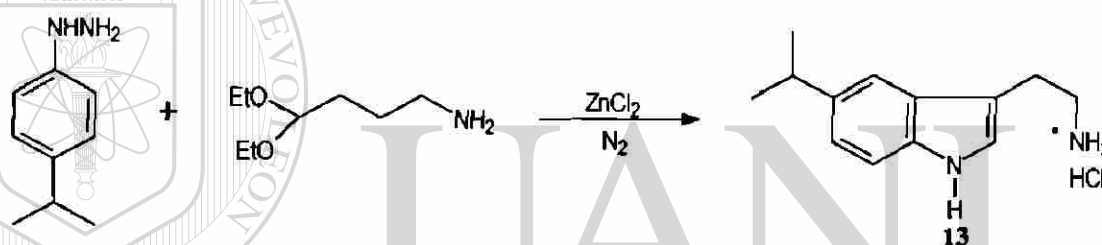
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

2.1-7 Cloruro de 3-acetil-2-metil-9-metoxi-12H-indolo[2,3-a]quinolizinio (25).



Este compuesto se sintetizó bajo las mismas condiciones que 22 obteniéndose conversión completa. Al reducir la relación molar *o*-cloranilo:21 de 3:1 a 2:1, también se observa la deshidrogenación completa del sistema tetracíclico al cabo de 10 minutos. El producto precipita como agujas pequeñas de color café claro; el análisis por TLC muestra una impureza que no causa problemas ya que no aparece en el espectro de ^1H -RMN.

2.1-8 Hidrocloruro de 5-isopropiltriptamina (13).

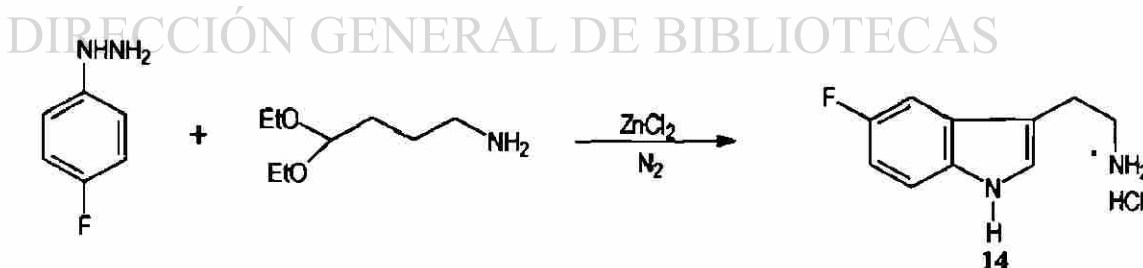


Los primeros experimentos se realizaron siguiendo el procedimiento reportado para obtener el hidrocloruro de triptamina¹³. El resultado fue una mezcla de productos que no se pudo separar.

Se siguió el procedimiento reportado en 3.3-1, el cual es una modificación del original¹³ y obtuvimos buenos resultados. Sin embargo, el tratamiento de la mezcla de reacción fue diferente al del punto 3.3-1. En este caso utilizamos H_2S en lugar de Na_2S para precipitar el zinc y evitar el problema de la formación de NaCl .

Se juntaron los sólidos de los diferentes experimentos (ya que por TLC se observó que eran lo mismo) y se guardaron en un desecador durante varios días (3-5). Al sacarlos del desecador se transformaron en un aceite, el cual analizamos por TLC teniendo como resultado una mezcla de varios componentes. Tratamos de inducir el aceite a la cristalización con metanol, etanol, acetato de etilo, eter etílico, THF, etc., sin éxito. La separación por cromatografía en columna de al menos uno de los componentes tampoco dio resultado, ya que los componentes del aceite se adsorbían fuertemente en la fase estacionaria. Al aceite se le hizo una fusión con sodio para verificar si se encontraba azufre en la mezcla y ver si el H_2S había reaccionado de alguna manera con el producto dando los resultados observados, pero la prueba dio negativa. Es evidente sin embargo que las condiciones ácidas resultantes de introducir H_2S a la mezcla de reacción indujeron a la descomposición de la triptamina formada.

2.1-9 Hidrocloruro de 5-fluortriptamina (14). ®



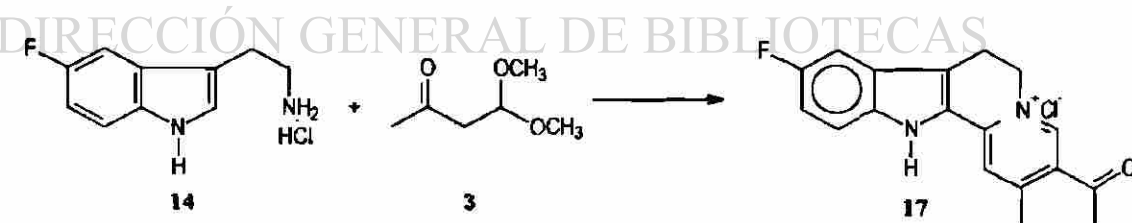
No se obtuvieron buenos resultados siguiendo la marcha reportada para el hidrocloruro de triptamina¹³ por lo que se usaron las mismas condiciones que para el hidrocloruro de 5-isopropiltryptamina, a excepción del tiempo de reacción, el cual fue de 15-20 min. Un factor importante en

esta síntesis es la calidad del nitrógeno a usarse (grado cromatográfico), ya que de lo contrario el rendimiento se ve afectado.

También se presentan los problemas del ZnS y el NaCl (interferencia en la separación del producto), los cuales se resolvieron en la misma forma que para el hidrocloreto de triptamina.

Cuando la escala fue lo suficientemente grande (más de 0.5 g del hidrocloreto de 4-fluorfenilhidrazina), después de filtrar el ZnS y dejar reposar el filtrado toda la noche, se formaron en éste último unos cristales cúbicos de color blanco que son de producto puro y es conveniente separar, antes de seguir con el tratamiento. Por lo demás, los pasos a seguir y los resultados obtenidos fueron idénticos que para el hidrocloreto de triptamina.

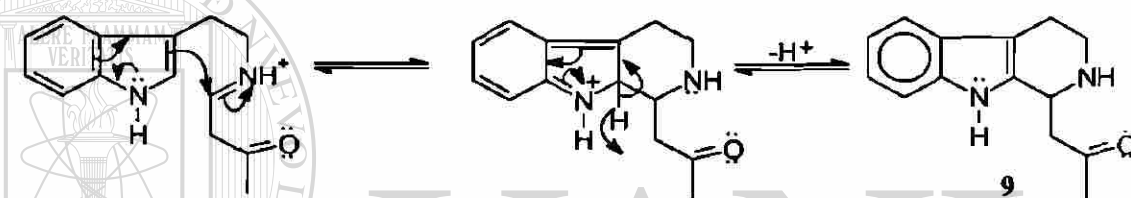
2.1-10 Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-9-flúor-2-metil-6H-indolo-[2,3-*a*]quinolizinio (17).



Los primeros intentos por sintetizar esta substancia se llevaron acabo empleando el mismo procedimiento reportado para 7 (disolución del hidrocloreto de triptamina en HOAc a ebullición y adición del dimetilacetal del acetilacetaldehído 3); sin embargo el producto obtenido

fue una mezcla de un sólido rojo amorfo y unas agujas largas de color amarillento. Los análisis por TLC, IR y RMN, demostraron que el primero era el compuesto de interés y el segundo era el 1,3,5-triacetilbenceno²⁶ (16), este último es el mismo compuesto que se obtuvo cuando se intentó sintetizar el sistema tetracíclico partiendo de triptamina (ver punto 2.1-2b).

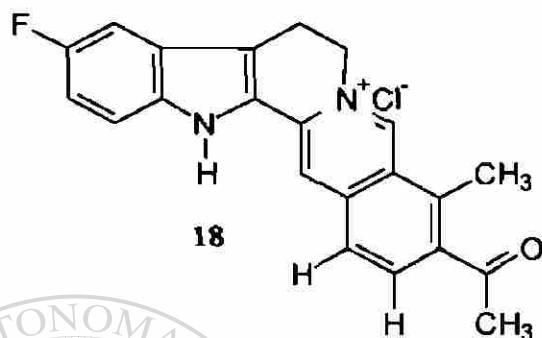
Podemos justificar el que esta reacción produzca cantidades importantes de este compuesto analizando el mecanismo de formación del sistema tetracíclico:



La formación de la tetrahidro- β -carbolina (9) transcurre por medio de la reacción de Pictet-Spengler, la cual involucra la participación de los electrones del anillo bencénico; el efecto inductivo del flúor dificulta la participación de estos electrones y por lo tanto retarda la formación del intermediario, favoreciendo así la reacción del acetilacetaldehído (2) consigo mismo.

El problema se resolvió agregando el diemtilacetal del acetilacetaldehído lentamente (a lo largo de 90-120 min.) para favorecer la reacción de éste con la triptamina y posteriormente con la tetrahidro- β -carbolina.

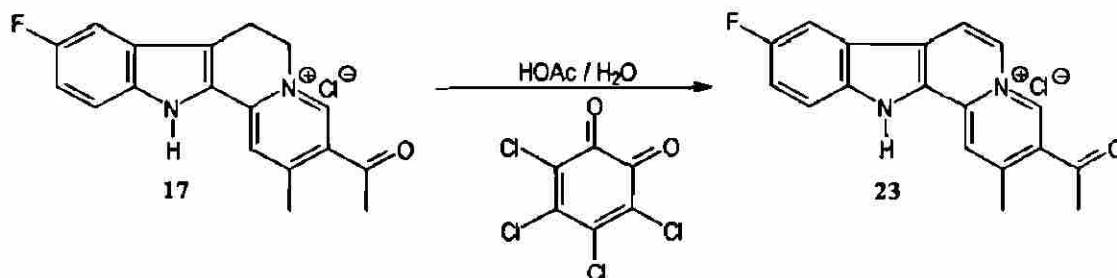
Otro componente de la mezcla de reacción que se obtiene de las aguas madres en pequeñas cantidades (10 %) fue un sólido polar ($R_f= 0.1$) de color amarillo cuya estructura probablemente sea la siguiente:



El producto se aisló y recristalizó de ácido acético, pero desgraciadamente parece descomponerse en las condiciones de recristalización ya que siempre se obtiene una mezcla de compuestos aun después de tres recristalizaciones sucesivas. Se intentó formar un cristal por evaporación lenta utilizando ácido acético, ácido fórmico y metanol (por separado) sin que los resultados fueran favorables. En el mejor de los casos se obtuvo un aglomerado de cristales muy pequeños en forma de agujas (HOAc).

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

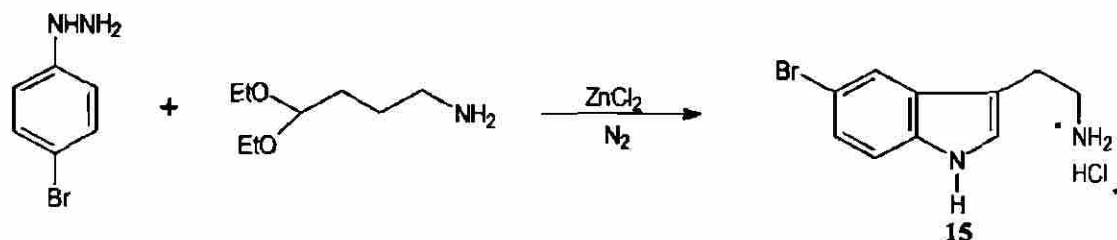
2.1-11 Cloruro de 3-acetil-9-flúor-2-metil-12*H*-indolo[2,3-*a*]quinolizinio (23).



La deshidrogenación de **17** se intentó en las mismas condiciones en que se obtuvo **22**, pero la transformación no fue completa. El transcurso de la reacción se siguió por TLC calentando hasta por tres horas sin observar conversión completa y sí una descomposición gradual de la mezcla de reacción.

La relación molar *o*-cloranilo:**17** se incrementó gradualmente hasta llegar a un valor de 10:1 y a un tiempo de reacción de 30 min. Con lo que el reactivo se consume totalmente. Al final de la reacción queda una solución oscura y un sólido rojo (oxidante en exceso). El producto fue soluble en el medio de reacción, a diferencia de **22**, y una vez que el primero se obtiene se le hizo una extracción soxhlet con acetato de etilo para obtener un sólido amarillo de dos componentes con un rendimiento de 60%. El sólido se recrystalizó en metanol sin que se pudiera eliminar la impureza, el uso de otros solventes no dio resultado. Aparentemente, esta impureza es un compuesto con estructura muy similar a la del compuesto esperado, ya que las señales de ¹H-RMN así lo demuestran (espectros B₁₀₉-B₁₁₁).

2.1-12 Hidrocloruro de 5-bromotriptamina (15).

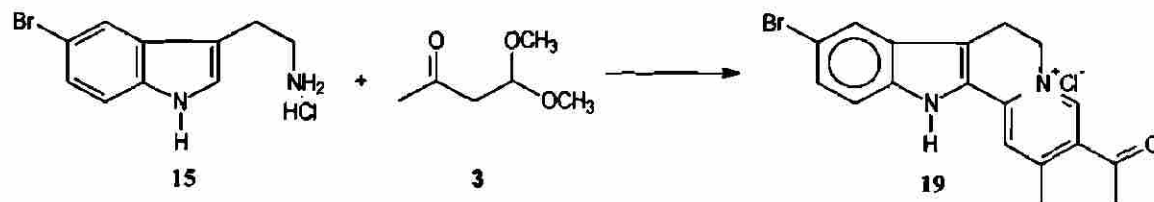


La síntesis de este compuesto tampoco funciona con las condiciones reportadas para obtener hidrocloruro de triptamina, y por ello se usaron las mismas condiciones que para 14 (hidrocloruro de 5-fluortriptamina). En este caso el tiempo de reacción es de 10 min. También es importante la calidad del nitrógeno que se usa (debe ser grado cromatográfico) ya que de lo contrario baja el rendimiento.

El problema del ZnS y el NaCl se atacó igual que en el caso anterior. Vuelve a observarse la formación de cristales cúbicos en el filtrado que resulta al eliminar el ZnS después de dejarlo reposar toda la noche, los cuales también deben de separarse antes de seguir con el procedimiento. El resto del procedimiento y los resultados fueron idénticos a los de los dos análogos anteriores.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

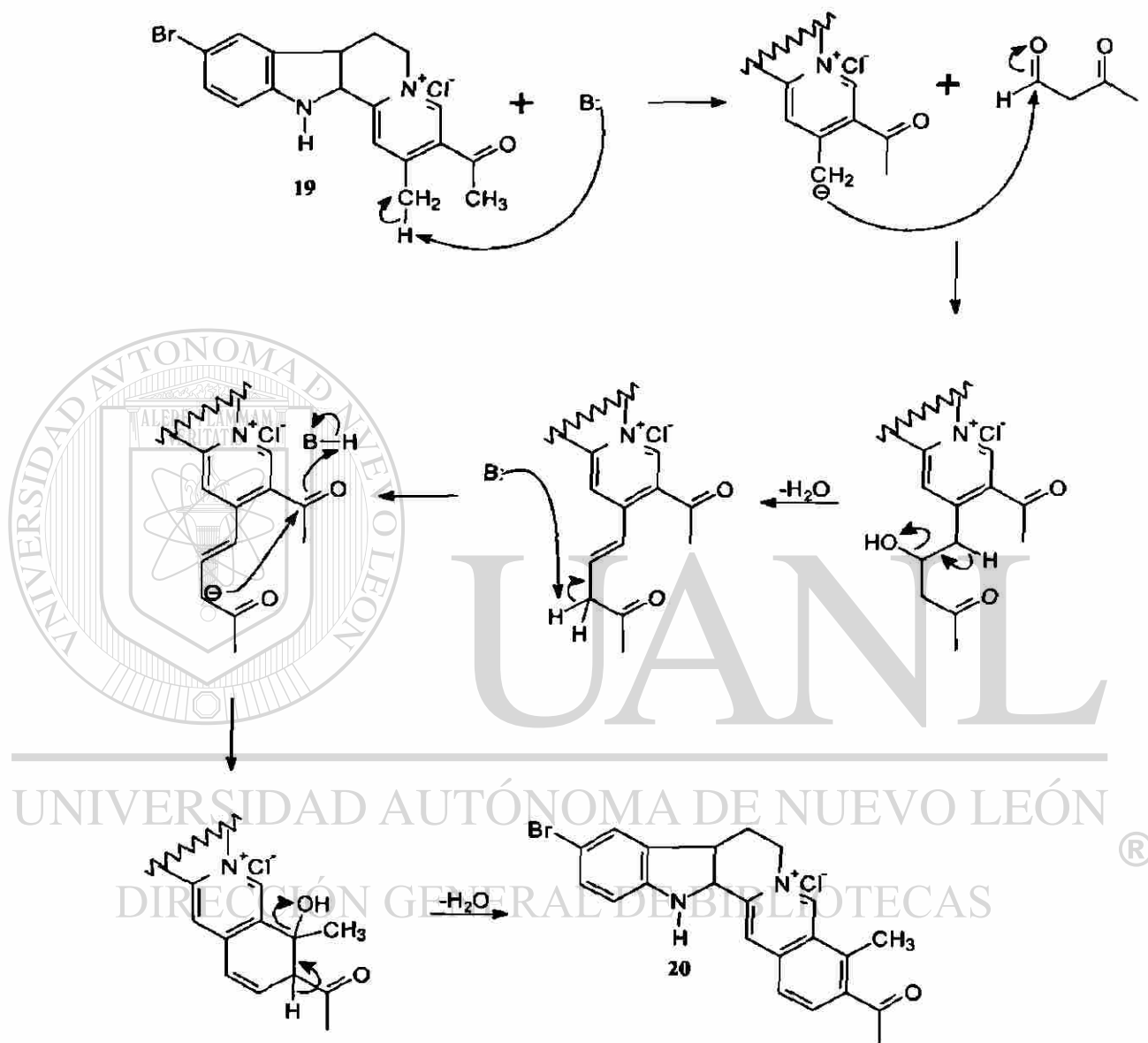
2.1-13 Cloruro de 3-acetil-9-bromo-7,12-dihidro-2-metil-6*H*-indolo-[2,3-*a*]quinolizinio (19).



En esta síntesis también se obtuvieron, aunque en cantidades menores, el 1,3,5-triacetilbenceno cuando se añadió el compuesto 3 todo al mismo tiempo. Por esta razón se siguió el mismo procedimiento que para el análogo fluorado.

También se obtuvo un subproducto polar ($R_f = 0.12$; acetato de etilo: metanol: ácido fórmico; 8:1:1) el cual es análogo al observado en la reacción para obtener 17, ya que presentan un espectro de RMN (protones) similar. A diferencia del subproducto fluorado (18), éste sí pudo obtenerse puro y se analizó por RMN llegando a la conclusión de que ambos subproductos presentan la misma estructura. No obstante, la información proporcionada por los espectros de RMN da lugar a varias suposiciones y no confirma completamente la estructura propuesta 20 (ver punto 2.2-13b), por lo que se trató de hacer crecer un cristal bajo las mismas condiciones del análogo fluorado obteniendo un aglomerado de cristales muy pequeños que no pueden ser usados para la determinación de estructura.

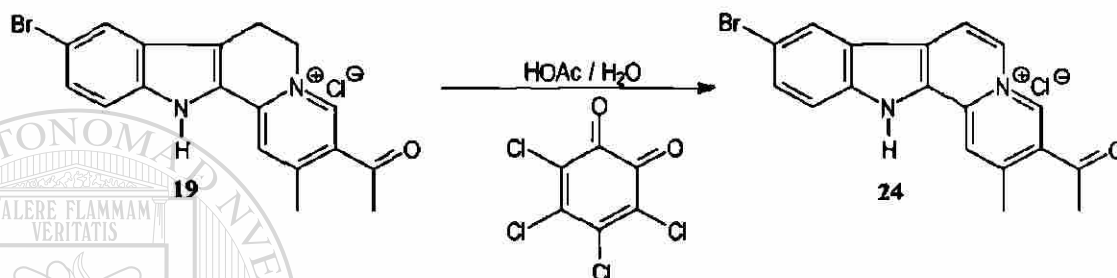
El mecanismo propuesto para la formación del compuesto 20 es el siguiente:



Todo lo anterior es un intento para tratar de explicar la formación del subproducto cuya estructura proponemos con base en los datos espectroscópicos presentados. La mejor manera para elucidar la estructura del compuesto sería la obtención de un difractograma, sin embargo

tampoco hemos podido obtener un cristal de las dimensiones adecuadas para este compuesto.

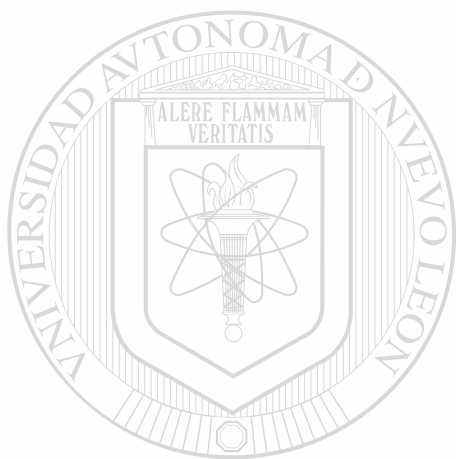
2.1-14 Cloruro de 3-acetil-9-bromo-2-metil-12*H*-indolo-[2,3-*a*]quinolizinio (24).



El punto de partida para tratar de obtener este compuesto fue el mismo que para 22. La única excepción fue el solvente ya que se usó HOAc: Ac. fórmico 2:1 debido a que la mezcla HOAc:H₂O no disolvió el reactivo. Sin embargo, la transformación no fue completa. En la misma forma que para el análogo fluorado, se llegó a la relación molar *o*-cloranilo:19 = 15:1 y a un tiempo de reacción de 60 min para transformar completamente el reactivo. El producto obtenido tiene una impureza que la recristalización de varios solventes no pudo eliminar.

La facilidad con que se deshidrogena cada uno de los análogos tiene que ver con el efecto inductivo del sustituyente en el anillo 'A'. El flúor y el bromo tienden a desestabilizar el carbocatión formado durante la reacción de deshidrogenación, mientras que el grupo metoxi lo estabiliza.

Sin embargo, esto no explica porqué es más difícil deshidrogenar el compuesto bromado que el fluorado.



UANL

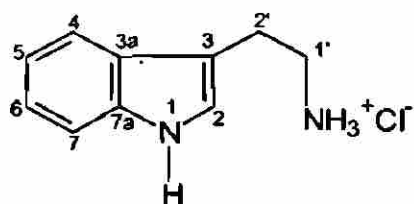
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

2.2 DISCUSIÓN DE ESPECTROS^{21, 22, 23, 28, 30}

2.2-1 Hidrocloruro de triptamina (10).



Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₁).

La banda intensa a 3292 cm^{-1} se debe a modos de tensión del N-H indólico. El pico ancho localizado a 3010 cm^{-1} así como las señales a 1581 y 1504 cm^{-1} corresponden a movimientos de tensión del enlace N-H del NH_3^+ . La banda que aparece a 1237 cm^{-1} es debida a modos de tensión C-N en el sistema indólico, mientras que la banda en 1102 cm^{-1} es causada por la tensión del enlace C-N en el C-NH_3^+ . La señal intensa a 748 cm^{-1} es generada por la flexión fuera del plano de los enlaces C-H del anillo bencénico, la cual es característica de la sustitución *orto* como es el caso del sistema indólico.

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectro B₁-B₃).

La señal con un desplazamiento químico de 11.10 ppm es debida al protón indólico (posición 1). El pico localizado a 8.32 ppm corresponde a los tres protones del NH_3^+ . El doblete a 7.58 ppm es originado por el protón 4-H, mientras que el registrado a 7.39 ppm se debe al átomo de hidrógeno 7-H. El núcleo de hidrógeno en la posición 2 da lugar a la señal localizada a 7.25 ppm. Los tripletes que se encuentran a 7.09 y 7.00 ppm corresponden a los protones 6 y 5. El pico trazado a 3.48 ppm se debe a la

presencia de agua en el solvente. La señal que aparece a 3.07 ppm se debe a los dos metilenos en las posiciones 1' y 2'. El singulete registrado a 2.51 ppm es causado por restos de solvente no deuterado (D_6 -DMSO).

2D 1H -RMN (400 MHz, COSY, D_6 -DMSO, Espectros B_4 - B_5).

Acoplamientos observados.

3J (Vecinales)	4-H (7.58) con 5-H (7.00)
	6-H (7.09) con 7-H (7.39)
	1-H (11.10) con 2-H (7.25)
	1-H (11.10) con 2-H (7.25)
4J	2-H (7.25) con 2'-H (3.07)*

* 1' y 2' Tienen el mismo desplazamiento químico.

^{13}C -RMN (100 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B_6 - B_8)²⁵.

Los picos registrados a 136.22 y 126.75 ppm se deben a los carbonos de las posiciones 7a y 3a respectivamente. Los picos de los carbonos terciarios tanto del anillo bencénico como el adyacente al nitrógeno indólico se localizan entre 123.21 y 111.47 ppm, correspondiendo estas dos señales a los carbonos de las posiciones 2 y 7. A 121.03 ppm se encuentra la señal del núcleo 6-C, mientras que a 118.04 y 118.35 ppm están las de los carbonos 4-C y 5-C respectivamente. El carbono de la posición 3 da señal a 109.48 ppm. Las señales respectivas de los carbonos en las posiciones 1' y 2' se encuentran a 39.23 y 22.95 ppm.

La señal de 1'-C aparece cubierta por la señal del solvente (DMSO) en el espectro normal (B_6). Sin embargo se observa claramente en el espectro DEPT 135 (B_8).

2D (^1H - ^{13}C)-RMN.

Acoplamientos observados a un solo enlace (HMQC, Espectros B_9 - B_{10}).

2-H (7.25) con 2-C (123.21)

4-H (7.58) con 4-C (118.05)

5-H (7.00) con 5-C (118.35)

6-H (7.09) con 6-C (121.03)

7-H (7.39) con 7-C (111.47)

Acoplamientos observados a 2 y 3 enlaces (HMBC, Espectros B_{11} - B_{12}).

2J 2-H (7.25) con 3-C (109.48)

3J 1-H (11.10) con 3-C (109.48)

1-H (11.10) con 3a-C (126.75)

2-H (7.25) con 3a-C (126.75)

2-H (7.25) con 7a-C (136.23)

4-H (7.58) con 6-C (121.03)

4-H (7.58) con 7a-C (136.23)

5-H (7.00) con 7-C (111.48)

5-H (7.00) con 3a-C (126.75)

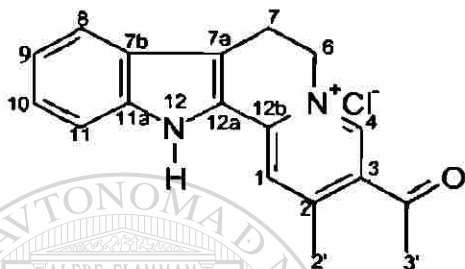
6-H (7.09) con 4-C (118.05)

6-H (7.09) con 7a-C (136.23)

7-H (7.39) con 5-C (118.35)

7-H (7.39) con 3a-C (126.75)

2.2-2a Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6H-indolo[2,3-a]quinolizinio (7).



Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₂).

La desaparición de la banda ancha e intensa cerca de 3000 cm^{-1} debida al NH_3^+ (presente en el espectro del hidrocloreuro de triptamina) y la presencia del pico agudo localizado a 1696 cm^{-1} característico del modo de tensión $\text{C}=\text{O}$ del grupo acetilo, el cual está desplazado a una frecuencia más baja de lo usual (1715 cm^{-1}) debido a los efectos de conjugación con el anillo piridínico, son los indicios más importantes de la obtención del sistema tetracíclico. Otras diferencias en los espectros que sugieren la transformación del reactivo son la señal a 1383 cm^{-1} , la cual proviene de las flexiones de los enlaces $\text{C}-\text{H}$ de los grupos metilo presentes en el producto y ausentes en el reactivo; así como también la ausencia de la banda debida a la tensión del enlace $\text{C}-\text{NH}_3$ alrededor de 1100 cm^{-1} .

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₃-B₁₄).

En este espectro se pueden observar señales similares a las del hidrocloreuro de triptamina: el protón indólico a 12.61 ppm, los protones aromáticos de 7.75 a 7.19 ppm (2 dobletes, 2 tripletes) y los metilenos de las posiciones 6 y 7 en 4.84 y 3.33 ppm respectivamente a la forma de tripletes; este último triplete solamente se observa después del intercambio con deuterio. Las primeras pruebas de la obtención del sistema tetracíclico son los singuletes a 9.43 y 8.27 ppm que corresponden a los protones 4-H y 1-H del anillo piridínico, así como la desaparición de la señal debida al protón alfa del indol (7.25 ppm en el espectro del hidrocloreuro de triptamina), lo cual apoya la formación de los anillos 'D' y 'C' respectivamente. La presencia en la molécula de los metilos en las posiciones 2' y 3' se confirma mediante los singuletes a 2.70 y 2.73 ppm. El pico intenso a 3.35 ppm lo causa el agua contenida en el solvente. La señal intensa a 2.50 ppm es debida a restos de solvente no deuterado (D₆-DMSO).

2D ¹H-RMN (400 MHz, COSY, D₆-DMSO, Espectros B₁₅-B₁₆).**Acoplamientos observados.**

³ J (Vecinales)	8-H (7.75) con 9-H (7.19)
	10-H (7.41) con 11-H (7.57)
	9-H (7.19) con 10-H (7.41)
	6-H (4.93) con 7-H (3.42)

^{13}C -RMN (100 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B_{17} - B_{19}).

El espectro muestra 18 señales correspondientes a igual número de carbonos en la molécula. La primera señal (196.26 ppm) corresponde al carbono del grupo carbonilo. En la región de carbonos aromáticos se observan 13 señales, 5 más que para el hidrocloreuro de triptamina, las cuales corresponden al incremento de este tipo de carbonos en la molécula producto: Núcleos 12b-C (142.88), 1-C (122.74), 2-C (130.64), 3-C (157.03), y 4-C (146.92) del anillo 'D'. Por último las señales de los metilenos a 54.98 y 18.68 ppm presentes también en el reactivo y las señales a 29.33 y 21.82 ppm correspondientes a los carbonos 3'-C y 2'-C, los cuales se encuentran solamente en la estructura del producto. Estas últimas cuatro señales se distinguen perfectamente en el espectro DEPT 135 (Espectro B_{19}).

2D (^1H - ^{13}C)-RMN.

Acoplamientos observados a un solo enlace (HMQC, Espectros B_{20} - B_{21}).

1-H (8.27) con 1-C (122.74)

4-H (9.43) con 4-C (146.92)

8-H (7.76) con 8-C (120.85)

9-H (7.19) con 9-C (120.92)

10-H (7.41) con 10-C (126.97)

11-H (7.57) con 11-C (112.73)

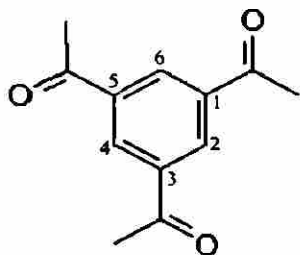
Acoplamientos observados a 2 y 3 enlaces (HMBC, Espectros B₂₂-B₂₃).

- ²J 1-H (8.27) con 2-C (130.64)
1-H (8.27) con 12b-C (142.88)
4-H (9.43) con 3-C (157.03)
6-H (4.93) con 7-C (18.86)

- ³J 1-H (8.27) con 2'-C (21.82)
1-H (8.27) con 12a-C (124.60)
4-H (9.43) con 6-C (54.98)
4-H (9.43) con 2-C (130.64)
4-H (9.43) con 12b-C (142.88)
4-H (9.43) con carbonilo (196.26)
6-H (4.93) con 7a-C (119.56)
6-H (4.93) con 12b-C (142.88)
8-H (7.75) con 10-C (126.97)

- 8-H (7.75) con 11a-C (139.90)
9-H (7.19) con 11-C (112.73)

- 9-H (7.19) con 7b-C (124.55)
10-H (7.41) con 8-C (120.85)
10-H (7.41) con 11a-C (139.90)
11-H (7.57) con 9-C (120.91)
11-H (7.57) con 7b-C (124.55)
12-H (12.61) con 7a-C (119.56)
12-H (12.61) con 7b-C (124.55)

2.2-2b y 2c 1,3,5-triacetilbenceno (16).**Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₃).**

El pico pequeño en 3060 cm^{-1} se debe a la deformación por tensión de los enlaces C-H aromáticos. Aproximadamente a 2980 y 2925 cm^{-1} aparece la señal causada por las tensiones asimétricas de los enlaces C-H de los grupos acetilo. La banda localizada a 1692 cm^{-1} es la correspondiente a la tensión del grupo carbonilo; mientras que los picos pequeños en 1588 y 1400 cm^{-1} probablemente se deben a las tensiones de los enlaces C=C aromáticos. La señal debida a la deformación por flexión de los enlaces C-H de los grupos acetilo tiene lugar en 1363 cm^{-1} .

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectro B₂₄).

El espectro completo consta solamente de cuatro señales incluidas las correspondientes al agua contenida en el solvente (3.31 ppm) y a restos de solvente no deuterado a 2.50 ppm . Las dos señales de importancia son singuletes lo cual indica que los protones que dan lugar a cada señal están aislados (no tienen protones vecinos) y la simplicidad del espectro sugiere una gran simetría de la molécula.

El singulete registrado a 8.63 ppm (integra para uno) corresponde a los protones aromáticos, los cuales dan una sola señal por ser

magnéticamente equivalentes. Los grupos acetilo dan origen a la señal a 2.72 ppm (integra para tres) y se registra una sola señal debido a la misma razón que los protones aromáticos.

2D ^1H -RMN (400 MHz, COSY, D_6 -DMSO, Espectro B_{25}).

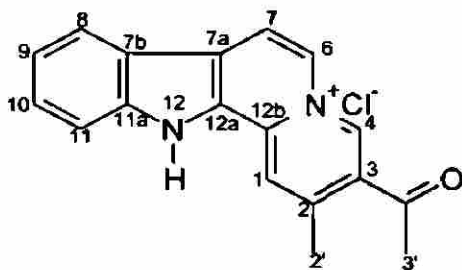
Se observa solo un acoplamiento pequeño de largo alcance entre los protones aromáticos y los grupos metilo.

^{13}C -RMN (100 MHz, D_6 -DMSO, Espectro B_{26}).

Este espectro es también sumamente sencillo en cuanto al número de señales que aparecen en él (cuatro), lo cual sugiere nuevamente la presencia de simetría en la molécula.

La primera señal a 197.07 ppm se debe a los grupos carbonilo, mientras que la ubicada a 137.49 ppm corresponde a los carbonos aromáticos substituidos por los grupos acetilo. Los carbonos aromáticos sin substituir dan señal en 131.22 ppm. La señal correspondiente al solvente se registra alrededor de 39.0 ppm. Por último, la presencia de los grupos metilo de la molécula da origen a la señal a 26.96 ppm. Lo anterior se puede constatar con el DEPT 135 en el cual aparecen únicamente los carbonos primarios, secundarios y terciarios; los primeros y los últimos aparecen hacia arriba del eje, en tanto que los carbonos secundarios lo hacen hacia abajo.

2.2-3 Cloruro de 3-acetil-2-metil-12*H*-indolo[2,3-*a*]quinolizinio (22).



Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₄).

La estructura de esta molécula es muy parecida a la de su precursor (al igual que su espectro), la diferencia es un doble enlace entre las posiciones 6 y 7 y cuya señal sería difícil de asignar y/o de diferenciar con certeza, ya que aparece en la misma región de las tensiones C=C aromáticos, comunes a ambas moléculas. Las diferencias más importantes son la presencia de la banda alrededor de 1400 cm⁻¹ y la que está centrada en 3050 cm⁻¹, así como la desaparición de la banda cerca de 1560 cm⁻¹ que se encuentra solamente en el espectro del producto.

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₂₇-B₂₈).

Este espectro confirma la estructura de la molécula ya que muestra la desaparición de los tripletes debidos a los metilenos y la aparición de un nuevo par de dobletes a 9.11 y 8.86 ppm causados por los protones de las posiciones 6 y 7 respectivamente. El resto de las señales permanecen igual, salvo un ligero cambio en los desplazamientos químicos.

2D ¹H-RMN (400 MHz, COSY, D₆-DMSO, Espectros B₂₉-B₃₀).**Acoplamientos observados.**

³ J (Vecinales)	6-H (9.11) con 7-H (8.86)
	8-H (8.46) con 9-H (7.5)
	9-H (7.5) con 10-H (7.76)
	10-H (7.76) con 11-H (7.89)

¹³C-RMN (100 Mz, D₆-DMSO, Espectros B₃₁-B₃₅).

Aquí se puede verificar también la deshidrogenación del sistema tetracíclico del compuesto **7** apoyándose principalmente en la técnica DEPT 135, en la cual, al igual que en el espectro de protones se puede observar la desaparición de las señales de los dos metilenos de **7**, así como la aparición de dos nuevas señales debidas a los carbonos terciarios correspondientes a las posiciones 6 (127.55 ppm) y 7 (116.51 ppm).

2D (¹H-¹³C)-RMN**Acoplamientos observados a un solo enlace (HMQC, Espectros B₃₆-B₃₇).**

2'-H (2.81) con 2'-C (21.43)
3'-H (2.81) con 3'-C (29.44)
1-H (8.96) con 1-C (122.42)
4-H (10.07) con 4-C (139.78)
6-H (9.11) con 6-C (127.55)
7-H (8.87) con 7-C (116.51)
8-H (8.47) con 8-C (122.24)
9-H (7.50) con 9-C (121.79)

10-H (7.77) con 10-C (129.88)

11-H (7.89) con 11-C (112.90)

Acoplamientos observados a dos y tres enlaces (HMBC, Espectros B_{38} - B_{39}).

2J 2'-H (2.80) con 2-C (130.61)
3'-H (2.80) con Carbonilo (197.07)

1-H (8.96) con 2-C (130.61)

1-H (8.96) con 12b-C (132.11)

4-H (10.06) con 3-C (146.09)

6-H (9.11) con 7-C (116.50)

7-H (8.86) con 6-C (127.54)

3J 2'-H (2.80) con 1-C (122.42)

2'-H (2.80) con 3-C (146.09)

3'-H (2.80) con 3-C (146.09)

4-H (10.06) con 6-C (127.54)

4-H (10.06) con 2-C (130.61)

4-H (10.06) con 12bC (132.11)

6-H (9.11) con 7a-C (123.85)

6-H (9.11) con 12b-C (132.11)

6-H (9.11) con 4-C (139.77)

7-H (8.86) con 12a-C (129.57)

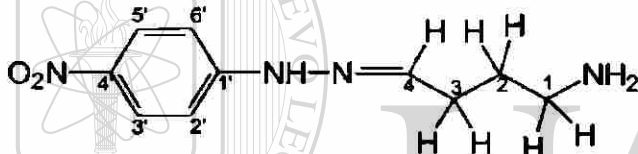
8-H (8.46) con 10-C (129.88)

8-H (8.46) con 11a-C (141.64)

9-H (7.50) con 11-C (112.90)

- 9-H (7.50) con 7b-C (120.58)
- 10-H (7.76) con 8-C (122.23)
- 10-H (7.76) con 11a-C (141.64)
- 11-H (7.89) con 7b-C (120.58)
- 11-H (7.89) con 9-C (121.78)

2.2-4 No obtuvimos espectros de 5-Nitrotriptamina (11), solamente de la hidrazona formada a partir de la *p*-nitrofenilhidrazina y el γ -aminobutiraldehído.



$^1\text{H-RMN}$ (400 MHz, $\text{D}_6\text{-DMSO}$, Espectros $\text{B}_{40}\text{-B}_{42}$).

La señal a 10.95 ppm corresponde al protón del NH (posición 1') el cual se intercambia con agua deuterada. A 8.07 ppm se observa un doblete que integra para dos protones el cual se debe a los núcleos de las posiciones 3' y 5'; de igual manera, el doblete localizado a 6.99 ppm corresponde a los protones 2' y 6'. Cada uno de estos pares de núcleos dan una misma señal debido a la simetría de la molécula. La señal a 7.41 ppm (triplete) la causa el protón de la posición 4 el cual aparece a campo bajo debido a que está unido a un carbono sp^2 . A 2.84 ppm aparece un triplete que integra para dos debido al núcleo de la posición 1. Las señales de los protones de las posiciones 2 y 3 (quinteto y cuarteto respectivamente) se observan a 1.82 y 2.35 ppm. La señal debida al NH_2 se encuentra

probablemente debajo de la señal del agua a 3.30 ppm ya que como se observa en el COSY (espectro B₄₅), hay una pequeña interacción entre esta última señal y la del protón de la posición 1.

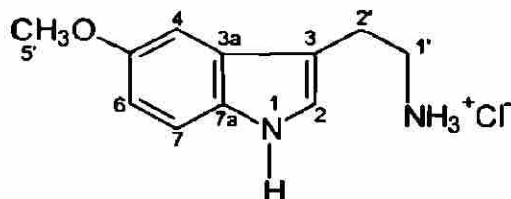
2D ¹H-RMN (400 MHz, COSY, D₆-DMSO, Espectros B₄₃-B₄₅).

Acoplamientos observados.

J^{β}	3'-H y 5'-H (8.07) con 2'-H y 6'-H (6.99)
	4-H (7.41) con 3-H (2.35)
	1-H (2.84) con 2-H (1.82)
	3-H (2.35) con 2-H (1.82)

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectro B₄₆).

El espectro muestra ocho señales para igual número de carbonos magnéticamente diferentes en la molécula, cinco en la región de carbonos aromáticos y tres en la de carbonos sp³. El hecho de que aparezca un número de señales menor al número de carbonos en la molécula, se debe a la simetría del anillo aromático. A 150.95 ppm se observa la señal del carbono en la posición 4' seguida de la del carbono de la posición 4 a 144.89 ppm. Hacia campo un poco más bajo, a 126.11 ppm, se encuentra la señal de los carbonos 3'-C y 5'-C. La señal correspondiente a 2'-C y 6'-C se localiza a 110.41 ppm. La última señal en la región de carbonos aromáticos a 101.52 ppm se debe al núcleo de la posición 1'. Las señales de los metilenos a campo alto son en el siguiente orden: 1-C, 38.27 ppm; 3-C, 28.64 ppm y 2-C 23.81 ppm.

2.2-5 Hidrocloruro de 5-metoxitriptamina (12).**Espectro de infrarrojo (KBr Espectro A₅).**

El pico debido a la tensión del enlace N-H indólico se localiza a 3300 cm^{-1} . Los modos de tensión de los enlaces N-H del grupo $^+\text{NH}_3$ dan lugar a la banda ancha cerca de 3000 cm^{-1} ; mientras que las flexiones de estos mismos enlaces provocan la aparición de los picos a 1600 y 1450 cm^{-1} , los cuales probablemente se traslapan con los correspondientes a las tensiones de los enlaces C=C. A este último tipo de deformación se debe la señal intensa ubicada a 1500 cm^{-1} . La presencia del grupo metoxilo se confirma mediante el pico de intensidad media cerca de 1380 cm^{-1} ocasionado por los modos de flexión de los enlaces C-H del CH_3 y por el pico agudo e intenso a 1100 cm^{-1} debido a la tensión C-O.

 ^1H -RMN (400 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B₄₇-B₄₈).

La señal a 10.81 ppm corresponde al protón de la posición 1. El singlete ancho a 8.08 ppm se debe al grupo $^+\text{NH}_3$. Las señales de los protones aromáticos aparecen en el siguiente orden: 7-H (doblete) a 7.24 , 2-H a 7.17 , 4-H a 7.07 y 6-H (doblete de dobletes) a 6.72 ppm . El grupo metoxilo da un singlete intenso a 3.75 ppm , y la señal debida a los metilenos (posiciones 1' y 2') aparece como un multiplete centrado a 3.00 ppm .

2D ^1H -RMN (400 MHz, COSY, D_6 -DMSO, Espectros B_{49} - B_{50}).**Acoplamientos observados.**

3J	1-H (10.81) con 2-H (7.17) 6-H (6.72) con 7-H (7.24)
4J	6-H (6.72) con 4-H (7.07)
5J	4-H (7.06) con 5'-H (3.76)

 ^{13}C -RMN (100 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B_{51} - B_{52}).

Los carbonos cuaternarios 5, 3a y 7a, dan señal a 153.05, 131.34 y 127.08 ppm respectivamente. Las señales de los núcleos 2-C, 7-C y 6-C se ubican, en el orden citado, a 123.89, 112.08 y 111.17 ppm. Las últimas dos señales en la región de carbonos sp^2 corresponden a 3-C (109.16) y 4-C (100.00). La señal intensa a 55.36 ppm se debe al carbono del grupo metoxilo. Los metilenos de las posiciones 1' y 2' dan lugar a las señales ubicadas 39.22 y 23.01 ppm.

2D (^1H - ^{13}C)-RMN.**Acoplamientos observados a un solo enlace (HMQC, Espectros B_{53} - B_{54}).**

1'-H (3.00) con 1'-C (39.22)
2'-H (3.00) con 2'-C (23.01)
5'-H (3.76) con 5'-C (55.36)
2-H (7.17) con 2-C (123.89)
4-H (7.06) con 4-C (100.00)
6-H (6.72) con 6-C (111.17)
7-H (7.24) con 7-C (112.08)

Acoplamientos observados a 2 y 3 enlaces (HMBC, Espectros B₅₅-B₅₆).

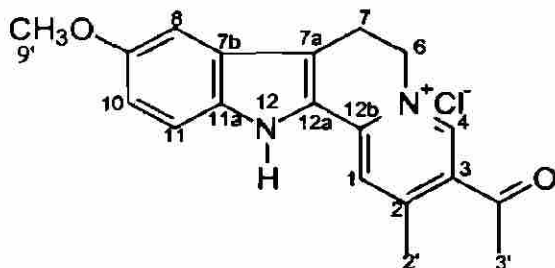
²J

- 1'-H (3.00) con 2'-C (23.01)
- 2'-H (3.00) con 1'-C (39.22)
- 2'-H (3.00) con 3-C (109.16)
- 1-H (10.81) con 7a-C (131.34)
- 2-H (7.17) con 3-C (109.16)
- 4-H (7.07) con 5-C (153.05)

³J

- 2'-H (3.00) con 2-C (123.89)
- 2'-H (3.00) con 3a-C (127.08)
- 1-H (10.81) con 3-C (109.16)
- 1-H (10.81) con 3a-C (127.08)
- 2-H (7.17) con 3a-C (127.08)
- 2-H (7.17) con 7a-C (131.34)
- 4-H (7.07) con 3-C (109.16)
- 4-H (7.07) con 6-C (111.17)
- 4-H (7.07) con 7a-C (131.34)
- 6-H (6.72) con 4-C (100.00)
- 6-H (6.72) con 7a-C (131.34)
- 7-H (7.24) con 3a-C (127.08)
- 7-H (7.24) con 5-C (153.05)

2.2-6 Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-9-metoxi-6H-indolo-[2,3-a]quinolizinio (21).



Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₆).

La banda de tensión del N-H aparece ligeramente más ensanchada y a una frecuencia mayor (3400) que en el espectro del hidrocloreto de metoxitriptamina. La primera evidencia de la obtención del sistema tetracíclico es la desaparición de la señal ancha a 3000 cm⁻¹, lo cual indica que el grupo ⁺NH₃ ya no está presente. En su lugar quedan solamente los picos pequeños debidos a las tensiones C-H aromáticos. Los picos agudos a 1700 y 1380 cm⁻¹ debidos a la tensión C=O y a las flexiones C-H de los CH₃, también sugieren la obtención del producto deseado. Los picos agudos e intensos a 1650 y 1550 cm⁻¹ se deben a los enlaces C=C del anillo piridínico.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, espectros B₅₇-B₅₈).

La señal del protón indólico (posición 12) se observa a 12.51 ppm. En la región de aromáticos se confirma la desaparición del protón α al nitrógeno indólico (por la formación del anillo 'C'), así como la obtención del anillo piridínico por los dos nuevos singuletes debidos a 4-H (9.39) y 1-H (8.22). A diferencia del espectro del hidrocloreto, en el del sistema teracíclico, las señales debidas a los metilenos en las posiciones 6 (4.89) y

7 (3.37) aparecen perfectamente resueltas. La presencia de los grupos acetilo y metilo se puede constatar por las señales intensas a 2.70 y 2.67 ppm respectivamente. El resto de las señales experimentan solamente un desplazamiento hacia campo más bajo.

2D ^1H -RMN (400 MHz, COSY, D_6 -DMSO, Espectros B_{59} - B_{60}).

Acoplamientos observados.

3J (Vecinales)	6-H (4.89) con 7-H (3.37)
	10-H (7.04) con 11-H (7.45)
4J	8-H (7.18) con 10-H (7.04)
5J	8-H (7.18) con 11-H (7.45)

^{13}C -RMN (100 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B_{61} - B_{63}).

Todas las señales corresponden al número y tipo de carbonos presentes en la molécula. Las tres señales que más fácilmente permiten comprobar la obtención del sistema tetracíclico son la del grupo carbonilo a

196.23 ppm y las de los grupos metilo 2' y 3' a 21.83 y 29.31 ppm. Las señales debidas a los carbonos terciarios del anillo 'D' se localizan a 122.54 (1-C) y 146.84 (4-C). La evidencia concluyente de la obtención del producto la dan las señales de los núcleos 12a-C, 12b-C, 2-C y 3-C a 124.92, 142.90, 130.37 y 156.76 ppm que son los carbonos cuaternarios (más el del carbonilo) que se forman junto con el sistema tetracíclico.

2D (¹H-¹³C)-RMN.

Acoplamientos observados a un solo enlace (HMQC, Espectros B₆₄-B₆₅).

2'-H (2.70) con 2'-C (21.83)

3'-H (2.67) con 3'-C (29.31)

9'-H (3.80) con 9'-C (55.35)

1-H (8.22) con 1-C (122.54)

4-H (9.39) con 4-C (146.84)

6-H (4.89) con 6-C (55.00)

7-H (3.37) con 7-C (18.94)

8-H (7.18) con 8-C (100.53)

10-H (7.04) con 10-C (118.84)

11-H (7.45) con 11-C (113.74)

Acoplamientos observados a 2 y 3 enlaces (HMBC, espectros B₆₆-B₆₇).

²J 2'-H (2.70) con 2-C (130.37)

3'-H (2.67) con carbonilo (196.23)

1-H (8.22) con 12b-C (142.90)

¹H (8.22) con 2-C (130.37)

4-H (9.39) con 3-C (156.76)

6-H (4.89) con 7-C (18.94)

12-H (12.51) con 11a-C (135.50)

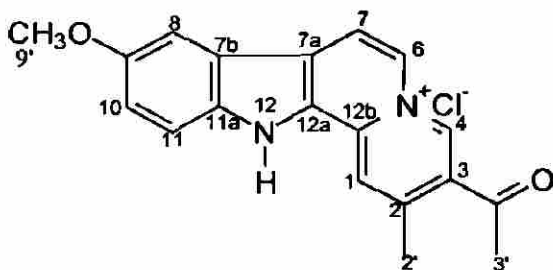
³J 2'-H (2.70) con 1-C (122.54)

2'-H (2.70) con 3-C (156.76)

9'-H (3.80) con 9-C (154.39)

- 1-H (8.22) con 2'-C (21.83)
- 1-H (8.22) con 12a-C (124.90)
- 4-H (9.39) con 6-C (55.00)
- 4-H (9.39) con 12b-C (142.90)
- 4-H (9.39) con carbonilo (196.23)
- 4-H (9.39) con 2-C (130.37)
- 6-H (4.89) con 7a-C (118.91)
- 6-H (4.89) con 12b-C (142.90)
- 6-H (4.89) con 4-C (146.84)
- 8-H (7.18) con 10-C (118.84)
- 8-H (7.18) con 11a-C (135.50)
- 10-H (7.04) con 11a-C (135.50)
- 11-H (7.45) con 7b-C (124.84)
- 11-H (7.45) con 9-C (154.39)
- 12-H (12.51) con 7a-C (118.91)
- 12-H (12.51) con 7b-C (124.84)

2.2-7 Cloruro de 3-acetil-2-metil-9-metoxi-12H-indolo[2,3-a]quinolizinio (25).



Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₇).

Las diferencias de los espectros del compuesto dihidrogenado y del producto son muy pequeñas; la más notoria es la desaparición, en el espectro del producto, de la banda que aparece a 1550 cm⁻¹ en el espectro del compuesto dihidrogenado .

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₆₈-B₆₉).

El hecho de que no se observen los tripletes debidos a los metilenos de las posiciones 6 y 7 (del reactivo), y la aparición de dos nuevos dobletes en la región de aromáticos a 9.04 (6-H) y 8.81 (7-H) confirma la obtención de la molécula.

2D ¹H-RMN (400 MHz, COSY, D₆-DMSO, Espectros B₇₀-B₇₁).**Acoplamientos observados.**

³J 6-H (9.04) con 7-H (8.81)
 10-H (7.39) con 11-H (7.79)

⁴J 1-H (8.89) con 2'-H (2.80)
 10-H (7.39) con 8-H (7.97)

⁵J 1-H (8.89) con 6-H (9.04)
 8-H (7.97) con 11-H (7.79)

⁶J 1-H (8.89) con 7-H (8.81)

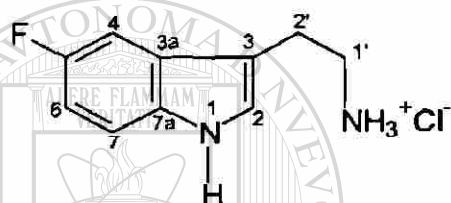
¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₇₂-B₇₄).

Al igual que en el espectro de protones, la desaparición de las señales a campo alto debidas a los metilenos y el aumento de dos señales en la región de carbonos aromáticos a 139.87 ppm (6-C) y 126.89 ppm (7-C),

permite constatar la deshidrogenación en las posiciones 6 y 7, observándose las 19 señales esperadas. La baja solubilidad del compuesto no permitió obtener los espectros DEPT, HMQC y HMBC.

2.2-8 No obtuvimos espectros de 5-isopropiltryptamina (13).

2.2-9 Hidrocloruro de 5-fluortryptamina (14).



Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₈).

La banda ligeramente ensanchada alrededor de 3280 cm^{-1} corresponde a la deformación por tensión del enlace N-H del indol. El pico ancho alrededor de 3000 cm^{-1} es debido a la presencia del grupo NH_3^+ . El par de picos ubicados cerca de 1600 cm^{-1} corresponden a la tensión de los enlaces C=C del anillo aromático (pico de frecuencia más alta) y el que se encuentra a la derecha de este último a los modos de flexión asimétrica del grupo NH_3^+ . La banda en 1500 cm^{-1} al igual que la ubicada cerca de 1450 cm^{-1} son causadas por los modos de tensión de los enlaces C=C aromáticos. El pico localizado entre estas dos últimas señales es originado por la flexión simétrica de los enlaces N-H de la sal de amonio cuaternario. Las bandas agudas de intensidad fuerte que se encuentran alrededor de 1200 y 1100 cm^{-1} se deben a las deformaciones por tensión de los enlaces C-N del indol y de la sal de amonio cuaternario respectivamente. La señal de

intensidad media ubicada aproximadamente a 930 cm^{-1} corresponde a las flexiones fuera del plano del enlace C-H del anillo aromático en la posición 4; en tanto que la que se encuentra en 800 cm^{-1} la causan los enlaces de las posiciones 6 y 7. En este espectro ya no aparece el pico debido a la flexión fuera del plano para el caso de un benceno con cuatro hidrógenos adyacentes (aproximadamente 750 cm^{-1}) debido a la substitución por el átomo de flúor en la posición 5.

^1H -RMN (400 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B_{75} - B_{77}).

La primera señal ubicada hacia campo bajo en 11.13 ppm corresponde al nitrógeno indólico (posición 1). El singulete ancho a 8.05 ppm que integra para 3 protones corresponde a los hidrógenos del nitrógeno cuaternario. En la región de aromáticos las señales de los núcleos de las posiciones 4, 7 y 2 aparecen traslapadas en un multiplete centrado en 7.35 ppm; es posible reconocer un singulete ancho a 7.38 ppm que corresponde al protón 7-H, un doblete a 7.35 ppm con $J= 3.3\text{ Hz}$ que es posible asignarlo al protón 4-H y finalmente un singulete ancho a 7.33 ppm que corresponde al protón 2-H. El triplete localizado a 6.93 ppm se debe al protón de la posición 6, esta multiplicidad se debe al hecho de que el flúor se acopla en la misma forma que lo hacen los átomos de hidrógeno²⁸. La señal del agua presente en el solvente se observa a 3.36 ppm y la de restos de solvente no deuterado a 2.50 ppm. El multiplete centrado en 3.0 ppm corresponde a los protones de las posiciones 1' y 2'.

2D ^1H -RMN (400 MHz, COSY, D_6 -DMSO, Espectros B_{78} - B_{79}).**Acoplamientos observados.**

3J (Vecinales)	1-H (11.13) con 2-H (7.35)
	6-H (6.93) con 7-H (7.38)

 ^{13}C -RMN (100 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B_{80} - B_{82}).

Las primeras dos señales centradas a 156.65 ppm corresponden al núcleo 5-C con una $^1J_{\text{C-F}}$ de 231.4 Hz, este valor se encuentra cerca del reportado para un benceno monosustituido con flúor (245 Hz)²⁸. Esta partición de la señal se debe a que el flúor se acopla con el carbono en la misma forma que lo hace con el hidrógeno. La señal debida al carbono 7a-C tiene lugar a 132.86 ppm. El doblete pequeño ($^3J_{\text{C-F}} = 10.06$ Hz) centrado en 127.0 ppm corresponde al carbono 3a-C. A 125.49 ppm se localiza el singulete debido a la presencia de 2-C. Los cuatro dobletes siguientes, continuando hacia campo alto, se deben a los carbonos terciarios del anillo de seis miembros y al de la posición 3; en 112.38 ppm se encuentra la señal correspondiente a 7-C, la señal del núcleo 3-C se localiza en 109.74 ppm. Las señales de 6-C y 4-C pueden observarse a 109.15 y 102.82 ppm respectivamente. Este patrón de partición es el mismo que se observa para el núcleo 5-C, la única diferencia es el valor de la constante de acoplamiento. La señal intensa centrada alrededor de 39 ppm se debe al solvente. Debajo de esta señal se encuentra la del metileno de la posición 2'; esto se puede comprobar mediante la técnica DEPT 135, en la cual los carbonos secundarios aparecen hacia abajo del eje, como es el caso. La última señal del espectro es debida a 1'-C.

2D (¹H-¹³C)-RMN.

Acoplamientos observados a un solo enlace (HMQC, Espectros B₈₃-B₈₄).

1'-H (3.00) con 1'-C (39.5)

2'-H (3.00) con 2'-C (22.91)

2-H (7.33) con 2-C (125.49)

4-H (7.35) con 4-C (112.38)

6-H (6.93) con 6-C (109.15)

7-H (7.38) con 7-C (102.82)

Acoplamientos observados a dos y tres enlaces (HMBC, Espectros B₈₅-B₈₆).

²J 1-H (11.13) con 7a-C (132.86)

2-H (7.33) con 3-C (109.74)

1'-H (3.00) con 2'-C (22.91)

2'-H (3.00) con 1'-C (39.4)

4-H (7.35) con 3a-C (127.00)

4-H (7.35) con 5-C (156.65)

6-H (6.93) con 7-C (102.82)

6-H (6.93) con 5-C (156.65)

7-H (7.38) con 7a-C (132.86)

³J 1-H (11.13) con 3-C (109.74)

1-H (11.13) con 3a-C (127.00)

1'-H (3.00) con 3-C (109.74)

2'-H (3.00) con 3a-C (127.00)

2-H (7.33) con 3a-C (127.00)

4-H (7.35) con 3-C (109.74)

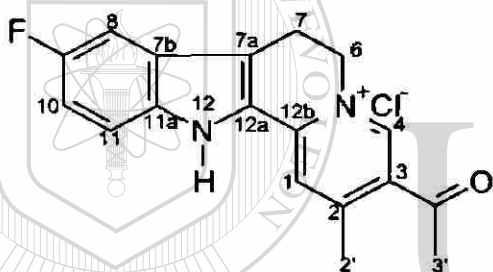
4-H (7.35) con 7a-C (132.86)

6-H (6.93) con 7a-C (132.86)

7-H (7.38) con 3a-C (127.00)

7-H (7.38) con 5-C (156.65)

**2.2-10a Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-9-flúor-2-metil-6*H*-indolo
[2,3-*a*]quinolizinio (17).**



Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₉):

A 1700 cm^{-1} se encuentra la señal del grupo carbonilo. Se puede apreciar también la ausencia de los picos debidos a la tensión N-H cerca de 3000 cm^{-1} y a las flexiones simétricas y asimétricas del grupo N^+H_2 cerca de 1600 y 1500 cm^{-1} , el cual desaparece para formar los anillos 'C' y 'D' del sistema tetracíclico. La presencia de los grupos metilo y/o acetilo puede confirmarse por la banda de intensidad media alrededor de 1360 cm^{-1} . El resto de las señales aportan poca información acerca de la transformación.

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₈₇-B₈₉).

En este espectro podemos observar los protones piridínicos (1-H y 4-H) a 9.44 y 8.30 ppm. Los singuletes intensos a 2.72 y 2.70 ppm corresponden a los protones del grupo metilo y del grupo acetilo. La ausencia de la señal debida al protón α al indol (posición 12a) junto con las señales anteriores confirman la obtención del sistema tetracíclico.

2D ¹H-RMN (400 MHz, COSY, D₆-DMSO, Espectros B₉₀-B₉₁).**Acoplamientos observados**

³ J (Vecinales)	10-H (7.26) con 8-H (7.58)
	10-H (7.26) con 11-H (7.58)
	6-H (4.93) con 7-H (3.36)
Larga distancia	10-H (7.26) con 7-H (3.36)

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO Espectros B₉₂-B₉₅).

La técnica DEPT 135 muestra claramente las señales de los carbonos primarios en las posiciones 2' y 3' a 21.79 y 29.37 ppm respectivamente. Aparecen también dos nuevas señales de carbonos terciarios a 146.91 y 122.95 causadas por los núcleos 4-C y 1-C; mientras que la señal del carbono alfa del indol ya no aparece como un carbono terciario sino como uno cuaternario debido a la formación del anillo 'C'.

¹H-RMN (400 MHz, CD₃OD, Espectros B₉₆-B₉₇):

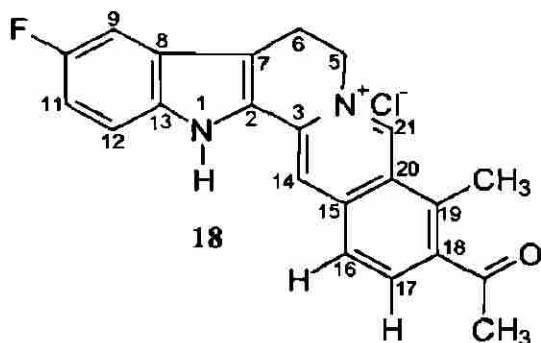
Este espectro presenta diferencias con respecto al obtenido en D₆-DMSO, sin embargo se pueden ver perfectamente las señales del compuesto 17.

La primera de estas diferencias es la desaparición de la señal del protón de la posición 12 debido al intercambio con deuterio del metanol deuterado. La diferencia más marcada es el desplazamiento de todas las demás señales hacia campos más altos; los protones de las posiciones 1 y 4 dan señal a 6.43 y 7.69 ppm respectivamente, mientras que en D₆-DMSO lo hacen a 8.30 y 9.44 ppm. Las señales correspondientes a los protones del anillo 'A' aparecen completamente resueltas, a diferencia del espectro en D₆-DMSO en donde las señales de los núcleos de las posiciones 8 y 11 se traslapan para dar un multiplete a 7.58 ppm. Otra diferencia importante en esta región es que la señal del protón 10-H aparece como un doblete de dobletes en lugar de un triplete como el espectro en D₆-DMSO; lo cual se debe a que este protón tiene constantes de acoplamiento diferentes con el flúor y el protón 11-H. Los metilenos de las posiciones 6 y 7 dan tripletes a 3.36 y 1.87 ppm. Las señales de los metilos de las posiciones 2' y 3' aparecen a 1.24 y 1.12 ppm, las cuales están más separadas que en el espectro de D₆-DMSO.

2D ¹H-RMN (400 MHz, COSY, CD₃OD, Espectros B₉₈-B₉₉):

³ J (Vecinales)	6-H (3.36) con 7-H (1.87)
	10-H (5.94) con 11-H (5.84)
⁴ J	8-H (5.62) con 10-H (5.94)
Larga distancia	1-H (6.43) con 10-H (5.94)

2.2-10b Cloruro de 18-acetil-10-fluor-19-metil-3, 4, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21-dehidro-yohimbano (18).



No pudimos obtener una muestra lo suficientemente pura de este compuesto para caracterización debido a que se descomponía al recrystalizarlo (ver parte experimental, punto 3.3-10b). Sin embargo; los espectros obtenidos de esta muestra permiten confirmar que se trata de un análogo del compuesto 20 (punto 2.2-13b).

Espectro de Infrarrojo (KBr, Espectro A₁₀):

Se observa la señal debida a la tensión del enlace N-H alrededor de 3400 cm⁻¹ así como las debidas al grupo C=O y metilo a 1700 y 1380 cm⁻¹ respectivamente. Una diferencia con respecto al espectro del compuesto 17, es que en el espectro del compuesto 18 disminuye considerablemente la intensidad de las bandas localizadas cerca de 1550 y 1500 cm⁻¹. Esta misma situación se observa al comparar el espectro del cloruro de indoloquinolizino con el de su respectivo compuesto deshidrogenado. También podemos observar la presencia de un par de picos alrededor de 850 cm⁻¹, característicos de la flexión fuera del plano de los enlaces C-H de

un anillo bencénico con dos átomos de hidrógeno adyacentes, como es el caso del primer y quinto anillo.

^1H -RMN (400 MHz, CD_3OD , Espectros B_{100} - B_{102}):

Este espectro presenta un patrón similar al del compuesto 17 en CD_3OD , solo que con las señales hacia campo más bajo.

La diferencia más notable es el par de dobletes a 8.73 y 8.04 ppm (17-H y 16-H respectivamente), los cuales provienen de un sistema aislado ya que se acoplan únicamente entre sí. También se observan un par de singletes debidos probablemente a los protones del cuarto anillo, 14-H (8.65 ppm) y 21-H (7.04 ppm). Nuevamente se pueden ver las señales del anillo "A" (9-H, 11-H y 12-H) solo que ahora si se observa el acoplamiento de 9-H y 12-H con el flúor (2.2 y 2.0 Hz respectivamente). Las señales de los metilenos (4.96 y 3.43 ppm) y los metilos (2.87 y 2.33 ppm) aparecen perfectamente resueltas y a campo más bajo que las señales correspondientes del compuesto 17.

2D ^1H -RMN (400 MHz, CD_3OD , Espectros B_{103} - B_{104}):

Acoplamientos observados

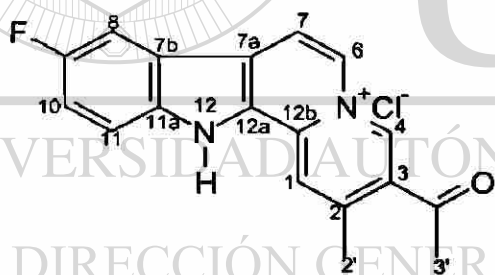
3J (Vecinales)	16-H (8.04 con 17-H (8.73)
	5-H (4.96) con 6-H (3.43)
	11-H (7.33) con 12-H (6.89)
4J	9-H (7.02) con 11-H (7.33)
5J	9-H (7.02) con 12-H (6.89)

^{13}C -RMN (100 MHz, CD_3OD , Espectros B_{105} - B_{108}):

Este espectro también presenta un patrón parecido al del compuesto 17 pero con las señales a campo más bajo.

La presencia de dos nuevas señales de carbono terciario en la región de aromáticos y la permanencia de las señales principales del compuesto 17 (el carbonilo a 191.73 ppm; los dobles correspondientes a 9-C, 10-C, 11-C y 12-C con sus correspondientes constantes de acoplamiento y las de los metilos y metilenos debajo de 50 ppm) nos hacen suponer que obtuvimos el compuesto con la estructura propuesta.

2.2-11 Cloruro de 3-acetil-9-flúor-2-metil-12*H*-indolo [2,3-*a*]quinolizinio (23).

**Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A_{11}):**

Salvo por la señal alrededor de 3400 cm^{-1} debida a la tensión del enlace N-H que aparece aquí como un pico ligeramente ensanchado en lugar de los dos que aparecen en el espectro del reactivo, el resto del espectro es muy parecido al de este último. El pico del carbonilo en 1700 cm^{-1} . Las tensiones C=C en $1650, 1600, 1500$ y 1400 cm^{-1} . La banda debida a la flexión de los enlaces C-H de los metilos, etc. No se distingue una

señal en la región de los dobles enlaces que permita constatar la transformación.

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₀₉-B₁₁₁).

El espectro obtenido es el de una mezcla de dos compuestos; sin embargo, se pueden observar las señales de un compuesto principal que corresponden al producto esperado.

Al igual que en el análogo no sustituido, la evidencia principal de la obtención del compuesto deshidrogenado es la desaparición de los tripletes en las posiciones 6 y 7 (los cuales se observan en el espectro del reactivo), así como la presencia de dos nuevos dobletes en la región de aromáticos a 9.09 y 8.82 ppm que corresponden a estas mismas dos posiciones en el producto. Otro cambio notorio es la resolución de las señales debidas a los núcleos 8-H (8.34 ppm) y 11-H (7.93 ppm), las cuales se traslapan en el espectro de la dihidroindoloquinolizina. Además, estas dos señales, junto con la del protón en la posición 10, aparecen como dobletes de dobletes y triplete de dobletes respectivamente.

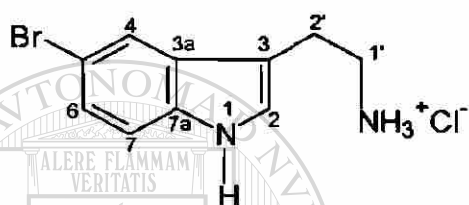
2D ¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₁₂-B₁₁₃).

Acoplamientos observados.

³ J (Vecinales)	6-H (9.09) con 7-H (8.82)
	10-H (7.65) con 11-H (7.93)
⁴ J	10-H (7.65) con 8-H (8.34)

^{13}C -RMN

No fue posible obtener espectros de carbono debido a la baja solubilidad del compuesto en los únicos solventes disponibles (D_6 -DMSO y CD_3OD).

2.2-12 Hidrocloruro de 5-bromotriptamina (15).**Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₁₂).**

La tensión del enlace N-H indólico da lugar a la banda a 3273 cm^{-1} . La banda ancha alrededor de 2972 cm^{-1} se debe a las tensiones de los enlaces N-H del NH_3^+ . Los picos debidos a las tensiones de los enlaces C=C están a 1605 , 1512 y 1461 cm^{-1} ; los correspondientes a las flexiones de los enlaces N-H del N^+H_3 se encuentran a la derecha del pico de 1605 y a 1461 cm^{-1} . A 1098 cm^{-1} se encuentra la banda de la tensión del enlace C-N de la posición 1'. El patrón de sustitución del anillo bencénico se puede comprobar por las señales a 885 y 800 cm^{-1} , las cuales son características de las flexiones fuera del plano de los enlaces C-H aromáticos cuando hay 1 (posición 4) y 2 (posiciones 6 y 7) hidrógenos adyacentes. La banda a 631 cm^{-1} se debe al enlace C-Br.

^1H -RMN (400 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B_{114} - B_{115}).

La señal del protón indólico se ubica a 11.24 ppm. El singulete ancho localizado a 8.05 ppm corresponde a los protones enlazados al nitrógeno cuaternario. El núcleo de la posición 4 da lugar a la señal que se encuentra a 7.78 ppm, mientras que los dobletes que están a 7.34 y 7.19 ppm se deben a 7-H y 6-H respectivamente. El singulete a 7.31 ppm se debe al protón de la posición 2; esta última asignación se confirma por el acoplamiento (COSY) de dicha señal con la correspondiente a 1-H. Las señales de los metilenos (1' y 2') aparecen traslapadas a 3.01 ppm. La señal del agua contenida en el solvente y la de restos de solvente no deuterado se encuentran a 3.33 y 2.50 ppm.

2D ^1H -RMN (400 MHz, COSY, D_6 -DMSO, Espectros B_{116} - B_{117}).**Acoplamientos observados.**

3J (Vecinales) 1-H (11.24) con 2-H (7.31)

6-H (7.19) con 7-H (7.34)

4J 4-H (7.78) con 6-H (7.19)

5J 4-H (7.78) con 7-H (7.34)

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS 4-H (7.78) con 2'-H (3.01)

Larga distancia 4-H (7.78) con $^*\text{NH}_3$ (8.05)

 ^{13}C -RMN (100 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B_{118} - B_{120}).

La señal hacia campo más bajo (134.92 ppm) corresponde al núcleo 5-C; en seguida, a 128.68 ppm se encuentra la señal del carbono de la posición 3a. Las señales de los carbonos terciarios aparecen en forma

consecutiva en el siguiente orden: 2-C a 125.18, 6-C a 123.54, 4-C a 120.43 y 7-C a 113.51 ppm. Las siguientes dos señales a 111.12 y 109.34 ppm se deben a 7a-C y 3-C respectivamente. Los metilenos 1' y 2' dan señal a 39.48 y 22.76 ppm.

2D (¹H-¹³C)-RMN.

Acoplamientos observados a un solo enlace (HMQC, Espectros B₁₂₁-B₁₂₂).

1'-H (3.01) con 1'-C (39.48)

2'-C (3.01) con 2'-C (22.76)

2-H (7.31) con 2-C (125.18)

4-H (7.78) con 4-C (120.43)

6-H (7.19) con 6-C (123.54)

7-H (7.34) con 7-C (113.51)

Acoplamientos observados a dos y tres enlaces (HMBC, Espectros

B₁₂₃-B₁₂₄).

²J 1'-H (3.01) con 2'-C (22.76)

2'-H (3.01) con 1'-C (39.48)

4-H (7.78) con 5-C (134.92)

2-H (7.31) con 3-C (109.35)

6-H (7.19) con 5-C (134.92)

7-H (7.34) con 7a-C (111.12)

³J 1-H (11.24) con 3-C (109.35)

1-H (11.24) con 3a-C (128.68)

2-H (7.31) con 3a-C (128.68)

2-H (7.31) con 7a-C (111.12)

1'-H (3.01) con 3-C (109.35)

2'-H (3.01) con 3a-C (128.68)

4-H (7.78) con 6-C (123.54)

4-H (7.78) con 3-C (109.35)

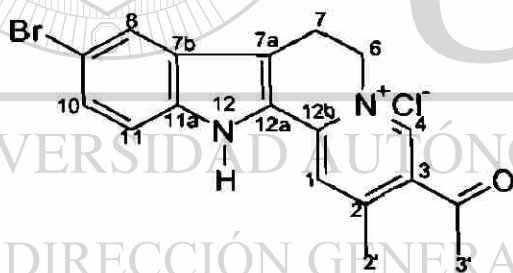
4-H (7.78) con 7a-C (111.12)

6-H (7.19) con 4-C (120.43)

7-H (7.34) con 3a-C (128.68)

7-H (7.34) con 5-C (134.92)

2.2-13a Cloruro de 3-acetil-9-bromo-7,12-dihidro-2-metil-6H-indolo-[2,3-a]quinolizinio (19).



Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₁₃).

La banda debida a la tensión del enlace N-H indólico está desplazada a frecuencia más alta (3450 cm^{-1}) respecto a la del hidrocloreuro de triptamina bromado (3272 cm^{-1}). No se observa la banda ancha centrada a 3000 cm^{-1} ni las cercanas a 1600 y 1460 cm^{-1} debidas a la tensión de los enlaces N-H del grupo $^+\text{NH}_3$, lo que sugiere la formación de los anillos 'C' y 'D'. El pico agudo en 1700 cm^{-1} confirma la presencia del grupo acetilo

(tensión C=O) en el anillo 'D', así como el ubicado alrededor de 1380 cm^{-1} debido a las flexiones de los enlaces C-H de los CH_3 .

^1H -RMN (400 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B_{125} - B_{127}).

La baja solubilidad de este compuesto en los dos únicos solventes disponibles (D_6 -DMSO y CD_3OD) dio lugar a que se obtuviera solamente el espectro de protones con una intensidad de las señales muy pequeña. No obstante, las señales que indican la obtención del compuesto se aprecian claramente. Tales son las de los protones piridínicos 1-H y 4-H a 8.19 y 9.42 ppm. Desaparece la señal debida al protón α al nitrógeno indólico; lo cual, junto con las señales anteriores, indica la formación de los anillos 'C' y 'D'. Otra diferencia es la resolución de las señales debidas a los metilenos presentes en la molécula, las cuales se traslapan en el espectro del reactivo. En este caso observamos 2 tripletes a 4.91 y 3.40 ppm. Los protones aromáticos del anillo 'A' aparecen como un singulete a 8.03 ppm (8-H) y dos dobletes a 7.55 (11-H) y 7.50 ppm (10-H). La presencia de los metilos en las posiciones 2' y 3' se confirma por los singuletes ubicados a 2.69 y 2.73 ppm.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

^1H -RMN (400 MHz, CD_3OD , Espectros B_{128} - B_{130}).

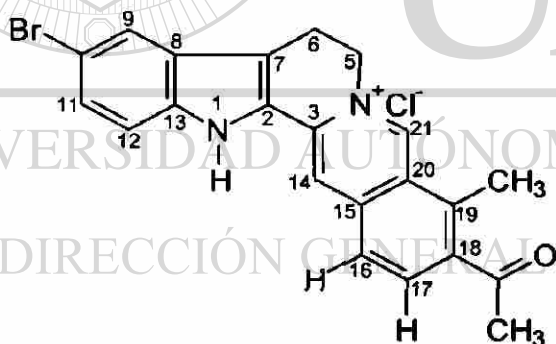
El espectro de este compuesto en metanol deuterado es muy similar al obtenido en D_6 -DMSO, solo que las señales de protones aromáticos están ligeramente corridas hacia campos altos y la de protones alifáticos hacia campos bajos.

2D ¹H-RMN (400 MHz, COSY, D₆-DMSO Espectros B₁₃₁-B₁₃₂).**Acoplamientos observados.**

³ J (Vecinales)	10-H (7.50) con 11-H (7.55)
	6-H (4.91) con 7-H (3.40)
Larga distancia	1-H (8.20) con 8-H (8.03)

2.2-13b Cloruro de 18-acetil-10-bromo-19-metil-3, 4, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21-dehidro-yohimbano (20).

Durante la síntesis del compuesto **19** se aisló un segundo producto (ver parte experimental) cuyas propiedades y datos espectrales difieren, en poca medida, de las del primero. Aparentemente dicha substancia resulta de la *adición de una segunda molécula de acetilacetaldehído* y la posterior formación de un quinto anillo. La estructura que se propone es la siguiente:

**Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₁₄).**

Tomando como referencia el espectro del compuesto **16**, siguen observándose las señales principales. El pico de la tensión del NH aparece a 3400 cm⁻¹. La banda intensa debida a la tensión del enlace C=O se localiza a 1700 cm⁻¹. Las señales a 1650 y 1550 cm⁻¹ de los enlaces C=C

también aparecen aunque con una marcada disminución en la intensidad, al igual que la señal de los CH₃.

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₃₃-B₁₃₅).

Aparecen todas las señales características del sistema tetracíclico, aunque con un ligero desplazamiento hacia campo bajo en la región de aromáticos. En esta misma región aparecen un par de dobletes (8.82 y 8.15 ppm) que integran cada uno para un protón, tienen una constante de acoplamiento de 8 Hz. y que se acoplan solamente entre sí (COSY), lo cual indica que es un sistema aislado.

En un principio consideramos que la adición de una segunda molécula de acetilacetaldehído (2) había sido en el nitrógeno indólico; sin embargo, debido a la presencia de la señal a 11.31 ppm (que desaparece después del intercambio con D₂O) y a que hay solamente dos señales de grupos metilo, se descartó la posibilidad.

Se hicieron experimentos NOE irradiando las señales correspondientes a los núcleos de las posiciones 1, 16, 17, 18' y 19'. La irradiación de la primera incrementa las señales de 12-H y 14-H; la señal de 17-H registra un noe al irradiar la de 16-H y viceversa, pero no afecta la señal de 14-H. Las otras dos señales en que se observa un aumento en la intensidad son 17-H y 21-H por la irradiación de 18'-H y 19'-H respectivamente. Estos datos soportan, aunque sea en parte, la estructura propuesta.

2D ^1H -RMN (400 MHz, COSY, D_6 -DMSO, Espectros B_{136} - B_{137}).

Se observan los acoplamientos esperados entre los metilenos de las posiciones 5 y 6 así como entre los pares de protones vecinales 11-H, 12-H y 16-H, 17-H.

 ^{13}C -RMN (100 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B_{138} - B_{140}).

El espectro consta de dieciocho señales en total, en lugar de las veintidós que son de esperarse para la estructura propuesta. La técnica DEPT 135 muestra las señales de dos metilos (a 20.98 ppm aparece una tercera señal de grupo metilo debida a la acetona que está como impureza) y dos metilenos; además hay siete señales de carbonos terciarios en la región de aromáticos que corresponden al mismo número y tipo de carbonos presentes en la molécula. Lo anterior indica que las señales faltantes serían de carbonos cuaternarios. Una justificante sería el largo tiempo de relajación de este tipo de núcleos lo cual causa que no se observe la señal en el espectro. Otra razón por la cual no se observan estas cuatro señales puede ser el traslape. La gran mayoría de los carbonos de esta molécula (18) dan señal en la región de 100-160 ppm lo cual puede provocar el traslape de una o más señales.

2D (^1H - ^{13}C)-RMN.

Acoplamientos observados a un solo enlace (HMQC, Espectros B_{141} - B_{143}):

14-H (9.18) con 14-C (146.12)

17-H (8.82) con 17-C (143.19)

16-H (8.15) con 16-C (129.79)

9-H (7.22) con 9-C (126.05)

11-H (7.19) con 11-C (123.74)

14-H (7.64) con 14-C (120.26)

12-H (7.34) con 12-C (113.54)

5-H (4.90) con 5-C (58.26)

6-H (3.26*) con 6-C (24.85)

19'-H (2.85) con 19'-C (19.75)

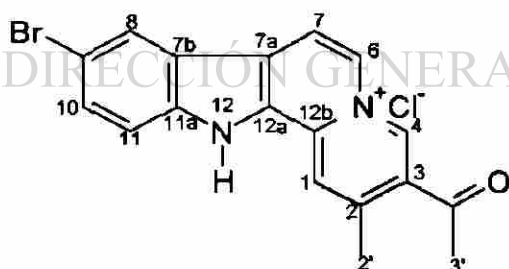
18'-H (2.85) con 18'-C (19.75)

*En D₂O

Nota: Se obtuvo un compuesto análogo al anterior (mismas señales ¹H-RMN. Ver punto 2.2-10b) durante la síntesis de 14; sin embargo los datos espectrales son menos abundantes, por lo que discutimos solamente los del derivado bromado.

2.2-14 Cloruro de 3-acetil-9-bromo-2-metil-12H-indolo-

[2,3-*a*]quinolizinio (24).

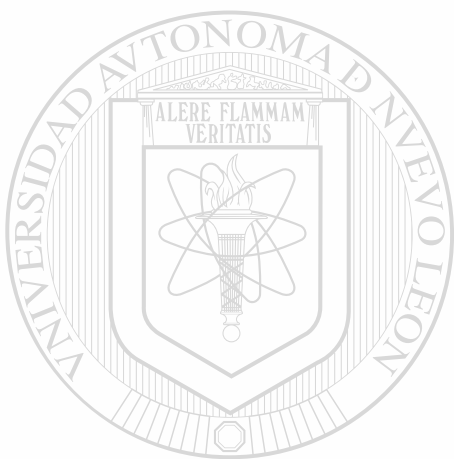


Espectro de infrarrojo (KBr, Espectro A₁₅).

La diferencia más notable es la desaparición de la señal que aparece en el espectro del reactivo (17) a 1550 cm⁻¹.

^1H -RMN (400 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B_{144} - B_{145}).

Al igual que en los análogos anteriores, la desaparición de las señales debidas a los metilenos (tripletes) y la aparición de un par de dobletes en la región de aromáticos (9.04 y 8.79 ppm) debidos a la nueva insaturación, permite confirmar la obtención del producto.



UANL

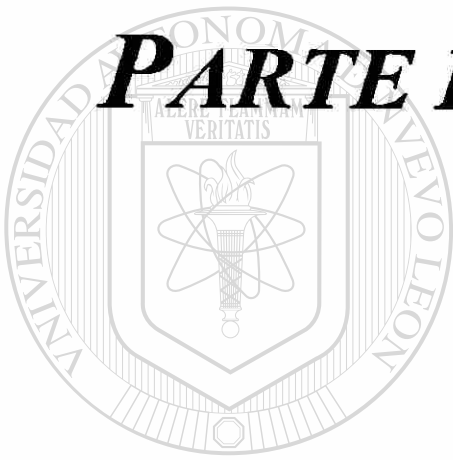
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

CAPÍTULO 3

PARTE EXPERIMENTAL



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

3.1 DESCRIPCIÓN DE LOS REACTIVOS.

Fórmula	Nombre	Marca	Pureza (%)
$C_6H_8N_2$	Fenilhidrazina.	Sigma	97
$C_8H_{19}NO_2$	Dietilacetal del 4-aminobutiraldehído.	Aldrich	90
$Na_2S \cdot 9H_2O$	Sulfuro de sodio nonahidratado.	PQM	100
$ZnCl_2$	Cloruro de cinc	Desarrollo de especialidades químicas.	99
$C_6H_7N_3O_2$	4-nitrofenilhidrazina.	Espectrum	97
$C_7H_{11}ClN_2O$	Hidrocloruro de 4-metoxifenilhidrazina.	Aldrich	98
$C_9H_{15}ClN_2$	Hidrocloruro de 4-isopropilfenilhidrazina.	Aldrich	98
$C_6H_8ClFN_2$	Hidrocloruro de 4-fluorfenilhidrazina.	Aldrich	97
$C_6H_8BrClN_2$	Hidrocloruro de 4-bromofenilhidrazina.	Aldrich	99
$C_6H_{12}O_3$	Dimetilacetal del acetilacetaldehído.	Aldrich	90
$C_{11}H_{15}ClN_2O$	Hidrocloruro de 5-metoxitriptamina.	Aldrich	97
$C_6Cl_4O_2$	<i>o</i> -Cloranilo	GMBH & Co.	97
SiO_2	Gel de sílice	Merck	

Solventes: Todos son grado analítico de la marca PQM.

3.2 MATERIAL Y EQUIPO.

Placas para cromatografía en capa fina marca Riedel-deHaën gel de sílice 60 F254.

Espectrofotómetro de infrarrojo magna IR 550 de la marca Nicolet.

Las unidades de los espectros de infrarrojo están dadas en cm^{-1} .

Espectrómetro de resonancia magnética nuclear de 400 MHz amx serie avance dpx 400 con sonda multinuclear de la marca Bruker. Las unidades de los espectros de RMN (desplazamientos químicos, δ) están dadas en partes por millón (ppm). El formato en que se presenta la descripción de los espectros de RMN es: desplazamiento químico (integración de la señal, multiplicidad, constante de acoplamiento, posición del núcleo que da la señal). En dichas descripciones se utilizan las siguientes abreviaturas: s: singulete, d: doblete, t: triplete, *J*: constante de acoplamiento (Hz), sa: singulete ancho.

3.3 PROCEDIMIENTOS.

3.3-1 Hidrocloruro de triptamina (10)¹³.

Se pesaron en un matraz redondo de 50 mL 0.8 g (7.4 mmol) de fenilhidrazina, 1.2 g (7.4 mmol) del dietilacetal del γ -aminobutiraldehído, y 1.01 g (7.4 mmol) de $ZnCl_2$ previamente fundido y pulverizado después de enfriarse. La mezcla se agitó magnéticamente y se calentó en un baño de glicerina a 170-180 °C por tres horas. La mezcla se disolvió en 15 mL de HOAc al 15 % y la solución se extrajo con éter etílico. La capa etérea se desechó y la solución acuosa se mezcló con 2 g de $Na_2S \cdot 9H_2O$ disueltos en la mínima cantidad de agua. El ZnS precipitado se filtró y se extrajo en un soxhlet con 30 mL de metanol por dos horas. La solución de metanol se evaporó a sequedad en el rotavapor y el residuo se agregó a la solución de HOAc. La solución se concentró en el rotavapor hasta 3 mL aproximadamente y se dejó enfriar para filtrar posteriormente. El sólido obtenido se secó a vacío y se lavó con etanol anhidro, filtrando posteriormente. El filtrado se evaporó a sequedad en el rotavapor con lo que se obtuvieron 7.2 g (50 %) de un sólido amarillo claro. $R_f = 0.28$ (Metanol: cloroformo 1:3)

La recristalización de este compuesto se llevó a cabo disolviéndolo en CH_3OH a temperatura ambiente y dejando evaporar la solución a la misma temperatura (30 °C aproximadamente). La solución se dejó evaporar hasta una quinta parte y se obtuvieron unos cristales grandes de color café claro, los cuales se filtraron y lavaron con metanol helado.

IR (KBr, Espectro A₁):

3292 (N-H indólico); 3010 (N-H del R-NH₃⁺); 1237 (C-N del indol); 1102 (C-N del C-NH₃⁺); 748 (C-H del anillo bencénico *o*-disustituido).

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectro B₁-B₃):

11.10 (1H, s, ↑ D₂O, 1-H); 8.32 (3H, sa, ↑ D₂O, -⁺NH₃); 7.58 (1H, d, *J*= 7.81 Hz, 4-H); 7.39 (1H, d, *J*= 8.50 Hz, 7-H); 7.25 (1H, d, *J*= 2.0 Hz, 2-H); 7.09 (1H, t, *J*= 7.51 Hz, 6-H); 7.00 (1H, t, *J*= 7.16 Hz, 5-H); 3.07 (4H, s, 1'-H y 2'-H).

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₆-B₈):

136.22 (Cq, 7a-C); 126.75 (Cq, 3a-C); 123.21 (CH, 2-C); 121.03 (CH, 6-C); 118.35 (CH, 5-C); 118.05 (CH, 4-C); 111.48 (CH, 7-C); 109.48 (CH, 3-C); 39.23 (CH₂, 1'-C); 22.95 (CH₂, 2'-C).

3.3-2a Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6*H*-indolo-[2,3-*a*]quinolizinio (7)³.

En un matraz redondo de 25 mL se pesaron 1.995 g (10 mmoles) de hidrocloreuro de triptamina y se agregaron 15 mL de ácido acético glacial. La mezcla se calentó a reflujo bajo agitación constante y, una vez que se disolvió el sólido, se añadieron 4 g (30 mmoles) de dimetilacetal del acetilacetaldehído. La mezcla se dejó refluendo por cuatro horas y posteriormente se dejó enfriar y reposar hasta que ya no precipitó más sólido (generalmente toda la noche). El producto obtenido se filtró a vacío y se lavó con 5 mL de éter etílico, posteriormente se colocó en un

deseccador a vacío con NaOH. El sólido seco dió un peso de 1.21 g (38.8 %) y se recrystalizó en agua con lo que se obtuvieron agujas de color amarillo. $R_f = 0.6$ (Acetato de etilo: ácido fórmico: metanol 8:1:1).

IR (KBr, Espectro A₂):

3445 (N-H indólico); 1696 (C=O); 1637, 1553 (C=C piridínico); 1383 (C-H del CH₃); 755 (C-H del anillo bencénico *o*-disustituido).

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₃-B₁₄):

12.61 (1H, s, 12-H, \uparrow D₂O); 9.43 (1H, s, 4-H); 8.27 (1H, s, 1-H); 7.76 (1H, d, $J = 8.05$ Hz, 8-H); 7.57 (1H, d, $J = 8.3$ Hz, 11-H); 7.41 (1H, t, $J = 7.5$ Hz, 10-H); 7.19 (1H, t, $J = 7.4$ Hz, 9-H); 4.93 (2H, t, $J = 7.2$ Hz, 6-H); 3.43 (2H, t, $J = 7.2$ Hz, 7-H); 2.73 (3H, s, 2'-H); 2.70 (3H, s, 3'-H).

La señal de los protones en la posición 7 se observa solo después del intercambio con deuterio.

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₇-B₁₉):

196.26 (Cq, C=O); 157.03 (Cq, 3-C); 146.92 (CH, 4-C); 142.88 (Cq, 12b-C); 139.90 (Cq, 11a-C); 130.64 (Cq, 2-C); 126.97 (CH, 10-C); 124.60 (Cq, 12a-C); 124.55 (Cq, 7b-C); 122.74 (CH, 1-C); 120.92 (CH, 9-C); 120.85 (CH, 8-C); 119.56 (Cq, 7a-C); 112.73 (CH, 11-C); 54.98 (CH₂, 6-C); 29.33 (CH₃, 3'-C); 21.82 (CH₃, 2'-C); 18.86 (CH₂, 7-C).

3.3-2b Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6*H*-indolo-[2,3-*a*]quinolizino (7)³ utilizando metanol como solvente.

Se realizaron tres experimentos para sintetizar la dihidro-indoloquinolizina en metanol, en escalas de 0.2, 0.2 y 0.5 g de hidrocloreuro de triptamina.

Experimento A: 200 mg (1.02 mmol) de hidrocloreuro de triptamina y 400 mg (3.06 mmol) del dimetilacetal del acetilacetaldehído se disuolvieron en 2 mL de metanol anhidro a reflujo y se calentaron durante 8 horas. Después se enfrió la mezcla de reacción (48 hrs) con lo que precipitaron 9.5 mg (13 %) de cloruro de dihidro-indoloquinolizino 7 (TLC).

Experimento B: Similar al experimento A, pero se añadieron 0.2 mL de ácido clorhídrico concentrado (37.2 %) antes de iniciar la reacción. A las tres horas de reacción se observó la presencia del cloruro 7; sin embargo después de 8 horas de calentamiento a reflujo, la mezcla se tomó completamente oscura y la TLC reveló la formación de una mezcla compleja, desapareciendo el cloruro de dihidroindoloquinolizino inicialmente formado.

Experimento C: 500 mg (2.55 mmol) de hidrocloreuro de triptamina y 1 g (7.65 mmol) del dimetilacetal del dimetilacetaldehído se disuolvieron en 4 mL de metanol anhidro. Después de calentar 6 horas a reflujo se añadió 1 g más del dimetilacetal, calentándose a reflujo durante 4 horas más. Después de enfriar la mezcla de reacción (48 hrs) precipitaron 105 mg de un sólido amarillo y se recuperaron 123 mg más del mismo al agregar 20 mL de éter

etílico a las aguas madres de reacción. El total de cloruro de dihidro-indoloquinolizino (TLC) obtenido de esta manera resultó en un 45 % de rendimiento.

3.3-2c Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-6*H*-indolo-[2,3-*a*]quinolizino (7)³ a partir de triptamina.

Para esta síntesis se siguió el método descrito en el punto 3.3-2a pero partiendo de triptamina en lugar de su hidrocloreto; sin embargo, el producto principal fue el triacetilbenceno 16, el cual precipitó al enfriarse el medio de reacción

$R_f = 0.98$ (Acetato de etilo: ácido fórmico: metanol 8:1:1)

IR (KBr, Espectro A₃):

3060 (C-H aromático); 1692 (C=O); 1558 (C=C aromático); 1363 (-CH₃); 1227 (C-O).

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectro B_{2,4}):

8.63 (1H, s, C-H aromático); 2.72 (3H, s, -COCH₃).

Debido a la simetría de la molécula del triacetilbenceno, estas señales corresponden a la de los tres protones aromáticos y a la de los tres grupos metilo.

¹³C-RMN (100 MHz, D6-DMSO, Espectro B₂₆):

197.03 (Cq, C=O); 137.49 (Cq, 1-C, 3-C y 5-C); 131.22 (CH, 2-C, 4-C y 6-C); 26.96 (CH₃, -CH₃). De nuevo la simetría de la molécula deja observar solo una señal para cada uno de los grupos de átomos de carbono similares.

Se observó por TLC que el compuesto **7** está presente en el medio de reacción pero en cantidad tal que no pudimos aislarlo.

Se realizó un experimento adicional bajo las condiciones mencionadas anteriormente pero agregando un equivalente de ácido clorhídrico concentrado a la mezcla de reacción; sin embargo el resultado fue una mezcla de muchos compuestos, con la dihidro-indoloquinolizina como uno de los componentes minoritarios.

3.3-3 Cloruro de 3-acetil-2-metil-12H-indolo[2,3-a]quinolizinio (22).

Se disolvió, con agitación magnética, 1 g (3.2 mmol) del compuesto **7** en una mezcla de ácido acético:agua en la relación 6.6:0.4, a temperatura de ebullición. Una vez disuelto el reactivo, se agregaron cuidadosamente 2.36 g (9.6 mmol) de *o*-cloranilo y se mantuvo refluendo la mezcla por 10 minutos; la mezcla se dejó enfriar y reposar por toda una noche. El sólido obtenido se filtró y lavó con 20 mL de éter etílico; después se extrajo en un equipo soxhlet con acetato de etilo hasta que dejó de observarse una coloración amarilla en el solvente. El sólido se secó y pesó (75 %). El sólido se puede recrystalizar de metanol o de HOAc.

R_f = 0.16 (Acetato de etilo: Ácido fórmico: Metanol 8:1:1)

IR (KBr, Espectro A₄):

3400 (N-H indólico); 1700 (C=O); 1650, 1400 (C=C piridínicos); 1380 (C-H de CH₃); 750 (C-H anillo bencénico *o*-disustituido).

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₂₇-B₂₈):

13.80 (1H, s, ↑ D₂O, 12-H); 10.07 (1H, s, 4-H); 9.11 (1H, d, *J*= 6.9 Hz, 6-H); 8.96 (1H, s, 1-H); 8.87 (1H, d, *J*= 6.9 Hz, 7-H); 8.46 (1H, d, *J*= 8.03 Hz, 8-H); 7.89 (1H, d, *J*= 8.34 Hz, 11-H); 7.77 (1H, t, *J*= 7.65 Hz, 10-H); 7.50 (1H, t, *J*= 7.51 Hz, 9-H); 2.81 (6H, s, 2'-H y 3'-H).

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₃₁-B₃₅):

197.08 (Cq, C=O); 146.10 (Cq, 3-C); 141.65 (Cq, 11a-C); 139.78 (CH, 4-C); 132.11 (Cq, 12b-C); 130.62 (Cq, 2-C); 129.88 (CH, 10-C); 129.58 (Cq, 12a-C); 127.55 (CH, 6-C); 123.86 (Cq, 7a-C); 122.42 (CH, 1-H); 122.24 (CH, 8-H); 121.79 (CH, 9-H); 120.58 (Cq, 7b-C); 116.51 (CH, 7-C); 112.91 (CH, 11-C); 29.44 (CH₃, 2'-C); 21.43 (CH₃, 3'-C).

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



3.3-4 Hidrocloruro de 5-nitrotriptamina (11).

Los intentos para sintetizar este compuesto se basaron en el procedimiento descrito en el punto 3.3-1. (PNFH = *p*-nitro fenilhidrazina, DEA = dietilacetal del aminobutiraldehído).

En la siguiente tabla se resumen las condiciones empleadas:

Rel. Molar ZnCl ₂ :PNFH	Rel. Molar DEA:PNFH	Solvente	Temp. (°C)	Tiempo de reacción (minutos)	N ₂	Resultado
1.5:1	1:1	No	120	180	No	No hay reacción*.
3:1	1:1	No	135	180	No	No hay reacción*.
3:1	1:1	No	140	180	No	No hay reacción*.
10:1	1:1	No	140	5	No	No hay reacción*.
6:1	1.5:1	Tolueno	110	120	No	No hay reacción*.
10:1	1.5:1	Etilen- glicol	135	50	No	Descomposi- ción.
5:1	2:1	No	120	5	Sí	Hidrazona
5:1	2:1	No	130	5	Sí	Hidrazona

*Se recuperó *p*-nitrofenilhidrazina.

Recuperación de la *p*-nitrofenilhidrazona del γ -aminobutiraldehído.

En un matraz bola de 50 mL se pesaron 1.0 g (6.5 mmol) de *p*-nitrofenilhidrazina, 2.10 g (13 mmol) de dietilacetal del γ -aminobutiraldehído y 4.4 g (32.5 mmol) de ZnCl₂ previamente fundido y pulverizado. Los reactivos se mezclaron perfectamente mediante agitación magnética y se hizo pasar una corriente de nitrógeno sobre la mezcla. El

matraz se introdujo en un baño de aceite precalentado a 130 °C. Después de 5 minutos, se retiró el matraz del baño de temperatura y se cortó el nitrógeno. La mezcla de reacción se disolvió con 40 mL de HOAc al 10 % en agua y se extrajo tres veces con éter etílico (40 mL). Después se agregaron 9.4 g de $\text{Na}_2\text{S}\cdot 9\text{H}_2\text{O}$ disueltos en la mínima cantidad de agua. El sólido precipitado se filtró y se extrajo en un equipo soxhlet durante 2 horas usando metanol (35 mL). La solución de metanol se evaporó a sequedad en un rotavapor y el residuo se mezcló con la solución de HOAc. La nueva mezcla se concentró hasta 3-4 mL y el sólido resultante se filtró y después se secó en un desecador a vacío. El sólido se lavó con 30 mL de etanol anhidro usando agitación y se filtró por gravedad. El filtrado se concentró a sequedad con lo que se obtuvieron 315 mg de un aceite de color rojizo. El aceite se disolvió en la mínima cantidad de metanol y se aplicó sobre una placa para cromatografía en capa fina de 20 x 20 cm. La placa se desarrolló con una mezcla de cloroformo:metanol 3:1 con lo que se logró aislar 5 mg de uno de los componentes principales.

^1H -RMN (400 MHz, D_6 -DMSO, Espectros B₄₀-B₄₂):

10.95 (1H, s, 1'-NH); 8.07 (2H, d, $J= 9.21$ Hz, 3'-H y 5'-H); 7.41 (1H, t, $J= 4.75$ Hz, 4-H); 6.99 (2H, d, $J= 9.00$ Hz, 2'-H y 6'-H); 2.84 (2H, t, $J= 7.56$ Hz, 1-H); 2.35 (2H, c, $J= 7.35$ Hz, 3-H); 1.82 (2H, q, $J= 7.45$ Hz, 2-H).

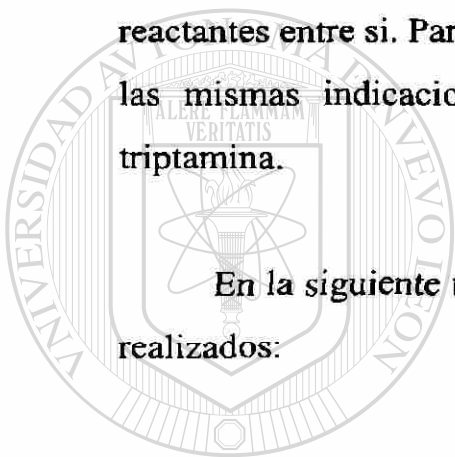
^{13}C -RMN (100 MHz, D_6 -DMSO, Espectro B_{4d}):

150.95 (Cq, 4'-C); 144.89 (CH, 4-C); 126.11 (CH, 3'C y 5'-C); 110.41 (CH, 2'-C y 6'-C); 101.52 (Cq, 5'-C); 38.27 (CH_2 , 1-C); 28.64 (CH_2 , 3-C); 23.81 (CH_2 , 2-C).

3.3-5 Hidrocloruro de 5-metoxitriptamina (12).

Para la síntesis de este compuesto se siguió un procedimiento similar al descrito en 3.3-1, variando la temperatura y la relación molar de los reactantes entre si. Para el tratamiento de la mezcla de reacción se siguieron las mismas indicaciones que para el aislamiento del hidrocloruro de triptamina.

En la siguiente tabla se resumen las condiciones de los experimentos realizados:



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Rel. Molar ZnCl ₂ :PMFH	Rel. Molar DEA:PMFH	Temperatura (°C)	Tiempo (minutos)	Nitrógeno	Resultado
1:1	2:1	140	180	No	Mezcla de productos.
2:1	2:1	135	180	No	Mezcla de productos.
2:1	2:1	135	300	No	Mezcla de productos.
5:1	2:1	145-150	5	Sí	Mezcla de productos.
5:1	2:1	140	60	Sí	Mezcla de productos.
5:1	2:1	90-100	240	Sí	Mezcla de productos.
5:1	2:1	65-70	180	Sí	Mezcla de productos.

PMFH= Hidrocloruro de *p*-metoxifenilhidrazina®

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Al comparar estas mezclas de reacción con un estándar comercial (Aldrich) de hidrocloruro de *p*-metoxitriptamina se encontró que este último se encuentra presente en dichas mezclas en cantidades mínimas.

$R_f = 0.16$ (cloroformo:metanol 3:1).

Los espectros que se obtuvieron son los del producto comercial de la marca Aldrich.

IR (KBr, Espectro A₄):

3300 (N-H indólico); 3000 (N-H del ⁺NH₃); 1600, 1400 (N-H del ⁺NH₃); 1500 (C=C); 1200 (C-N); 1100 (C-O); 800 (C-H del anillo bencénico 1, 3, 5-trisustituido).

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₄₇-B₄₈):

10.81 (1H, s, 1-H); 8.08 (3H, sa, ⁺NH₃); 7.24 (1H, d, *J*= 8.7 Hz, 7-H); 7.17 (1H, d, *J*= 1.8 Hz, 2-H); 7.07 (1H, s, 4-H); 6.72 (1H, dd, *J*= 2.2, 8.7 Hz, 6-H); 3.76 (3H, s, -OCH₃); 3.00 (4H, m, 1'-H y 2'-H).

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₅₁-B₅₂):

153.05 (Cq, 5-C); 131.34 (Cq, 7a-C); 127.08 (Cq, 3a-C); 123.89 (CH, 2-C); 112.08 (CH, 7-C); 111.17 (CH, 6-C); 109.16 (Cq, 3-C); 100.00 (CH, 4-C); 55.36 (CH₃, -OCH₃); 39.22* (CH₂, 1'-C); 23.01 (CH₂, 2'-C).

* Bajo la señal de DMSO.

3.3-6 Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-2-metil-9-metoxi-6*H*-indolo-[®][2,3-*a*]quinolizinio (21).

Se disolvieron 0.5 g (2.2 mmol) de hidrocloreto de 5-metoxitriptamina en 5 mL de ácido acético a la temperatura de ebullición. Se agregó 1 mL (0.87 g, 6.6 mmol) de dimetilacetal del acetilacetaldehído. La mezcla se dejó refluendo durante 4 horas después de agregar el segundo reactivo y después se dejó reposando toda la noche. El sólido se filtró a vacío y se puso en un desecador a vacío con NaOH.

El sólido obtenido precipitó en forma de agujas pequeñas de color dorado con un 40 % de rendimiento.

$R_f = 0.32$ (acetato de etilo: ácido fórmico: metanol 8:1:1)

IR (KBr, Espectro A₆):

3400 (N-H indólico); 3050 (C-H aromáticos); 1700 (C=O); 1650, 1550 (C=C); 1380 (C-H de los CH₃); 1200 (C-N).

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₅₇-B₅₈):

12.51 (1H, s, 12-H); 9.39 (1H, s, 4-H); 8.22 (1H, s, 1-H); 7.45 (1H, d, $J = 8.9$ Hz, 11-H); 7.18 (1H, s, 8-H); 7.04 (1H, dd, $J = 2.1, 8.9$ Hz, 10-H); 4.89 (2H, t, $J = 7.2$ Hz, 6-H); 3.80 (3H, s, 9'-H); 3.37 (2H, t, $J = 7.3$ Hz, 7-H); 2.70 (3H, s, 2'-H); 2.67 (3H, s, 3'-H).

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₆₁-B₆₃):

196.23 (Cq, C=O); 156.76 (Cq, 3-C); 154.39 (Cq, 9-C); 146.84 (CH, 4-C); 142.90 (Cq, 12b-C); 135.50 (Cq, 11a-C); 130.37 (Cq, 2-C); 124.92 (Cq, 12a-C); 124.80 (Cq, 7b-C); 122.54 (CH, 1-C); 118.91 (Cq, 7a-C); 118.84 (CH, 10-C); 113.74 (CH, 11-C); 100.53 (CH, 8-C); 55.35 (CH₃, 9'-C); 55.00 (CH₂, 6-C); 29.31 (CH₃, 3'-C); 21.83 (CH₃, 2'-C); 18.94 (CH₂, 7-C).

3.3-7 Cloruro de 3-acetil-2-metil-9-metoxi-12H-indolo[2,3-a]quinolizinio (25).

Se Disolvieron 0.1 g (0.029 mmol) del compuesto 21 en una mezcla de 1.3 mL de HOAc y 0.1 mL de H₂O. Una vez disuelto el reactivo, se

agregaron cuidadosamente 0.14 g (0.58 mmol) de *o*-cloranilo. La mezcla reflujo por 20 minutos y se dejó reposar toda la noche. El sólido obtenido se filtró a vacío y se extrajo en un soxhlet con acetato de etilo hasta que el solvente salió incoloro. El sólido cristalizó como agujas pequeñas de color café claro (65%).

$R_f = 0.44$ (acetato de etilo: metanol: ácido fórmico; 8:1:1)

IR (KBr, Espectro A₇):

3400 (N-H indólico); 3050 (C-H aromáticos); 1700 (C=O); 1650, 1400 (C=C); 1380 (C-H de los CH₃); 1050 (C-O); 800 (C-H del anillo 'A').

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₆₈-B₆₉):

13.68 (1H, s, 12-H); 10.03 (1H, s, 4-H); 9.04 (1H, d, $J = 6.6$ Hz, 6-H); 8.90 (1H, s, 1-H); 8.81 (1H, d, $J = 6.6$ Hz, 7-H); 7.97 (1H, s, 8-H); 7.79 (1H, d, $J = 8.9$ Hz, 11-H); 7.39 (1H, dd, $J = 1.5, 8.9$ Hz, 10-H); 3.92 (3H, s, 9'-H); 2.80 (6H, s, 2'-H y 3'-H).

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₇₂-B₇₄):

197.09 (Cq, C=O); 154.91 (Cq, 9-C); 146.05 (CH, 4-C); 139.87 (CH, 6-C); 136.84 (Cq, 12b-C); 132.20 (Cq, 11a-C); 130.39 (Cq, 2-C); 129.64 (Cq, 7b-C); 126.89 (CH, 7-C); 123.38 (Cq, 3-C); 122.28 (CH, 1-C); 121.11 (Cq, 12a-C); 121.03 (Cq, 7a-C); 116.56 (CH, 10-C); 113.92 (CH, 11-C); 102.55 (CH, 8-C); 55.63 (CH₃, 9'-C); 29.44 (CH₃, 3'-C); 21.50 (CH₃, 2'-C).

3.3-8 Hidrocloruro de 5-isopropilriptamina (13).

Los primeros experimentos siguieron las indicaciones reportadas para obtener hidrocloruro de triptamina (cantidades estequiométricas de los tres reactivos, $T = 170-180\text{ }^{\circ}\text{C}$, $t = 3\text{ hrs.}$) pero el resultado fue una mezcla de compuestos debida a la descomposición.

Para corregir esto se usaron las siguientes relaciones molares: dietilacetal del γ -aminobutiraldehído (DEA):*p*-isopropilfenilhidrazina (PIFH) = 2:1 y ZnCl_2 :PIFH = 5:1; la reacción se llevó a cabo en atmósfera de nitrógeno, el tiempo se acortó a 5 min., y la temperatura se controló entre 160 y 170 $^{\circ}\text{C}$. El aumento en la cantidad de DEA fue para disolver una parte de la PIFH y el incremento de ZnCl_2 para tratar de reducir el tiempo de reacción y con ello la posible descomposición de los reactivos y/o el producto.

Bajo estas condiciones se llevó a cabo un experimento y a los 5 minutos se suspendió el calentamiento ya que cesó el desprendimiento de NH_3 .

El análisis por TLC mostró un componente principal con un R_f muy parecido al del hidrocloruro de triptamina.

Debido a la gran cantidad de NaCl que precipita junto con el producto después de concentrar la mezcla de reacción durante la obtención del hidrocloruro de triptamina, se decidió en este caso burbujear H_2S en la solución de la mezcla de reacción en lugar de agregar Na_2S .

El procedimiento fue el siguiente:

La mezcla de reacción se disolvió en 15-20 mL de HOAc al 15 % y bajo agitación se burbujeó una corriente de H₂S en un sistema con una trampa de NaOH al 40 % al final del mismo. El gas se obtuvo al hacer reaccionar 12.2 g de Na₂S.9H₂O con 3 mL de H₂SO₄ concentrado. Este último se agregó muy lentamente a la sal de sodio por medio de un embudo de adición. Una vez terminado el proceso, en la solución de HOAc se formó un precipitado amarillo (ZnS) el cual se filtró a vacío y se depositó en el contenedor correspondiente. El filtrado se concentró en el rotavapor hasta 4-5 mL con lo que se obtuvo un aceite de color café rojizo. El aceite se separó de la solución acuosa y se disolvió en la mínima cantidad de MeOH. La solución de metanol se evaporó a sequedad en el rotavapor con lo que se obtuvo un sólido del mismo color que el aceite en un rendimiento del 97 %.

El análisis por TLC del sólido mostró dos componentes, uno con R_f = 0 y el otro con un R_f igual al del producto principal de la reacción. ®

El poco reactivo restante se hizo reaccionar bajo las mismas condiciones y la mezcla de reacción se trató de la misma forma, observándose los mismos resultados. Desafortunadamente después de 5 días, este sólido, aun en el desecador, volvió a convertirse en aceite y presentó varios componentes (TLC) como producto de la descomposición, no pudiéndose recuperar el producto principal.

3.3-9 Hidrocloruro de 5-fluortriptamina (14).

En un matraz bola de 50 mL se pesaron 0.3 g (1.8 mmoles) de hidrocloruro de 4-fluorfenilhidrazina y 0.59 g (3.6 mmoles) de dietilacetal del γ -aminobutiraldehído y se mezclaron completamente con agitación magnética. A continuación se agregaron 1.25 g (9.2 mmol) de $ZnCl_2$ previamente fundido y pulverizado (esto se hizo rápidamente, dado que el $ZnCl_2$ es muy higroscópico) y se mezcló con los dos compuestos anteriores. Se hizo pasar una corriente de nitrógeno por el matraz y se introdujo en un baño de aceite precalentado a 170-180 °C hasta que cesó el desprendimiento de amoniaco (15-20 min.). El matraz se sacó del baño se cerró la corriente de N_2 . La mezcla de reacción se disolvió en 15 mL de HOAc al 10-15 % y se extrajo 2 veces con 15 mL de éter etílico. Se disolvieron 2.5 g de $Na_2S \cdot 9H_2O$ en la mínima cantidad de agua y se agregaron con agitación intensa a la solución de HOAc. El sólido precipitado se filtró y después se extrajo en un equipo soxhlet durante 2 horas con 25 mL de metanol. La solución de metanol se evaporó a sequedad y enseguida se agregó al residuo la solución de ácido acético. La solución se concentró hasta 3 mL aproximadamente y se filtró. El se colocó en un desecador a vacío con NaOH y una vez seco, se suspendió en 15-20 mL de etanol. La mezcla se filtró por gravedad y el filtrado se evaporó a sequedad para obtener un sólido de color amarillo claro con un rendimiento del 55 %.

$R_f = 0.47$ (Metanol: cloroformo 1:3)

La recristalización del producto final se hizo en la misma forma que para el análogo **10** obteniéndose cristales del mismo tipo, solo que más pequeños.

IR (KBr, Espectro A₈):

3290 (N-H indólico); 3000 (N-H del ⁺NH₃); 1600, 1400 (C=C y N-H del ⁺NH₃); 1100 (C-N); 800 (C-H aromáticos).

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₇₅-B₇₇):

11.13 (1H, s, 1-H); 8.05 (3H, sa, ⁺NH₃); 7.38 (1H, sa, 7-H); 7.35 (1H, d, *J* = 3.3 Hz, 4-H); 7.33 (1H, s, 2-H); 6.93 (1H, t, *J* = 8.6 Hz, 6-H); 3.00 (4H, m, 1'-H y 2'-H).

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₈₀-B₈₂):

156.65 (Cq, d, ¹J_{C-F} = 231.4 Hz, 5-C); 132.86 (Cq, 7a-C); 127.00 (Cq, d, ³J_{C-F} = 10.06 Hz, 3a-C); 125.49 (CH, 2-C); 112.38 (CH, d, ²J_{C-F} = 10.06 Hz, 7-C); 109.74 (Cq, d, ⁴J_{C-F} = 5.03 Hz, 3-C); 109.15 (CH, d, ²J_{C-F} = 26.10 Hz, 6-C); 102.82 (CH, d, ³J_{C-F} = 23.14 Hz, 4-C); 39.45 (CH₂, 1'-C); 22.91 (CH₂, 2'-C).

3.3-10 a) Cloruro de 3-acetil-7,12-dihidro-9-flúor-2-metil-6*H*-indolo-[2,3-*a*]quinolizinio (17).

En un matraz de 10 mL se pesaron 0.47 g (2.2 mmol) de hidrocloreto de 5-flúortriptamina y se disolvieron a temperatura de ebullición en 3.3 mL de HOAc. A lo largo de 2 horas a reflujo se agregó 1 mL (0.86 g = 6.6

mmol) de dimetilacetal del acetilacetaldehído. La mezcla se dejó refluendo durante 2 horas después de terminar la adición y se dejó reposar durante toda la noche para después filtrarla a vacío. El sólido obtenido es amorfo y de color rojizo (28 %) aun después de recristalizarlo en ácido acético (solubilidad aproximada: 12 mg/mL).

$R_f = 0.31$ (Acetato de etilo: metanol: ácido fórmico 8:1:1).

IR (KBr, Espectro A₉):

3600, 3450 (N-H del indol); 3050 (C-H aromático); 1700 (C=O); 1650, 1550, 1500 (C=C) 1380 (C-H del CH₃).

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₈₇-B₈₉):

12.79 (1H, s, \uparrow D₂O, 12-H); 9.44 (1H, s, 4-H); 8.30 (1H, s, 1-H); 7.58 (2H, m, 8-H y 11-H); 7.27 (1H, t, $J = 8.6$ Hz, 10-H); 4.93 (2H, t, $J = 7.1$ Hz, 6-H); 3.39 (7-H, se traslapa con la señal de H₂O); 2.73 (3H, s, 3'-H); 2.70 (3H, s, 2'-H).

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₉₂-B₉₅):

187.33 (Cq, C=O); 150.68 (Cq, 3-C); 150.28 (Cq, d, $^1J_{C-F} = 237.94$ Hz, 9-C); 138.44 (CH, 4-C); 135.28 (Cq, 12b-C); 129.19 (Cq, 11a-C); 123.22 (Cq, 2-C); 114.60 (CH, 1-C); 108.11 (CH, d, $^2J_{C-F} = 27.5$ Hz, 10-C); 105.58 (CH, d, $^3J_{C-F} = 9.4$ Hz, 11-H); 96.36 (CH, $^2J_{C-F} = 24.1$ Hz, 8-C); 47.37 (CH₂, 6-C); 19.63 (CH₃, H₃C-CO); 13.14 (CH₃, 2'-C).

¹H-RMN (400 MHz, CD₃OD, Espectros B₉₆-B₉₇):

7.69 (1H, s, 4-H); 6.43 (1H, s, 1-H); 5.94 (1H, dd, $J_1 = 8.9$ Hz, $J_2 = 4.1$ Hz, 10-H); 5.84 (1H, d, $J = 9.0$ Hz, 11-H); 5.64 (1H, s, 8-H); 3.36 (2H, t, $J = 7.0$ Hz, 6-H); 1.87 (2H, t, $J = 7.0$ Hz, 7-H); 1.25 (3H, s, 3'-H); 1.24 (3H, s, 2'-H).

3.3-10b Cloruro de 18-acetil-10-fluor-19-metil-3, 4, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21-dehidro-yohimbano (18).

Después de filtrar 17 y dejar reposar las aguas madres, precipitó un segundo sólido ($R_f = 0.1$, acetato de etilo: metanol: ácido fórmico 8:1:1) de color amarillo claro; el cual, aparentemente resultó de la adición de una segunda molécula de acetilacetaldehído. Este compuesto también se recrystalizó de ácido acético. La formación de cristales se intentó disolviendo 5 mg de la muestra (en HOAc, ac. fórmico y MeOH) a la temperatura ambiente y dejando evaporar la solución a la misma temperatura. Solamente en el caso del ácido acético se obtuvieron unos cristales en forma de agujas, pero demasiado pequeños como para obtener un difractograma.

Espectro de Infrarrojo (IR, KBr, Espectro A₁₀):

3400 (N-H indólico); 1700 (C=O); 1380 (C-H, CH₃); 850 (C-H de los anillos A y D).

¹H-RMN (400 MHz, CD₃OD, Espectros B₁₀₀-B₁₀₂):

8.73 (1H, d, $J = 8.24$ Hz, 17-H); 8.65 (1H, s, 14-H); 8.04 (1H, d, $J = 8.25$ Hz, 16-H); 7.33 (1H, dd, $J_1 = 8.8$ Hz, $J_2 = 4.4$ Hz, 11-H); 7.04 (1H, s, 21-H); 7.02 (1H, d, $J = 2.2$ Hz, 9-H); 6.89 (1H, td, $J_1 = 2$ Hz, $J_2 = 9.1$ Hz, 12-H); 4.96 (2H, t, $J = 6.4$ Hz, 5-H); 3.43 (2H, t, $J = 6.4$ Hz, 6-H); 2.87 (3H, s, H₃C-CO); 2.33 (3H, s, 19'-H).

¹³C-RMN (100 MHz, CD₃OD, Espectros B₁₀₅-B₁₀₈):

191.73 (Cq, C=O); 158.49 (Cq, 18-C); 157.2 (Cq, d, $J_{C-F} = 209.7$ Hz, 10-C); 145.22 (CH, 21-C); 142.39 (CH, 18-C); 129.38 (CH, 16-C); 125.45 (CH, 14-C); 111.79 (CH, d, $J_{C-F} = 9.6$ Hz, 12-C); 109.36 (CH, d, $J_{C-F} = 26.5$ Hz, 11-C); 58.30 (CH₂, 5-C); 24.48 (CH₂, 6-C); 24.42 (CH₃, H₃C-CO); 18.40 (CH₃, 19'-C).

3.3-11 Cloruro de 3-acetil-9-flúor-2-metil-12*H*-indolo[2,3- α]quinolizinio (23).

Se disolvieron 0.17 g (0.51 mmol) del compuesto **17** en una mezcla[®] HOAc:H₂O (30:2) a la temperatura de ebullición. Una vez disuelto el sólido, se agregaron 1.26 g (5.1 mmol) de *o*-cloranilo la mezcla se mantuvo refluendo y con agitación durante media hora. Inmediatamente después se filtró el sólido rojo y se lavó con 3-5 mL de ácido fórmico. El filtrado se evaporó a sequedad en el rotavapor y se agregaron al residuo 10 mL de acetato de etilo, con lo que se formó un sólido amarillo. Dicho sólido se filtró y se le hizo una extracción continua (soxhlet) con acetato de etilo

hasta que el solvente quedó incoloro. El producto final fue un sólido amarillo (61%)

$R_f = 0.4$ (Acetato de etilo: ácido fórmico: metanol 8:1:1).

IR (KBr, Espectro A₁₁):

3400 (N-H indólico); 3050 (C-H aromáticos); 1700 (C=O); 1650, 1550, 1400 (C=C); 1380 (C-H de los CH₃); 800 (C-H del anillo 'A').

¹H-RMN (400 MHz, D6-DMSO, Espectros B₁₀₉-B₁₁₁):

13.8 (1H, s, \uparrow D₂O, 12-H); 10.07 (1H, s, 4-H); 9.09 (1H, d, $J = 6.9$ Hz, 6-H); 8.94 (1H, s, 1-H); 8.83 (1H, d, $J = 6.8$ Hz, 7-H); 8.34 (1H, dd, $J = 2.1, 9.5$ Hz, 8-H); 7.93 (1H, dd, $J = 4.1, 8.9$ Hz, 11-H); 7.66 (1H, td, $J = 2.5, 9.1$ Hz, 10-H); 2.81 (6H, s, 2'-H y 3'-H).

3.3-12 Hidrocloruro de 5-bromotriptamina (15).

Este compuesto se obtuvo siguiendo el mismo procedimiento con el que se sintetizó el análogo fluorado (3.3-9), basándose en las relaciones molares de los reactivos. El rendimiento obtenido fue de 60%.

$R_f = 0.64$ (Cloroformo: metanol 3:1)

La recristalización fue igual que para 10, mas el resultado son láminas opacas de color blanco.

IR (KBr, Espectro A₁₂):

3273 (N-H indólico); 2972 (N-H del ⁺NH₃); 1605, 1461 (N-H del ⁺NH₃); 1512 (C=C); 1098 (C-N); 885 (C-H del anillo 'A').

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₁₄-B₁₁₅):

11.24 (1H, s, 1-H); 8.05 (3H, sa, ⁺NH₃); 7.78 (1H, s, 4-H); 7.34 (1H, d, *J*= 8.5 Hz, 7-H); 7.31 (1H, s, 2-H); 7.19 (1H, d, *J*= 8.5 Hz, 6-H); 3.01 (4H, s, 1'-H y 2'-H).

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₁₈-B₁₂₀):

134.92 (Cq, 5-C); 128.68 (Cq, 3a-C); 125.18 (CH, 2-C); 123.54 (CH, 6-C); 120.43 (CH, 4-C); 113.51 (CH, 7-C); 111.12 (Cq, 7a-C); 109.35 (Cq, 3-C); *39.48 (CH₂, 1'-C); 22.76 (CH₂, 2'-C).

*Bajo la señal de DMSO

3.3-13a Cloruro de 3-acetil-9-bromo-7,12-dihidro-2-metil-6*H*-indolo-[2,3-*a*]quinolizinio (19).

Se disolvieron 0.44 g (1.6 mmol) de hidrocloruro de 5-bromotriptamina en 5.5 mL de HOAc hirviendo con agitación magnética. Una vez disuelto el compuesto, se agregaron a lo largo de 90-120 minutos, 0.7 mL de dimetilacetal del acetilacetaldehído (0.63 g, 4.8 mmol). La mezcla se mantuvo refluendo durante dos horas después de haber terminado la adición del dimetil acetal. Después se dejó enfriar y reposar durante tres horas y se filtró a vacío. Se obtuvo un sólido rojizo con un rendimiento del 30 %, el cual se recristalizó de una mezcla de ácido

acético: ácido fórmico 3:0.6. $R_f = 0.8$ (Acetato de etilo: ácido fórmico: metanol 8:1:1).

IR (KBr, Espectro A₁₃):

3400 (N-H indólico); 3050 (C-H aromáticos); 1700 (C=O); 1650, 1550 (C=C); 1380 (C-H de los CH₃); 800 (C-H del anillo 'A').

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₂₅-B₁₂₇):

9.42 (1H, s, 4-H); 8.19 (1H, s, 1-H); 8.03 (1H, s, 8-H); 7.55 (1H, d, $J = 8.8$ Hz, 11-H); 7.50 (1H, d, $J = 8.3$ Hz, 10-H); 4.91 (2H, t, $J = 6.7$ Hz, 6-H); 3.40 (7H, se traslapa con la señal de H₂O); 2.73 (3H, s, 3'-H); 2.69 (3H, s, 2'-H).

¹H-RMN (400 MHz, CD₃OD, Espectros B₁₂₈-B₁₃₀):

9.27 (1H, s, 4-H); 8.00 (1H, s, 1-H); 7.94 (1H, s, 8-H); 7.51 (1H, dd, $J_1 = 8.7$ Hz, $J_2 = 1.2$ Hz, 10-H); 7.46 (1H, d, $J = 8.9$ Hz, 11-H); 4.93 (2H, t, $J = 7.4$ Hz, 6-H); 3.45 (2H, t, $J = 7.3$ Hz, 7-H); 2.82 (3H, s, 3'-H); 2.70 (3H, s, 2'-H).

La baja solubilidad de este compuesto no permitió obtener espectros de carbono 13.

3.3-13b Cloruro de 18-acetil-10-bromo-19metil-3, 4, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21-dehidro-yohimbano (20).

Después de dejar reposar el filtrado de donde se obtuvo 19, precipitaron 100 mg de un segundo sólido de color amarillo, el cual se recrystalizó de ácido acético.

$R_f = 0.12$ (acetato de etilo: ácido fórmico: metanol 8:1:1).

IR (KBr, Espectro A₁₄):

3400 (N-H indólico); 1700 (C=O); 1650, 1550 (C=C); 800 (C-H del anillo 'A').

¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₃₃-B₁₃₅):

11.31 (1H, s, 1-H, \uparrow D₂O); 9.18 (1H, s, 14-H); 8.82 (1H, d, $J = 8$ Hz, 17-H); 8.15 (1H, d, $J = 8$ Hz, 16-H); 7.64 (1H, s, 21-H); 7.34 (1H, d, $J = 8.5$ Hz, 12-H); 7.22 (1H, s, 9-H); 7.19 (1H, d, $J = 8.5$ Hz, 11-H); 4.90 (2H, t, $J = 6.0$ Hz, 5-H); 3.26 (1H, t, $J = 5.9$ Hz, 6-H); 2.85 (3H, s, 19-CH₃); 2.53 (3H, s, CH₃ del grupo acetilo).

¹³C-RMN (100 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₃₈-B₁₄₀):

193.71 (Cq, C=O); 146.19 (CH, 21-C); 143.19 (CH, 16-C); 129.79 (CH, 17-C); 126.05 (CH, 9-C); 123.74 (CH, 11-C); 120.26 (CH, 14-C); 113.54 (CH, 12-C); 58.26 (CH₂, 5-C); 26.83 (CH₃, grupo acetilo); 24.85 (CH₂, 6-C); 19.75 (CH₃, 19-CH₃); 158.76, 134.69, 132.71, 128.59, 111.42, 108.26 (señales correspondientes a 6 átomos de carbono cuaternario. Cuatro señales de carbono cuaternario esperadas no aparecen probablemente debido a empalmes con otras señales).

3.3-14 Cloruro de 3-acetil-9-bromo-2-metil-12*H*-indolo-[2,3-*a*]quinolizinio (24).

Se disolvieron en una mezcla de 10 mL de ácido acético y 5 mL de ácido fórmico a la temperatura de ebullición, 0.5 g (1.2 mmol) del compuesto 19. Se agregaron 4.7 g (19.1 mmol) de *o*-cloranilo a la solución y la mezcla se mantuvo refluendo y con agitación magnética durante una hora. La mezcla de reacción se filtró a vacío y el sólido obtenido se lavó con 5-8 mL de ácido fórmico. El filtrado se evaporó a sequedad y se le agregaron 20 mL de acetato de etilo agitando muy bien. El sólido amarillo que queda sin disolver se filtró (se oscurece un poco) y se le hizo una extracción continua en un soxhlet con acetato de etilo. El producto final fue un sólido amarillo (65-70 %). La recristalización se llevó a cabo en metanol.

$R_f = 0.52$ (Acetato de etilo: ácido fórmico: metanol 8:1:1).

IR (KBr, Espectro A₁₅):

3450 (N-H indólico); 3050 (C-H aromáticos); 1700 (C=O); 1650, 1450 (C=C); 1380 (C-H de los CH₃).

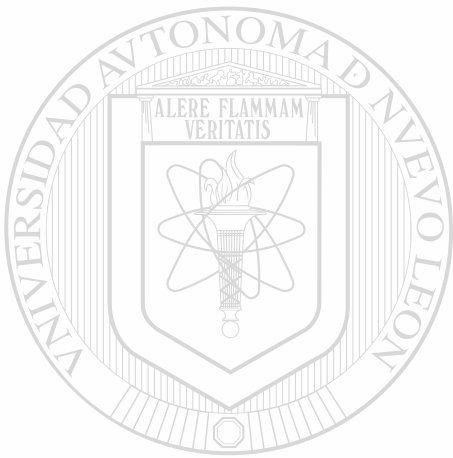
¹H-RMN (400 MHz, D₆-DMSO, Espectros B₁₄₄-B₁₄₅):

13.89 (1H, s, 12-H); 10.01 (1H, s, 4-H); 9.04 (1H, d, $J = 6.7$ Hz, 6-H); 8.88 (1H, s, 1-H); 8.79 (1H, d, $J = 6.7$ Hz, 7-H); 8.72 (1H, s, 8-H); 2.75 (6H, s, 3'-H y 2'-H).

No es posible observar claramente los dos dobletes ocasionados por los protones 10 y 11. Suponemos que se encuentran traslapados con las señales restantes.

CAPÍTULO 4

CONCLUSIONES



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

CONCLUSIONES

Con base en los resultados obtenidos y en los mecanismos de reacción propuestos, podemos concluir que los sustituyentes con efecto inductivo positivo aumentan la velocidad de reacción de formación de los hidroccloruros de triptamina a partir de las fenilhidrazinas correspondientes utilizando la síntesis clásica de indol de Fischer; mientras que los que tienen efecto inductivo negativo la retardan. Para los sustituyentes estudiados en este trabajo se encontró el siguiente orden de reactividad:



para el caso del grupo nitro, la desactivación es tal, que el compuesto de interés no se obtiene bajo las condiciones de reacción empleadas.

Este orden de reactividad se debe a la participación de los electrones del anillo bencénico para la formación del anillo de 5 miembros, los cuales estarán más o menos disponibles según si el sustituyente es menos o más electronegativo.

No obstante que, en teoría, el grupo metoxi debería favorecer en mayor medida que el *i*-propil la reacción de ciclación, no pudimos obtener el reactivo de interés. Probablemente debido a la baja estabilidad térmica del reactivo.

Algo muy importante en la reacción para obtener los hidroccloruros de triptamina es el uso de una atmósfera de nitrógeno, ya que de lo

contrario los productos obtenidos se oxidan bajo las condiciones de reacción. Esto último pasa en los casos de los sustituyentes *i*-propil, Br y F; el único que no presenta este comportamiento es el hidrocloreuro de triptamina, ya que éste se puede obtener tanto en atmósfera de nitrógeno como sin ella sin que haya repercusiones en el rendimiento de la reacción, lo cual indica una mayor estabilidad térmica de este compuesto respecto a los otros análogos.

En lo referente a la obtención del cloruro de dihidroindoloquinolinizino, utilizando la reacción de Teuber, encontramos que para que la reacción se lleve a cabo se necesita tanto de la catálisis ácida del ácido acético usado como solvente así como de la del HCl proveniente del hidrocloreuro de triptamina, ya que de lo contrario se obtiene un producto derivado de la trimerización del acetilacetaldehído (partiendo de la amina libre del hidrocloreuro de triptamina). Otro factor importante es la temperatura que se alcanza con el ácido acético (116 °C), ya que de ser menor, los rendimientos de la reacción son tan bajos que el producto no se puede aislar, detectándose solamente por TLC (uso de metanol como solvente).

La presencia de flúor y bromo en el anillo bencénico retarda la reacción de Pictet-Spengler para la formación de la tetrahidro- β -carbolina (9), favoreciendo con ello la trimerización del acetilacetaldehído. Algo parecido a lo que pasa en ausencia de la catálisis de HCl.

Otra reacción que favorecen estos mismos grupos, es la adición de una tercera molécula de acetilacetaldehído en el metilo de la posición 2 de las dihidroindoloquinolizinas formadas y la posterior formación de un quinto anillo. Lo anterior es una consecuencia de la mayor estabilidad que tiene un carbanión generado en esta posición cuando el flúor o el bromo se encuentran presentes en la molécula, con respecto a uno en el que no hay ningún grupo electronegativo que estabilice la carga generada.

Por otro lado, la deshidrogenación de los sistemas tetracíclicos presenta un patrón muy parecido. El orden de reactividad encontrado fue el siguiente:

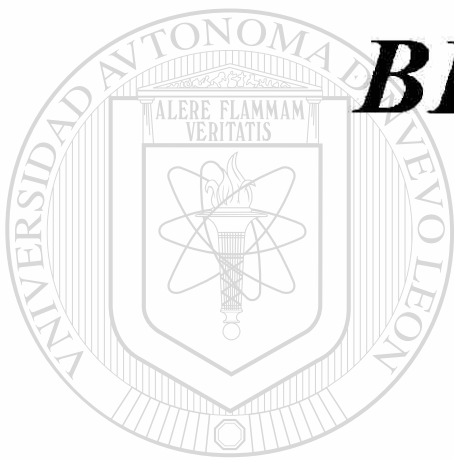


este orden obedece a que los grupos con efecto inductivo positivo tienden a estabilizar el carbocatión que se genera en la posición 7 durante el transcurso de la reacción. Sin embargo el orden de reactividad del flúor y el bromo no es el de esperarse tomando en cuenta la reactividad de cada uno de estos grupo. No obstante, es difícil hacer una comparación directa, ya que en el caso del flúor el solvente utilizado fue una mezcla de ácido acético y agua, mientras que con el bromo se usó ácido acético y ácido fórmico.

Los datos espectroscópicos confirman la estructura esperada para cada uno de los compuestos sintetizados, a excepción de los subproductos obtenidos en las reacciones de formación de las dihidroindoloquinolizinas fluorada y bromada, de los cuales solamente fue posible proponer una estructura probable.

CAPÍTULO 5

BIBLIOGRAFÍA



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

BIBLIOGRAFÍA

1. Beljanski M., Beljanski M. S.; Three alkaloids as selective destroyers of cancer cells in mice; *Oncology* **1986**, 43; 198-203.
2. Beljanski M., Beljanski M. S.; Selective inhibition of in vitro synthesis of cancer DNA by alkaloids of β -carboline class; *Experimental Cell Biology* **1982**, 50; 79-87.
- 3a) Teuber H. J., U. Hochmuth; *Tetrahedron Lett.* **1964**, 325-329.
- b) Teuber H. J., Quintanilla-Licea R., Raabe T.; Indolo[2,3-*a*]chinolizine und eine einfache synthese von flavoserpentine; *Liebigs Ann. Chemie* **1988**, 1111-1120.
4. Teuber H. J., Quintanilla-Licea R.; Heteroyohimban-analoga aus 3-acetyl-7,12-dihydro-2-methyl-6H-indolo[2,3-*a*]chinolizinium chlorid; *Liebigs Ann. Chem.* **1989**, 443-447.
5. Quintanilla-Licea R.; Teuber H. J.; Ein chinolizin-derivat aus tryptophan und acetylacetaldehyd; *Arch. Pharm.* **1992**, 325, 557-58.
6. Teuber H. J., Quintanilla-Licea R.; Synthese von Heterocyclen mit Hydroxymethylenketonen. XIV [1] Zur regioselectivität der reaction von

acetylacetaldehyd mit tryptamin; Journal für Praktische Chemie **1994**, 336, 452-457.

7. Gribble W. G., Johnson D. A.; A direct metalation route to the zwitterionic indole alkaloids. Syntheses of indolo[2,3-*a*]quinolizine, flavopereirine, flavocarpine and dihidroflavopereirine; Tetrahedron Lett. **1987**, 28, 5259-5262.

8. Weissberg A. Taylor E. C.; The chemistry of heterocyclic compounds, part one; John Wiley & Sons; pp 232-316; **1972**.

9. Sundberg Richard J.; The chemistry of indoles; Academic Press; pp142-164, 159, 229; **1970**.

10. E. Fischer and F. Jourdan, Chem. Ber. **1883**, 16, 2241.

11a) E. Fischer; Justus Liebigs Ann. Chem. **1886**, 236, 116.

b). E. Fischer; Chem. Ber. **1886**, 19, 1563.

12a) Abramovitch, R. A.; J. Chem. Soc., p 4593 (1956).

b) Abramovitch, R. A. and Shapiro D.; J. Chem. Soc., p 4589 (1956).

13. Ewins A. J.; J. Chem. Soc., **99**, 270 (1911).

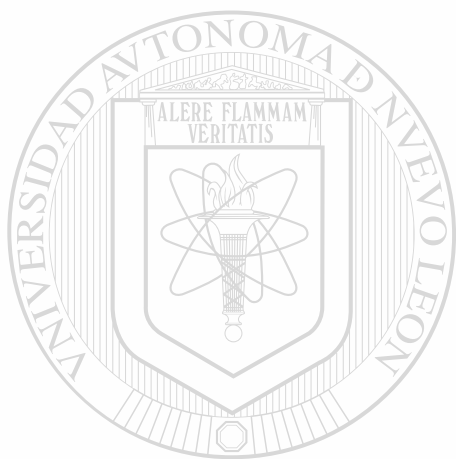
14. March Jerry; *Advanced Organic Chemistry; reactions, mechanisms and structure*, fourth edition; John Wiley & Sons; pp 1162-63; **1992**.
15. Hughes D. L., Zhao D.; *Mechanistic studies of the Fischer indole reaction*; *Journal of Organic Chemistry* **1993**, 58, 228-233.
16. *The Fischer Indole Synthesis: A Semiempirical Study*; Rosas García V. M., Quintanilla-Licea R., Longoria E.; *Conference on Heterocyclic Chemistry (ECHET 98)*; June-July 1998.
[Http://www.ch.ic.ac.uk.ectoc.echet98](http://www.ch.ic.ac.uk.ectoc.echet98).
17. Longoria Enrique; *Síntesis de indol de Fischer: Un estudio semiempírico*; Tesis de Licenciatura; F.C.Q, U.A.N.L.; **1999**.
18. Teuber H. J., Quintanilla-Licea R., Bats J. W.; *Reaction of 3-acetyl-7,12-dihydro-2-methyl-6H-indolo[2,3-a]quinolizinium chloride with aromatic aldehydes forming "dimers" under kinetic control; stereoselective acetal versus aldol ring closure*; *Liebigs Ann. Chem.* **1992**, 1251-1257.
19. Villarreal-Platas Esaúl; *Estudios mecanísticos en la formación de indoloquinolizinas*; Tesis de Licenciatura; F.C.Q, U.A.N.L.; **1997**.
20. Trost B. M.; *Dehydrogenation mechanisms. On the mechanism of dehydrogenation of acenaphthene by quinones*; *Journal of The American Chemical Society* **1967**, 89, 1847-1851.

21. Sylverstein R. M., Bassler Clayton C., Morrill Terence C.; Spectrometric identification of organic compounds, fifth edition; John Wiley & Sons; pp 100-132, 231-248; **1991**.
22. Pasto Daniel J., Johnson Carl R.; Determinación de estructuras orgánicas; Reverté; pp 125-144; **1974**.
23. Friebolin Horst; Basic one- and two-dimensional NMR spectroscopy, second edition; VCH; pp 58-66, 87-88, 104-105; **1993**.
- 24a) R. N. Schut; Chemistry and Industry (London) **1960**, 1246-1247.
- b) M. J. Mokrosz, P. Kowalski, A. J. Bojarski, J. L. Mokrosz; Heterocycles 1994, 37, 265-274.
25. Emers Ludger, Kang Sungzong; Carbon-13 NMR spectroscopy of substituted indoles and tryptamins; J. Chem. Research **1981**, 3019-3027.
26. Franke Walter, Kraft Richard; Neure methoden der präparativen organischen chemie II, über synthesen mit acetessigaldehyd; Angewandte Chemie **1955**, 67, 395-99.
27. A. I. Scott; Bioorg. Che. **1974**, 3, 39.
28. M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh; Spektroskopische Methoden in der Organischen Chemie, Georg Thieme Verlag, Stuttgart **1984**; pag. 154.

29. P. Yu, T. Wang, J. Li, J. M. Cook; *Journal of Organic Chemistry* **2000**, *65*, 3173-3192.

30. L. Llor, L. Muñoz; *Journal of Organic Chemistry* **2000**, *65*, 2716-2722.

31. M. Itoigawa, Y. Kashiwada, ch. Ito, H. Furukawa, Y. Tachibana, K. F. Bastow, K. H. Lee; *Journal of Natural Products*, **2000**, *63*, 893-897.



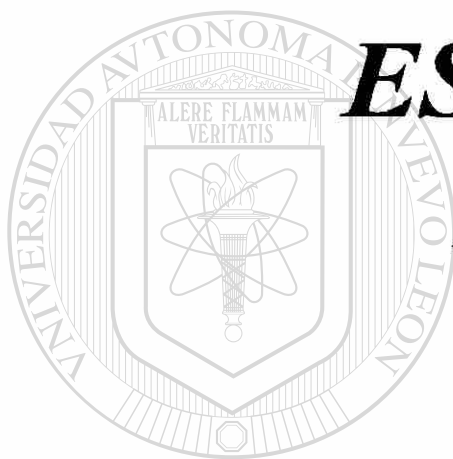
UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

***APÉNDICE “A”:
ESPECTROS DE
INFRARROJO***

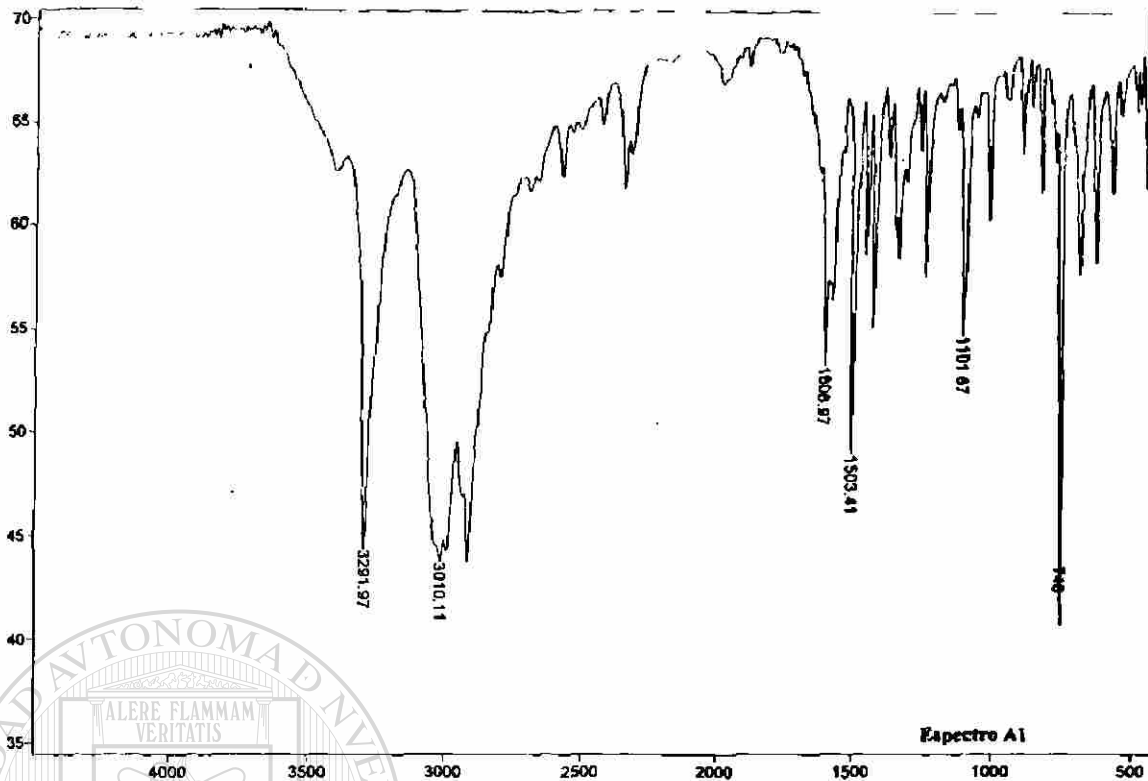


UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



Transmittance / Wavenumber (cm-1)

File # 2: MCTREC

Number of Scans= 10 Apodization=

11/02/96 8.58 PM Res=4 cm-1

Espectro de IR correspondiente al experimento EVP-1C 2° res.

Date: 14/08/96

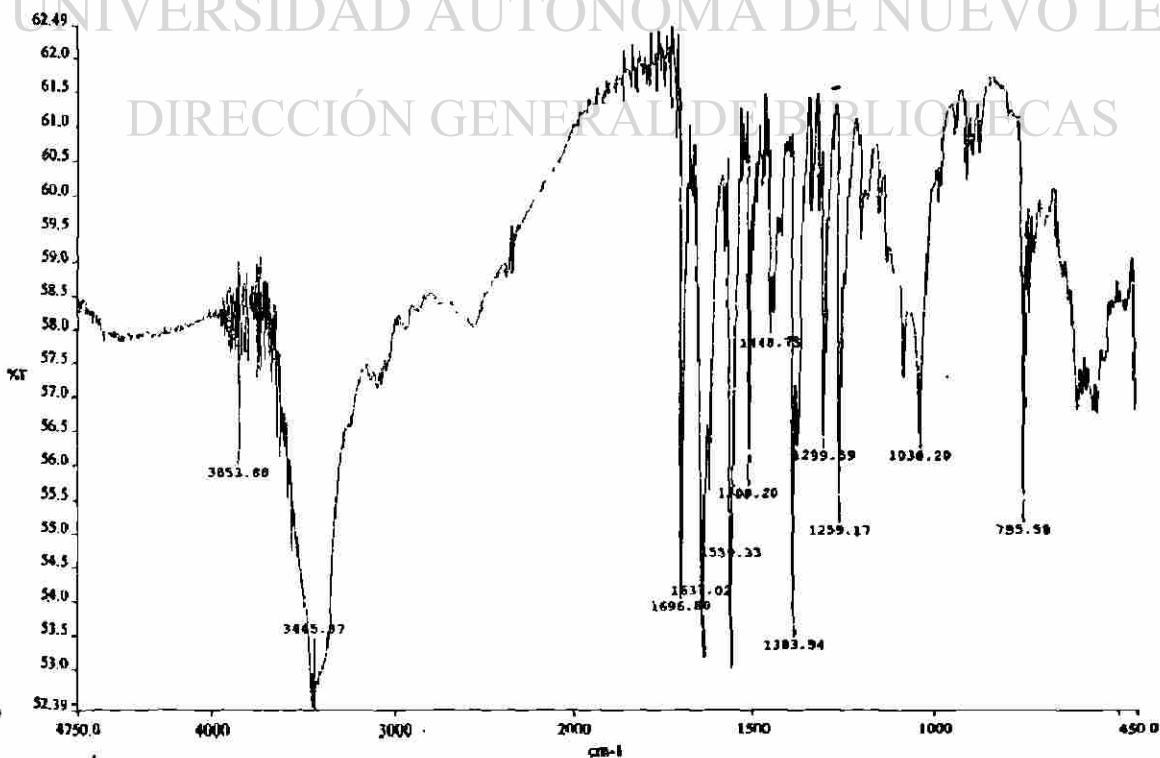
Espectro A2

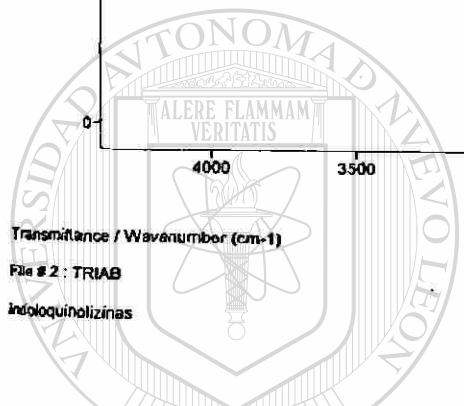
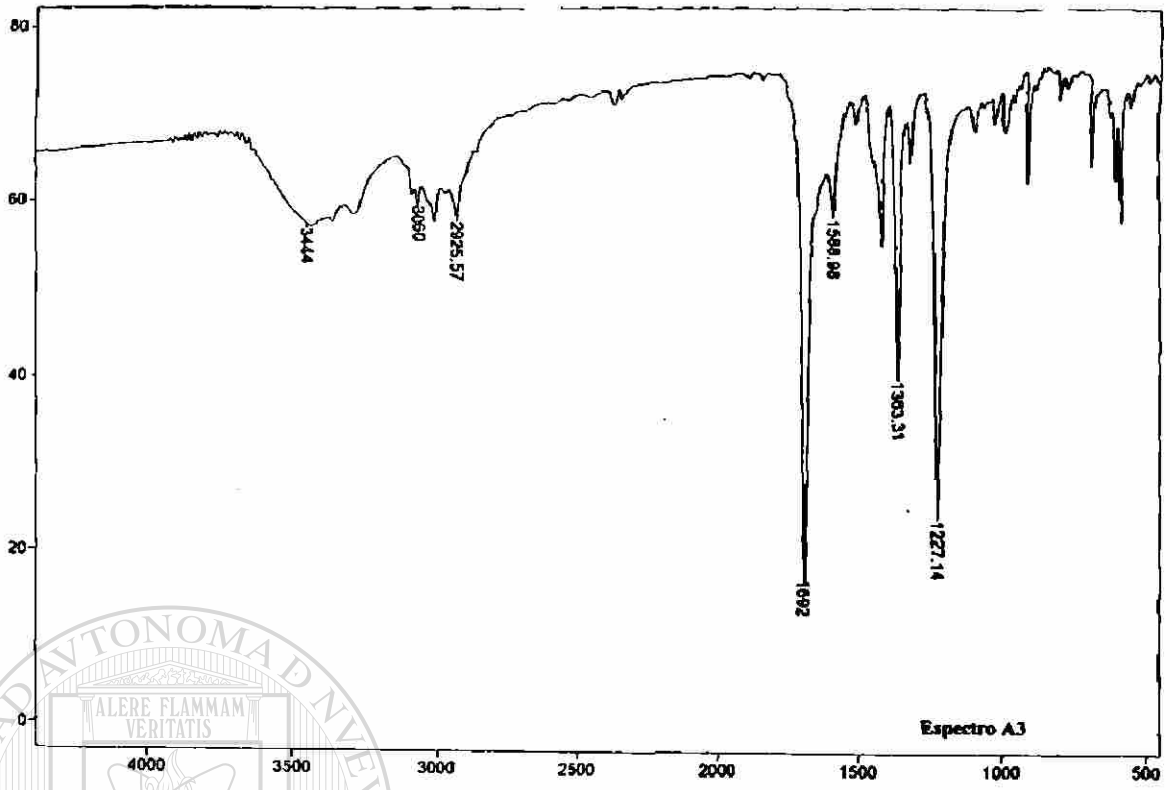
Time: 12:52:56 PM

File: NM80005

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS





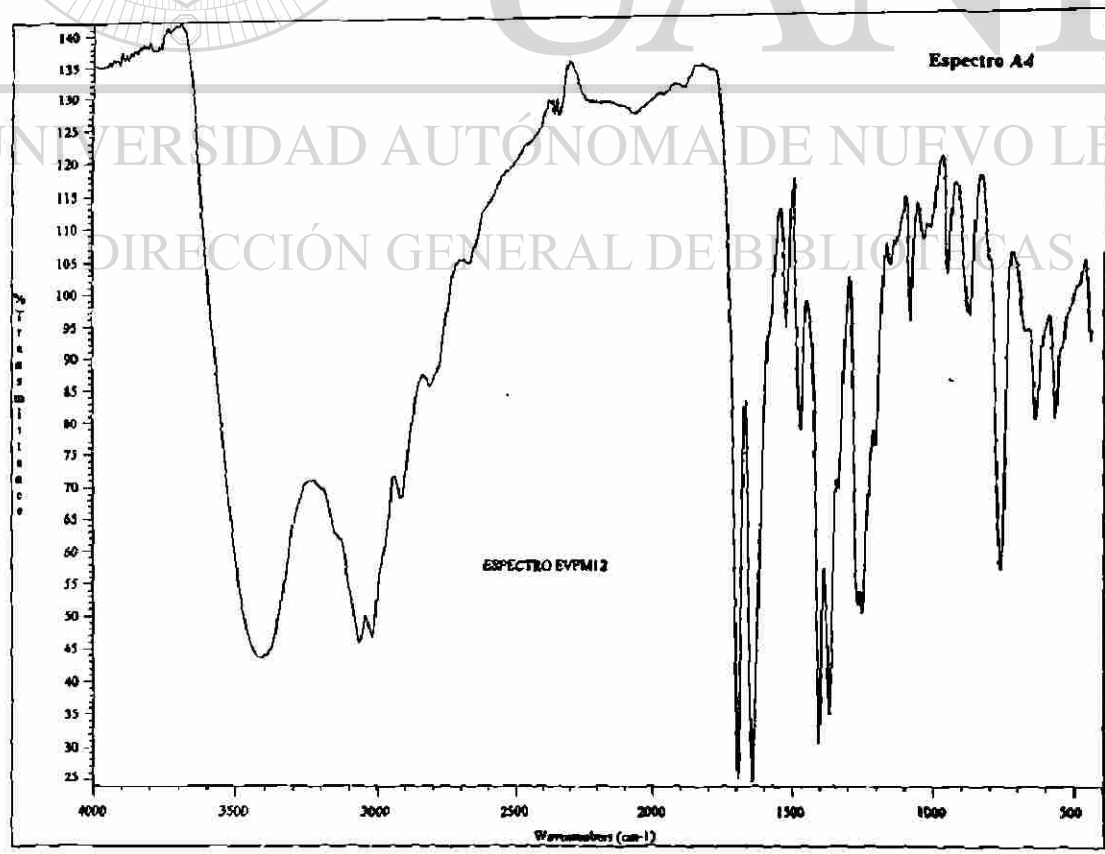
Transmittance / Wavenumber (cm-1)

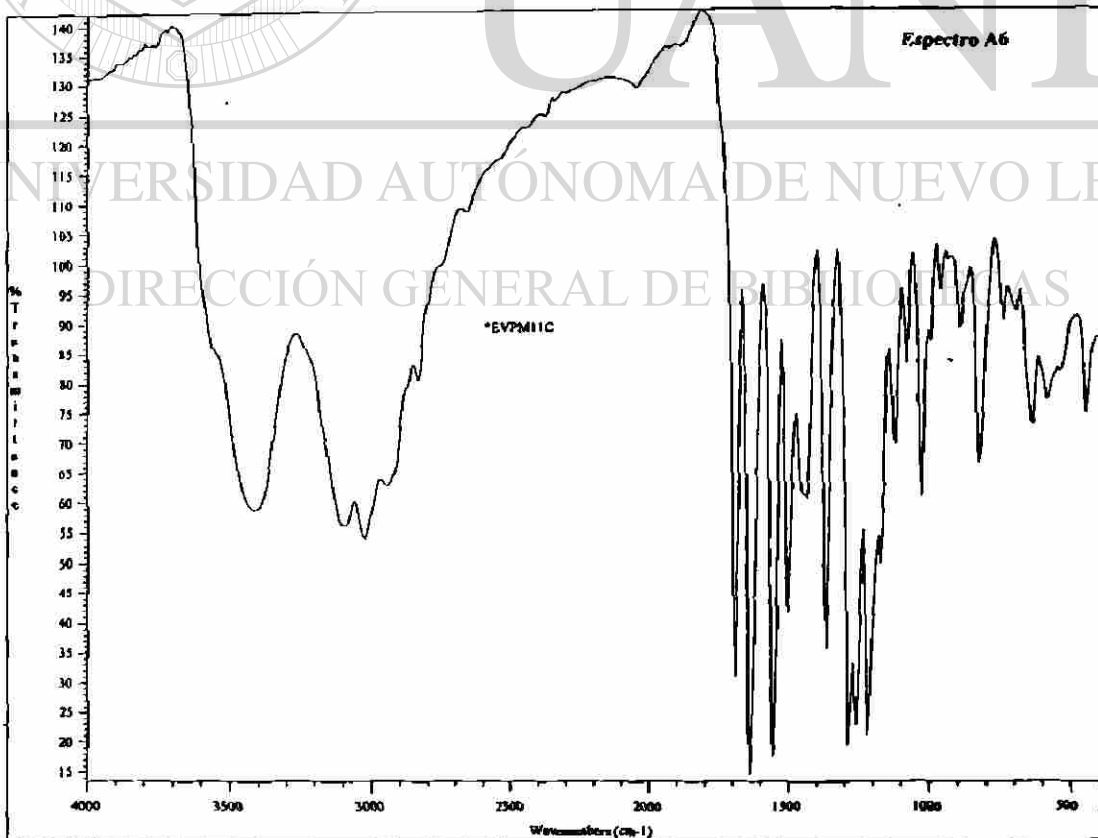
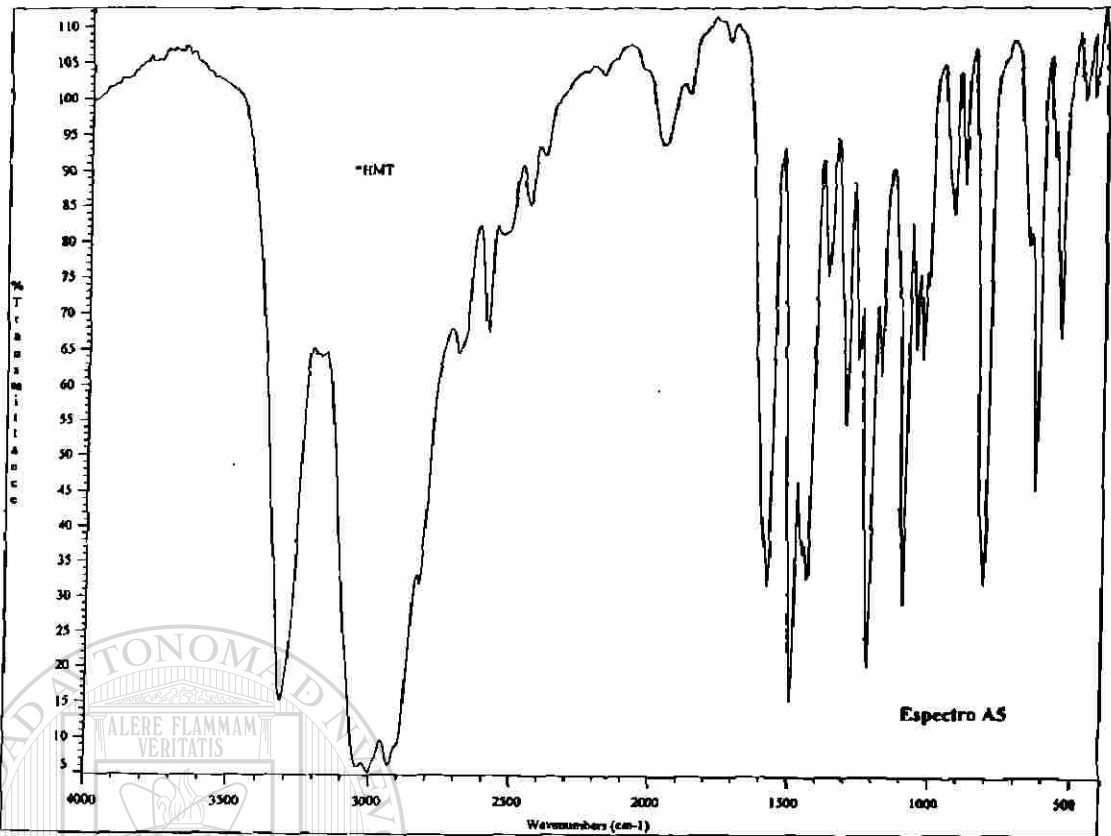
File # 2 : TRIAB
Indoloquinolizinas

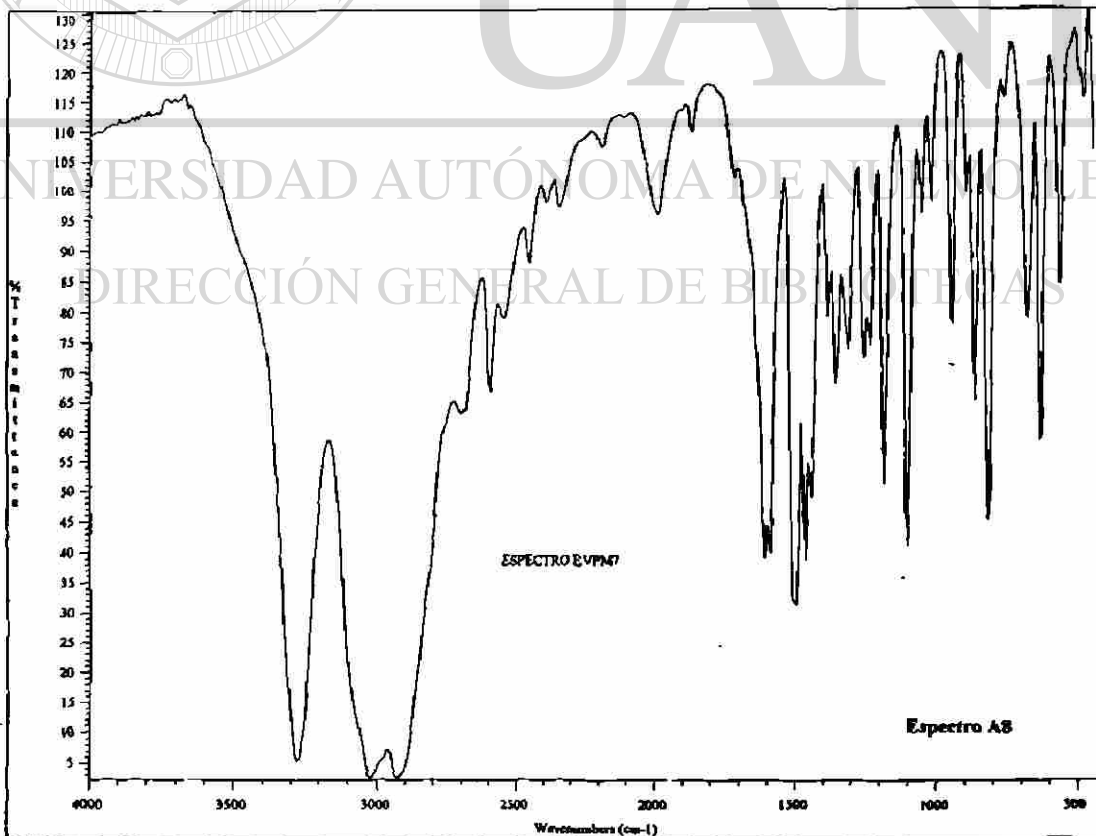
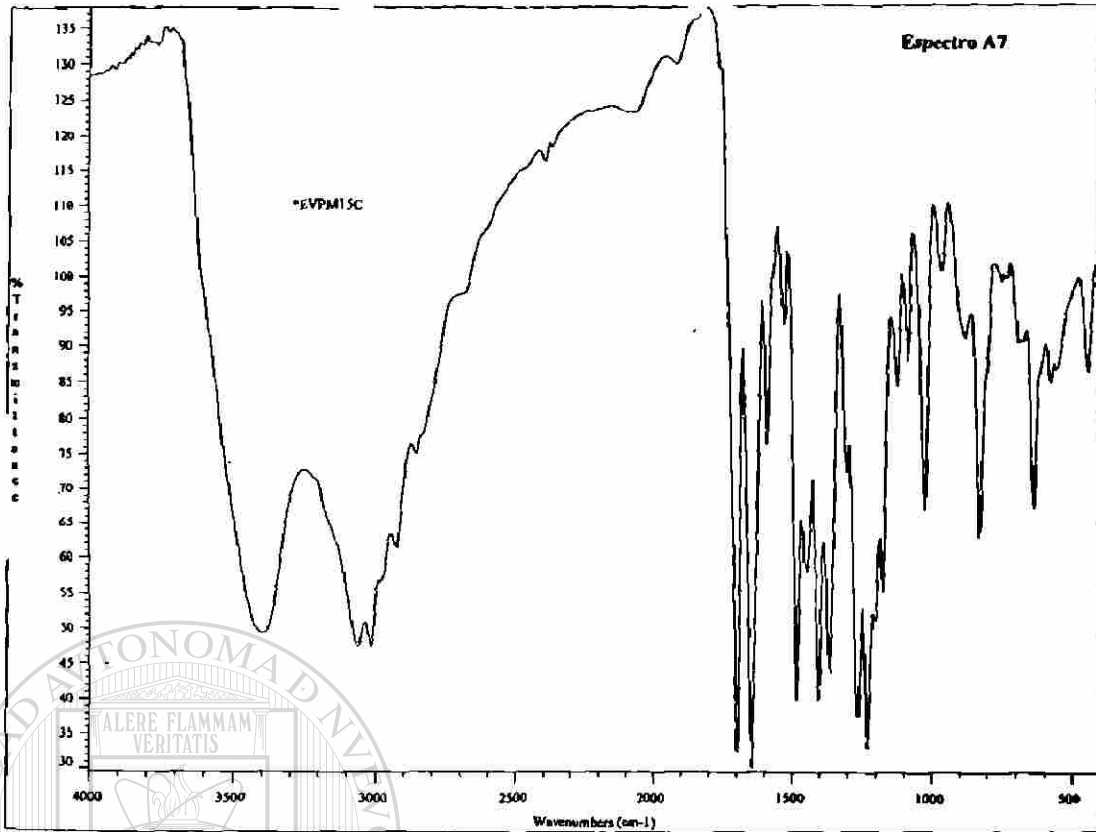
Number of Scans= 10 Apodization=
2/12/98 4:34 PM Res=4 cm-1

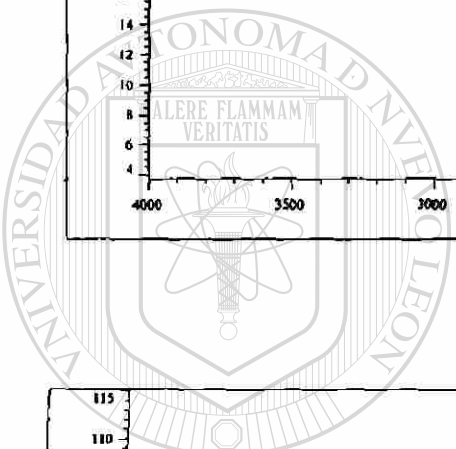
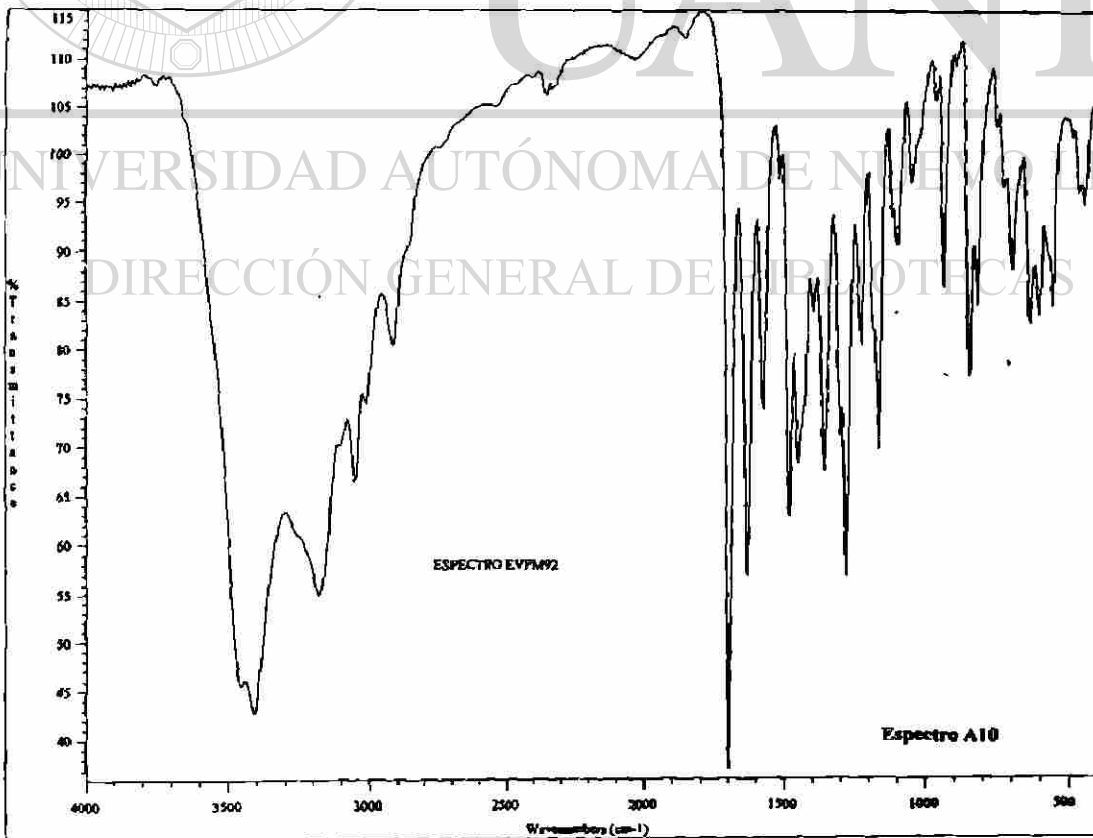
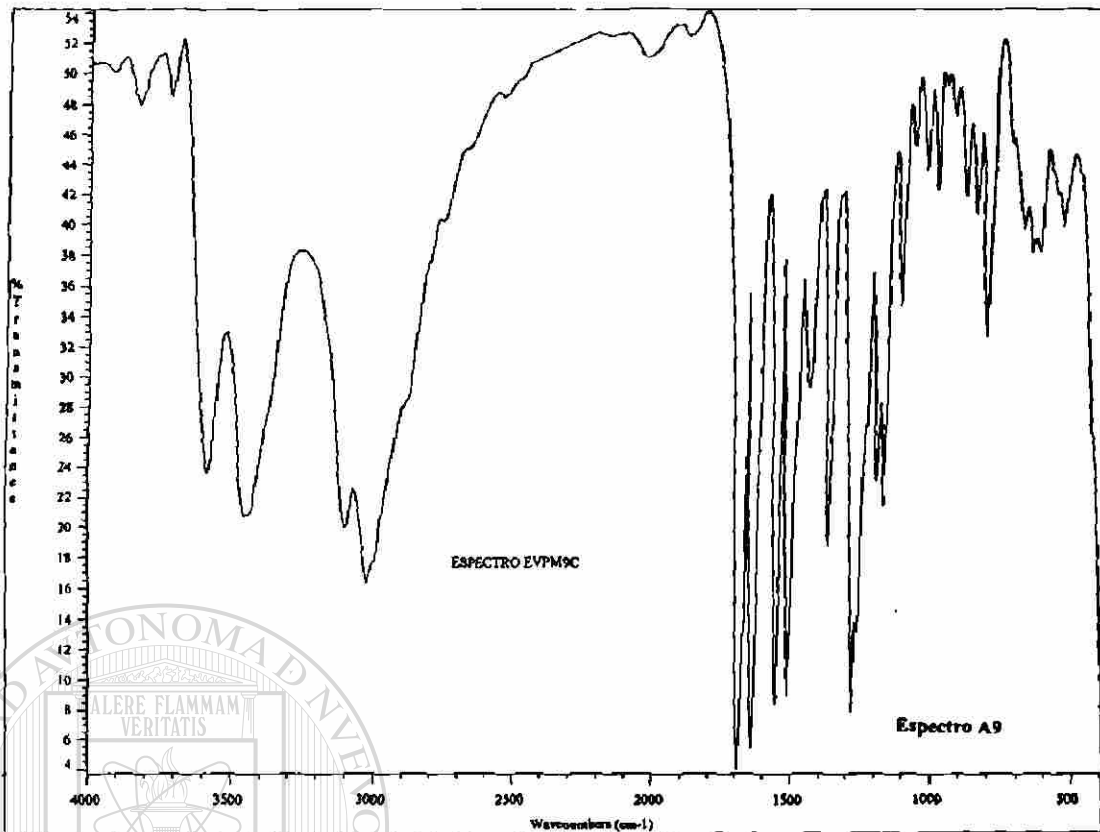
U A N L

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

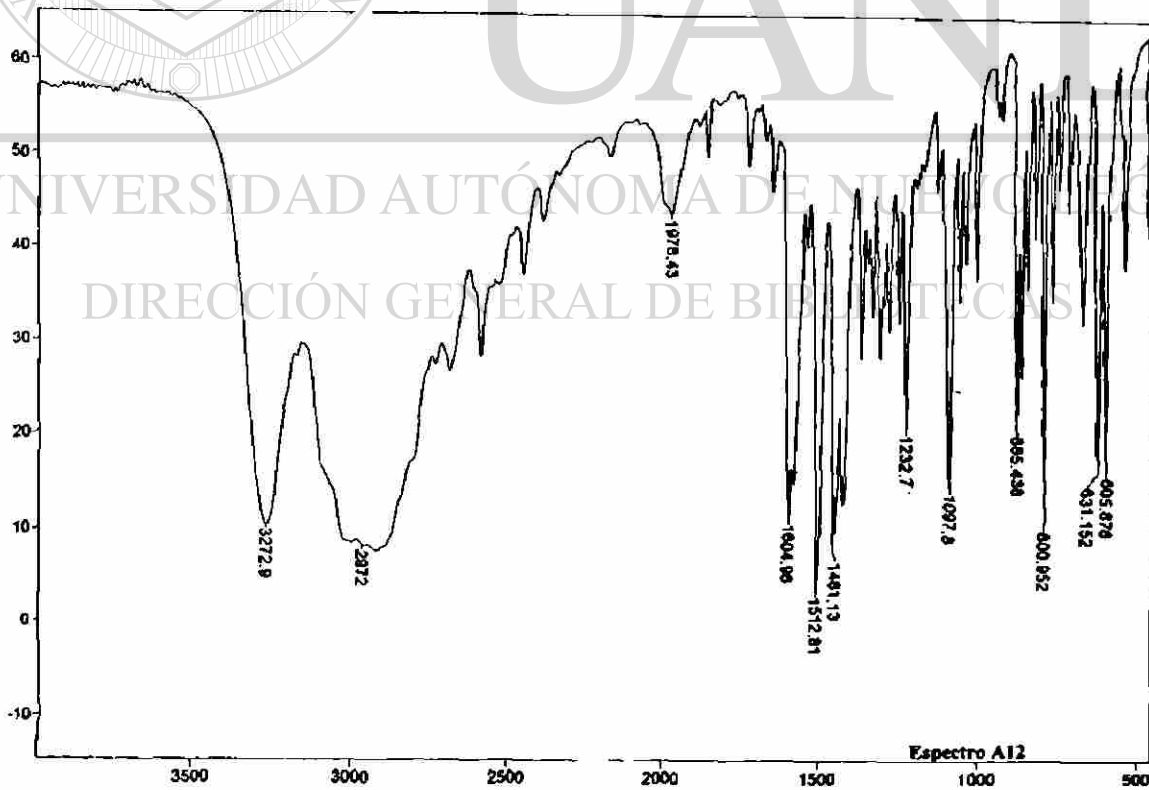
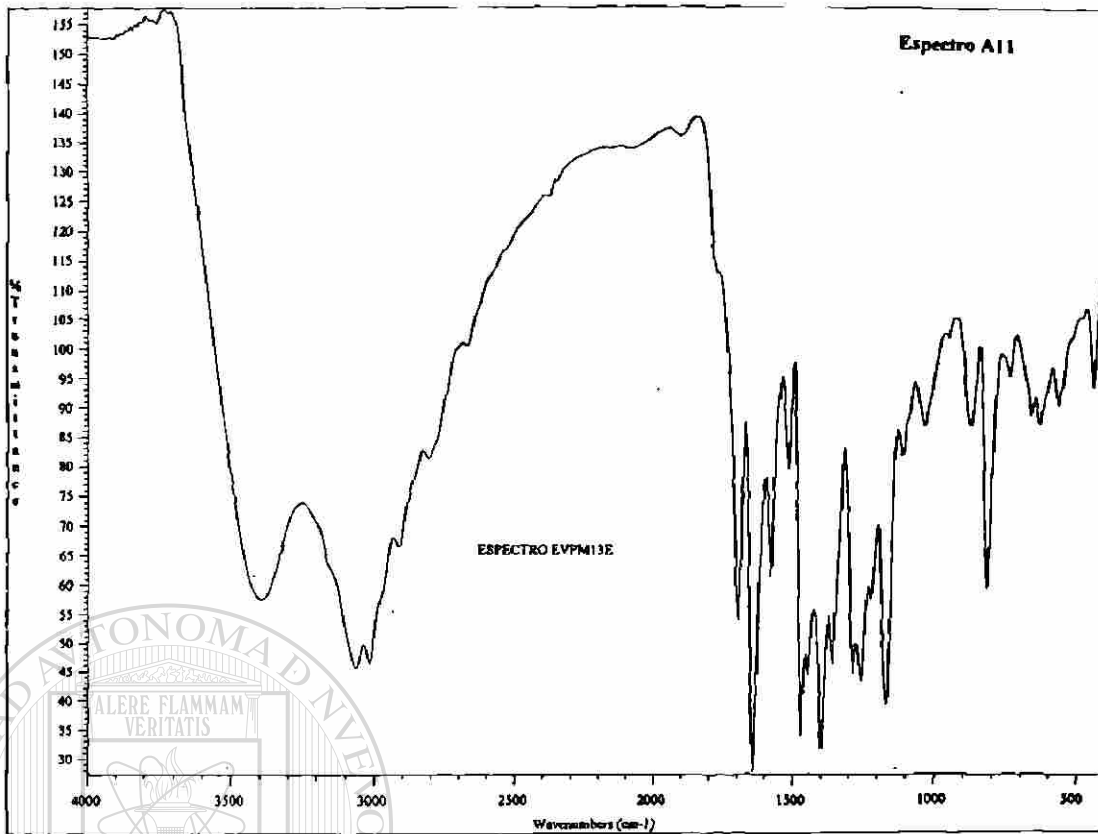








UANI
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

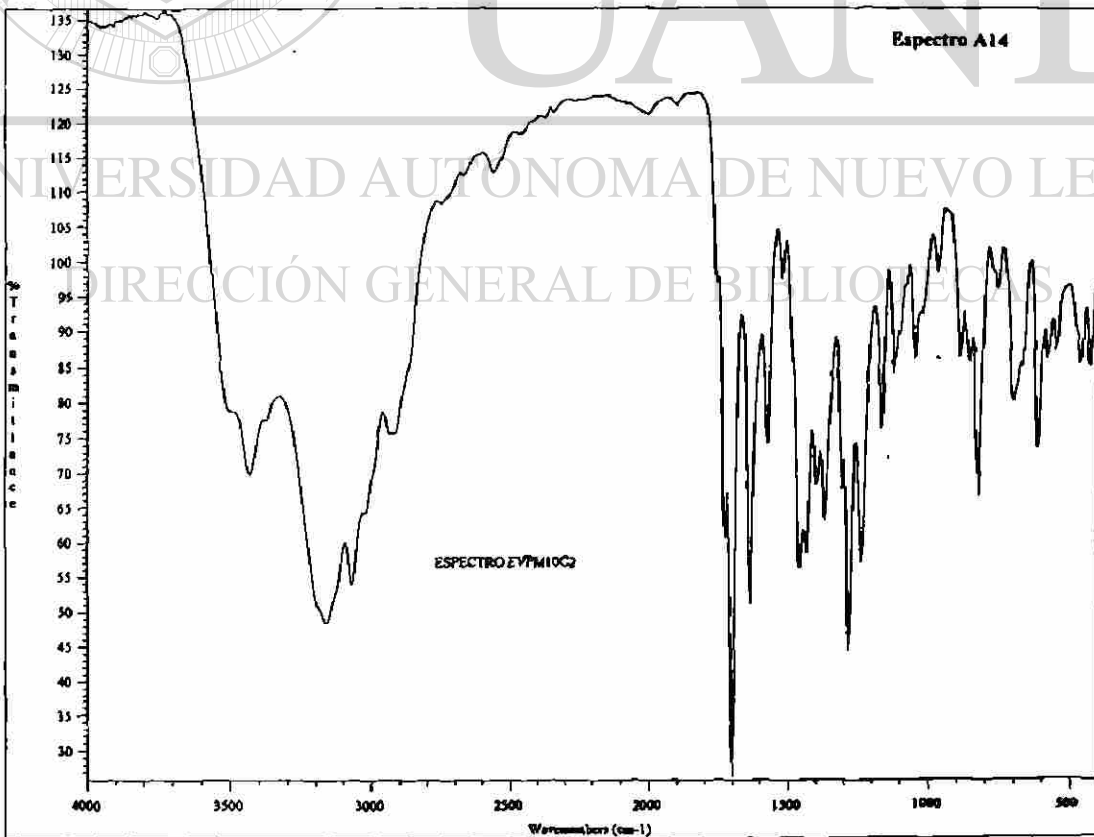
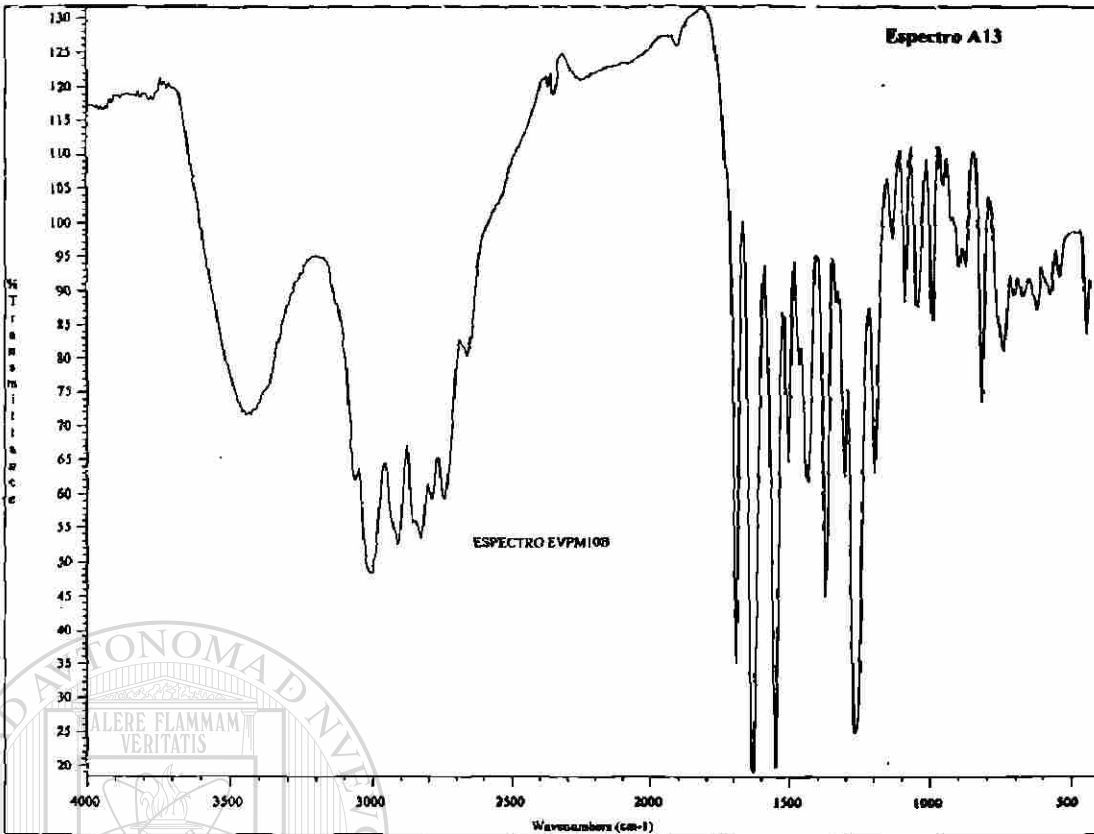


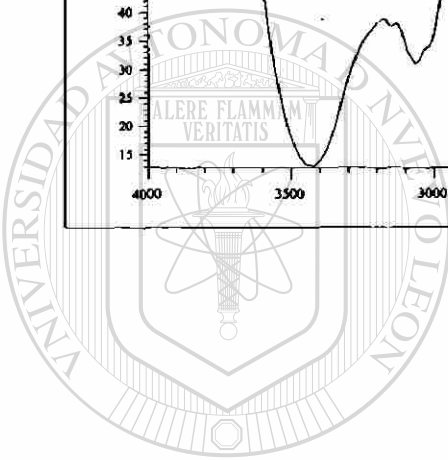
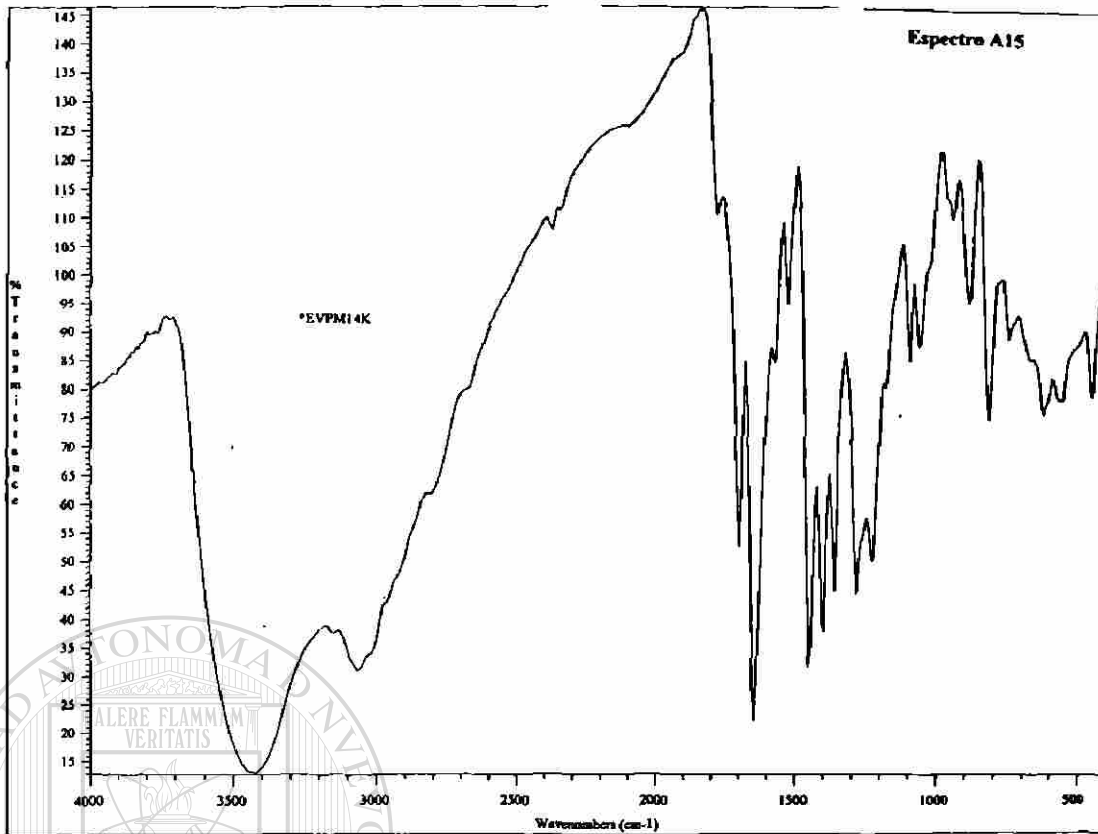
Transmittance / Wavenumber (cm-1)

Number of Scans= 10 Apodization=

File # 1 : EVPN8G

26/11/98 5:49 PM Res=4 cm-1





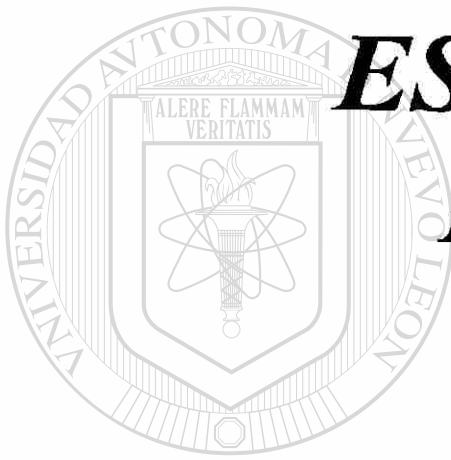
UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

***APÉNDICE “B”:
ESPECTROS DE
RESONANCIA
MAGNÉTICA
NUCLEAR***



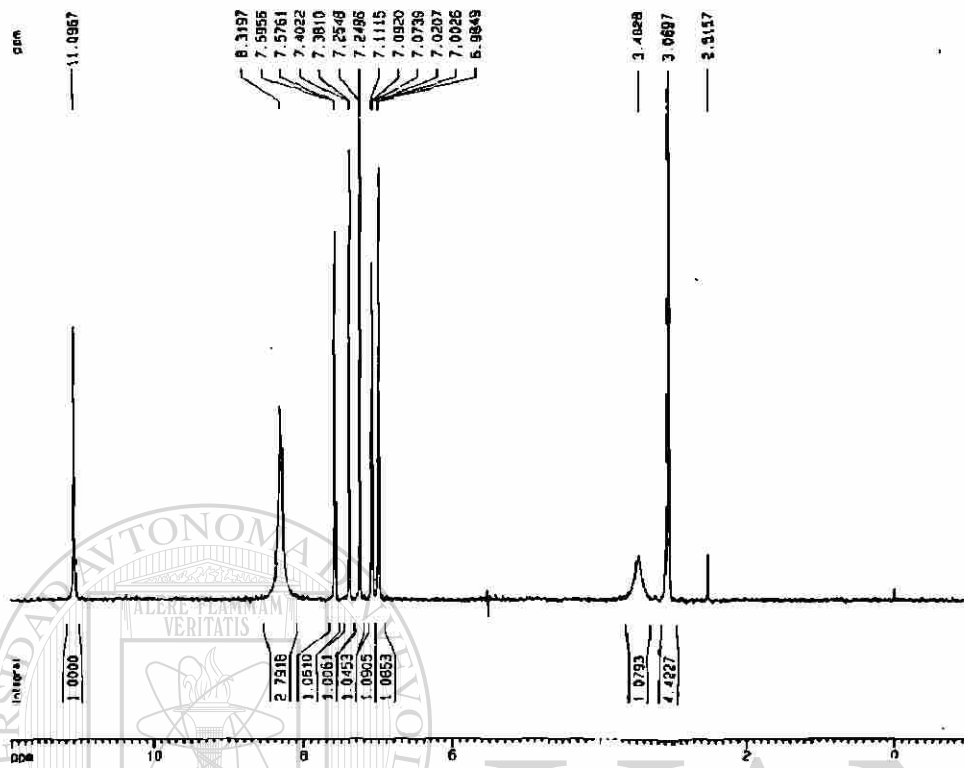
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Cloruro de Triptamina
Espectro RMN 1H

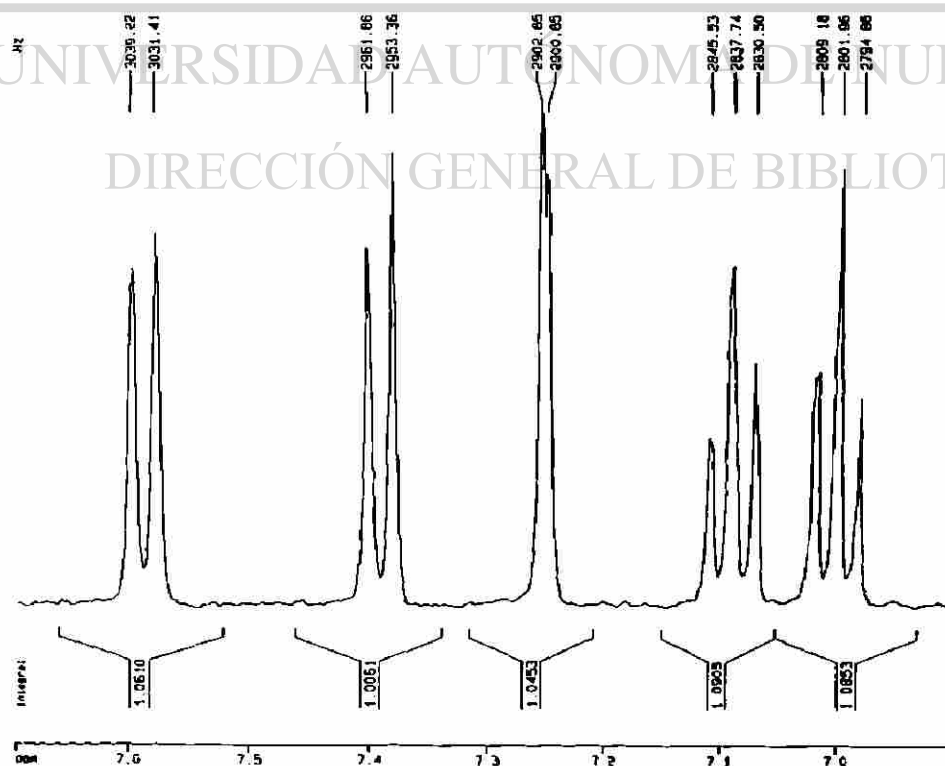
B1: 1H-RMN, Espectro normal



Current Data Parameters	
NAME	Triptam1
EXPNO	1
PROCNO	1
F2 - Acquisition Parameters	
DATE_	980211
TIME	8 15
INSTRUM	smect
PROBHD	5 mm Hui114
PULPROG	zg
TD	32768
SOLVENT	DMSO
NS	128
DS	2
SWH	5268.333 Hz
FIDRES	0.159346 Hz
AQ	3.1457779 sec
RG	45.3
GB	98.000 usec
DE	8.00 usec
TE	300.0 K
D1	1.5000000 sec
P1	12.50 usec
DE	8.00 usec
SFO1	400.1322083 MHz
FUC1	34
PL1	-3.00 dB
F2 - Processing parameters	
SI	8192
SF	400.1322083 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	-1.20 Hz
GB	0
PC	1.00
ID HNP data parameters	
CR	20.00 cm
F1P	12.017 ppm
F1	4000.43 Hz
F2P	0.999 ppm
F2	-389.91 Hz
PRGPR	0.05000 ppm/cm
MRCH	250.01000 Hz/cm

Cloruro de Triptamina
Espectro RMN 1H

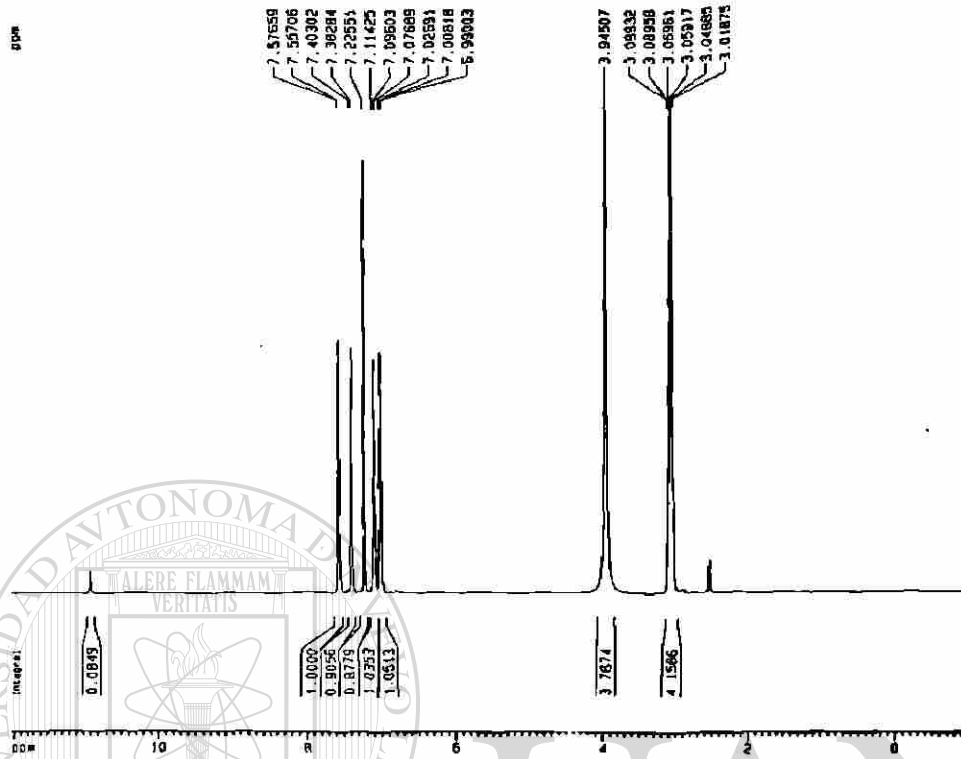
B2: 1H-RMN, Ampliación de la región de aromáticos



Current Data Parameters	
NAME	Triptam1
EXPNO	1
PROCNO	1
F2 - Acquisition Parameters	
DATE_	980211
TIME	8 15
INSTRUM	smect
PROBHD	5 mm Hui114
PULPROG	zg
TD	32768
SOLVENT	DMSO
NS	128
DS	2
SWH	5268.333 Hz
FIDRES	0.159346 Hz
AQ	3.1457779 sec
RG	45.3
GB	98.000 usec
DE	8.00 usec
TE	300.0 K
D1	1.5000000 sec
P1	12.50 usec
DE	8.00 usec
SFO1	400.1322083 MHz
FUC1	34
PL1	-3.00 dB
F2 - Processing parameters	
SI	8192
SF	400.1322083 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	-1.20 Hz
GB	0
PC	1.00
ID HNP data parameters	
CR	20.00 cm
F1P	7.700 ppm
F1	3891.00 Hz
F2P	0.999 ppm
F2	-389.91 Hz
PRGPR	0.05000 ppm/cm
MRCH	250.01000 Hz/cm

Cloruro de Triptamina
Espectro de RMN 1H
Intercambio con Deuterio

B3: ¹H-RMN, Intercambio
con D₂O.



Current Data Parameters
NAME Triptamin
EXPNO 1
PROCNO 1

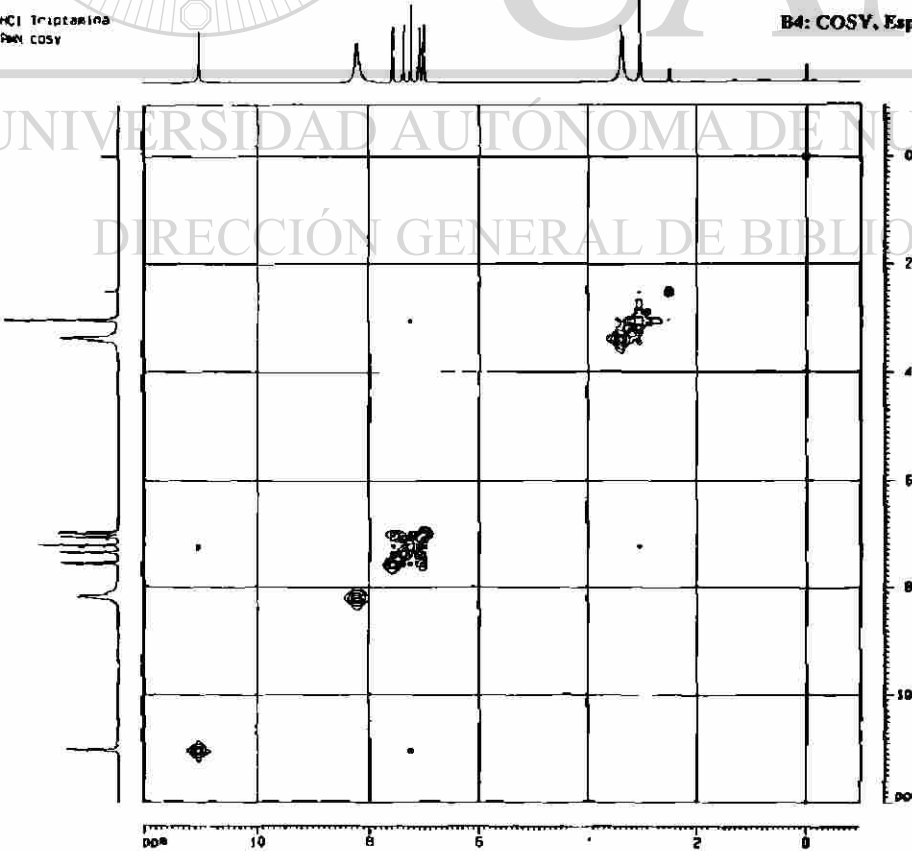
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 08/21/12
Time 1:07
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm MSL300
PULPROG zgpg30
TD 32768
SOLVENT DMSO
NS 128
DS 2
SFO1 300.131314 MHz
FIDRES 0.150946 Hz
AQ 3.1437773 sec
RG 409.3
DQ 64.000 usec
DE 8.00 usec
TE 300.2 K
O1 1.50000000 sec
P1 12.00 usec
DE 8.00 usec
SFO2 400.142605 MHz
NUC1 1H
PL1 -3.00 dB

F2 - Processing parameters
SI 0182
SF 400.142605 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.30 Hz
GB 0
PC 1.00

10 MHz data parameters
CH 20.00 cm
F1P 12.031 cm
F1 4814.15 Hz
Y2P -0.385 cm
F2 -284.18 Hz
FPC2 0.05203 ppm/cm
VOC 280.41848 Hz/cm

HCl Triptamina
RMN COSY

B4: COSY, Espectro completo.



Current Data Parameters
NAME Triptamin
EXPNO 1
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 08/21/12
Time 12:06
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm MSL300
PULPROG zgpg30
TD 32768
SOLVENT DMSO
NS 128
DS 2
SFO1 300.131314 MHz
FIDRES 0.150946 Hz
AQ 3.1437773 sec
RG 409.3
DQ 64.000 usec
DE 8.00 usec
TE 300.2 K
O1 1.50000000 sec
P1 12.00 usec
DE 8.00 usec
SFO2 400.142605 MHz
NUC1 1H
PL1 -3.00 dB

F1 - Acquisition parameters
SI 0182
SF 400.142605 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.30 Hz
GB 0
PC 1.00

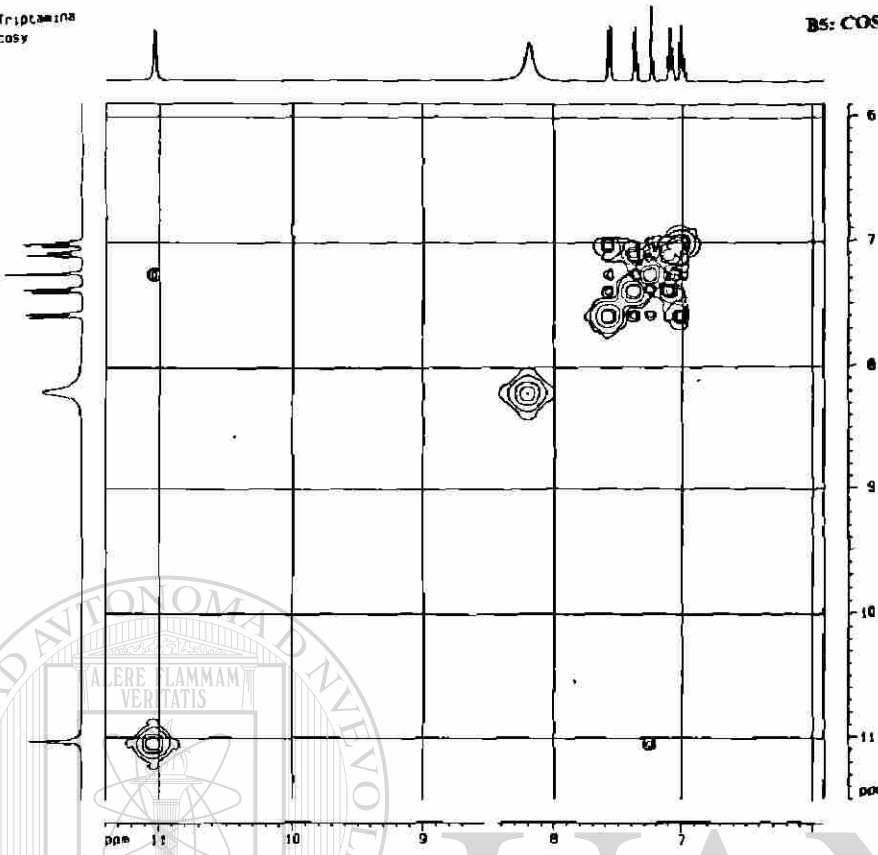
F2 - Processing parameters
SI 0182
SF 400.142605 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.30 Hz
GB 0
PC 1.00

F1 - Processing parameters
SI 0182
SF 400.142605 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.30 Hz
GB 0
PC 1.00

10 MHz data parameters
CH 20.00 cm
F1P 12.031 cm
F1 4814.15 Hz
Y2P -0.385 cm
F2 -284.18 Hz
FPC2 0.05203 ppm/cm
VOC 280.41848 Hz/cm

HCl Triptamina
2000 cosy

B5: COSY, Ampliación.



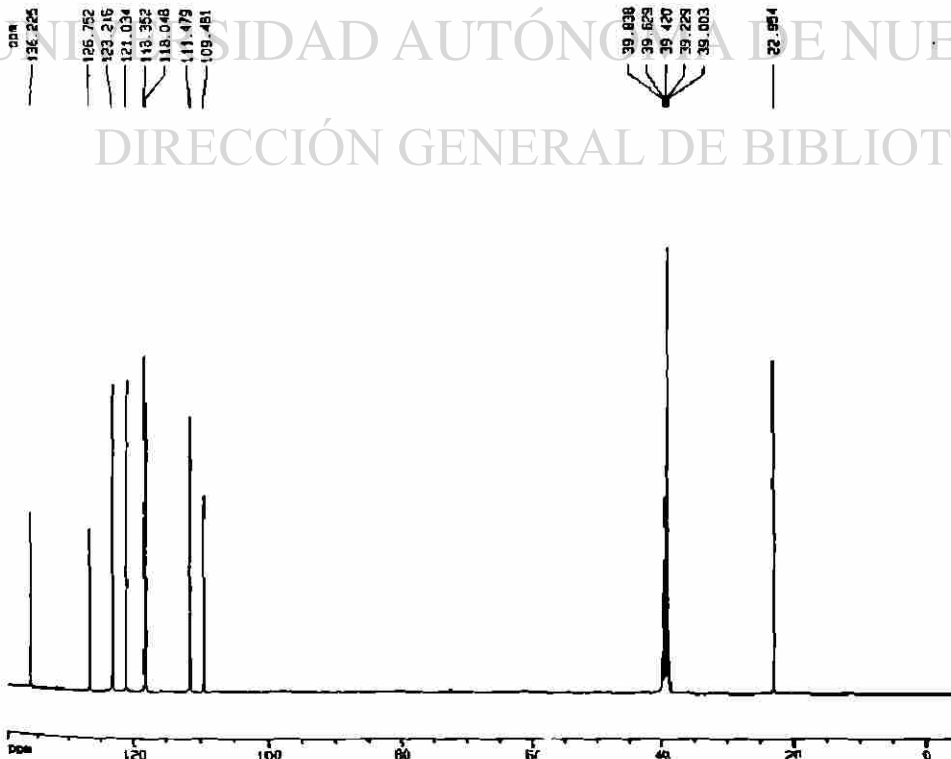
Current Data Parameters

```

NAME      Triptam
EXPNO     1
PROCNO    1
F2 - Acqisition Parameters
Date_     080211
Time      0 24
INSTRUM   spect
PROBHD    5 mm HLL111
PULPROG   zgpg
TD         65536
SOLVENT   CDCl3
NS         1024
DS         4
SWH        12526.324 Hz
FIDRES     0.237675 Hz
AQ         2.1437957 sec
RG         65536
HSA        0
GB         0
PC         300.0 K
RG1        0.000000 sec
RG2        0.000000 sec
RG3        16.00 sec
C1         2.0000000 sec
CHOPPING  0.01218
PCPD2     165.00 sec
SFO2      400.1166005 MHz
NUC2      13
P1         -3.00 dB
PL12      16.00 dB
P1        10.25 sec
GC         0.00 sec
SFO1      100.6201214 MHz
NUC1      13C
P1         -1.00 dB
F2 - Processing parameters
SI         32768
SF         100.6126823 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         1.00 Hz
GB         0
PC         1.40
F0 - 13C NMR parameters
C1         20.00 sec
F0P        140.000 MHz
F1         140.000 MHz
F2         1.000 MHz
F3         -0.030 MHz
SFO2      7.25000 MHz/CP
AQC       725.46250 MHz
  
```

Cloruro de Triptamina
Espectro RMN 13C

B6: ¹³C-RMN, Espectro normal.



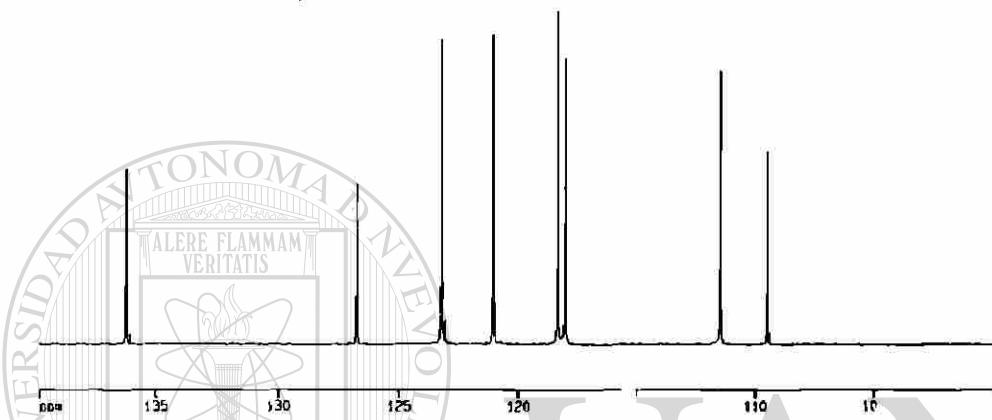
Current Data Parameters

```

NAME      Triptam
EXPNO     1
PROCNO    1
F2 - Acquisition Parameters
Date_     080211
Time      0 24
INSTRUM   spect
PROBHD    5 mm HLL111
PULPROG   zgpg
TD         65536
SOLVENT   CDCl3
NS         1024
DS         4
SWH        12526.324 Hz
FIDRES     0.237675 Hz
AQ         2.1437957 sec
RG         65536
HSA        0
GB         0
PC         300.0 K
RG1        0.000000 sec
RG2        0.000000 sec
RG3        16.00 sec
C1         2.0000000 sec
CHOPPING  0.01218
PCPD2     165.00 sec
SFO2      400.1166005 MHz
NUC2      13
P1         -3.00 dB
PL12      16.00 dB
P1        10.25 sec
GC         0.00 sec
SFO1      100.6201214 MHz
NUC1      13C
P1         -1.00 dB
F2 - Processing parameters
SI         32768
SF         100.6126823 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         1.00 Hz
GB         0
PC         1.40
F0 - 13C NMR parameters
C1         20.00 sec
F0P        140.000 MHz
F1         140.000 MHz
F2         1.000 MHz
F3         -0.030 MHz
SFO2      7.25000 MHz/CP
AQC       725.46250 MHz
  
```

Cloruro de Triptamina
Espectro RMN 13C

ppm
136.225
125.752
123.216
121.034
118.352
116.046
111.478
109.481



Cloruro de Triptamina
Espectro deat 13C

B7: ¹³C-RMN, Ampliación de
la región de aromáticos.

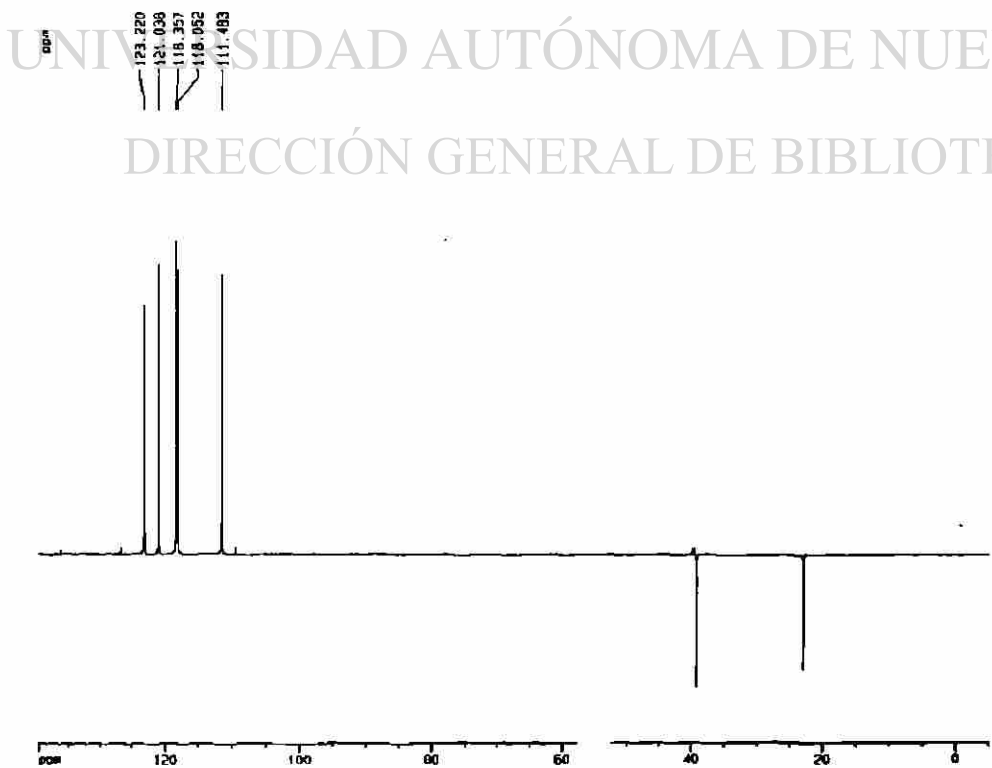
```

Current Data Parameters
NAME: Triptamc1
EXPNO: 3
PROCNO: 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ : 080711
Time : 8 24
INSTRUM : spect
PROBHD : 5 mm Hx11 mm
PULPROG : zgpg
TD : 65536
SOLVENT : CDCl3
NS : 1624
DS : 4
SWH : 15876.324 Hz
FIDRES : 0.237676 Hz
AQ : 2.1637257 sec
RG : 18384
CQ : 32.100 usec
DE : 0.00 usec
TE : 300.2 K
AQ1 : 0.0300000 sec
AQ2 : 0.0000000 sec
PL13 : 18.00 dB
G1 : 2.0000000 sec
CPDPRG2 : waltz16
PCPD2 : 100.00 usec
SFO2 : 400.126000 MHz
NUC2 : 13
PL2 : -3.00 dB
PL12 : 18.00 dB
P1 : 10.25 usec
DE : 0.00 usec
SFO1 : 100.6201214 MHz
NUC1 : 13C
PL1 : -1.00 dB

F2 Processing parameters
SI : 32768
SF : 100.6196232 MHz
WDW : EM
SSB : 0
LB : 1.00 Hz
GB : 0
PC : 1.48

90 MHz plot parameters
CX : 20.00 cm
CP : 1.00 000 usec
F1 : 14080.75 MHz
F2 : 100.000 MHz
F3 : 10061.26 MHz
PUNCH : 2.000000 usec
MUCH : 70.77565 MHz/cm
    
```



```

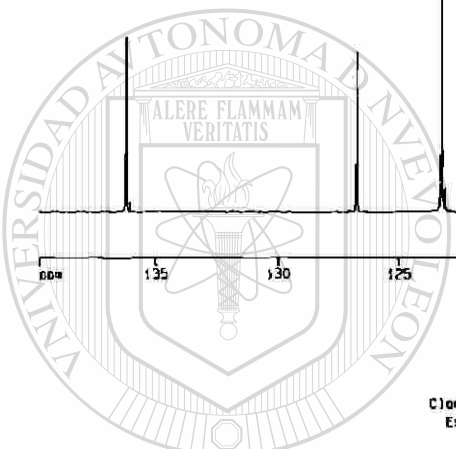
Current Data Parameters
NAME: Triptamc1
EXPNO: 4
PROCNO: 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ : 080711
Time : 9 16
INSTRUM : spect
PROBHD : 5 mm Hx11 mm
PULPROG : zgpg
TD : 65536
SOLVENT : CDCl3
NS : 1624
DS : 4
SWH : 15876.324 Hz
FIDRES : 0.237676 Hz
AQ : 2.1637257 sec
RG : 18384
CQ : 32.100 usec
DE : 0.00 usec
TE : 300.2 K
AQ1 : 0.0300000 sec
AQ2 : 0.0000000 sec
PL13 : 18.00 dB
G1 : 2.0000000 sec
CPDPRG2 : waltz16
PCPD2 : 100.00 usec
SFO2 : 400.126000 MHz
NUC2 : 13
PL2 : -3.00 dB
PL12 : 18.00 dB
P1 : 10.25 usec
DE : 0.00 usec
SFO1 : 100.6201214 MHz
NUC1 : 13C
PL1 : -1.00 dB

F2 Processing parameters
SI : 32768
SF : 100.6196232 MHz
WDW : EM
SSB : 0
LB : 1.00 Hz
GB : 0
PC : 1.48

90 MHz plot parameters
CX : 20.00 cm
CP : 1.00 000 usec
F1 : 14080.75 MHz
F2 : 100.000 MHz
F3 : 10061.26 MHz
PUNCH : 2.000000 usec
MUCH : 70.77565 MHz/cm
    
```

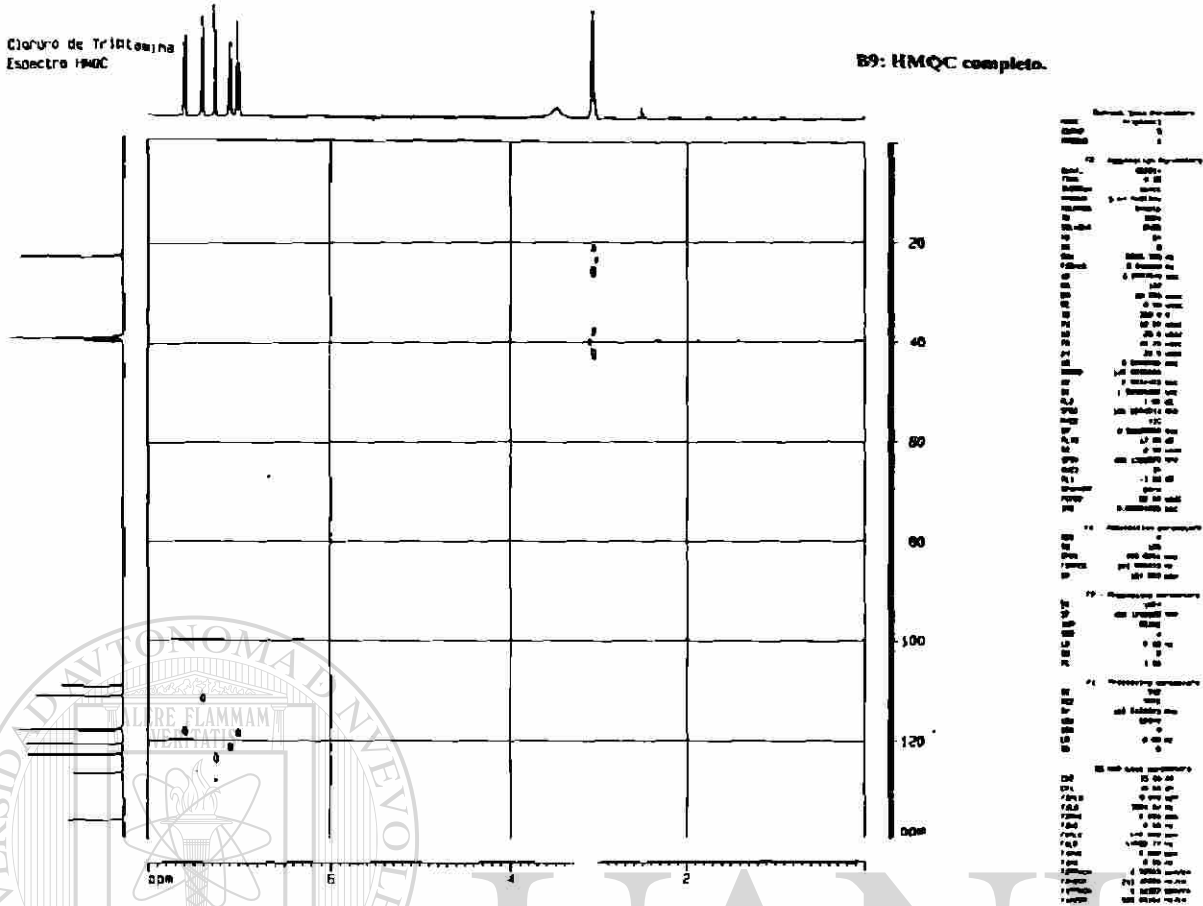
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



UANL

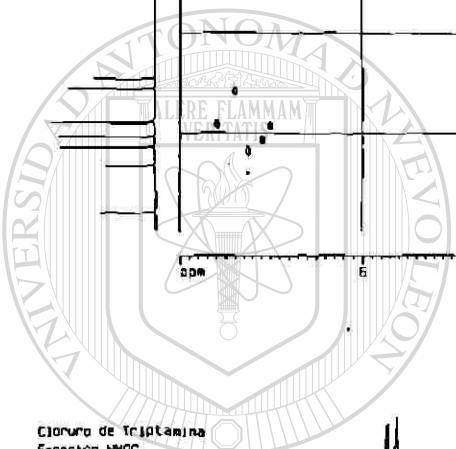
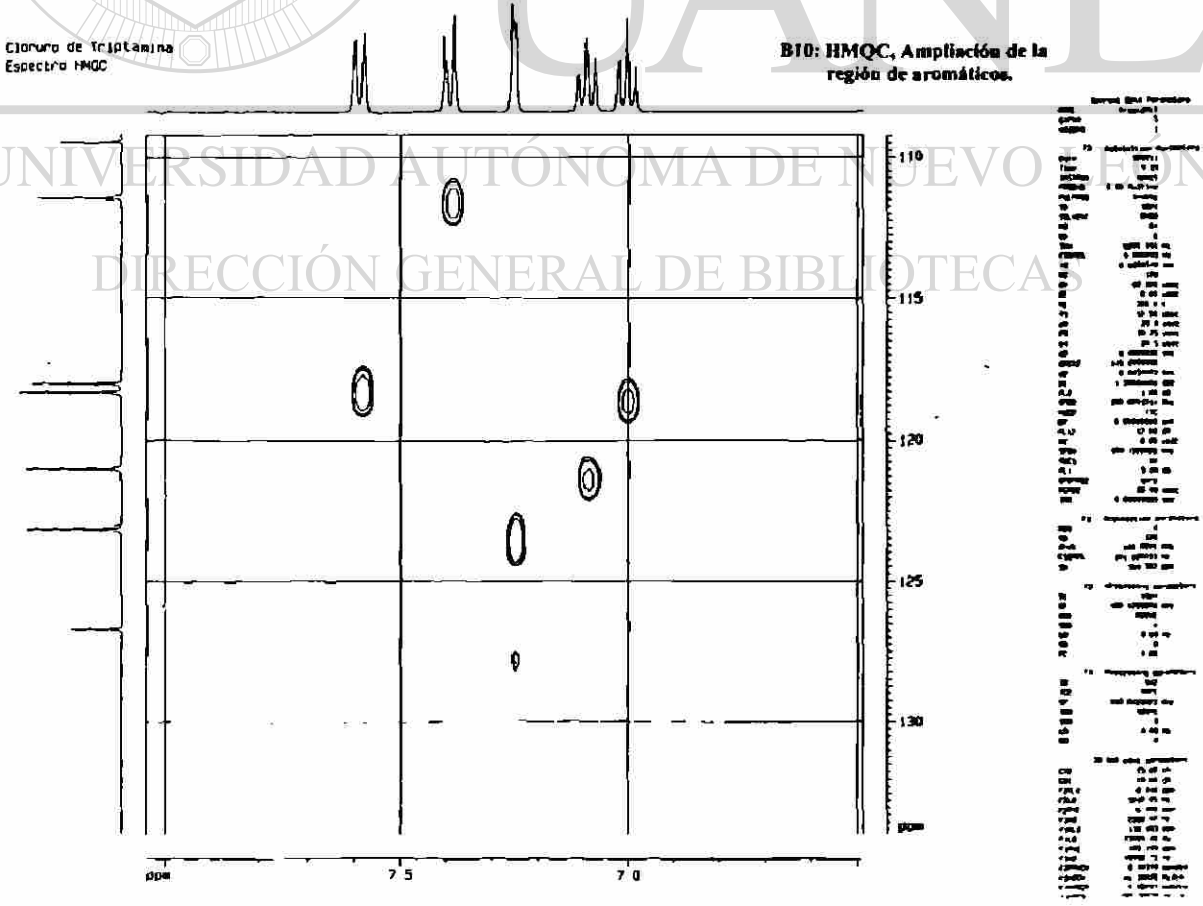
Cloruro de Triptamina
Espectro HMOC

B9: HMOC completo.



Cloruro de Triptamina
Espectro HMOC

B10: HMOC, Ampliación de la
región de aromáticos.



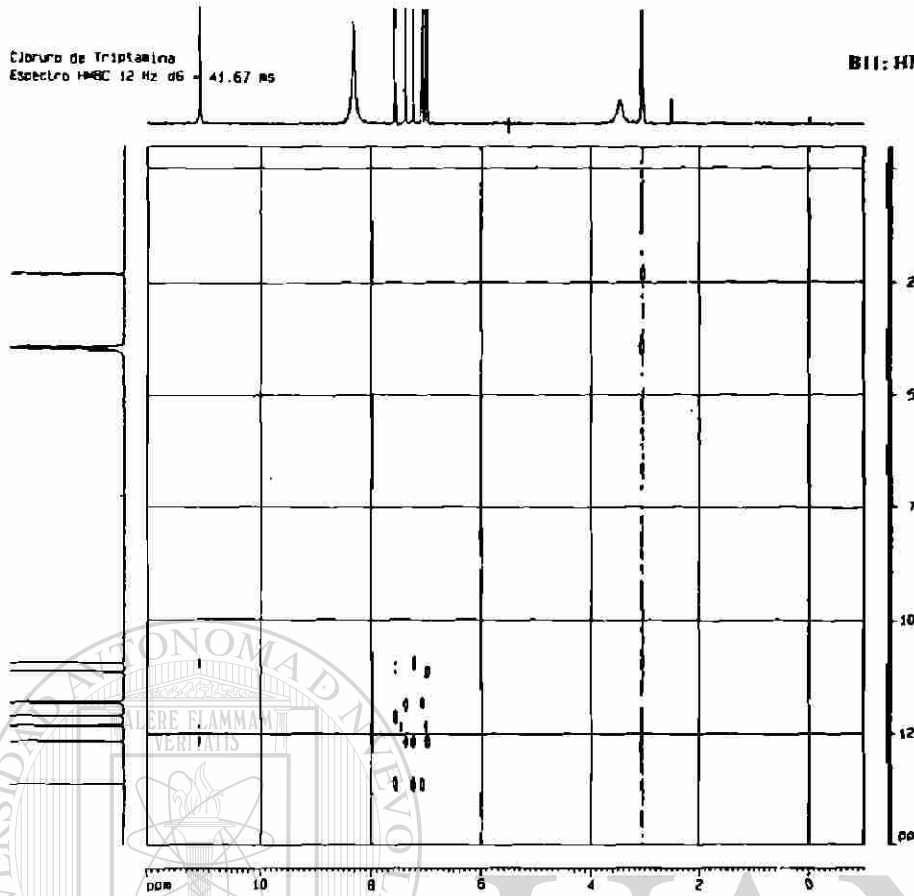
UNANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



Cloruro de Triptamina
Espectro HMBC 12 Hz d6 - 41.67 ms

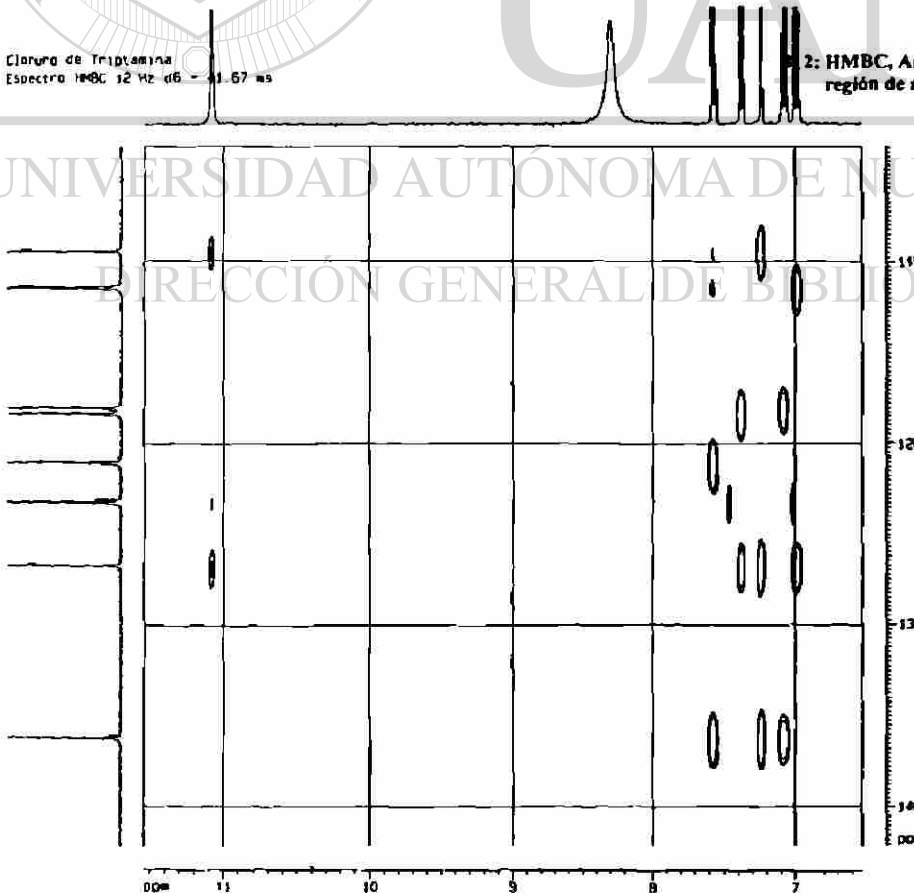
B11: HMBC completo.



Channel Name	Frequency	Phase	Amplitude	Offset
13C	125.76	0	1.00	0
1H	500.13	0	1.00	0

Cloruro de Triptamina
Espectro HMBC 12 Hz d6 - 41.67 ms

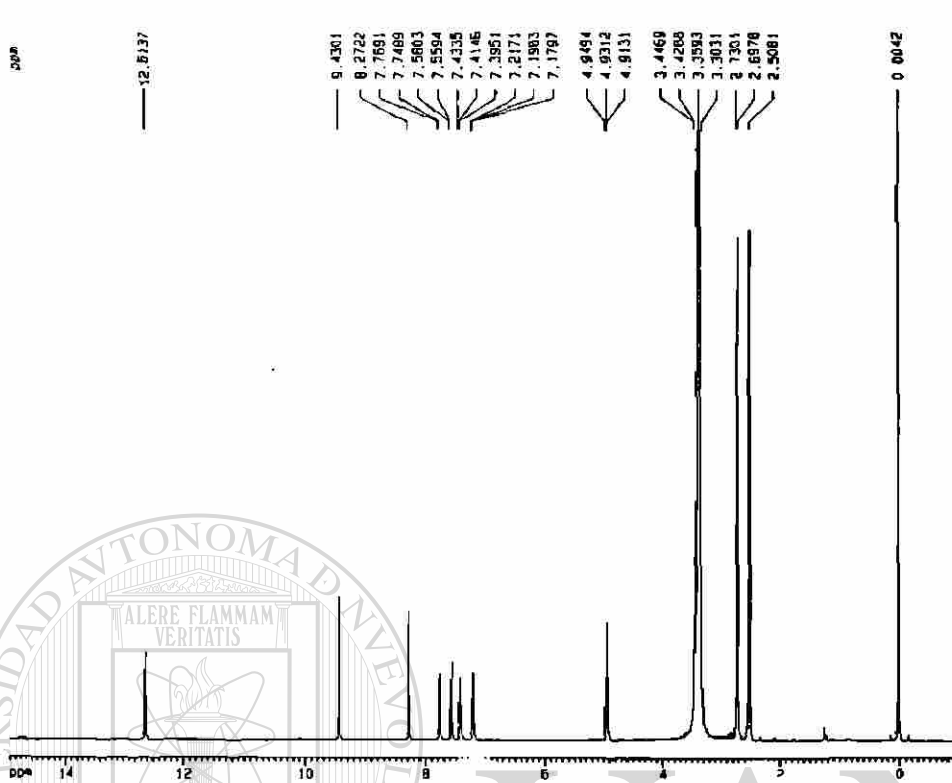
2: HMBC, Ampliación de la región de aromáticos



Channel Name	Frequency	Phase	Amplitude	Offset
13C	125.76	0	1.00	0
1H	500.13	0	1.00	0

C) Indoloquinazolinio
en 1H

B13: ¹H-RMN, Espectro completa.



Current Data Parameters
NAME C11000
EXPNO 1
PROCNO 1

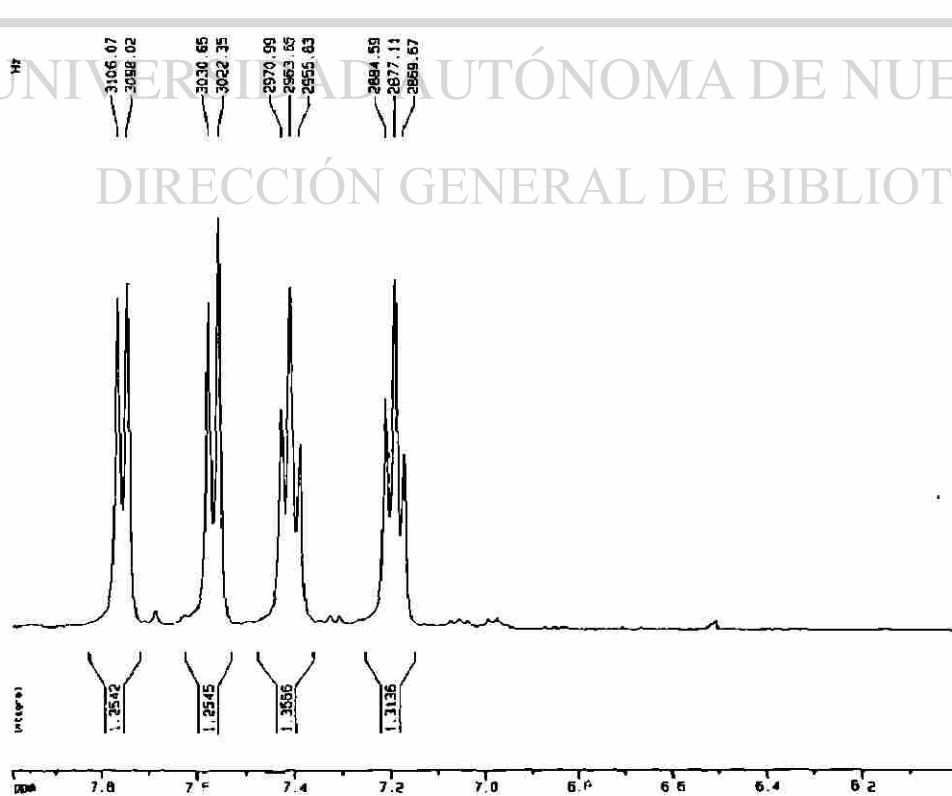
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 080521
Time 10 52
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Multinu
PULPROG zg
TD 32768
SOLVENT DMSO
NS 16
DS 2
SWH 8410.256 Hz
FIDRES 0.185625 Hz
AQ 2.3050940 sec
RG 256
OR 76.000 usec
DE 8.00 usec
TE 300.0 K
D1 1.00000000 sec
P1 12.50 usec
DE 8.00 usec
SFO1 400.1360000 MHz
NUC1 1H
PL1 -3.00 dB

F2 - Processing parameters
SI 16384
SF 400.1360000 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.30 Hz
GB 0
PC 1.00

1D non aqol parameters
CX 20.00 cm
FIP 15.010 ppm
F1 8005.64 Hz
F2P 1.010 ppm
F2 404.22 Hz
FRACH 0.00102 ppm/cm
HZCH 320.51285 Hz/cm

Indoloquinazolinio

B14: ¹H-RMN, Amplificación de la región de aromáticos.

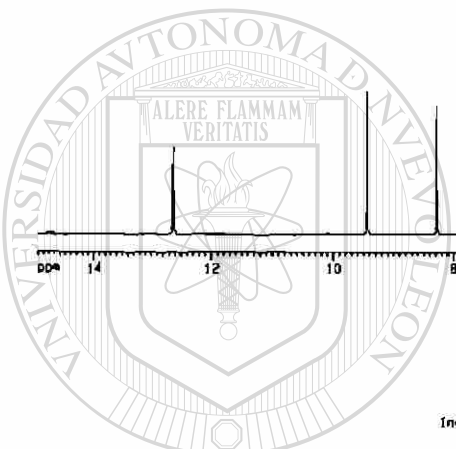


Current Data Parameters
NAME Indoloq
EXPNO 1
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 080226
Time 20 02
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Multinu
PULPROG zg
TD 32768
SOLVENT DMSO
NS 256
DS 4
SWH 8009.616 Hz
FIDRES 0.183389 Hz
AQ 2.7263477 sec
RG 181.3
OR 83.200 usec
DE 8.00 usec
TE 300.0 K
D1 1.00000000 sec
P1 12.50 usec
DE 8.00 usec
SFO1 400.1360000 MHz
NUC1 1H
PL1 -3.00 dB

F2 - Processing parameters
SI 6192
SF 400.1360000 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.30 Hz
GB 0
PC 1.00

1D non aqol parameters
CX 20.00 cm
FIP 0.000 ppm
F1 3291.64 Hz
F2P 0.000 ppm
F2 2460.78 Hz
FRACH 0.10000 ppm/cm
HZCH 40.01388 Hz/cm

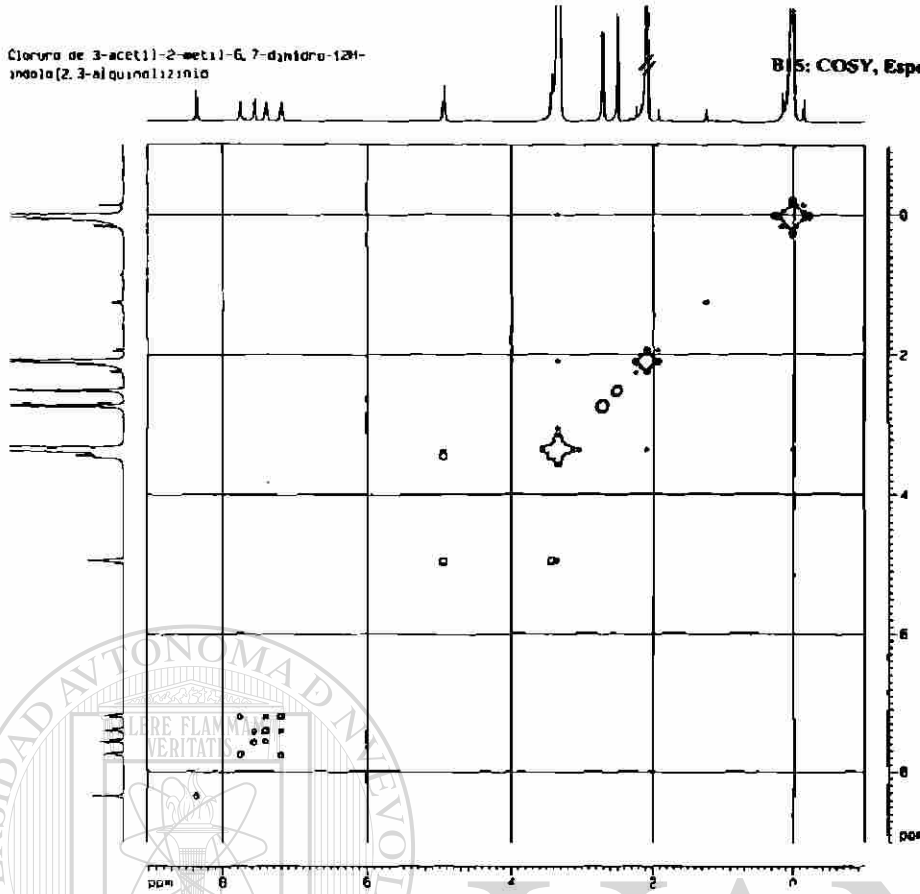


UNANIL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Cloruro de 3-acetil-2-metil-6,7-dihidro-12H-indolo[2,3-a]quinolinizina

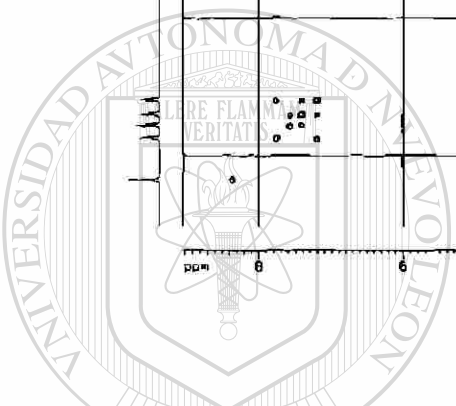
B15: COSY, Espectro completo.



```

Current Data Parameters
NAME: B15
EXPNO: 2
PROCNO: 1
F2 - Acquisition Parameters
Date_ :
Time: 20 04
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm QNP1H
PULPROG: zgpg30
AQ: 0.0800
RG: 655
SF: 400
WDW: EM
SSB: 0
LB: 3.00
GB: 0
PC: 1.00
SFO: 400.141800 MHz
NUC1: 13C
NUC2: 1H
PCPD1: 0.000000 sec
PCPD2: 0.000000 sec
F1 - Processing parameters
SI: 32768
SF: 400.141800 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 3.00 Hz
GB: 0
PC: 1.00
F2 - Processing parameters
SI: 32768
SF: 400.141800 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 3.00 Hz
GB: 0
PC: 1.00
2D 2D data parameters
SI: 32768
SF: 400.141800 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 3.00 Hz
GB: 0
PC: 1.00

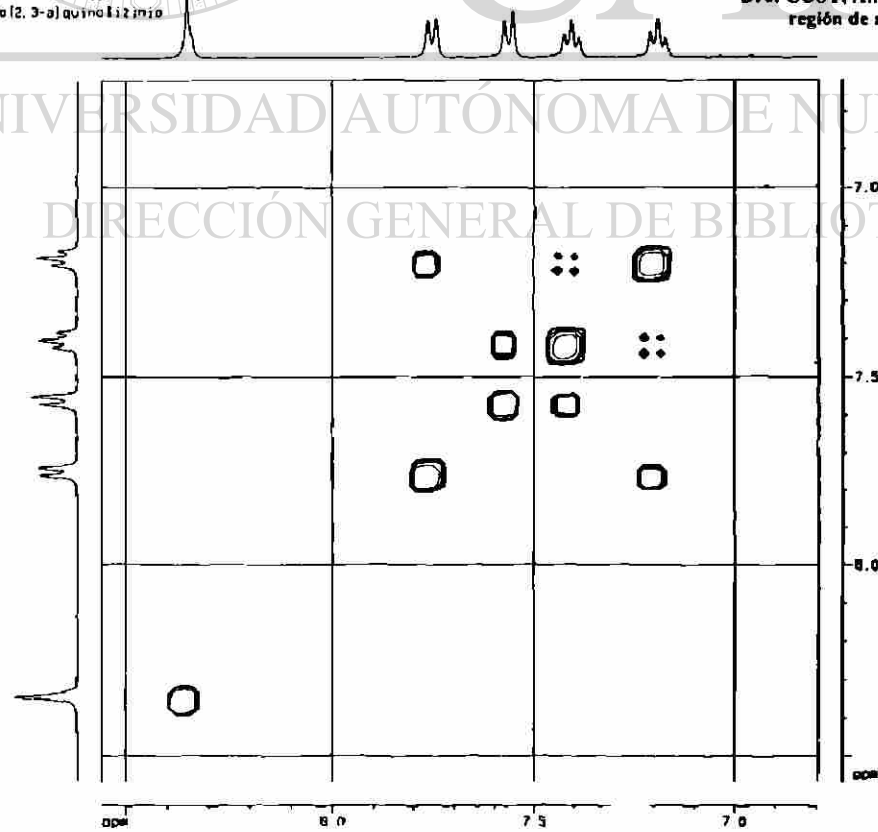
```



UANL

Cloruro de 3-acetil-2-metil-6,7-dihidro-12H-indolo[2,3-a]quinolinizina

B16: COSY, Ampliación de la región de aromáticos.



```

Current Data Parameters
NAME: B16
EXPNO: 2
PROCNO: 1
F2 - Acquisition Parameters
Date_ :
Time: 20 04
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm QNP1H
PULPROG: zgpg30
AQ: 0.0800
RG: 655
SF: 400
WDW: EM
SSB: 0
LB: 3.00
GB: 0
PC: 1.00
SFO: 400.141800 MHz
NUC1: 13C
NUC2: 1H
PCPD1: 0.000000 sec
PCPD2: 0.000000 sec
F1 - Processing parameters
SI: 32768
SF: 400.141800 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 3.00 Hz
GB: 0
PC: 1.00
F2 - Processing parameters
SI: 32768
SF: 400.141800 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 3.00 Hz
GB: 0
PC: 1.00
2D 2D data parameters
SI: 32768
SF: 400.141800 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 3.00 Hz
GB: 0
PC: 1.00

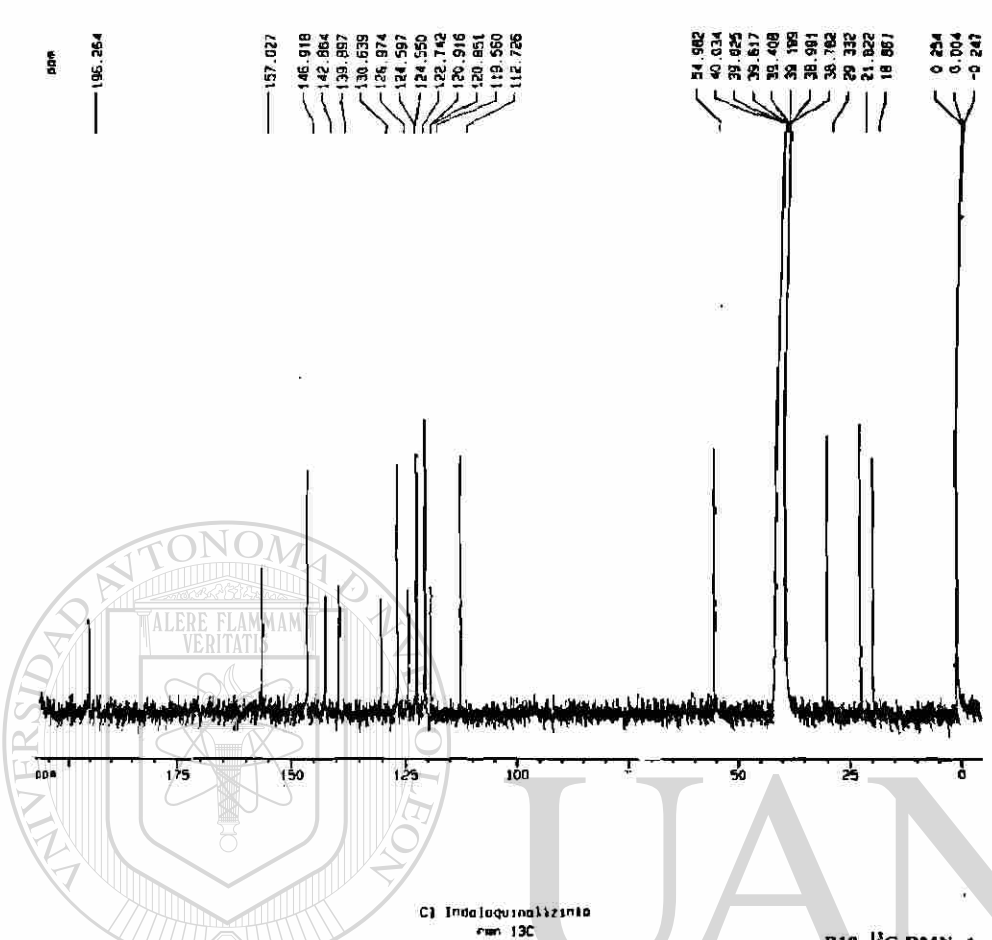
```

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

C) Indaloquinazolinato
en 13C

B17: ¹³C-RMN, Espectro completo.



Current Data Parameters
NAME Exp-1C
EXPNO 3
PROCNO 1

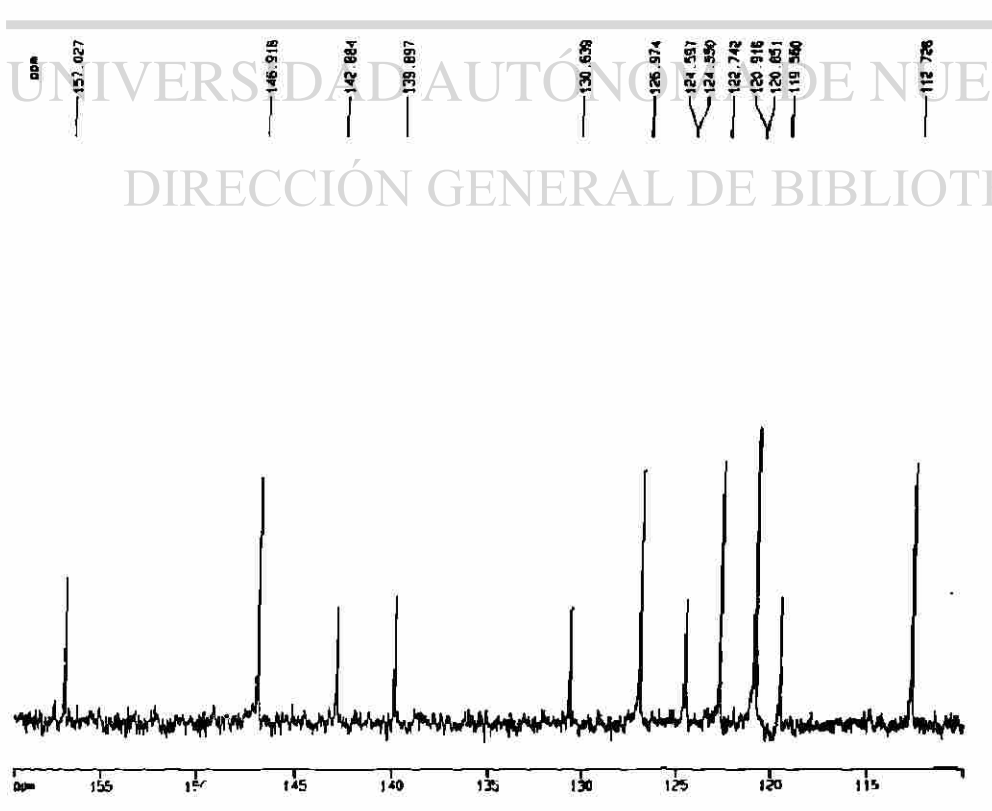
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 08/25/09
Time 11:49
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm HLL1H1
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 41280
DS 8
SWH 21551.725 Hz
FIDRES 0.320853 Hz
AQ 1.5204957 sec
RG 32768
DB 23.200 umsec
DE 0.00 umsec
TE 300.0 K
D11 0.0300000 sec
d12 0.0000700 sec
PL13 15.00 dB
D1 2.0000000 sec
CPRPROG waltz16
PCPD2 185.00 umsec
SF02 400.1300000 MHz
NUC2 13C
PL2 -3.00 dB
PL12 18.00 dB
P1 10.25 umsec
DE 0.00 umsec
SFO1 100.6270418 MHz
NUC1 13C
PC 1.00 dB

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 400.1300000 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 3.00 Hz
GB 0
PC 1.00

10 MHz plot parameters
CX 20.00 cm
FAP 200.000 MHz
FB 21080.05 Hz
FOP 0.002 ppm
FZ 463.05 Hz
PRDC 10.71624 MHz/Hz
APDC 1077.58716 MHz/Hz

C) Indaloquinazolinato
en 13C

B18: ¹³C-RMN, Ampliación.



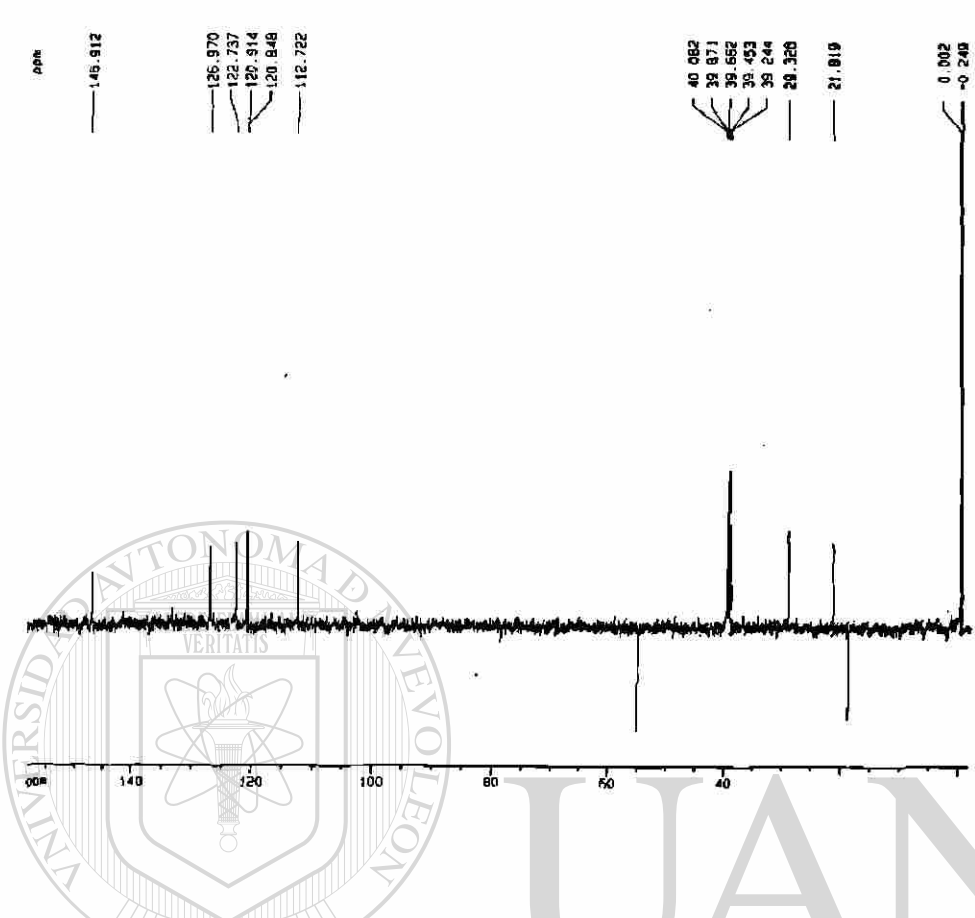
Current Data Parameters
NAME Exp-1C
EXPNO 3
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 08/25/09
Time 11:49
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm HLL1H1
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 41280
DS 8
SWH 21551.725 Hz
FIDRES 0.320853 Hz
AQ 1.5204957 sec
RG 32768
DB 23.200 umsec
DE 0.00 umsec
TE 300.0 K
D11 0.0300000 sec
d12 0.0000700 sec
PL13 15.00 dB
D1 2.0000000 sec
CPRPROG waltz16
PCPD2 185.00 umsec
SF02 400.1300000 MHz
NUC2 13C
PL2 -3.00 dB
PL12 18.00 dB
P1 10.25 umsec
DE 0.00 umsec
SFO1 100.6270418 MHz
NUC1 13C
PC 1.00 dB

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 400.1300000 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 3.00 Hz
GB 0
PC 1.00

10 MHz plot parameters
CX 20.00 cm
FAP 200.000 MHz
FB 21080.05 Hz
FOP 0.002 ppm
FZ 463.05 Hz
PRDC 10.71624 MHz/Hz
APDC 1077.58716 MHz/Hz

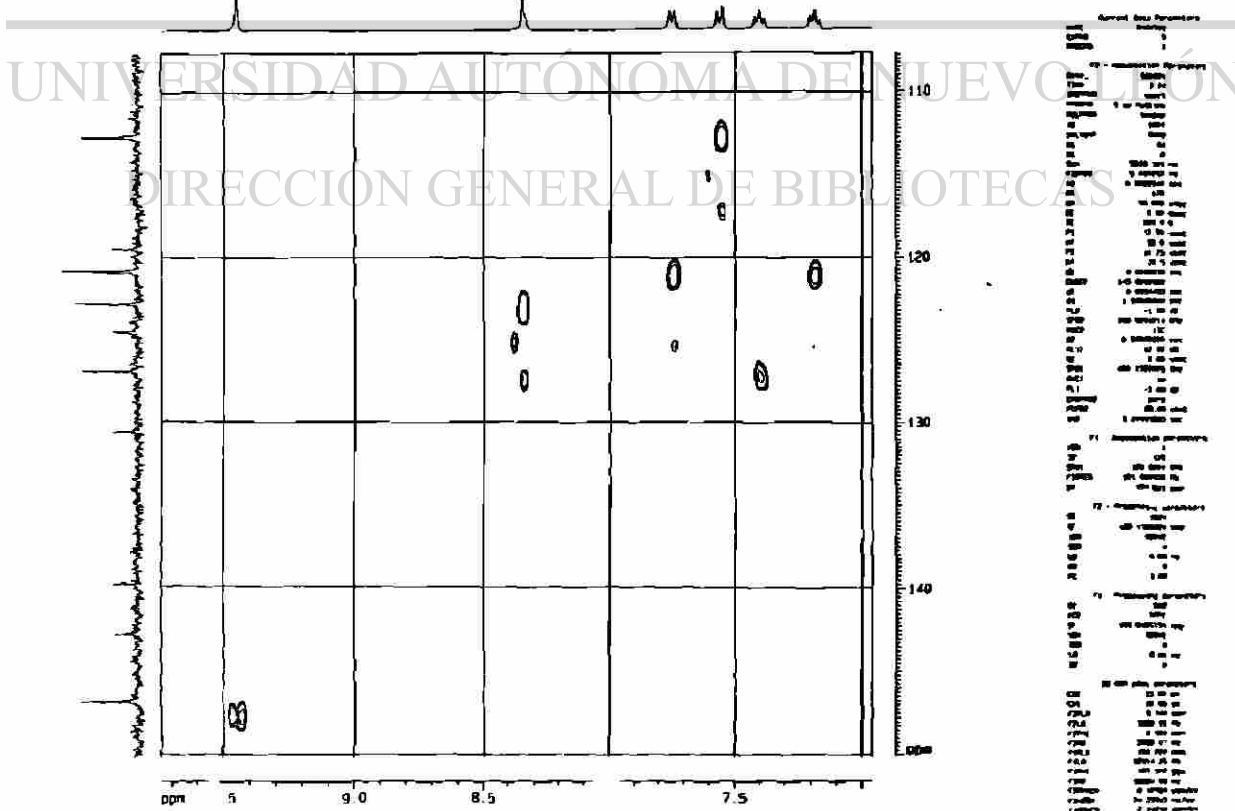
ppm



Current Data Parameters
NAME: Cloruro de 3-acetil-2-metil-6,7-dihidro-12H-indolo[2,3-b]quinolizina
EXPNO: 4
PROCNO: 1
F2 - Acquisition Parameters
Date_ : 080512
Time : 14.43
INSTRUM : spect
PROBHD : 5 mm HLLHNP
PULPROG : zgpg30
TD : 32768
SOLVENT : DMSO
NS : 27200
DS : 4
SWH : 16191.228 Hz
FIDRES : 0.492612 Hz
AQ : 1.622912 Sec
RG : 32768
XG : 38.880 mmol
YG : 8.880 mmol
ZG : 8.880 mmol
TE : 300.2 K
F4 : 10.75 mmol
SFO : 20.5 mmol
ZFO : 12.56 mmol
AQ2 : 25.0 mmol
AQ3 : 1.05 0000000
AQ4 : 0.003485 Sec
AQ5 : 0.0000200 Sec
AQ6 : 0.0000131 Sec
AQ7 : 2.0000000 Sec
AQ8 : -3.00 00 00
AQ9 : 0.00 131000000 Hz
AQ10 : 30
AQ11 : 100.6267277 Hz
AQ12 : 13C
AQ13 : 1.00 00 00
AQ14 : 16.00 00 00
AQ15 : 6.00 00 00
AQ16 : 11.17 16
AQ17 : 105.00 00 00
F2 - Processing parameters
SI : 32768
SF : 100.6267277 MHz
WDW : EM
SSB : 0
GB : 0
PC : 1.00
F2 - 13C NMR parameters
C1 : 20.00 cm
C2 : 130.947 cm
C3 : 10000.10 Hz
C4 : -1.000 mmol
C5 : 100.13 Hz
C6 : 0.1412 mmol/mol
C7 : 800.00150 Hz

Cloruro de 3-acetil-2-metil-6,7-dihidro-12H-indolo[2,3-b]quinolizina

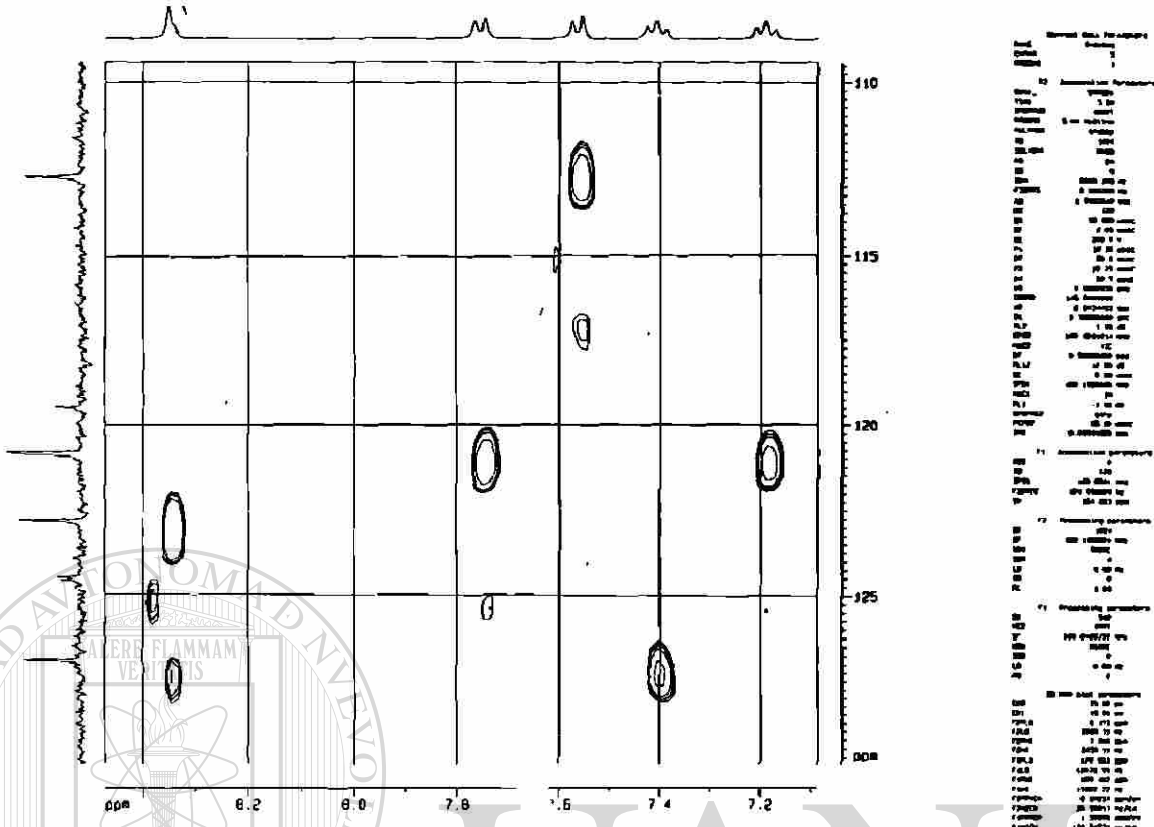
B20: HMBC.



Current Data Parameters
NAME: Cloruro de 3-acetil-2-metil-6,7-dihidro-12H-indolo[2,3-b]quinolizina
EXPNO: 4
PROCNO: 1
F2 - Acquisition Parameters
Date_ : 080512
Time : 14.43
INSTRUM : spect
PROBHD : 5 mm HLLHNP
PULPROG : zgpg30
TD : 32768
SOLVENT : DMSO
NS : 27200
DS : 4
SWH : 16191.228 Hz
FIDRES : 0.492612 Hz
AQ : 1.622912 Sec
RG : 32768
XG : 38.880 mmol
YG : 8.880 mmol
ZG : 8.880 mmol
TE : 300.2 K
F4 : 10.75 mmol
SFO : 20.5 mmol
ZFO : 12.56 mmol
AQ2 : 25.0 mmol
AQ3 : 1.05 0000000
AQ4 : 0.003485 Sec
AQ5 : 0.0000200 Sec
AQ6 : 0.0000131 Sec
AQ7 : 2.0000000 Sec
AQ8 : -3.00 00 00
AQ9 : 0.00 131000000 Hz
AQ10 : 30
AQ11 : 100.6267277 Hz
AQ12 : 13C
AQ13 : 1.00 00 00
AQ14 : 16.00 00 00
AQ15 : 6.00 00 00
AQ16 : 11.17 16
AQ17 : 105.00 00 00
F2 - Processing parameters
SI : 32768
SF : 100.6267277 MHz
WDW : EM
SSB : 0
GB : 0
PC : 1.00
F2 - 13C NMR parameters
C1 : 20.00 cm
C2 : 130.947 cm
C3 : 10000.10 Hz
C4 : -1.000 mmol
C5 : 100.13 Hz
C6 : 0.1412 mmol/mol
C7 : 800.00150 Hz

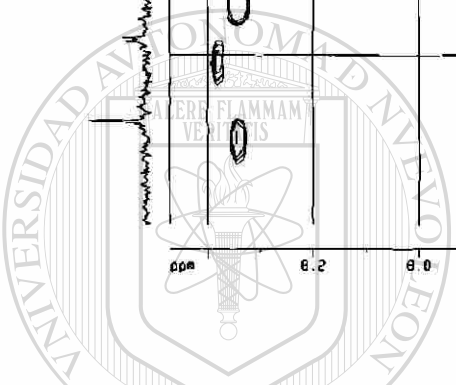
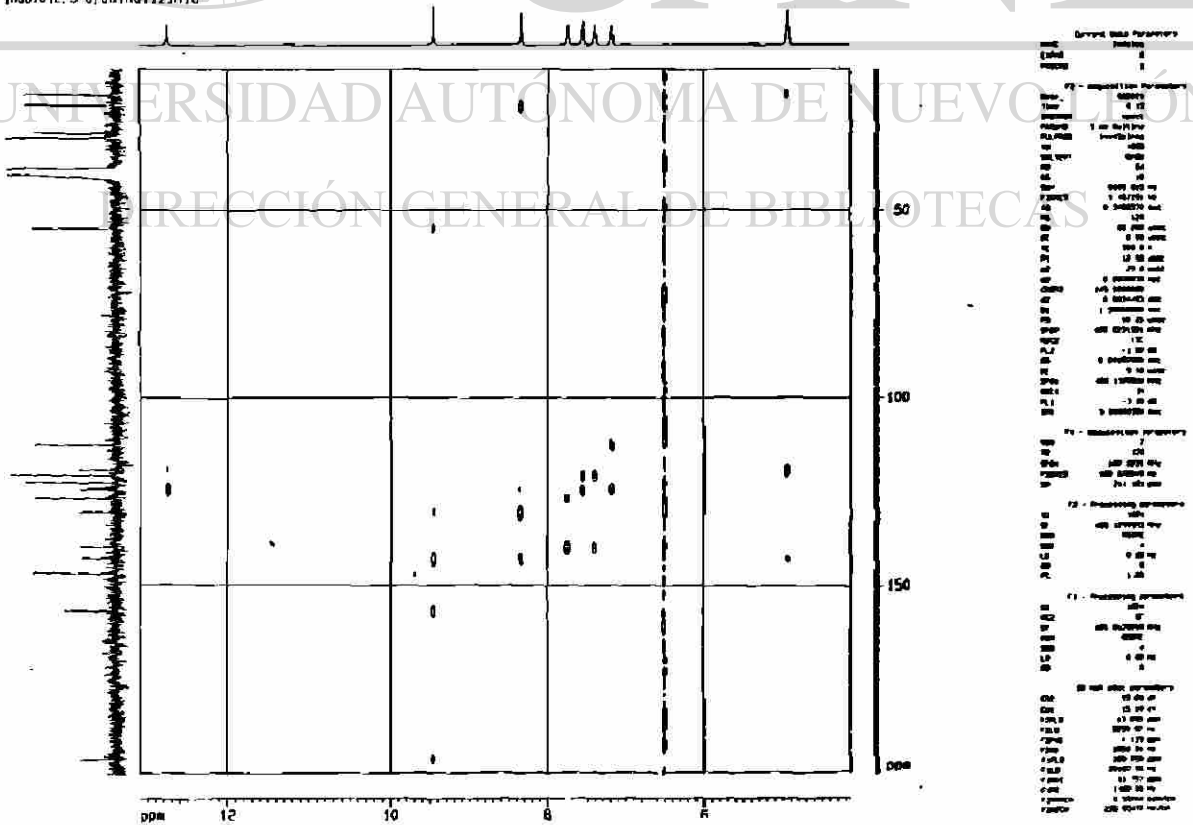
Cloruro de 3-acetil-2-metil-6,7-dihidro-12H-
indolo[2,3-a]quinolizina

B21: HMBC, Ampliación.



Cloruro de 3-acetil-2-metil-6,7-dihidro-12H-
indolo[2,3-a]quinolizina

B22: HMBC.

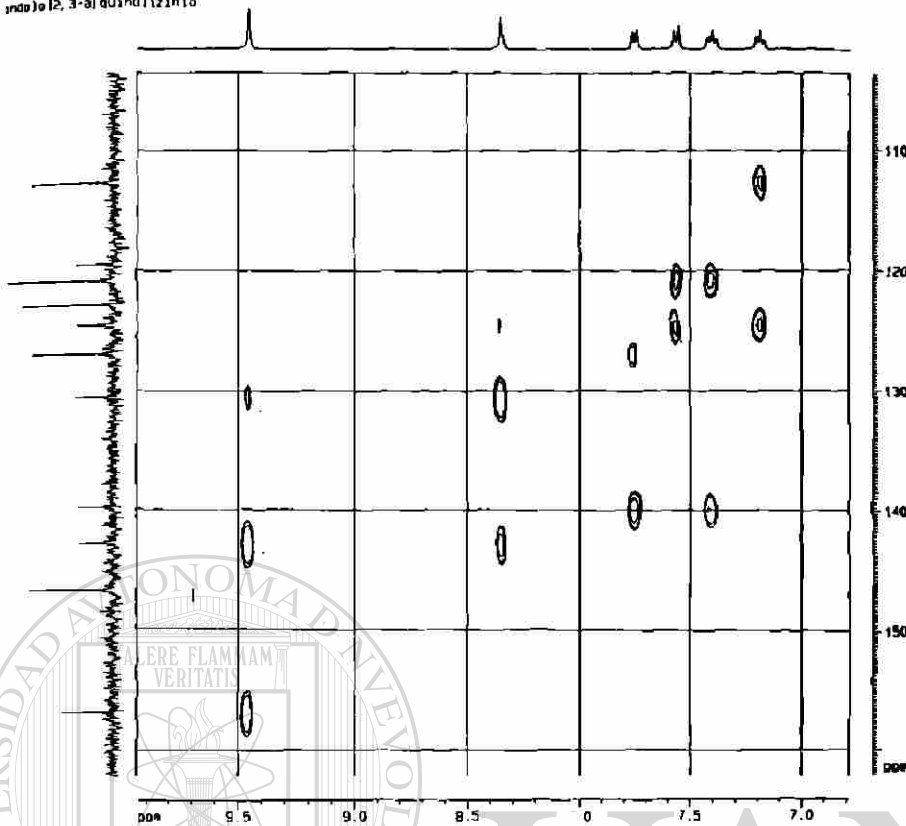


U A N L

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Cloruro de 3-acetil-2-metil-5,7-dihidro-12H-
indolo[2,3-a]quinolinizina

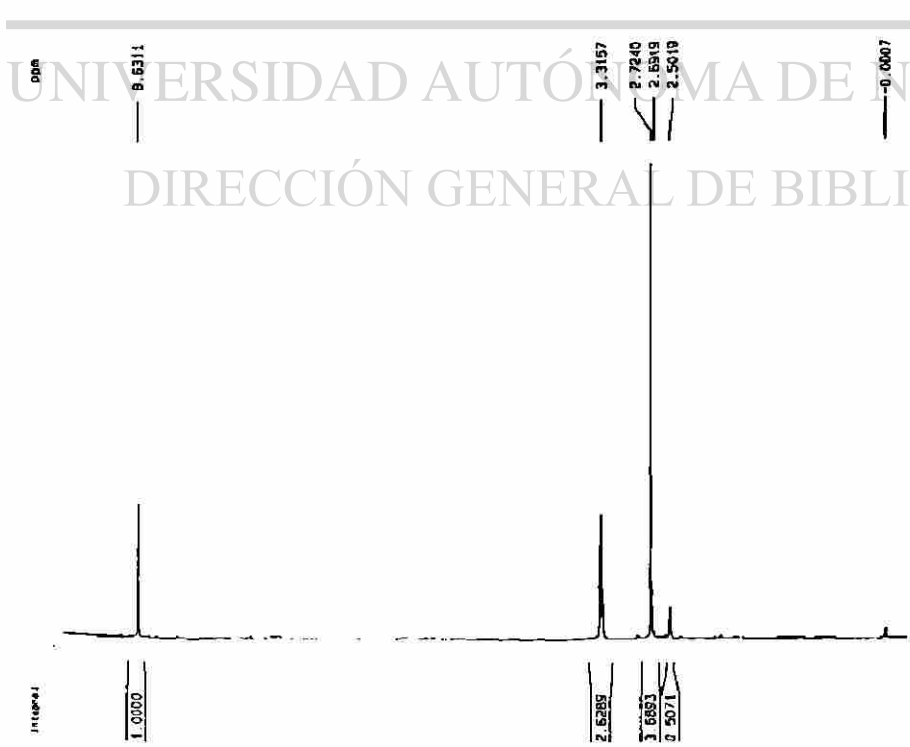
B23: HMBC, Ampliación.



Section	Parameter	Value	
F2 - Acquisition Parameters	Date_	08-02	
	Time	17:12	
	INSTRUM	spect	
	PROBHD	5 mm Hurlow	
	PULPROG	zgpg30	
	TD	32768	
	SOLVENT	DMSO	
	NS	128	
	DS	4	
	SWH	4270.000 Hz	
F2 - Processing parameters	SI	8192	
	SF	400.130028 MHz	
	WDW	EM	
	SSB	0	
	LB	0.30 Hz	
	GB	0	
	PC	0.10	
	F0 - Acquisition Parameters	SI	32768
		SF	100.628120 MHz
		WDW	EM
SSB		0	
LB		0.30 Hz	
GB		0	
PC		0.10	
F1 - Acquisition Parameters		SI	32768
		SF	100.628120 MHz
		WDW	EM
	SSB	0	
	LB	0.30 Hz	
	GB	0	
	PC	0.10	

EVP-M4A

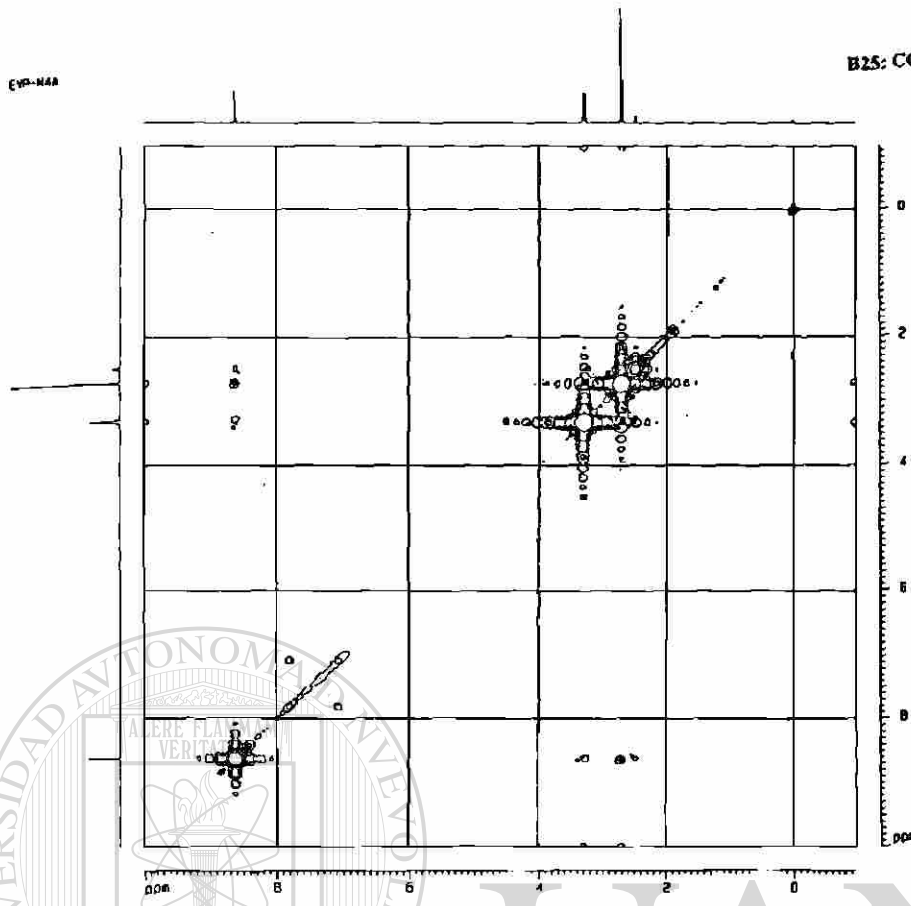
B24: ¹H-RMN, Espectro completo.



Section	Parameter	Value	
Current Data Parameters	NAME	EVM4A	
	EXPNO	1	
	PROCNO	1	
	F2 - Acquisition Parameters	Date_	08-02
	Time	17:12	
	INSTRUM	spect	
	PROBHD	5 mm Hurlow	
	PULPROG	zgpg30	
	TD	32768	
	SOLVENT	DMSO	
F2 - Processing parameters	SI	8192	
	SF	400.130028 MHz	
	WDW	EM	
	SSB	0	
	LB	0.30 Hz	
	GB	0	
	PC	0.10	
	F0 - Acquisition Parameters	SI	32768
		SF	100.628120 MHz
		WDW	EM
SSB		0	
LB		0.30 Hz	
GB		0	
PC		0.10	
F1 - Acquisition Parameters		SI	32768
		SF	100.628120 MHz
		WDW	EM
	SSB	0	
	LB	0.30 Hz	
	GB	0	
	PC	0.10	

EVP-M4A

B25: COSY completo.



Current Data Parameters

NAME	EVP-M4A
EXPNO	3
PROCNO	1

F2 - Acquisition Parameters

Date_	200409
Time	8:30
INSTRUM	jeol-ecx
PROBHD	5 mm HX-1H
PULPROG	zgpg30
TD	65536
SOLVENT	DMSO
NS	8192
DS	8
SWH	71331.725 Hz
FIDRES	0.328653 Hz
AQ	1.5204902 sec
RG	32768
QR	23.000 sec
QE	0.05 sec
TE	300.2 K
Q1	0.0380000 sec
Q12	0.0002000 sec
PL13	18.00 dB
Q1	2.0000000 sec
CPDPRG2	hiltz18
PCPD2	180.00 sec
SFO2	400.118000 MHz
NUC2	1H
PL2	-3.00 dB
PL12	0.00 dB
P1	10.25 sec
DE	0.00 sec
SFO1	400.623418 MHz
NUC1	13C
PL1	-1.00 dB

F2 - Processing parameters

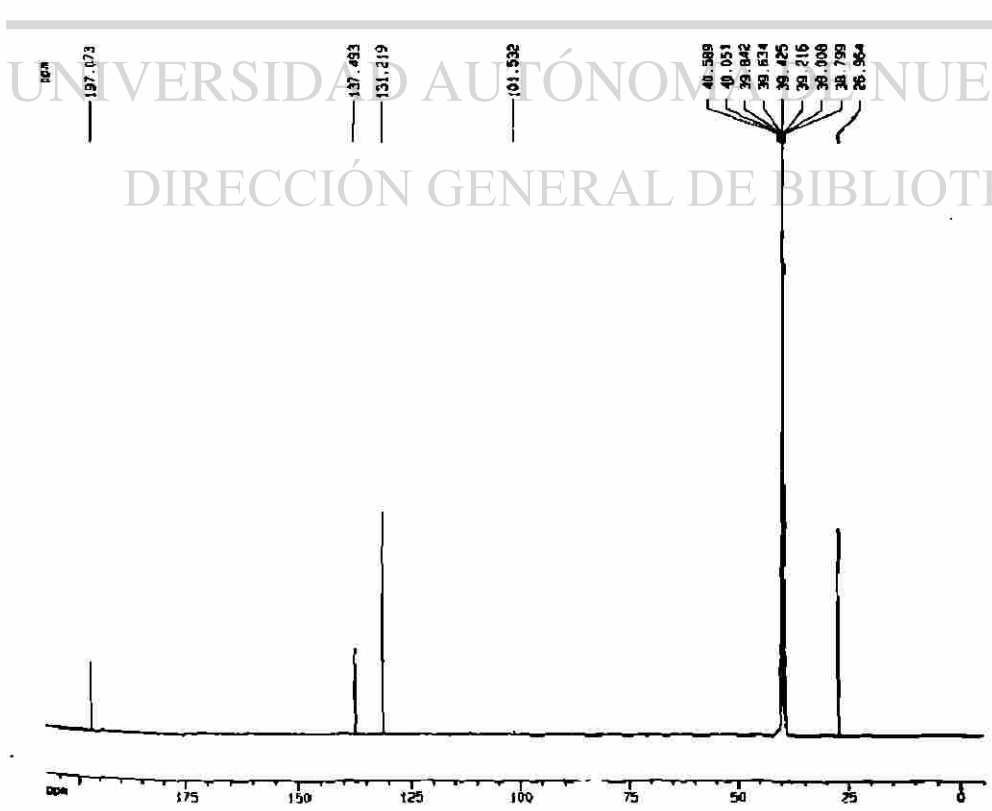
SI	32768
SF	400.6192000 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	1.00 Hz
GB	0
PC	1.00

acq par parameters

CH	15.00 sec
EXPT	25.00 sec
F1	214.26 MHz
F2	-5.000 MHz
F3	-583.00 MHz
NUC1	13C 75000 MHz/CP
NUC2	1H 500.136 MHz/CP

EVP-M4A

B26: ¹³C-RMN, Espectro completo.



Current Data Parameters

NAME	EVP-M4A
EXPNO	3
PROCNO	1

F2 - Acquisition Parameters

Date_	200409
Time	8:30
INSTRUM	jeol-ecx
PROBHD	5 mm HX-1H
PULPROG	zgpg30
TD	65536
SOLVENT	DMSO
NS	8192
DS	8
SWH	71331.725 Hz
FIDRES	0.328653 Hz
AQ	1.5204902 sec
RG	32768
QR	23.000 sec
QE	0.05 sec
TE	300.2 K
Q1	0.0380000 sec
Q12	0.0002000 sec
PL13	18.00 dB
Q1	2.0000000 sec
CPDPRG2	hiltz18
PCPD2	180.00 sec
SFO2	400.118000 MHz
NUC2	1H
PL2	-3.00 dB
PL12	0.00 dB
P1	10.25 sec
DE	0.00 sec
SFO1	400.623418 MHz
NUC1	13C
PL1	-1.00 dB

F2 - Processing parameters

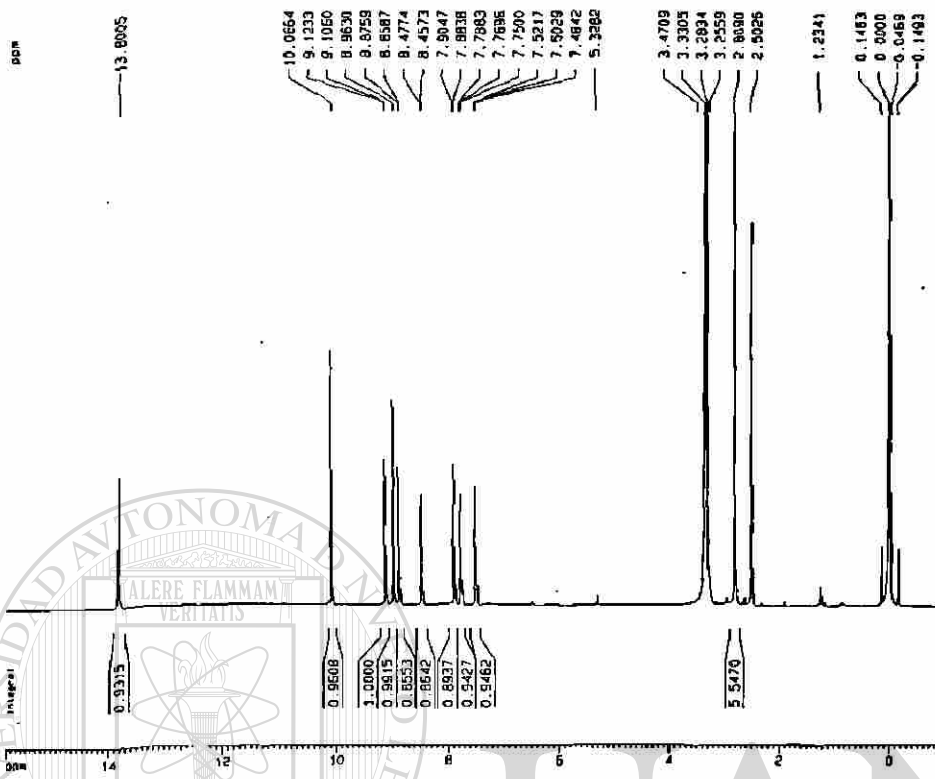
SI	32768
SF	400.6192000 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	1.00 Hz
GB	0
PC	1.00

acq par parameters

CH	15.00 sec
EXPT	25.00 sec
F1	214.26 MHz
F2	-5.000 MHz
F3	-583.00 MHz
NUC1	13C 75000 MHz/CP
NUC2	1H 500.136 MHz/CP

MST-2KM 3ra. Recristalizada
RMN 1H

B27: ¹H-RMN. Espectro completo.



Current Date Parameters
NAME MS120M
EXPNO 2
PROCNO 1

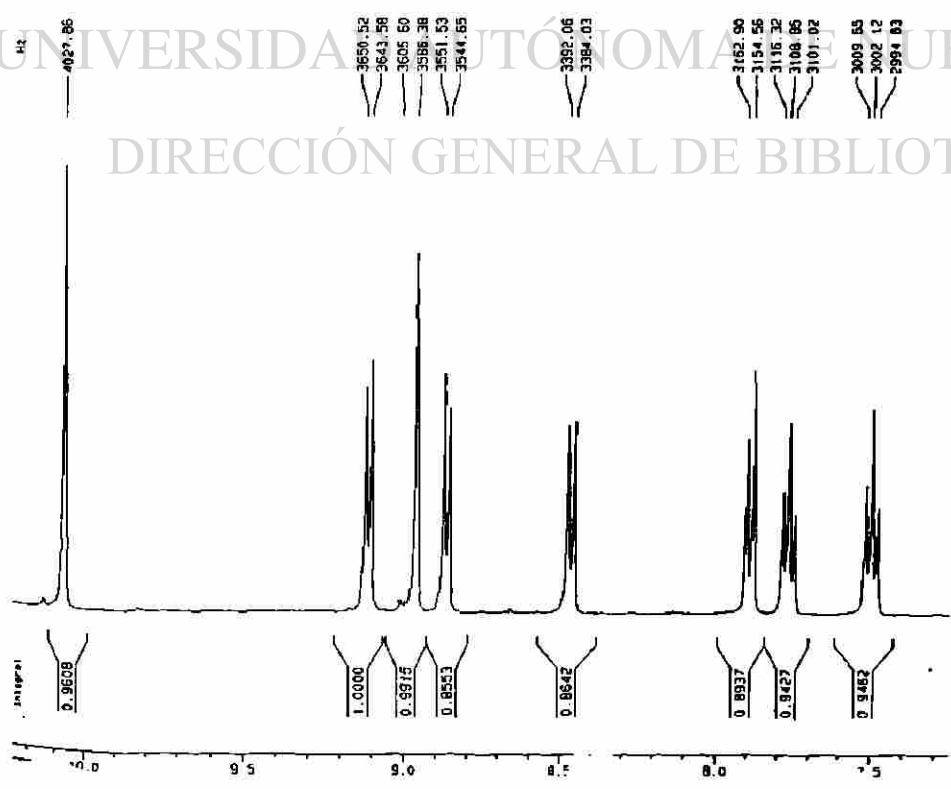
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 980522
Time 18 46
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Multinu
PULPROG zgpg30
TD 32768
SOLVENT DMSO
NS 64
DS 4
SSA 8012 828 Hz
FIDRES 0 244532 Hz
AQ 2 0447731 sec
RG 256
DR 62 400 usec
DE 8 00 usec
TE 300 0 K
D1 1 00000000 sec
P1 12 50 usec
DE 8 00 usec
SFO1 400 1324022 Hz
NUC1 1H
PL1 1 00 dB

F2 - Processing parameters
SI 16384
SF 400 1300023 Hz
WDW EM
SSB 0
LB 0 30 Hz
GB 0
PC 1 00

10 MHz plot parameters
CX 20 00 cm
F1P 16 013 ppm
F1 6407 15 Hz
F2P -1 000 ppm
F2 -400 13 Hz
PPH2 0 85064 ppm/c
NUC2 310 36818 Hz/c

MST-2KM 3ra. Recristalizada
RMN 1H

B28: ¹H-RMN, Amplificación.



Current Date Parameters
NAME MS120M
EXPNO 7
PROCNO 1

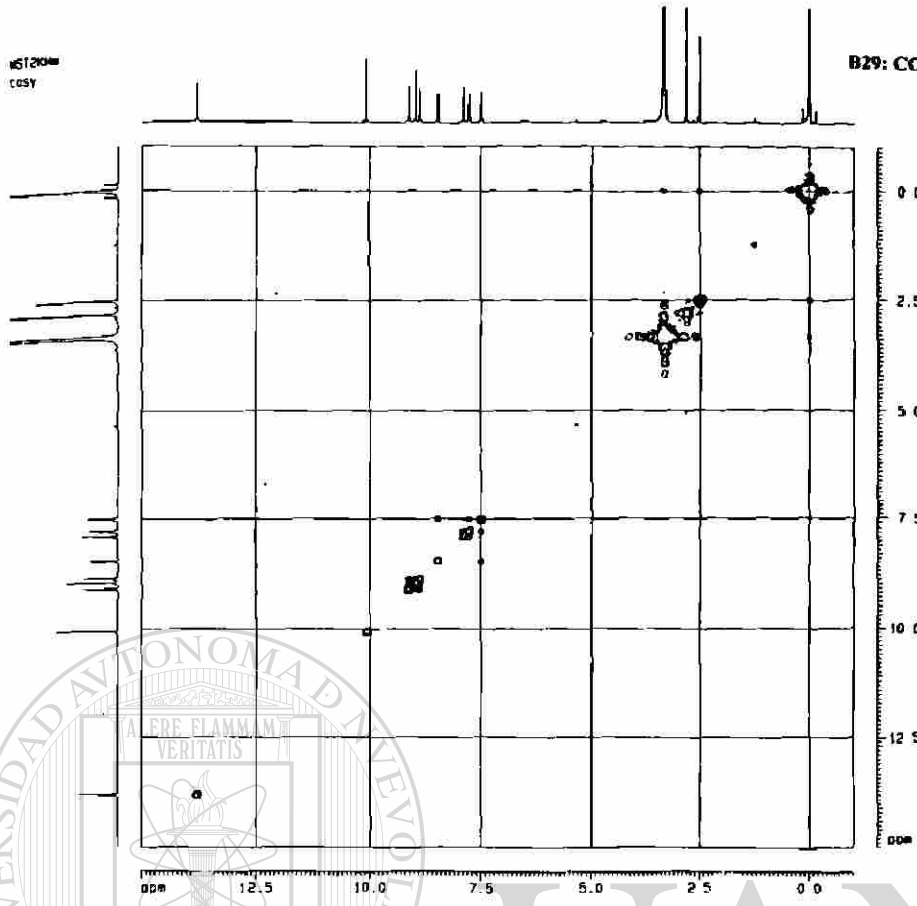
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 980522
Time 18 46
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Multinu
PULPROG zgpg30
TD 32768
SOLVENT DMSO
NS 64
DS 4
SSA 8012 828 Hz
FIDRES 0 244532 Hz
AQ 2 0447731 sec
RG 256
DR 62 400 usec
DE 8 00 usec
TE 300 0 K
D1 1 00000000 sec
P1 12 50 usec
DE 8 00 usec
SFO1 400 1324022 Hz
NUC1 1H
PL1 -3 00 dB

F2 - Processing parameters
SI 16384
SF 400 1300023 Hz
WDW EM
SSB 0
LB 0 30 Hz
GB 0
PC 1 00

10 MHz plot parameters
CX 20 00 cm
F1P 16 274 ppm
F1 4943 04 Hz
F2P 7 254 ppm
F2 2901 63 Hz
PPH2 0 15012 ppm/c
NUC2 80 06699 Hz/c

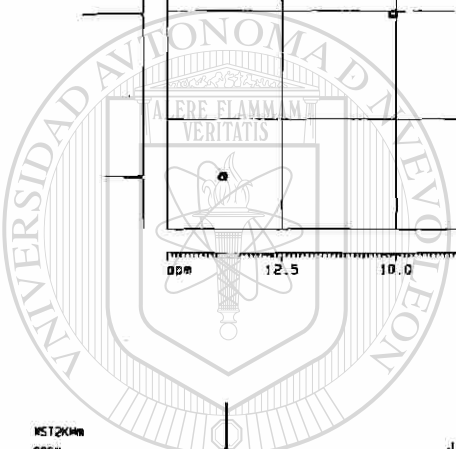
KST200
COSY

B29: COSY completo.



Current Data Parameters

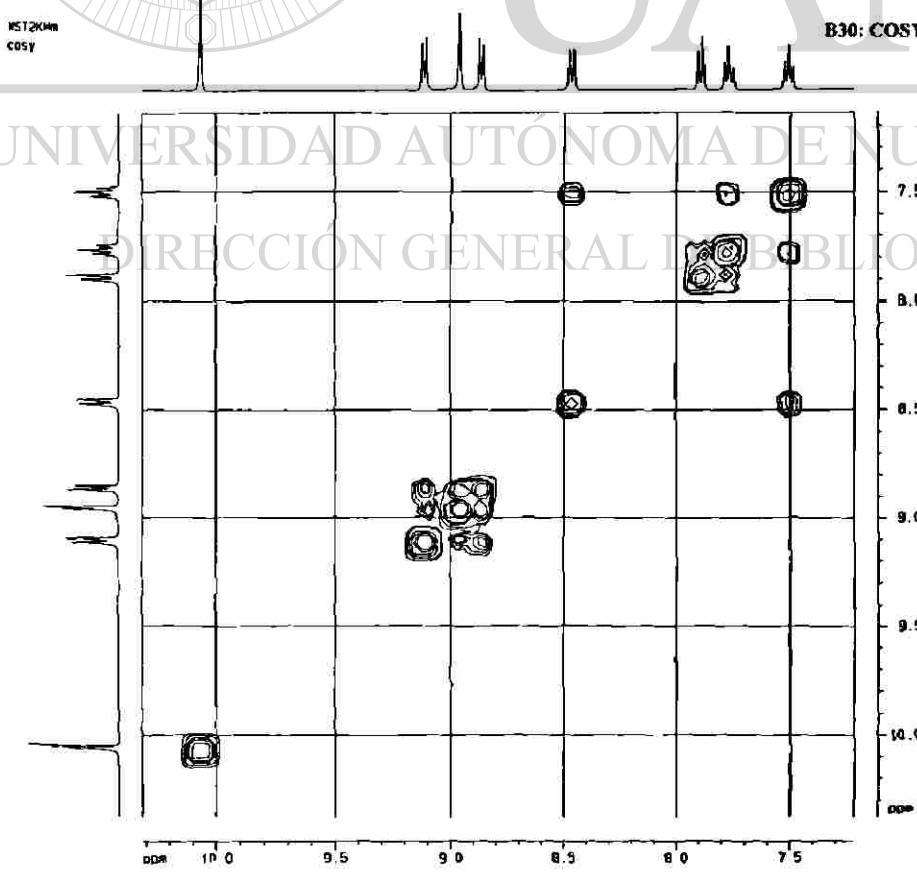
NAME	1
EXPNO	1
PROCNO	1
PROCAM	1
PROCF1	1
PROCF2	1
PROCF3	1
PROCF4	1
PROCF5	1
PROCF6	1
PROCF7	1
PROCF8	1
PROCF9	1
PROCF10	1
PROCF11	1
PROCF12	1
PROCF13	1
PROCF14	1
PROCF15	1
PROCF16	1
PROCF17	1
PROCF18	1
PROCF19	1
PROCF20	1
PROCF21	1
PROCF22	1
PROCF23	1
PROCF24	1
PROCF25	1
PROCF26	1
PROCF27	1
PROCF28	1
PROCF29	1
PROCF30	1
PROCF31	1
PROCF32	1
PROCF33	1
PROCF34	1
PROCF35	1
PROCF36	1
PROCF37	1
PROCF38	1
PROCF39	1
PROCF40	1
PROCF41	1
PROCF42	1
PROCF43	1
PROCF44	1
PROCF45	1
PROCF46	1
PROCF47	1
PROCF48	1
PROCF49	1
PROCF50	1
PROCF51	1
PROCF52	1
PROCF53	1
PROCF54	1
PROCF55	1
PROCF56	1
PROCF57	1
PROCF58	1
PROCF59	1
PROCF60	1
PROCF61	1
PROCF62	1
PROCF63	1
PROCF64	1
PROCF65	1
PROCF66	1
PROCF67	1
PROCF68	1
PROCF69	1
PROCF70	1
PROCF71	1
PROCF72	1
PROCF73	1
PROCF74	1
PROCF75	1
PROCF76	1
PROCF77	1
PROCF78	1
PROCF79	1
PROCF80	1
PROCF81	1
PROCF82	1
PROCF83	1
PROCF84	1
PROCF85	1
PROCF86	1
PROCF87	1
PROCF88	1
PROCF89	1
PROCF90	1
PROCF91	1
PROCF92	1
PROCF93	1
PROCF94	1
PROCF95	1
PROCF96	1
PROCF97	1
PROCF98	1
PROCF99	1
PROCF100	1



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

KST2000
COSY

B30: COSY, Ampliación.



Current Data Parameters

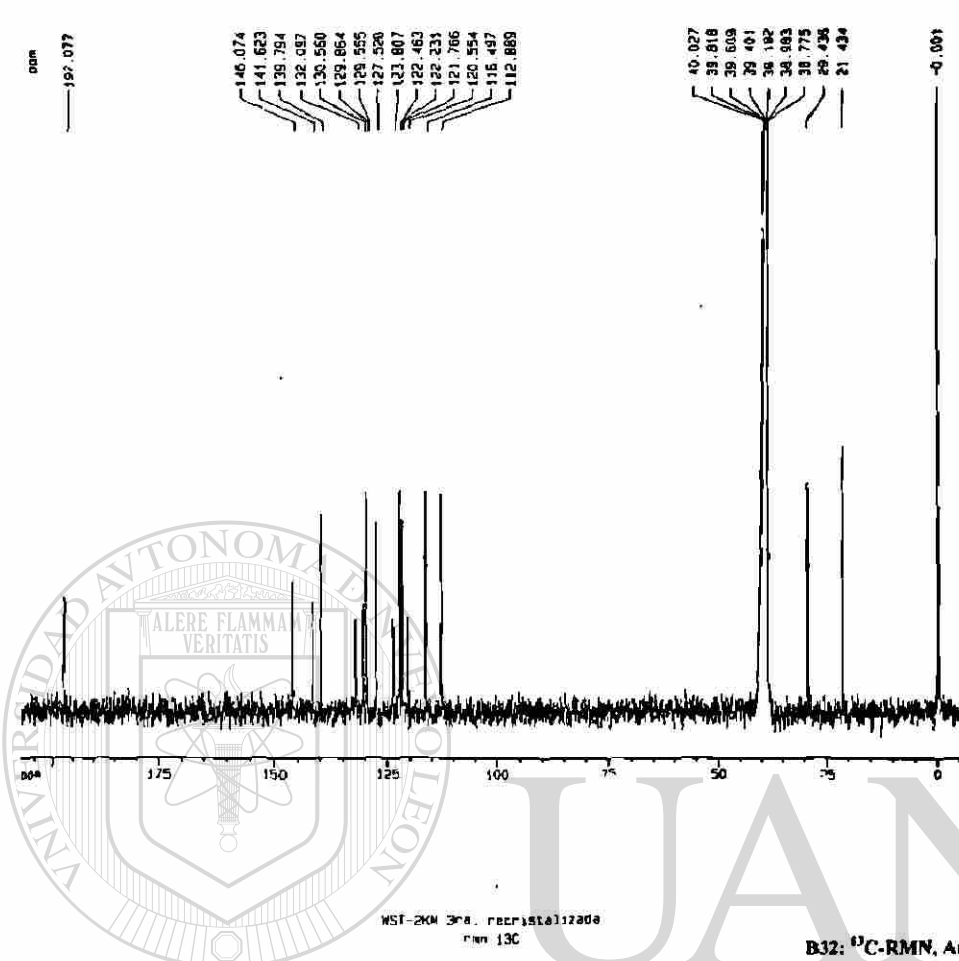
NAME	1
EXPNO	1
PROCNO	1
PROCAM	1
PROCF1	1
PROCF2	1
PROCF3	1
PROCF4	1
PROCF5	1
PROCF6	1
PROCF7	1
PROCF8	1
PROCF9	1
PROCF10	1
PROCF11	1
PROCF12	1
PROCF13	1
PROCF14	1
PROCF15	1
PROCF16	1
PROCF17	1
PROCF18	1
PROCF19	1
PROCF20	1
PROCF21	1
PROCF22	1
PROCF23	1
PROCF24	1
PROCF25	1
PROCF26	1
PROCF27	1
PROCF28	1
PROCF29	1
PROCF30	1
PROCF31	1
PROCF32	1
PROCF33	1
PROCF34	1
PROCF35	1
PROCF36	1
PROCF37	1
PROCF38	1
PROCF39	1
PROCF40	1
PROCF41	1
PROCF42	1
PROCF43	1
PROCF44	1
PROCF45	1
PROCF46	1
PROCF47	1
PROCF48	1
PROCF49	1
PROCF50	1
PROCF51	1
PROCF52	1
PROCF53	1
PROCF54	1
PROCF55	1
PROCF56	1
PROCF57	1
PROCF58	1
PROCF59	1
PROCF60	1
PROCF61	1
PROCF62	1
PROCF63	1
PROCF64	1
PROCF65	1
PROCF66	1
PROCF67	1
PROCF68	1
PROCF69	1
PROCF70	1
PROCF71	1
PROCF72	1
PROCF73	1
PROCF74	1
PROCF75	1
PROCF76	1
PROCF77	1
PROCF78	1
PROCF79	1
PROCF80	1
PROCF81	1
PROCF82	1
PROCF83	1
PROCF84	1
PROCF85	1
PROCF86	1
PROCF87	1
PROCF88	1
PROCF89	1
PROCF90	1
PROCF91	1
PROCF92	1
PROCF93	1
PROCF94	1
PROCF95	1
PROCF96	1
PROCF97	1
PROCF98	1
PROCF99	1
PROCF100	1

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCION GENERAL DE BIBLIOTECAS

WST 2KM

B31: ¹³C-RMN, Espectro completa.



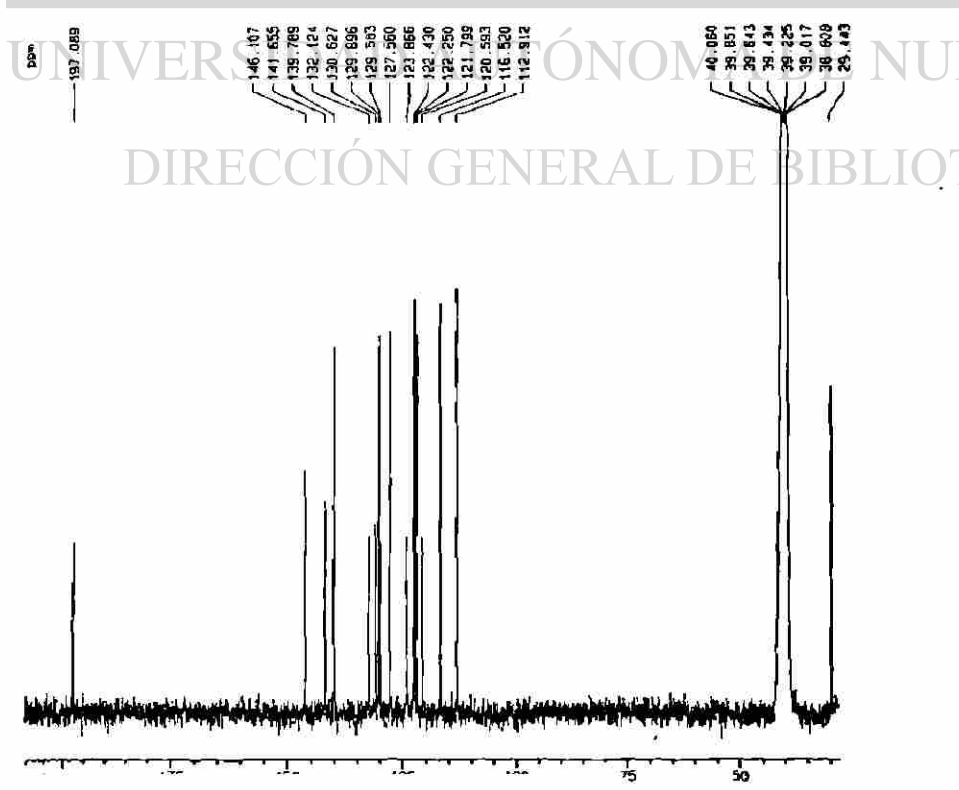
Current Data Parameters
NAME WST2KM2
EXPNO 1
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 800524
Time 15 04
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Huj111mg
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 81820
DS 8
SWH 21951.725 Hz
FIDRES 0.370853 Hz
AQ 1.5204832 sec
RG 32788
GB 23.700 usec
DE 0.00 usec
TE 300.0 K
D11 0.8200000 sec
d12 0.8000000 sec
PL12 14.00 dB
D1 2.0000000 sec
CPOPRG2 waltz16
PCPOPR 105.00 usec
SP02 400.1216000 MHz
NUC2 13
PL2 -3.00 dB
PL12 15.00 dB
PI 10.25 usec
DE 0.00 usec
SF01 100.6264004 MHz
NUC1 13C
PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 100.6264004 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.00

90 MHz data parameters
CX 20.00 cm
VFO 200.626400 MHz
F1 200.626400 MHz
F2 -5.500 MHz
F2 195.126400 MHz
SF02 10.71625 MHz
NUC2 1077.58016 MHz

B32: ¹³C-RMN, Amplificación.



Current Data Parameters
NAME WST2KM2
EXPNO 1
PROCNO 1

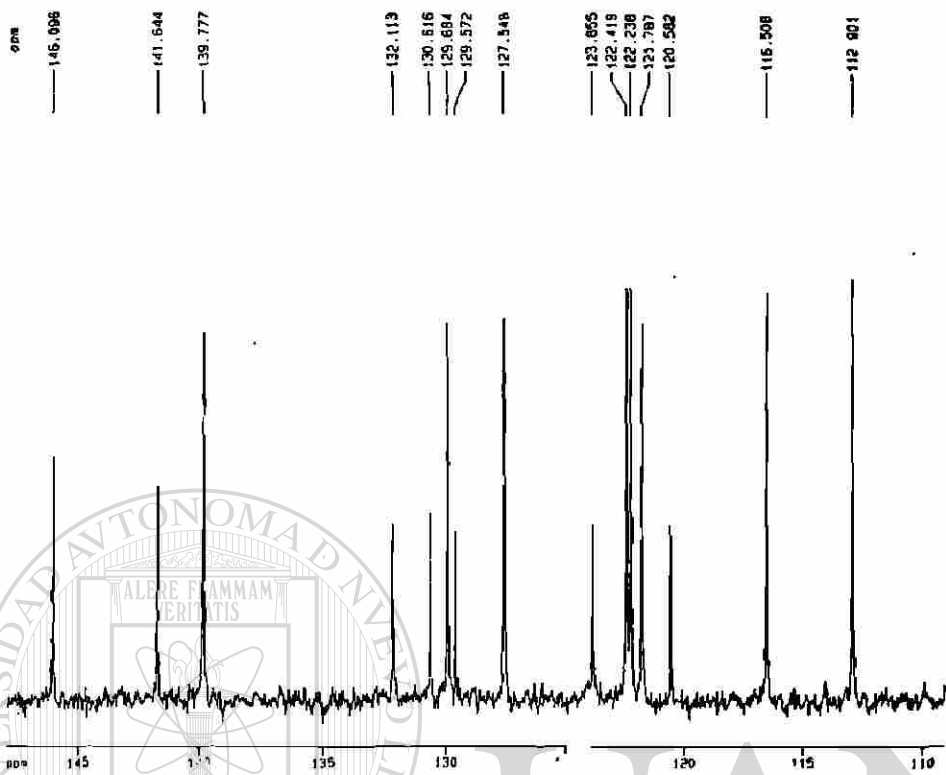
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 800524
Time 15 04
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Huj111mg
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 81820
DS 8
SWH 21951.725 Hz
FIDRES 0.370853 Hz
AQ 1.5204832 sec
RG 32788
GB 23.700 usec
DE 0.00 usec
TE 300.0 K
D11 0.8200000 sec
d12 0.8000000 sec
PL12 14.00 dB
D1 2.0000000 sec
CPOPRG2 waltz16
PCPOPR 105.00 usec
SP02 400.1216000 MHz
NUC2 13
PL2 -3.00 dB
PL12 15.00 dB
PI 10.25 usec
DE 0.00 usec
SF01 100.6264004 MHz
NUC1 13C
PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 100.6264004 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.00

90 MHz data parameters
CX 20.00 cm
VFO 200.626400 MHz
F1 200.626400 MHz
F2 -5.500 MHz
F2 195.126400 MHz
SF02 10.71625 MHz
NUC2 1077.58016 MHz

MST-2KM 3ra. recristalizada
 ppm 13C

B33: ¹³C-RMN, Ampliación de la
 región de aromáticos.



Current Data Parameters
 NAME MST2KM
 EXPNO 3
 PROCNO 1

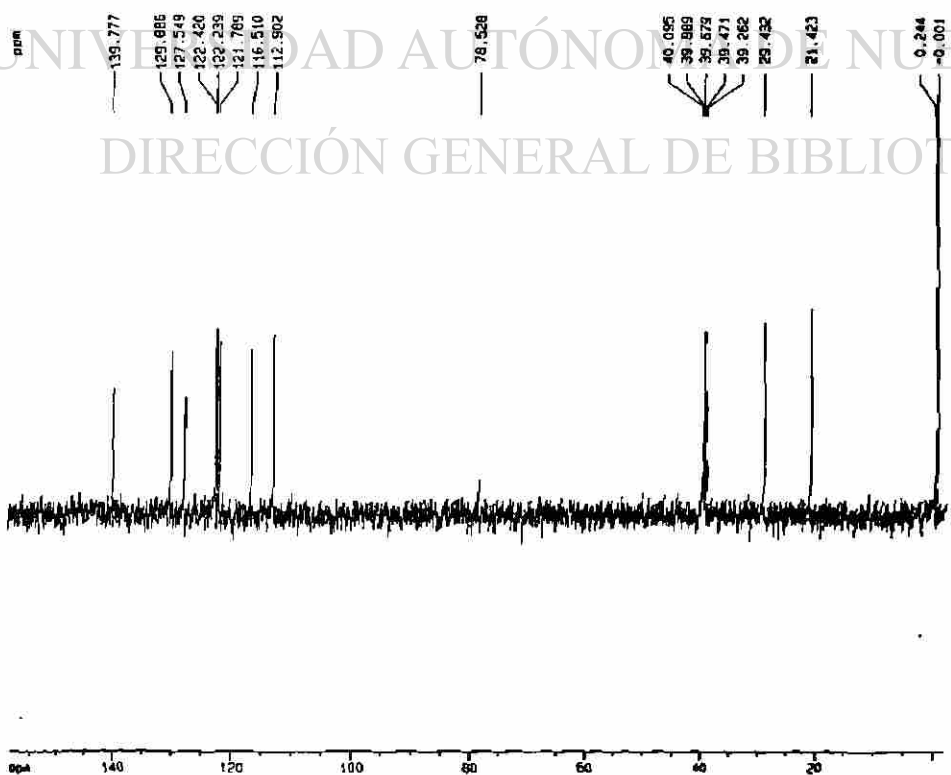
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 000524
 Time 15.04
 INSTRUM spect
 PULPROG 5 ms Multis
 QA.PRG 2pr
 TO 0233
 SOLVENT DMSO
 NS 01429
 DS 8
 SWH 21251.725 Hz
 FIDRES 0.324853 Hz
 AQ 1.3244952 sec
 SFO 327.08
 ZF 23.200 MHz
 GE 0.00 usec
 TE 300.2 K
 H1 0.030000 sec
 H2 0.000020 sec
 PL1 14.00 dB
 PL2 7.000000 sec
 SFO2 101.110 Hz
 PCPD 105.00 usec
 SFO2 400.1318005 MHz
 NUC2 13
 P2 -3.00 dB
 PL2 16.00 dB
 PL 17.23 usec
 P1 0.00 usec
 SFO1 100.626406 MHz
 NUC1 13C
 PL 1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 32708
 SF 100.6126257 MHz
 CH 0
 SB 0
 LB 3.00 Hz
 GB 0
 SC 1.00

60 MHz data parameters
 CX 20.00 Hz
 FCF 148.206 ppm
 F1 1493.7 Hz Hz
 F2 309.105 ppm
 FWHM 1.000000 Hz
 HCH 19.700000 Hz/Hz

MST2KM
 dept 135

B34: ¹³C-RMN, DEPT-135.



Current Data Parameters
 NAME MST2KM
 EXPNO 3
 PROCNO 1

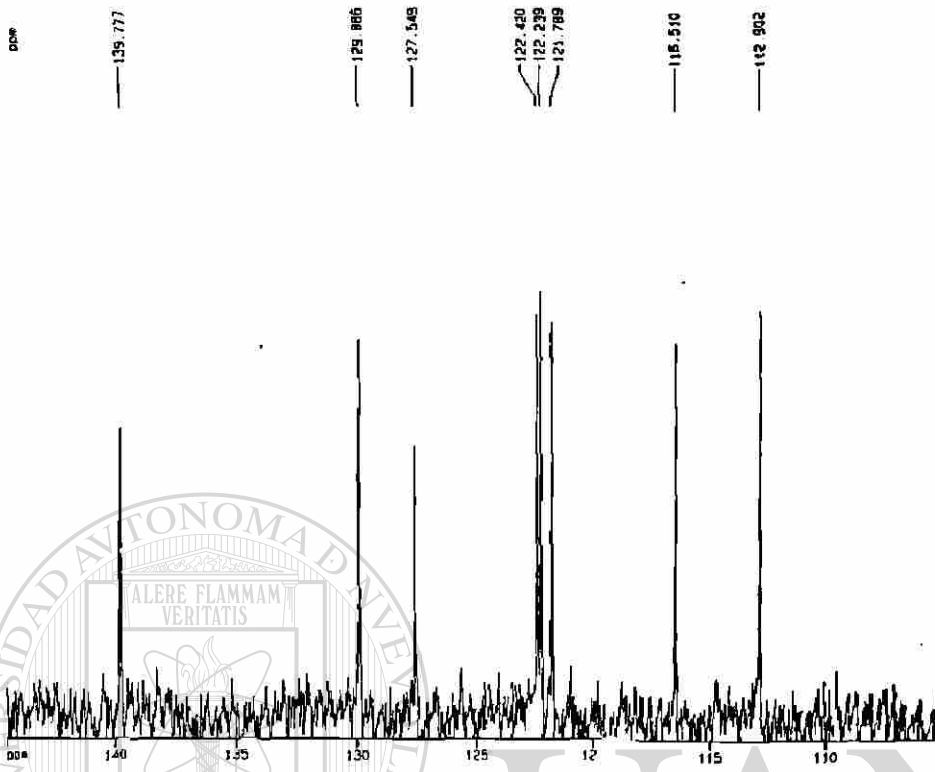
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 000524
 Time 15.30
 INSTRUM spect
 PULPROG 5 ms Multis
 QA.PRG 2pr
 TO 0233
 SOLVENT DMSO
 NS 0159
 DS 8
 SWH 18101.270 Hz
 FIDRES 0.412512 Hz
 AQ 1.3244952 sec
 SFO 327.08
 ZF 23.200 MHz
 GE 0.00 usec
 TE 300.2 K
 H1 0.030000 sec
 H2 0.000020 sec
 PL1 14.00 dB
 PL2 7.000000 sec
 SFO2 101.110 Hz
 PCPD 105.00 usec
 SFO2 400.1318005 MHz
 NUC2 13
 P2 -3.00 dB
 PL2 16.00 dB
 PL 17.23 usec
 P1 0.00 usec
 SFO1 100.626406 MHz
 NUC1 13C
 PL 1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 32708
 SF 100.6126257 MHz
 CH 0
 SB 0
 LB 3.00 Hz
 GB 0
 SC 1.00

60 MHz data parameters
 CX 20.00 Hz
 FCF 128.540 ppm
 F1 1493.7 Hz Hz
 F2 309.105 ppm
 FWHM 1.000000 Hz
 HCH 19.700000 Hz/Hz

NS12KH4
dept 135

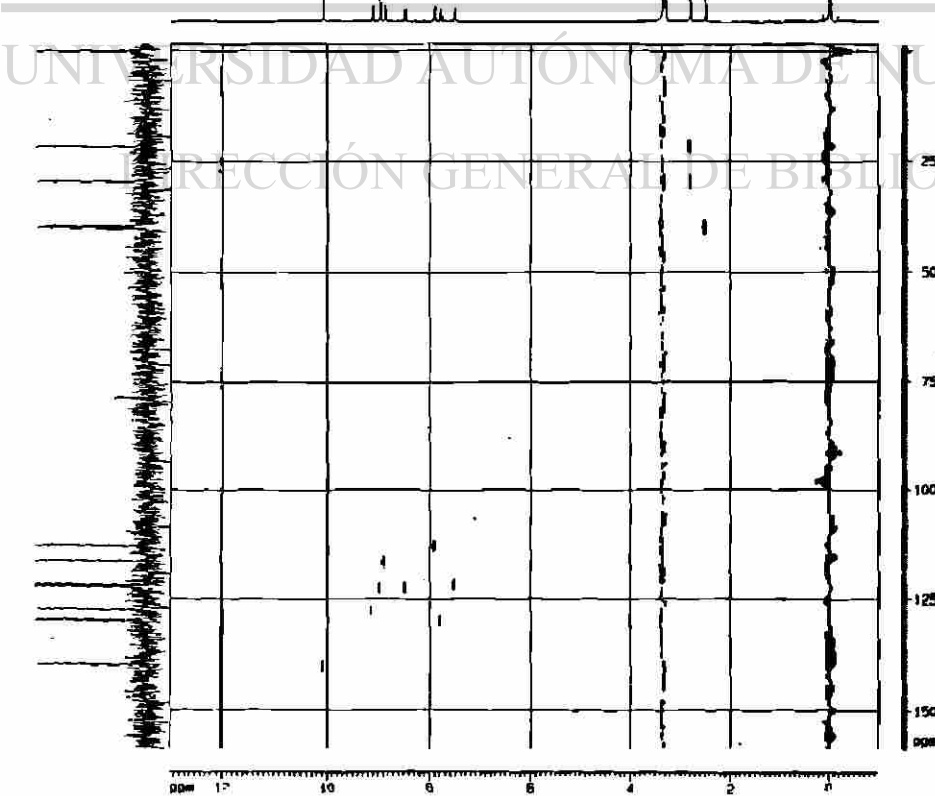
B35: ¹³C-RMN, DEPT-135 ampliación.



Current Data Parameters	Value
NAME	NS12KH4
EXPNO	9
PROCNO	1
F2 - Acquisition Parameters	
Date_	20060701
Time	5.30
INSTRUM	solnet
PROBHD	5 mm Hx11 mm
PULPROG	zgpg30
TD	32768
SOLVENT	DMSO
NS	8193
DS	4
SWH	64891.328 Hz
FIDRES	0.493812 Hz
AQ	1.4129812 sec
RG	32768
NY	30.900 spec
FX	0.00 spec
FY	0.00 spec
FZ	0.00 spec
SD	20.5 spec
SI	12.50 spec
SF	25.0 spec
CH2Z	143.000000
CH2	0.0030613 sec
CH12	0.0000200 sec
CH17	0.0000111 sec
CH21	2.0000000 sec
CH22	-3.00 sec
SP02	400.130000 MHz
NUC1	13C
NUC2	1H
NUC3	100.620772 MHz
NUC4	13C
NUC5	-1.00 sec
NUC6	10.00 sec
NUC7	0.00 spec
CPDPRG2	waltz16
NUCXP	100.00 spec
F2 - Processing parameters	
SI	32768
SP	100.617997 MHz
WDW	EM
SF	0
GB	3.00 Hz
GC	0
TC	1.48
50 mm data parameters	
CH	20.00 cm
FR	1.0000000 ppm
TD	32768.00 Hz
RF	200.0000000 ppm
NUC1	13C
NUC2	1H
CH2Z	2.0000000 ppm
CH21	201.22385 MHz

Clorure de indolequinolizina
HMOC

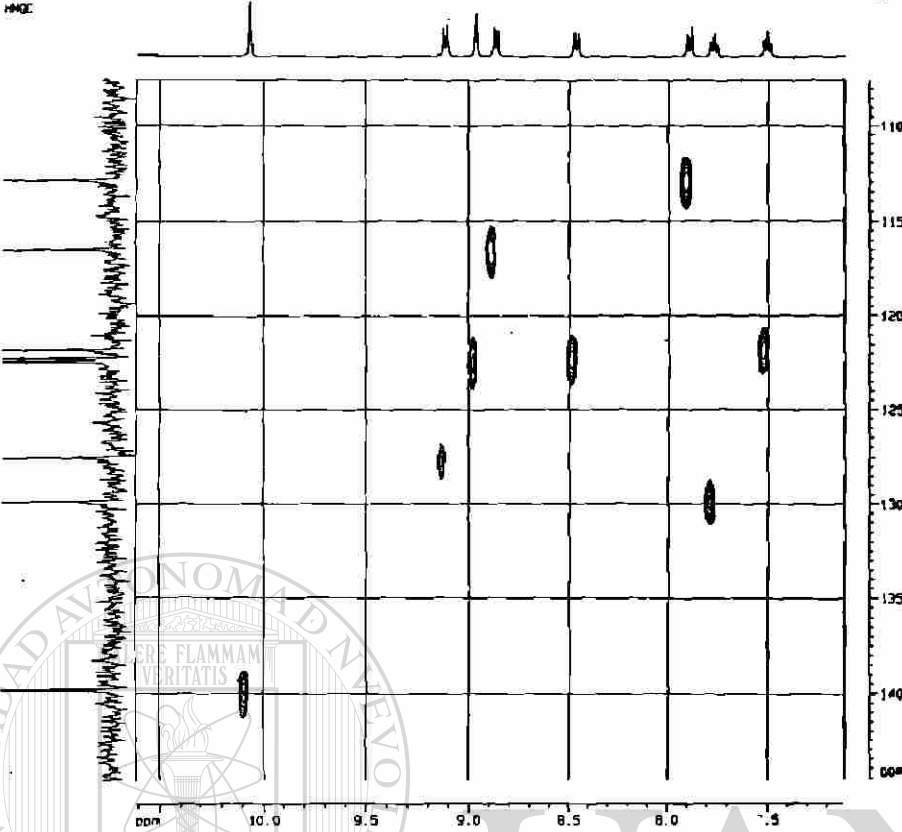
B36: HMOC.



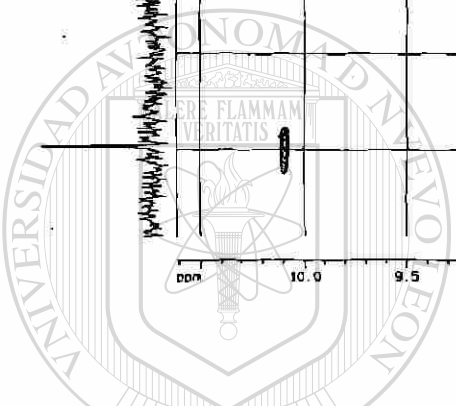
Current Data Parameters	Value
NAME	NS12KH4
EXPNO	9
PROCNO	1
F2 - Acquisition Parameters	
Date_	20060701
Time	5.30
INSTRUM	solnet
PROBHD	5 mm Hx11 mm
PULPROG	zgpg30
TD	32768
SOLVENT	DMSO
NS	8193
DS	4
SWH	64891.328 Hz
FIDRES	0.493812 Hz
AQ	1.4129812 sec
RG	32768
NY	30.900 spec
FX	0.00 spec
FY	0.00 spec
FZ	0.00 spec
SD	20.5 spec
SI	12.50 spec
SF	25.0 spec
CH2Z	143.000000
CH2	0.0030613 sec
CH12	0.0000200 sec
CH17	0.0000111 sec
CH21	2.0000000 sec
CH22	-3.00 sec
SP02	400.130000 MHz
NUC1	13C
NUC2	1H
NUC3	100.620772 MHz
NUC4	13C
NUC5	-1.00 sec
NUC6	10.00 sec
NUC7	0.00 spec
CPDPRG2	waltz16
NUCXP	100.00 spec
F2 - Processing parameters	
SI	32768
SP	100.617997 MHz
WDW	EM
SF	0
GB	3.00 Hz
GC	0
TC	1.48
50 mm data parameters	
CH	20.00 cm
FR	1.0000000 ppm
TD	32768.00 Hz
RF	200.0000000 ppm
NUC1	13C
NUC2	1H
CH2Z	2.0000000 ppm
CH21	201.22385 MHz

Cloruro de indolquinolizina
 HMQC

B37: HMQC, Ampliación.



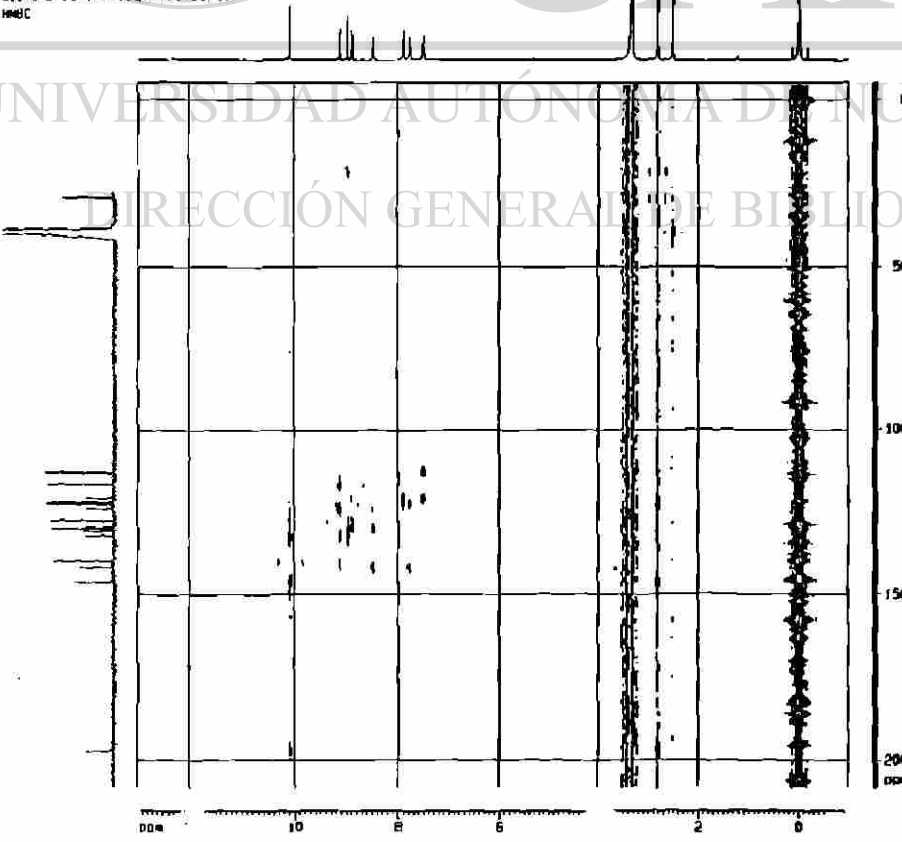
13C (ppm)	1H (ppm)	Assignment
110	7.8	...
115	8.8	...
120	8.8	...
120	8.5	...
120	7.8	...
125	8.8	...
130	8.8	...
135	8.8	...
140	8.8	...



U.A.N.L.

Cloruro de indolquinolizina
 HMBC

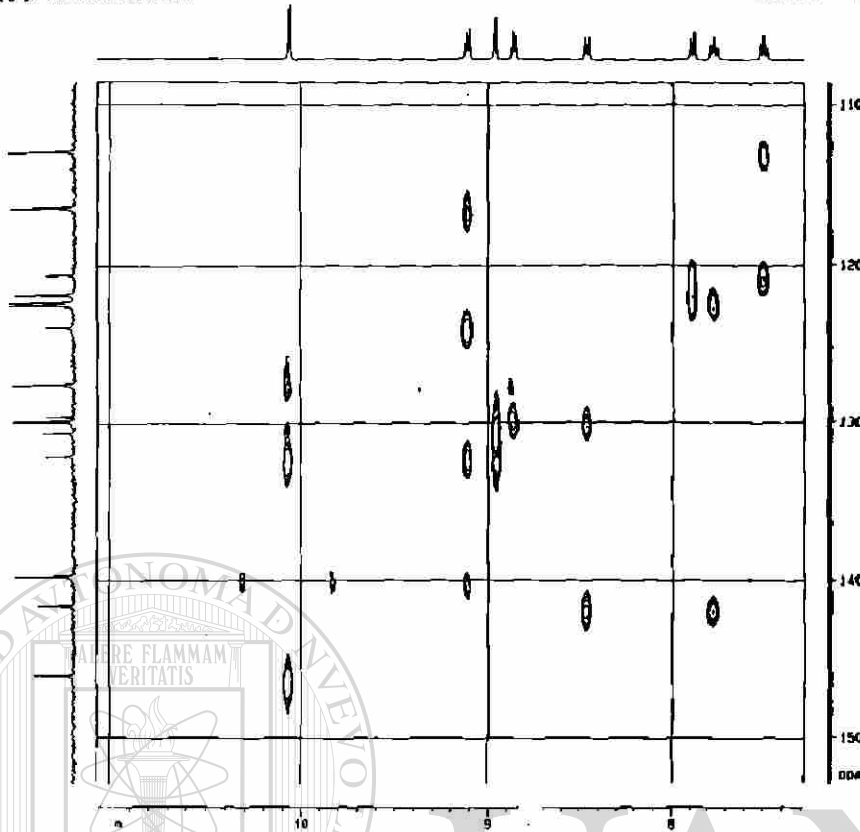
B38: HMBC.



13C (ppm)	1H (ppm)	Assignment
0	0	...
50
100
150
200

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
 DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



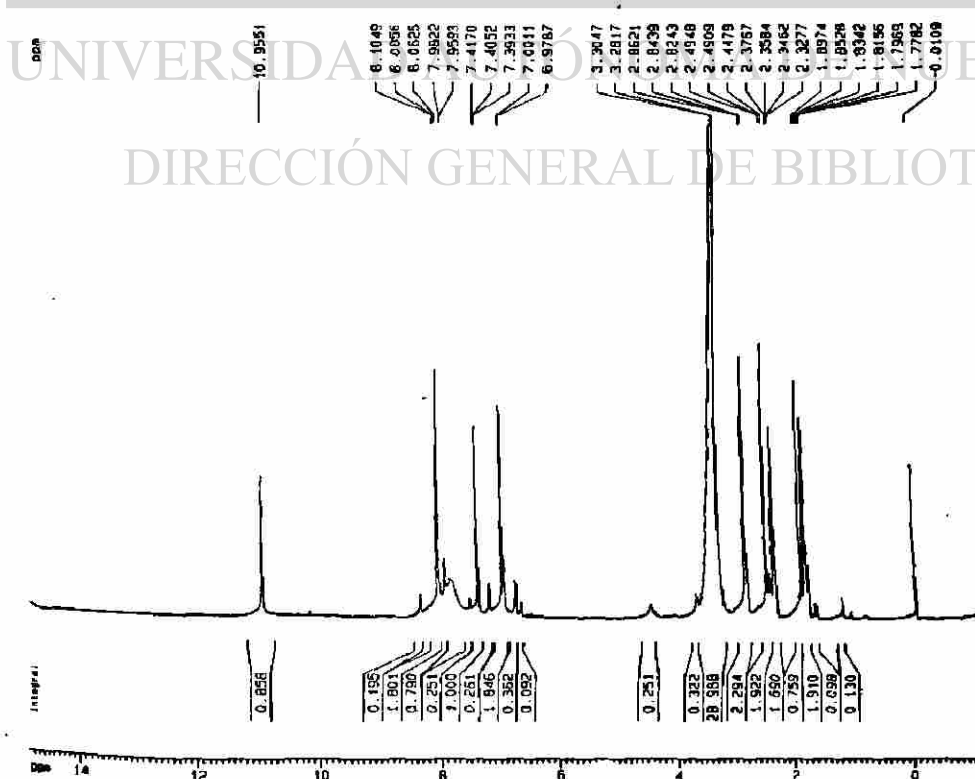


Current Data Parameters

NAME	EWK3LT
EXPNO	3
PROCNO	3
F2 - Acquisition Parameters	
Date_	200201
Time	15 31
INSTRUM	spect
PROBHD	5 mm Mult 1H
PL1PRG2	ZG
TD	32768
SOLVENT	DMSO
NS	65
DS	
SWH	8410.256 Hz
FREQES	0.15625 MHz
RG	2.500000 sec
NUC1	13C
NUC2	1H
DE	70.000 mmsec
TE	300.0 K
D1	1.0000000 sec
P1	12.50 mmsec
DE	8.00 mmsec
SF81	400.126024 MHz
NUC1	13C
NUC2	1H
PC	-3.00 dB
F2 - Processing parameters	
SI	16384
SF	400.126024 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	0.30 Hz
GB	0
PC	1.00
RG	20.00 cm
SI	14.917 ppm
F1	9900.61 MHz
F2	-1.623 ppm
F3	-409.44 MHz
SR	0.00162 sec/pt
PC	0.00162 sec

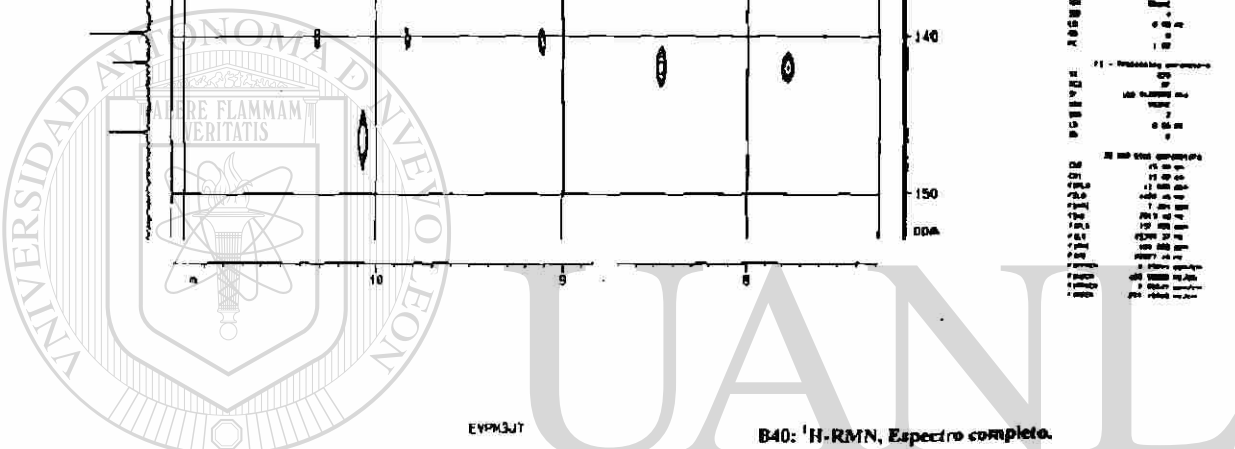
EWK3LT

B40: 1H-RMN, Espectro completo.



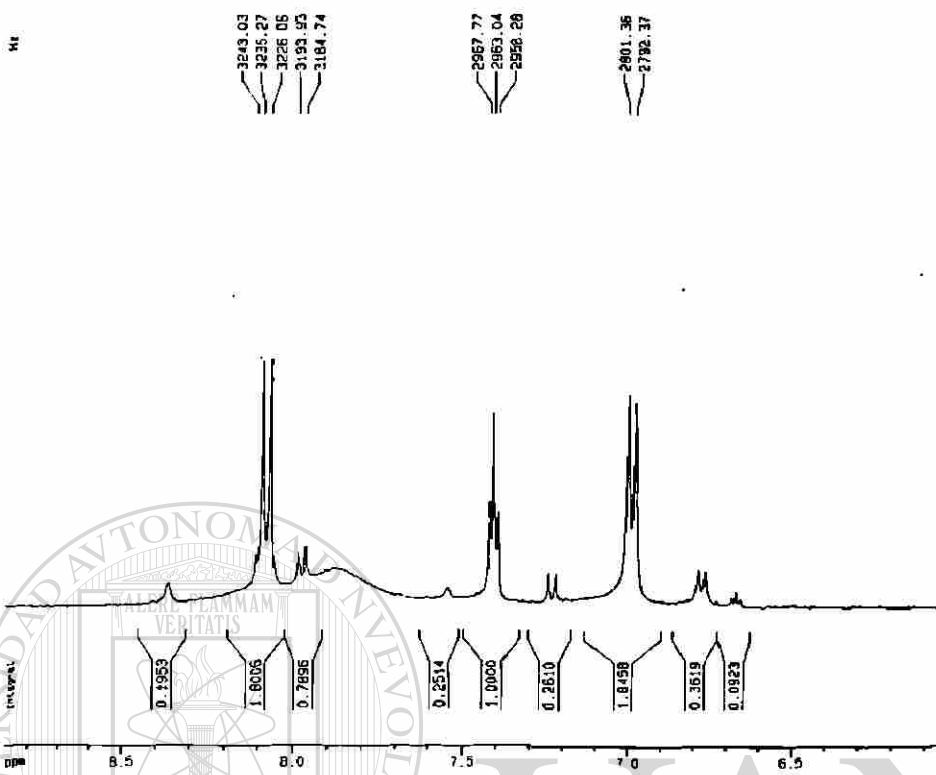
Current Data Parameters

NAME	EWK3LT
EXPNO	3
PROCNO	3
F2 - Acquisition Parameters	
Date_	200201
Time	15 31
INSTRUM	spect
PROBHD	5 mm Mult 1H
PL1PRG2	ZG
TD	32768
SOLVENT	DMSO
NS	65
DS	
SWH	8410.256 Hz
FREQES	0.15625 MHz
RG	2.500000 sec
NUC1	13C
NUC2	1H
DE	70.000 mmsec
TE	300.0 K
D1	1.0000000 sec
P1	12.50 mmsec
DE	8.00 mmsec
SF81	400.126024 MHz
NUC1	13C
NUC2	1H
PC	-3.00 dB
F2 - Processing parameters	
SI	16384
SF	400.126024 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	0.30 Hz
GB	0
PC	1.00
RG	20.00 cm
SI	14.917 ppm
F1	9900.61 MHz
F2	-1.623 ppm
F3	-409.44 MHz
SR	0.00162 sec/pt
PC	0.00162 sec



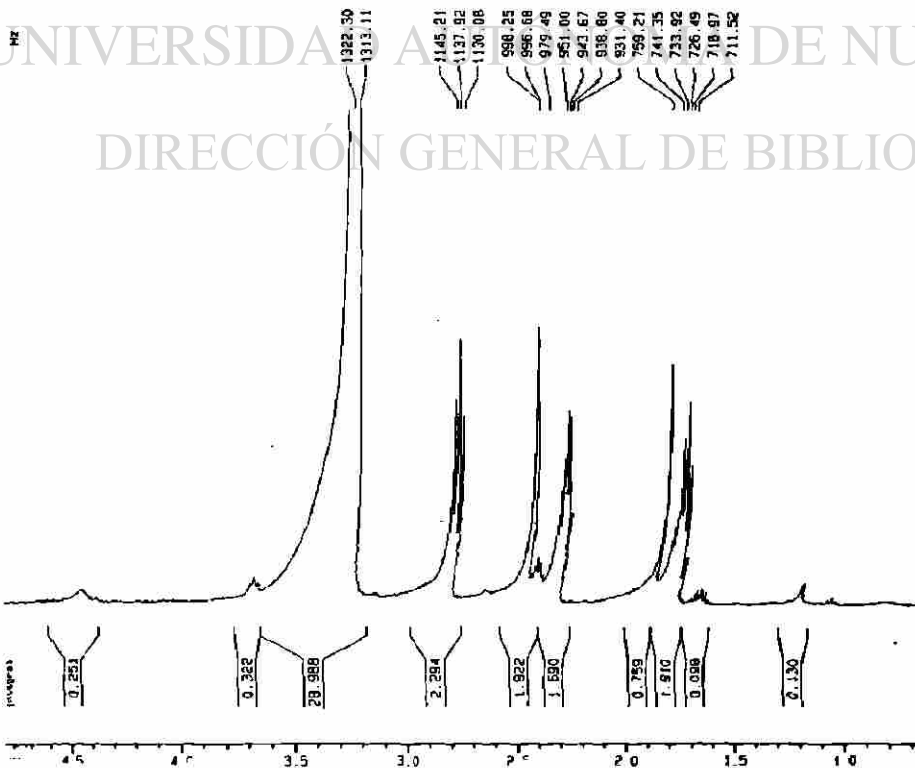
EVPK3JT

B41: ¹H-RMN, Ampliación.



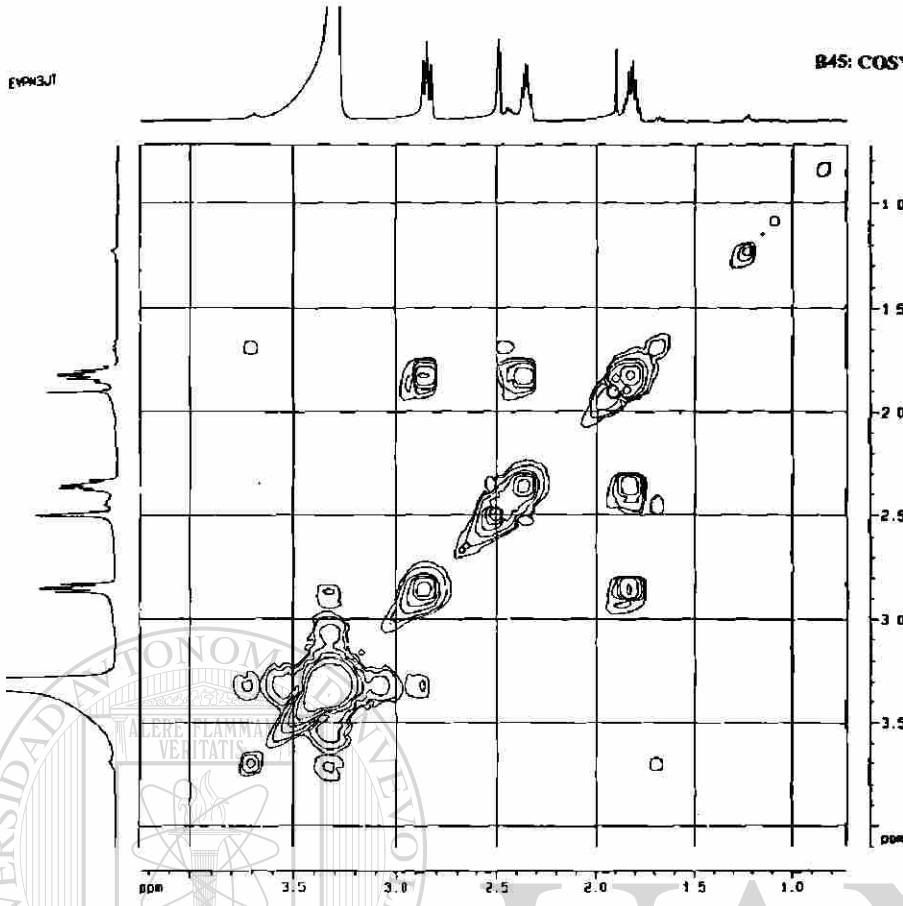
EVPK3JT

B42: ¹H-RMN, Ampliación.



EYPM3JT

B45: COSY. Ampliación.



```

Current Data Parameters
NAME      EYPM3JT
EXPNO     1
PROCNO    1

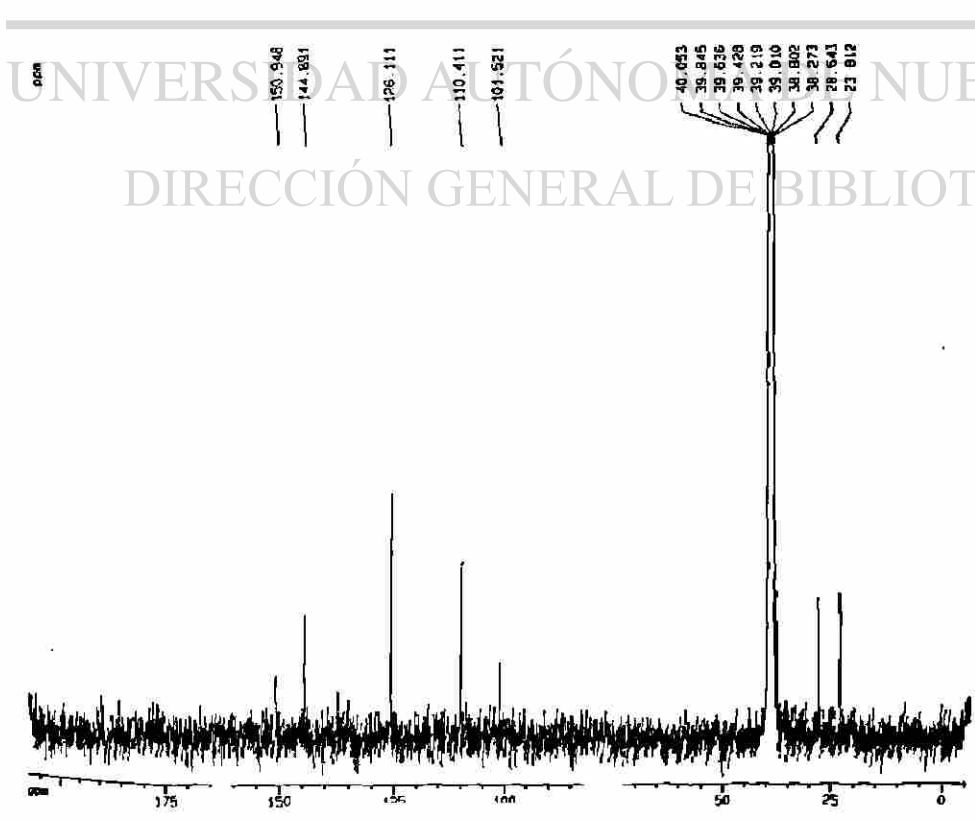
F2 - Acquisition Parameters
Date_     990204
Time      3 01
INSTRUM   spect
PROBHD    5 mm Multic
PULPROG   zgpg30
SOLVENT   DMSO
NS        640
DS        4
SWH        600.136 MHz
FIDRES     0.000180 Hz
AQ         0.000156 sec
RG         655
TE         300.2 K
D1         0.030000 sec
d12        0.000200 sec
PL12       16.00 dB
D11        2.0000000 sec
d112       0.0000000 sec
d1112     0.0000000 sec
d11112    0.0000000 sec
SFO1       400.146000 MHz
NUC1       13C
PL1        -1.00 dB

F1 - Processing parameters
SI         32768
SF         100.626000 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         3.00 Hz
GB         0
PC         1.40

10 mm p1d1 parameters
SI         32768
SF         400.146000 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         3.00 Hz
GB         0
PC         1.40
  
```

EYPM3JT

B46: ¹³C-RMN. Espectro completo.



```

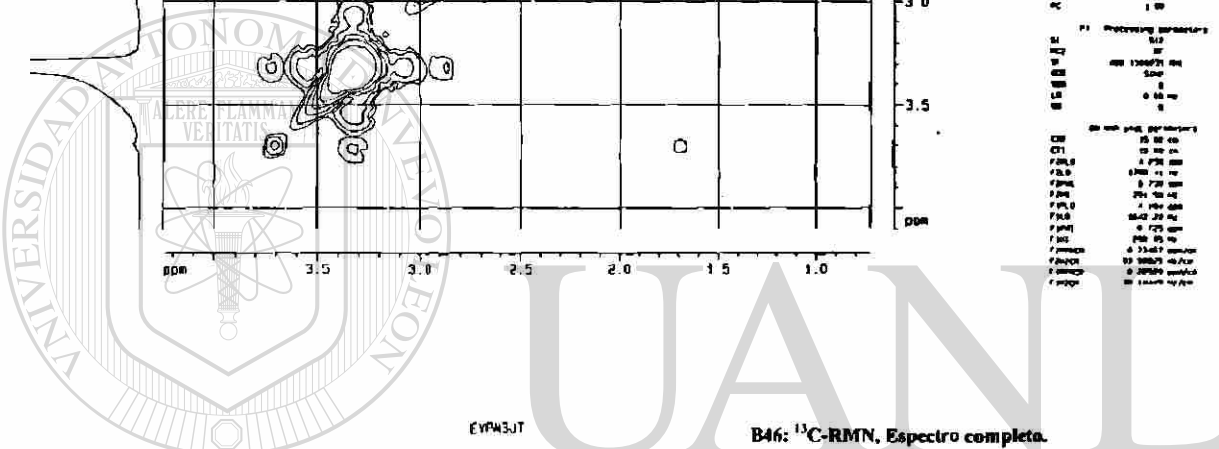
Current Data Parameters
NAME      EYPM3JT
EXPNO     1
PROCNO    1

F2 - Acquisition Parameters
Date_     990204
Time      3 01
INSTRUM   spect
PROBHD    5 mm Multic
PULPROG   zgpg30
SOLVENT   DMSO
NS        640
DS        4
SWH        600.136 MHz
FIDRES     0.000180 Hz
AQ         0.000156 sec
RG         655
TE         300.2 K
D1         0.030000 sec
d12        0.000200 sec
PL12       16.00 dB
D11        2.0000000 sec
d112       0.0000000 sec
d1112     0.0000000 sec
d11112    0.0000000 sec
SFO1       400.146000 MHz
NUC1       13C
PL1        -1.00 dB

F1 - Processing parameters
SI         32768
SF         100.626000 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         3.00 Hz
GB         0
PC         1.40

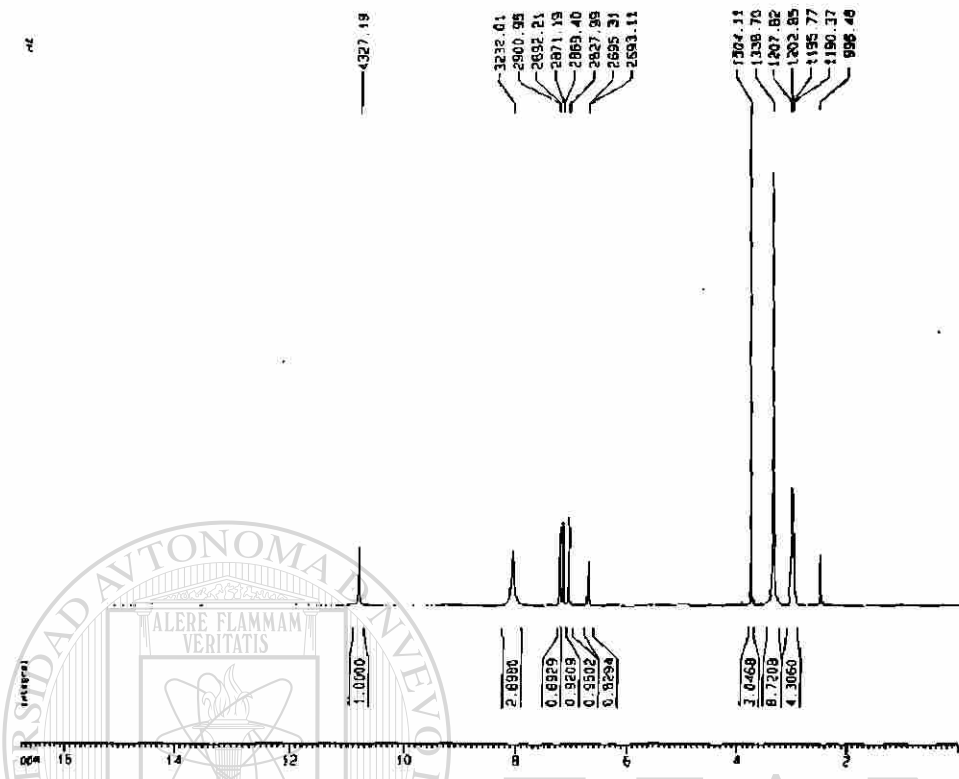
10 mm p1d1 parameters
SI         32768
SF         400.146000 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         3.00 Hz
GB         0
PC         1.40
  
```

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



HNT

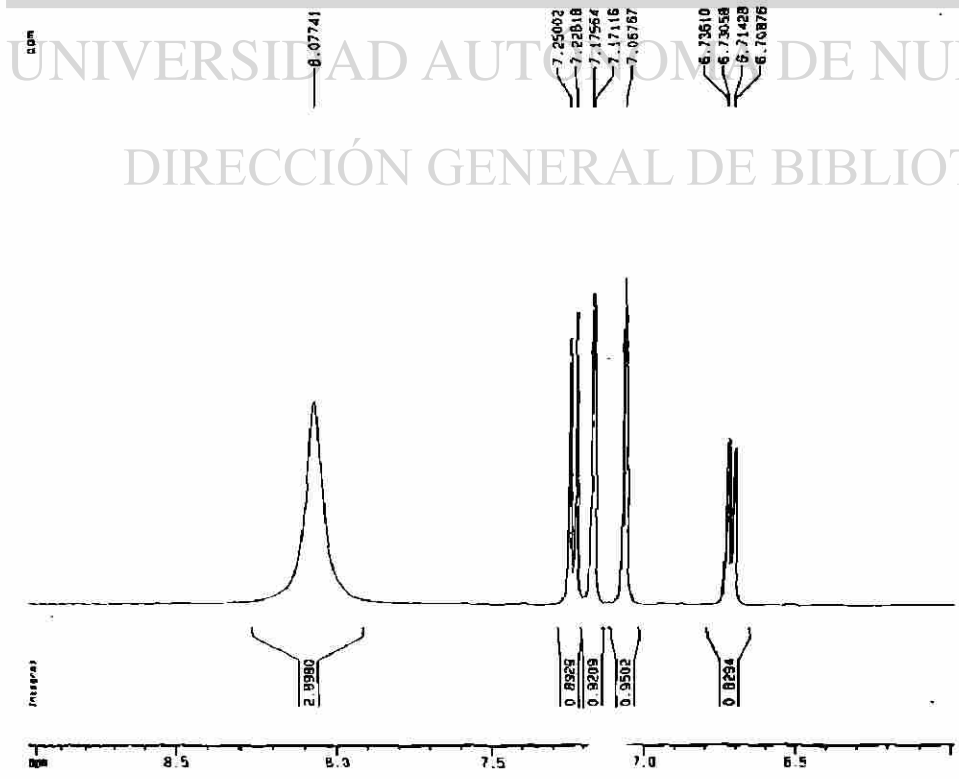
B47: ¹H-RMN, Espectro completo.



Current Data Parameters	
NAME	HNT
EXPNO	1
PROCNO	1
F2 - Acquisition Parameters	
Date_	990518
Time	14:58
INSTRUM	spect
PROBHD	5 mm Multicore
PULPROG	zg
TD	32768
SOLVENT	DMSO
NS	30
DS	4
SWH	6775.000 MHz
FIDRES	0.206729 Hz
AQ	2.4183283 sec
RG	101
DR	73.000 usec
DE	8.00 usec
TE	300.0 K
D1	1.8000000 sec
P1	12.50 usec
DE	8.00 usec
RF01	400.133017 MHz
HZC1	1M
PL1	-3.00 dB
F2 - Processing Parameters	
SI	16384
SF	400.130000 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	0.30 Hz
GB	0
PC	1.00
1D NMR list parameters	
CH	20.00 cm
FAP	15.046 ppm
F1	6780.42 Hz
F2P	0.000 ppm
F2	0.00 Hz
PPHCP	0.0428 ppm/cm
HZCM	328.02075 Hz/cm

HNT

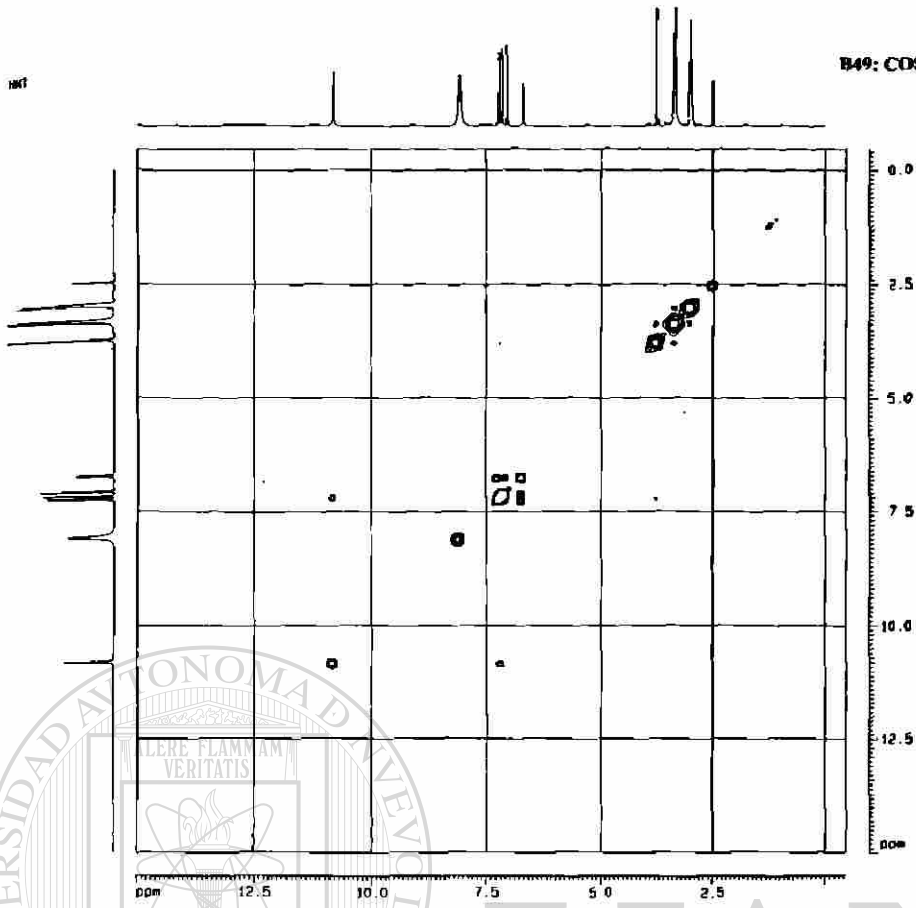
B48: ¹H-RMN, Ampliación.



Current Data Parameters	
NAME	HNT
EXPNO	1
PROCNO	1
F2 - Acquisition Parameters	
Date_	990518
Time	14:58
INSTRUM	spect
PROBHD	5 mm Multicore
PULPROG	zg
TD	32768
SOLVENT	DMSO
NS	30
DS	4
SWH	6775.000 MHz
FIDRES	0.206729 Hz
AQ	2.4183283 sec
RG	101
DR	73.000 usec
DE	8.00 usec
TE	300.0 K
D1	1.8000000 sec
P1	12.50 usec
DE	8.00 usec
RF01	400.133017 MHz
HZC1	1M
PL1	-3.00 dB
F2 - Processing Parameters	
SI	16384
SF	400.130000 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	0.30 Hz
GB	0
PC	1.00
1D NMR list parameters	
CH	20.00 cm
FAP	9.077 ppm
F1	3614.33 Hz
F2P	5.987 ppm
F2	2395.45 Hz
PPHCP	0.15231 ppm/cm
HZCM	80.94395 Hz/cm

1H1

B49: COSY completo.



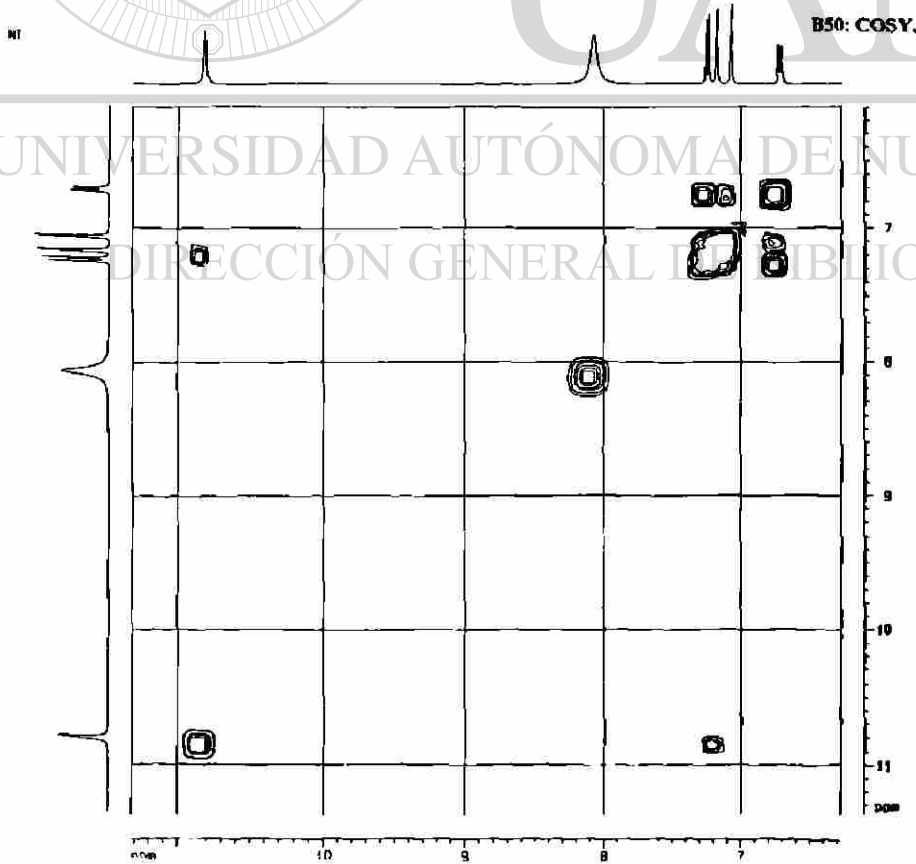
```

Current Data Parameters
=====
Date_   199708
Time    15.00
INSTRUM spect
PROBHD  5 mm QNP1H/
PULPROG zgpg30
AQ       0.500
RG       655
SFO      500
SF01     500.136
SF02     125.760
AQ1      1.00
AQ2      1.00
AQ3      1.00
AQ4      1.00
AQ5      1.00
AQ6      1.00
AQ7      1.00
AQ8      1.00
AQ9      1.00
AQ10     1.00
=====
F2 - Acquisition Parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====
F3 - Processing parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====
F4 - Acquisition parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====
F5 - Processing parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====
F6 - Acquisition parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====
F7 - Processing parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====

```

1H1

B50: COSY, Amplificación.



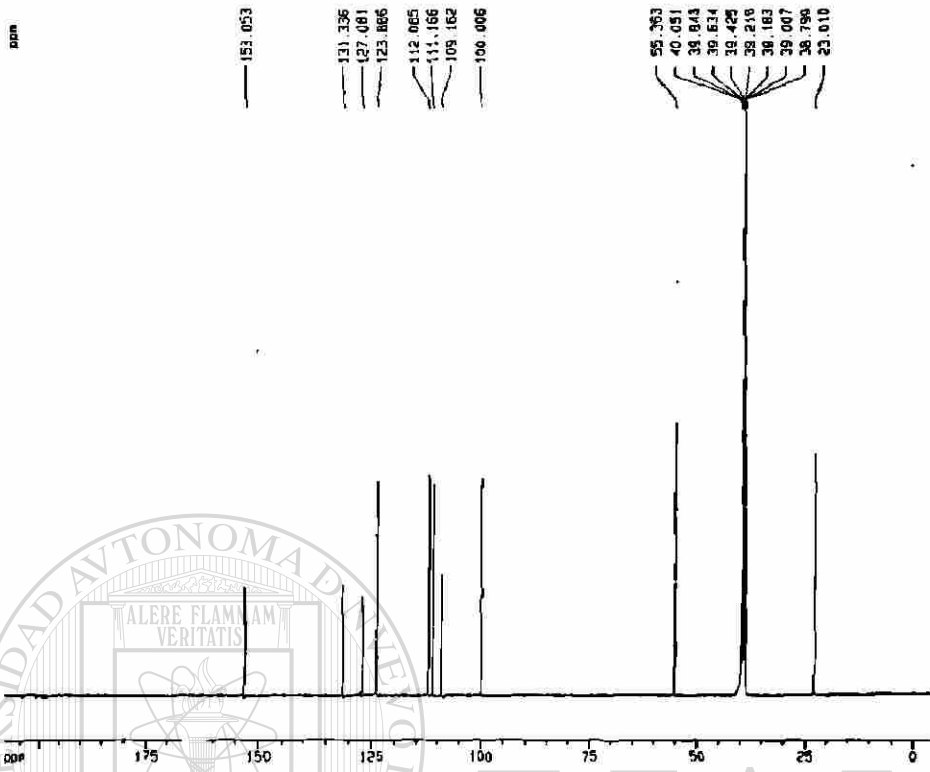
```

Current Data Parameters
=====
Date_   199708
Time    15.00
INSTRUM spect
PROBHD  5 mm QNP1H/
PULPROG zgpg30
AQ       0.500
RG       655
SFO      500
SF01     500.136
SF02     125.760
AQ1      1.00
AQ2      1.00
AQ3      1.00
AQ4      1.00
AQ5      1.00
AQ6      1.00
AQ7      1.00
AQ8      1.00
AQ9      1.00
AQ10     1.00
=====
F2 - Acquisition Parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====
F3 - Processing parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====
F4 - Acquisition parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====
F5 - Processing parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====
F6 - Acquisition parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====
F7 - Processing parameters
=====
SI      327
SF      500.136
SF01    500.136
SF02    125.760
AQ       1.00
=====

```

FMT

B51: ¹³C-RMN, Espectro completo.



Current Data Parameters
 NAME: B51
 EXPNO: 3
 PROCNO: 1

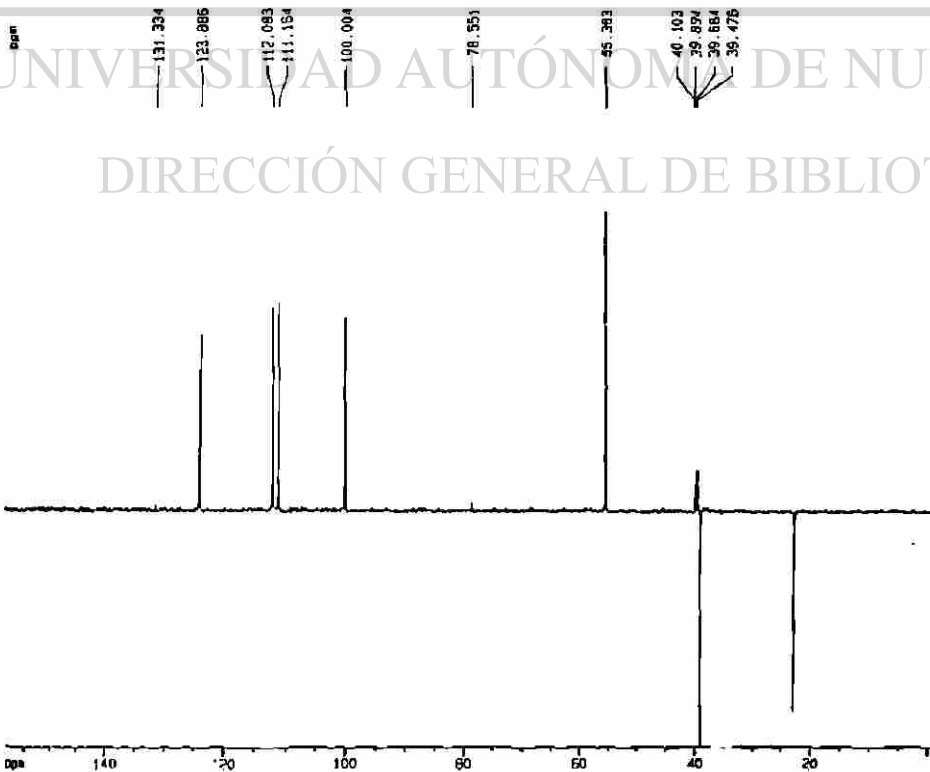
F2 - Acquisition Parameters
 Date_: 080516
 Time: 21:00
 INSTRUM: spect
 PROBP0: 5 mm HLL114
 PULPROG: zgpg
 TO: 02536
 SOLVENT: DMSO
 NS: 11482
 DS: 4
 SWH: 23201.729 Hz
 FIDRES: 0.300833 Hz
 AQ: 0.3304970 sec
 RG: 40384
 GB: 23.200 uS/cg
 DE: 0.00 uS/cg
 VE: 300.0 L
 SFO1: 0.0300000 sec
 SFO2: 0.0000000 sec
 PL13: 16.00 dB
 O1: 2.0000000 sec
 CDEPRG2: null116
 MPRG2: 105.00 uS/cg
 SFO2: 400.1310000 MHz
 NU2: 14
 PL2: -1.00 dB
 PL12: 18.00 dB
 PI: 10.75 uS/cg
 TE: 0.00 uS/cg
 SFO1: 100.6291200 MHz
 NUC1: 13C
 PL1: 1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI: 32768
 SF: 100.6126291 MHz
 XN: 0
 SSB: 0
 LB: 1.00 Hz
 GB: 0
 PC: 1.00

SI - Unitless parameters
 CA: 20.00 CG
 F0: 210.000 ppm
 F1: 21128.00 Hz
 F2P: -5.000 ppm
 G2: -50.0 Hz
 HPCB: 10.70000 uS/cg
 HPCN: 100.00000 uS/cg

Dept 135

B52: ¹³C-RMN, DEPT-135.



Current Data Parameters
 NAME: B52
 EXPNO: 4
 PROCNO: 1

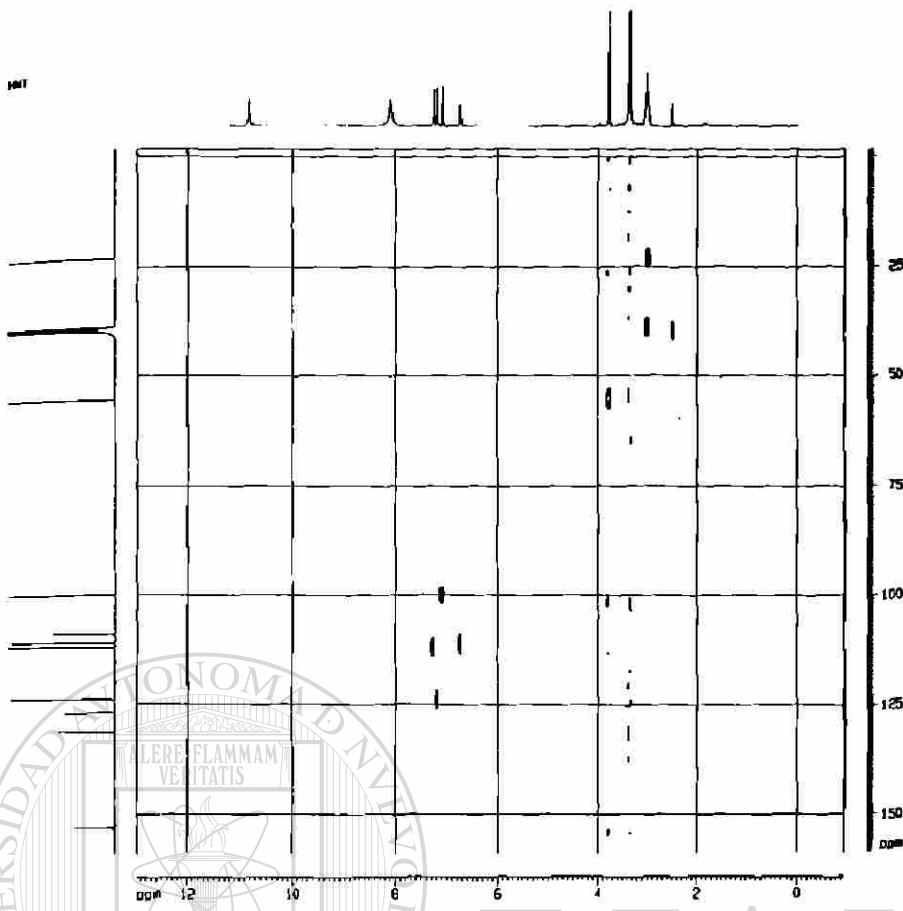
F2 - Acquisition Parameters
 Date_: 080516
 Time: 7:48
 INSTRUM: spect
 PROBP0: 5 mm HLL114
 PULPROG: dept135
 TO: 32768
 SOLVENT: DMSO
 NS: 11482
 DS: 0
 SWH: 18481.229 Hz
 FIDRES: 0.452012 Hz
 AQ: 0.4125012 sec
 RG: 30768
 GB: 30.000 uS/cg
 DE: 0.00 uS/cg
 VE: 300.0 L
 SFO1: 0.025 uS/cg
 SFO2: 0.0000000 sec
 PL1: 16.00 dB
 O1: 2.0000000 sec
 CDEPRG2: null116
 MPRG2: 105.00 uS/cg
 SFO2: 400.1310000 MHz
 NU2: 14
 PL2: -1.00 dB
 PL12: 18.00 dB
 PI: 10.75 uS/cg
 TE: 0.00 uS/cg
 SFO1: 100.6291200 MHz
 NUC1: 13C
 PL1: 1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI: 32768
 SF: 100.6126291 MHz
 XN: 0
 SSB: 0
 LB: 1.00 Hz
 GB: 0
 PC: 1.00

SI - Unitless parameters
 CA: 20.00 CG
 F0: 130.041 ppm
 F1: 12952.00 Hz
 F2P: 1.000 ppm
 G2: 100.12 Hz
 HPCB: 0.0000000 uS/cg
 HPCN: 100.00000 MHz

INT

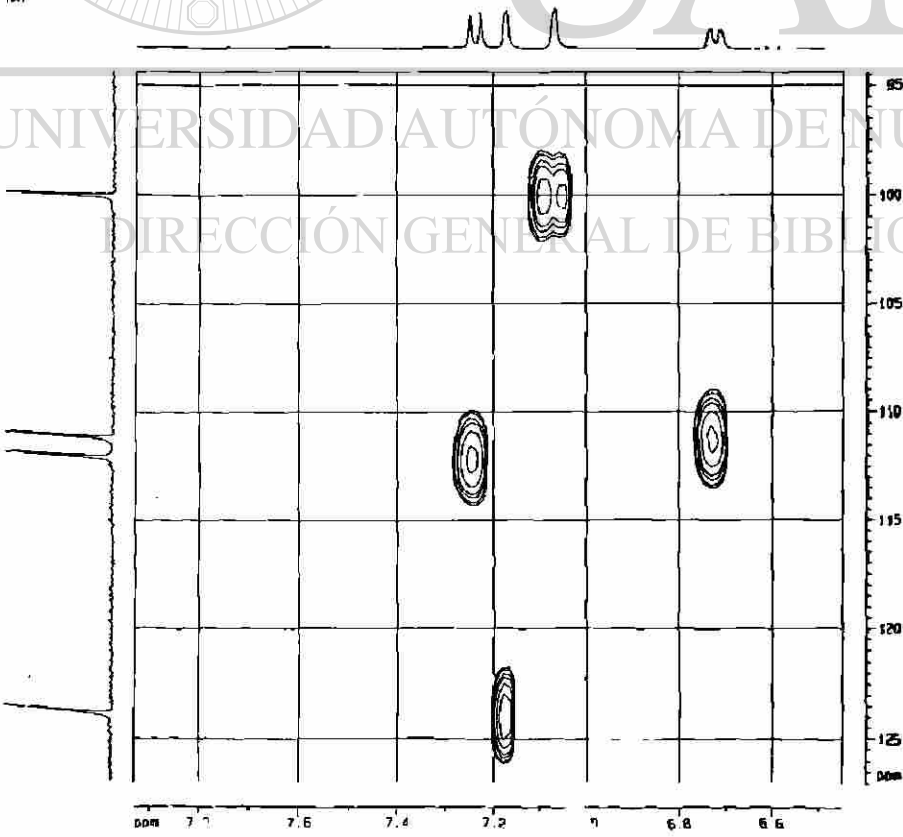
BS3: HMQC



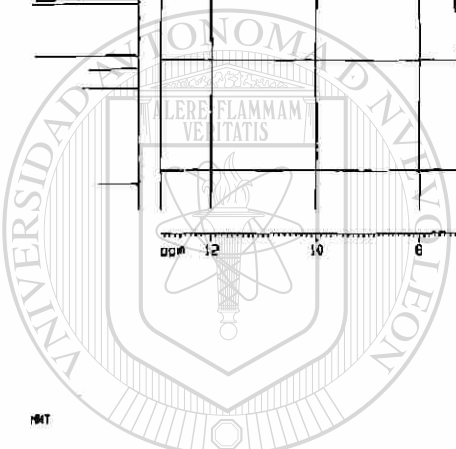
13C (ppm)	1H (ppm)	Assignment
155	7.2	Aromatic C=O
150	7.1	Aromatic C=O
145	7.0	Aromatic C=O
140	6.9	Aromatic C=O
135	6.8	Aromatic C=O
130	6.7	Aromatic C=O
125	6.6	Aromatic C=O
120	6.5	Aromatic C=O
115	6.4	Aromatic C=O
110	6.3	Aromatic C=O
105	6.2	Aromatic C=O
100	6.1	Aromatic C=O
95	6.0	Aromatic C=O
90	5.9	Aromatic C=O
85	5.8	Aromatic C=O
80	5.7	Aromatic C=O
75	5.6	Aromatic C=O
70	5.5	Aromatic C=O
65	5.4	Aromatic C=O
60	5.3	Aromatic C=O
55	5.2	Aromatic C=O
50	5.1	Aromatic C=O
45	5.0	Aromatic C=O
40	4.9	Aromatic C=O
35	4.8	Aromatic C=O
30	4.7	Aromatic C=O
25	4.6	Aromatic C=O
20	4.5	Aromatic C=O
15	4.4	Aromatic C=O
10	4.3	Aromatic C=O
5	4.2	Aromatic C=O
0	4.1	Aromatic C=O

INT

BS4: HMQC, Ampliación



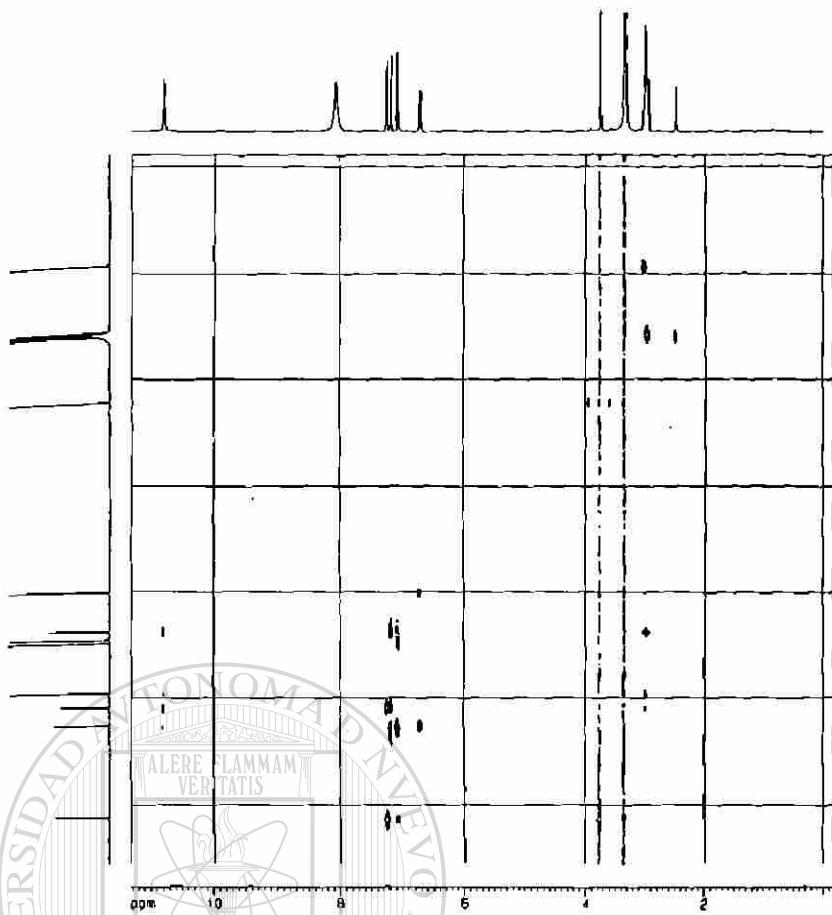
13C (ppm)	1H (ppm)	Assignment
120	7.2	Aromatic C=O
110	6.8	Aromatic C=O
100	7.2	Aromatic C=O



U A N L

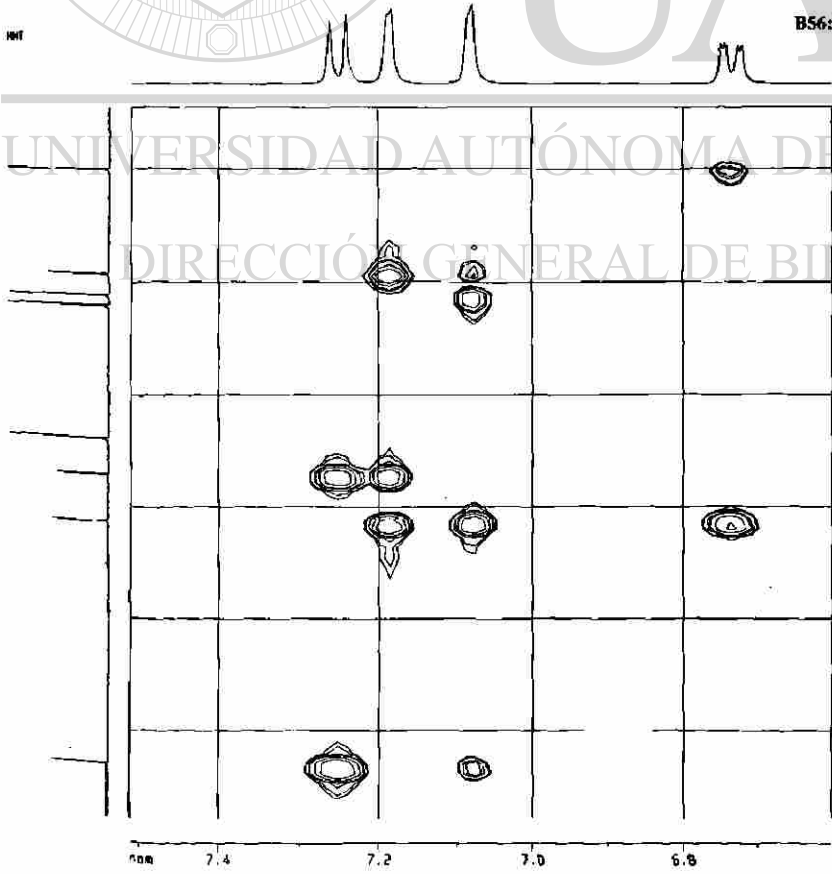
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS





B56: HMBC.

Chemical Shift (ppm)	Assignment
10.0	OH
9.8	OH
9.6	OH
9.4	OH
9.2	OH
9.0	OH
8.8	OH
8.6	OH
8.4	OH
8.2	OH
8.0	OH
7.8	OH
7.6	OH
7.4	OH
7.2	OH
7.0	OH
6.8	OH
6.6	OH
6.4	OH
6.2	OH
6.0	OH
5.8	OH
5.6	OH
5.4	OH
5.2	OH
5.0	OH
4.8	OH
4.6	OH
4.4	OH
4.2	OH
4.0	OH
3.8	OH
3.6	OH
3.4	OH
3.2	OH
3.0	OH
2.8	OH
2.6	OH
2.4	OH
2.2	OH
2.0	OH
1.8	OH
1.6	OH
1.4	OH
1.2	OH
1.0	OH
0.8	OH
0.6	OH
0.4	OH
0.2	OH

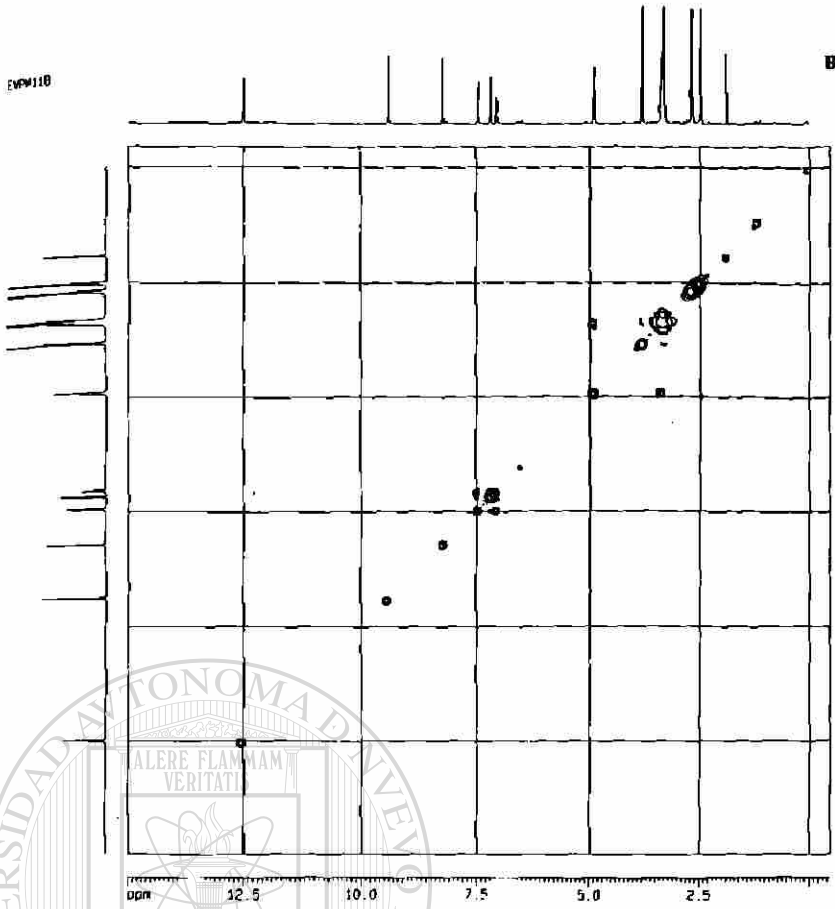


B56: HMBC, Ampliación.

Chemical Shift (ppm)	Assignment
10.0	OH
9.8	OH
9.6	OH
9.4	OH
9.2	OH
9.0	OH
8.8	OH
8.6	OH
8.4	OH
8.2	OH
8.0	OH
7.8	OH
7.6	OH
7.4	OH
7.2	OH
7.0	OH
6.8	OH
6.6	OH
6.4	OH
6.2	OH
6.0	OH
5.8	OH
5.6	OH
5.4	OH
5.2	OH
5.0	OH
4.8	OH
4.6	OH
4.4	OH
4.2	OH
4.0	OH
3.8	OH
3.6	OH
3.4	OH
3.2	OH
3.0	OH
2.8	OH
2.6	OH
2.4	OH
2.2	OH
2.0	OH
1.8	OH
1.6	OH
1.4	OH
1.2	OH
1.0	OH
0.8	OH
0.6	OH
0.4	OH
0.2	OH

EVM118

B59: COSY completo.



Current Data Parameters

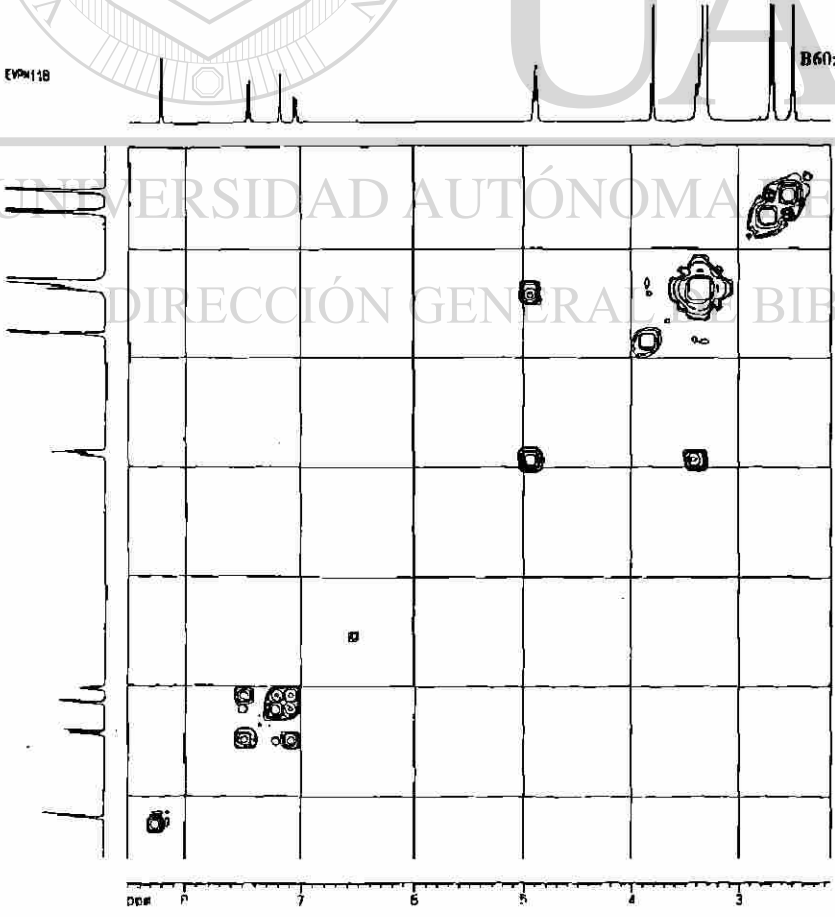
```

NAME: EVM118
PROCNO: 1
PR - Acquisition Parameters
Date_: 01 17
Time: 08:27
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm QNP1H/1
PULPROG: zgpg30
AQ: 0.08200000
RG: 655
AQ2: 0.00000000
SFO: 500.1370000
WDW: EM
SSB: 0
GB: 0
PC: 1.00
SC: 0.00
DC: 0.00
AS: 0.00
LA: 0.00
TE: 300.2
D1: 1.50000000
d11: 0.00000000
d12: 0.00000000
d13: 0.00000000
d14: 0.00000000
d15: 0.00000000
d16: 0.00000000
d17: 0.00000000
d18: 0.00000000
d19: 0.00000000
d20: 0.00000000
d21: 0.00000000
d22: 0.00000000
d23: 0.00000000
d24: 0.00000000
d25: 0.00000000
d26: 0.00000000
d27: 0.00000000
d28: 0.00000000
d29: 0.00000000
d30: 0.00000000
d31: 0.00000000
d32: 0.00000000
d33: 0.00000000
d34: 0.00000000
d35: 0.00000000
d36: 0.00000000
d37: 0.00000000
d38: 0.00000000
d39: 0.00000000
d40: 0.00000000
d41: 0.00000000
d42: 0.00000000
d43: 0.00000000
d44: 0.00000000
d45: 0.00000000
d46: 0.00000000
d47: 0.00000000
d48: 0.00000000
d49: 0.00000000
d50: 0.00000000
d51: 0.00000000
d52: 0.00000000
d53: 0.00000000
d54: 0.00000000
d55: 0.00000000
d56: 0.00000000
d57: 0.00000000
d58: 0.00000000
d59: 0.00000000
d60: 0.00000000
d61: 0.00000000
d62: 0.00000000
d63: 0.00000000
d64: 0.00000000
d65: 0.00000000
d66: 0.00000000
d67: 0.00000000
d68: 0.00000000
d69: 0.00000000
d70: 0.00000000
d71: 0.00000000
d72: 0.00000000
d73: 0.00000000
d74: 0.00000000
d75: 0.00000000
d76: 0.00000000
d77: 0.00000000
d78: 0.00000000
d79: 0.00000000
d80: 0.00000000
d81: 0.00000000
d82: 0.00000000
d83: 0.00000000
d84: 0.00000000
d85: 0.00000000
d86: 0.00000000
d87: 0.00000000
d88: 0.00000000
d89: 0.00000000
d90: 0.00000000
d91: 0.00000000
d92: 0.00000000
d93: 0.00000000
d94: 0.00000000
d95: 0.00000000
d96: 0.00000000
d97: 0.00000000
d98: 0.00000000
d99: 0.00000000
d100: 0.00000000

```

EVM118

B60: COSY, Ampliación.



Current Data Parameters

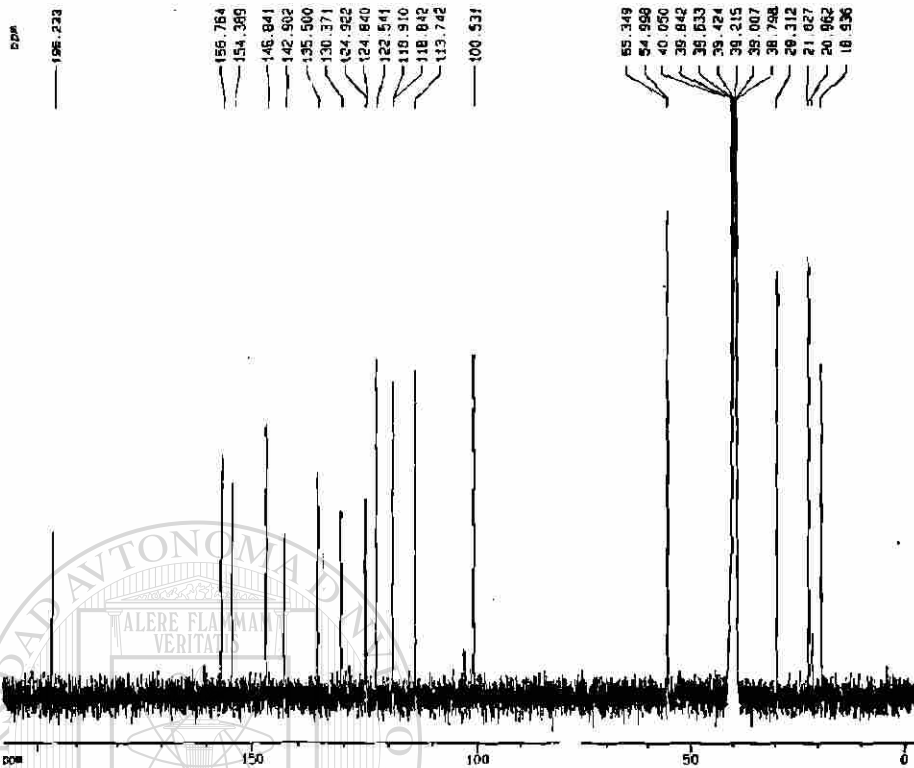
```

NAME: EVM118
PROCNO: 1
PR - Acquisition Parameters
Date_: 01 17
Time: 08:27
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm QNP1H/1
PULPROG: zgpg30
AQ: 0.08200000
RG: 655
AQ2: 0.00000000
SFO: 500.1370000
WDW: EM
SSB: 0
GB: 0
PC: 1.00
SC: 0.00
DC: 0.00
AS: 0.00
LA: 0.00
TE: 300.2
D1: 1.50000000
d11: 0.00000000
d12: 0.00000000
d13: 0.00000000
d14: 0.00000000
d15: 0.00000000
d16: 0.00000000
d17: 0.00000000
d18: 0.00000000
d19: 0.00000000
d20: 0.00000000
d21: 0.00000000
d22: 0.00000000
d23: 0.00000000
d24: 0.00000000
d25: 0.00000000
d26: 0.00000000
d27: 0.00000000
d28: 0.00000000
d29: 0.00000000
d30: 0.00000000
d31: 0.00000000
d32: 0.00000000
d33: 0.00000000
d34: 0.00000000
d35: 0.00000000
d36: 0.00000000
d37: 0.00000000
d38: 0.00000000
d39: 0.00000000
d40: 0.00000000
d41: 0.00000000
d42: 0.00000000
d43: 0.00000000
d44: 0.00000000
d45: 0.00000000
d46: 0.00000000
d47: 0.00000000
d48: 0.00000000
d49: 0.00000000
d50: 0.00000000
d51: 0.00000000
d52: 0.00000000
d53: 0.00000000
d54: 0.00000000
d55: 0.00000000
d56: 0.00000000
d57: 0.00000000
d58: 0.00000000
d59: 0.00000000
d60: 0.00000000
d61: 0.00000000
d62: 0.00000000
d63: 0.00000000
d64: 0.00000000
d65: 0.00000000
d66: 0.00000000
d67: 0.00000000
d68: 0.00000000
d69: 0.00000000
d70: 0.00000000
d71: 0.00000000
d72: 0.00000000
d73: 0.00000000
d74: 0.00000000
d75: 0.00000000
d76: 0.00000000
d77: 0.00000000
d78: 0.00000000
d79: 0.00000000
d80: 0.00000000
d81: 0.00000000
d82: 0.00000000
d83: 0.00000000
d84: 0.00000000
d85: 0.00000000
d86: 0.00000000
d87: 0.00000000
d88: 0.00000000
d89: 0.00000000
d90: 0.00000000
d91: 0.00000000
d92: 0.00000000
d93: 0.00000000
d94: 0.00000000
d95: 0.00000000
d96: 0.00000000
d97: 0.00000000
d98: 0.00000000
d99: 0.00000000
d100: 0.00000000

```

EVPH116

B61: ¹³C-RMN, Espectro normal.



Current Data Parameters
NAME (VPH116)
EXPNO 3
PROCNO 1

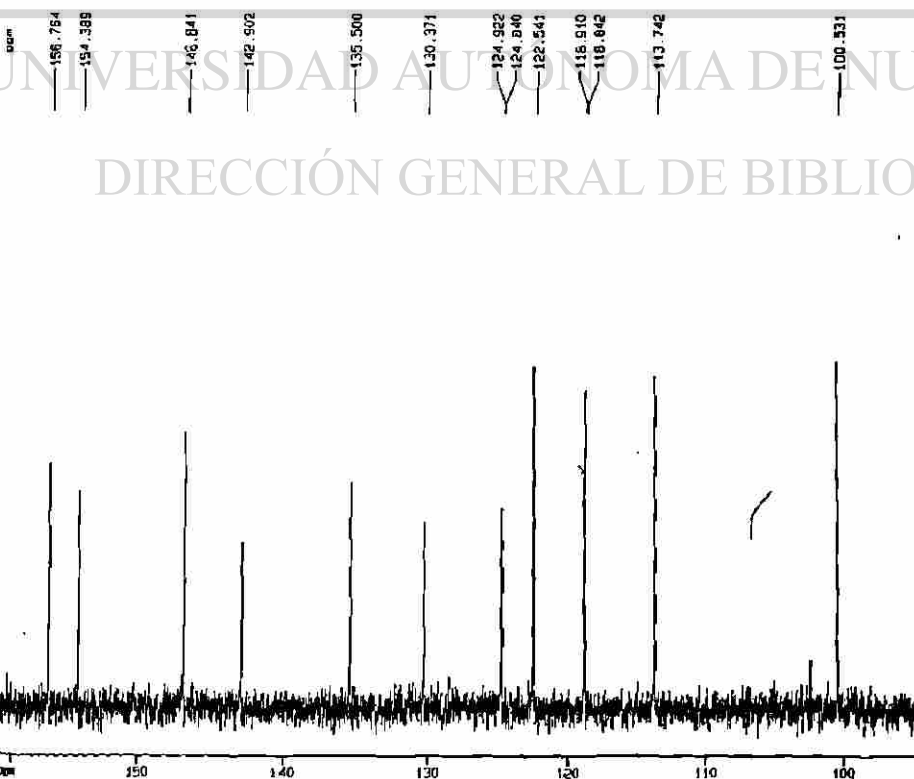
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 200511
Time 5.48
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Pelt100
PULPROG zgpg
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 640
DS 4
SWH 21051.725 MHz
FIDRES 0.320853 MHz
AQ 1.5204952 sec
RG 16384
DB 23.200 usec
DE 8.00 usec
TE 300.0 K
d11 0.0300000 sec
d12 0.0002000 sec
PL13 10.00 dB
D1 2.0000000 sec
CPOPRG2 mlti116
PCPU2 105.00 usec
SF02 400.1316005 MHz
NUC2 13
PL2 -3.00 dB
PL12 16.00 dB
P1 10.25 usec
DE 8.00 usec
SF01 100.6231330 MHz
NUC1 13C
PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 100.6196236 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.00

30 MHz plot parameters
CX 20.00 cm
FPP 200.564 ppm
F1 21084.79 MHz
F2 -4.841 MHz
SF 100.6196236 MHz
NUC1 13C
NUC2 13C

EVPH116

B62: ¹³C-RMN, Ampliación.

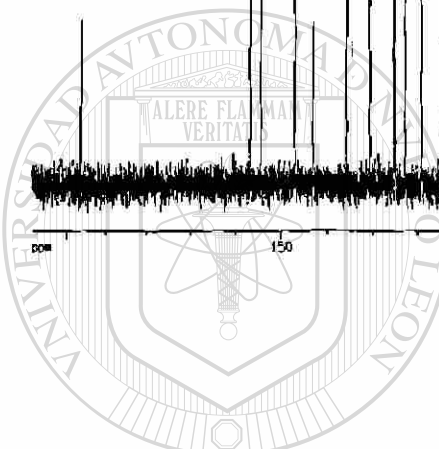


Current Data Parameters
NAME (VPH116)
EXPNO 3
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 200511
Time 5.48
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Pelt100
PULPROG zgpg
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 640
DS 4
SWH 21051.725 MHz
FIDRES 0.320853 MHz
AQ 1.5204952 sec
RG 16384
DB 23.200 usec
DE 8.00 usec
TE 300.0 K
d11 0.0300000 sec
d12 0.0002000 sec
PL13 10.00 dB
D1 2.0000000 sec
CPOPRG2 mlti116
PCPU2 105.00 usec
SF02 400.1316005 MHz
NUC2 13
PL2 -3.00 dB
PL12 16.00 dB
P1 10.25 usec
DE 8.00 usec
SF01 100.6231330 MHz
NUC1 13C
PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 100.6196236 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.00

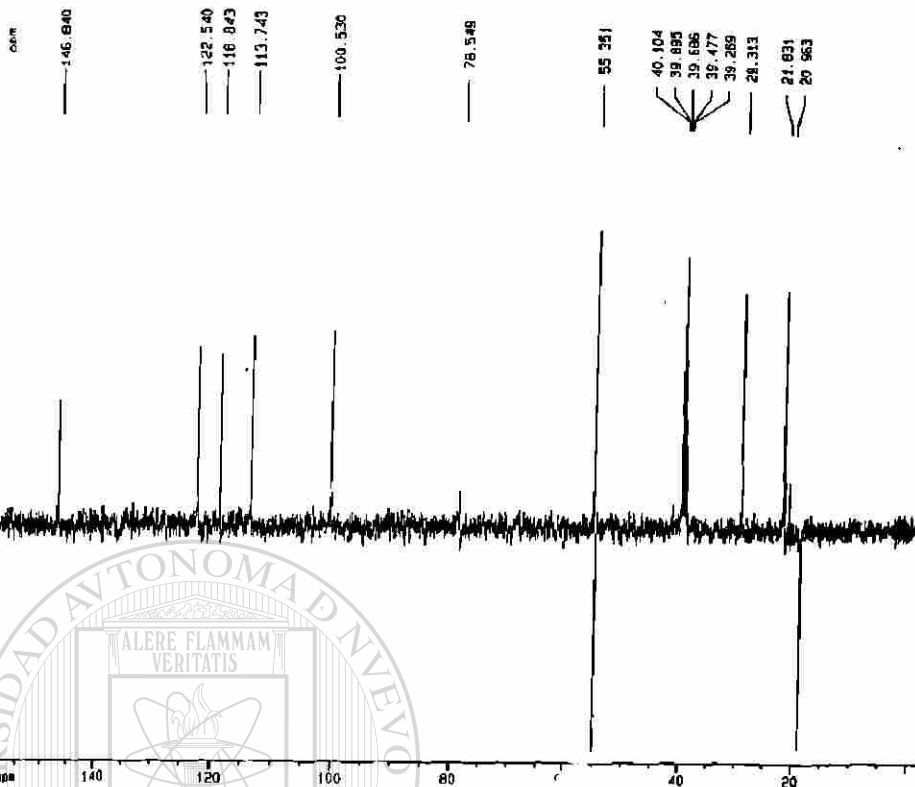
30 MHz plot parameters
CX 20.00 cm
FPP 151.261 ppm
F1 16029.32 MHz
F2 50.447 MHz
SF 100.6196236 MHz
NUC1 13C
NUC2 13C



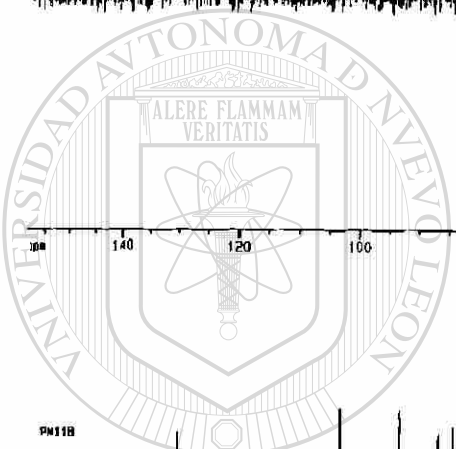
U A N L

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

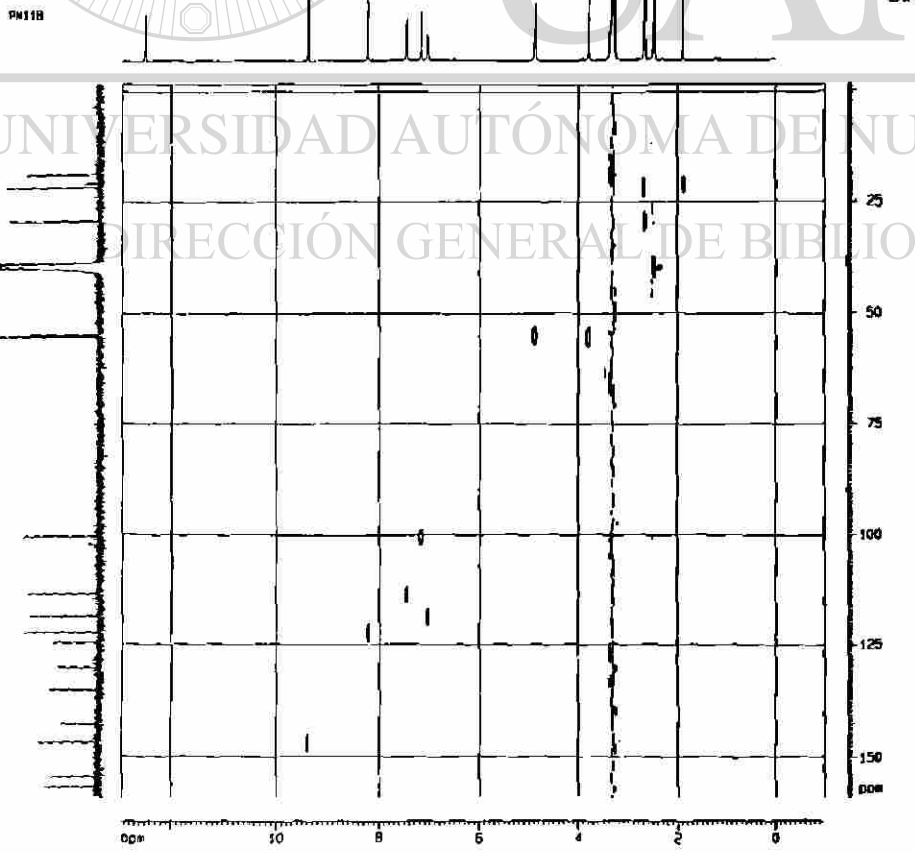


Current Data Parameters
 NAME EVPM118
 EXPNO 1
 PROCNO 1
 F2 - Acquisition Parameters
 SOLVENT water
 INSTRUM spect
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 SFO 400.136
 AS 32.768
 VS 32768
 SC 1
 SM 0
 SI 0
 FIDRES 0.482812 Hz
 AQ 1.0128812 sec
 ME 32.768
 SE 39.950 Hz
 TE 300.2 K
 D1 16.25 sec
 D2 2.00 sec
 D3 12.50 sec
 D4 25.00 sec
 C12Z 145.000000 sec
 C12 0.0034461 sec
 C12 0.0002700 sec
 ZDELTA 0.0000131 sec
 SI 2.00000000 sec
 R2 2.00000000 sec
 SFO 400.136000 MHz
 NUC1 1H
 NUC2 13C
 P1 100.000000 Hz
 P12 1.00 sec
 P12 1.00 sec
 JC 0.00 MHz
 C12PRG2 MLEV16
 RPDZ 100.00 MHz
 F2 - Processing parameters
 SI 32768
 SF 100.6176236 MHz
 NS 0
 DS 0
 AS 3.00 Hz
 MS 0
 SC 1.49
 SI 32768
 SF 100.6176236 MHz
 NS 0
 DS 0
 AS 3.00 Hz
 MS 0
 SC 1.49
 SI 32768
 SF 100.6176236 MHz
 NS 0
 DS 0
 AS 3.00 Hz
 MS 0
 SC 1.49



UNANL

B64: HMQC

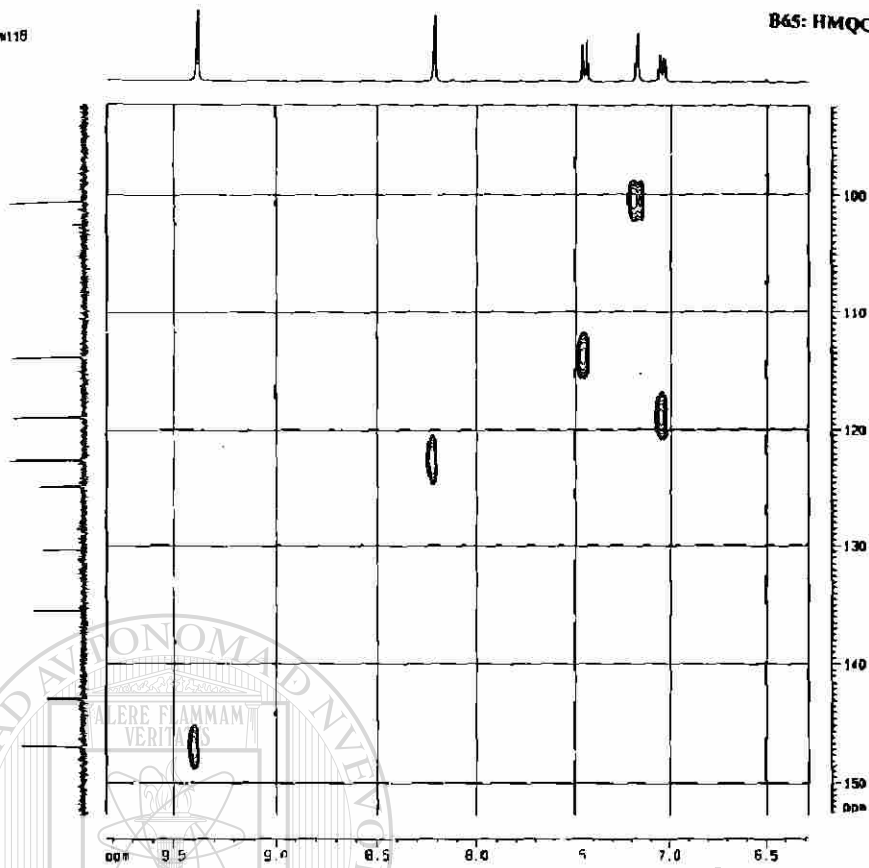


Current Data Parameters
 NAME EVPM118
 EXPNO 1
 PROCNO 1
 F2 - Acquisition Parameters
 SOLVENT water
 INSTRUM spect
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 SFO 400.136
 AS 32.768
 VS 32768
 SC 1
 SM 0
 SI 0
 FIDRES 0.482812 Hz
 AQ 1.0128812 sec
 ME 32.768
 SE 39.950 Hz
 TE 300.2 K
 D1 16.25 sec
 D2 2.00 sec
 D3 12.50 sec
 D4 25.00 sec
 C12Z 145.000000 sec
 C12 0.0034461 sec
 C12 0.0002700 sec
 ZDELTA 0.0000131 sec
 SI 2.00000000 sec
 R2 2.00000000 sec
 SFO 400.136000 MHz
 NUC1 1H
 NUC2 13C
 P1 100.000000 Hz
 P12 1.00 sec
 P12 1.00 sec
 JC 0.00 MHz
 C12PRG2 MLEV16
 RPDZ 100.00 MHz
 F2 - Processing parameters
 SI 32768
 SF 100.6176236 MHz
 NS 0
 DS 0
 AS 3.00 Hz
 MS 0
 SC 1.49
 SI 32768
 SF 100.6176236 MHz
 NS 0
 DS 0
 AS 3.00 Hz
 MS 0
 SC 1.49

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
 DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

EPM118

B65: HMQC, Ampliación.



Current Data Parameters

NAME: EPM118

PROBHD: 5mm QNP 1H/13

PULPROG: zgpg30

TD: 65536

SI: 32768

SD: 1

WDW: EM

SSB: 0

LB: 3.00

GB: 0

PC: 1.00

GC: 0

DC: 0

EC: 0

SC: 0

RC: 0

AR: 0

BR: 0

BL: 0

BR2: 0

BR3: 0

BR4: 0

BR5: 0

BR6: 0

BR7: 0

BR8: 0

BR9: 0

BR10: 0

BR11: 0

BR12: 0

BR13: 0

BR14: 0

BR15: 0

BR16: 0

BR17: 0

BR18: 0

BR19: 0

BR20: 0

BR21: 0

BR22: 0

BR23: 0

BR24: 0

BR25: 0

BR26: 0

BR27: 0

BR28: 0

BR29: 0

BR30: 0

BR31: 0

BR32: 0

BR33: 0

BR34: 0

BR35: 0

BR36: 0

BR37: 0

BR38: 0

BR39: 0

BR40: 0

BR41: 0

BR42: 0

BR43: 0

BR44: 0

BR45: 0

BR46: 0

BR47: 0

BR48: 0

BR49: 0

BR50: 0

BR51: 0

BR52: 0

BR53: 0

BR54: 0

BR55: 0

BR56: 0

BR57: 0

BR58: 0

BR59: 0

BR60: 0

BR61: 0

BR62: 0

BR63: 0

BR64: 0

BR65: 0

BR66: 0

BR67: 0

BR68: 0

BR69: 0

BR70: 0

BR71: 0

BR72: 0

BR73: 0

BR74: 0

BR75: 0

BR76: 0

BR77: 0

BR78: 0

BR79: 0

BR80: 0

BR81: 0

BR82: 0

BR83: 0

BR84: 0

BR85: 0

BR86: 0

BR87: 0

BR88: 0

BR89: 0

BR90: 0

BR91: 0

BR92: 0

BR93: 0

BR94: 0

BR95: 0

BR96: 0

BR97: 0

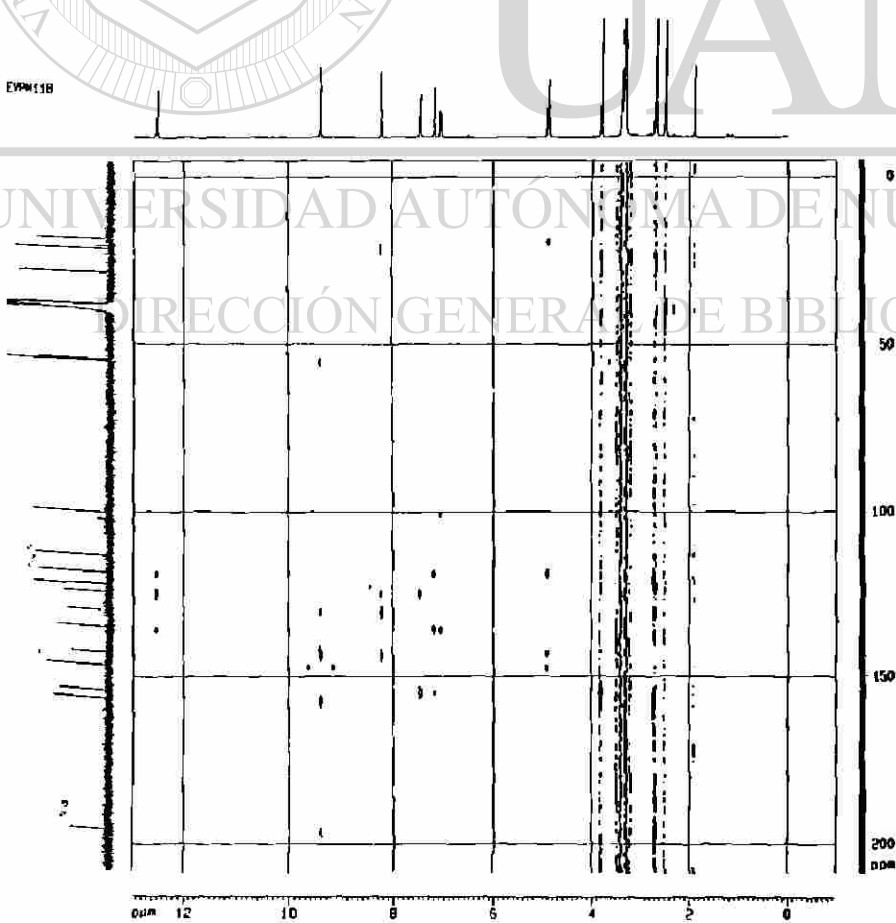
BR98: 0

BR99: 0

BR100: 0

EPM118

B66: HMBC.



Current Data Parameters

NAME: EPM118

PROBHD: 5mm QNP 1H/13

PULPROG: zgpg30

TD: 65536

SI: 32768

SD: 1

WDW: EM

SSB: 0

LB: 3.00

GB: 0

PC: 1.00

GC: 0

DC: 0

EC: 0

SC: 0

RC: 0

AR: 0

BR: 0

BL: 0

BR2: 0

BR3: 0

BR4: 0

BR5: 0

BR6: 0

BR7: 0

BR8: 0

BR9: 0

BR10: 0

BR11: 0

BR12: 0

BR13: 0

BR14: 0

BR15: 0

BR16: 0

BR17: 0

BR18: 0

BR19: 0

BR20: 0

BR21: 0

BR22: 0

BR23: 0

BR24: 0

BR25: 0

BR26: 0

BR27: 0

BR28: 0

BR29: 0

BR30: 0

BR31: 0

BR32: 0

BR33: 0

BR34: 0

BR35: 0

BR36: 0

BR37: 0

BR38: 0

BR39: 0

BR40: 0

BR41: 0

BR42: 0

BR43: 0

BR44: 0

BR45: 0

BR46: 0

BR47: 0

BR48: 0

BR49: 0

BR50: 0

BR51: 0

BR52: 0

BR53: 0

BR54: 0

BR55: 0

BR56: 0

BR57: 0

BR58: 0

BR59: 0

BR60: 0

BR61: 0

BR62: 0

BR63: 0

BR64: 0

BR65: 0

BR66: 0

BR67: 0

BR68: 0

BR69: 0

BR70: 0

BR71: 0

BR72: 0

BR73: 0

BR74: 0

BR75: 0

BR76: 0

BR77: 0

BR78: 0

BR79: 0

BR80: 0

BR81: 0

BR82: 0

BR83: 0

BR84: 0

BR85: 0

BR86: 0

BR87: 0

BR88: 0

BR89: 0

BR90: 0

BR91: 0

BR92: 0

BR93: 0

BR94: 0

BR95: 0

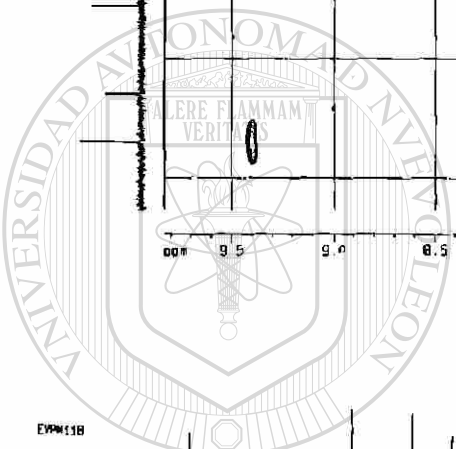
BR96: 0

BR97: 0

BR98: 0

BR99: 0

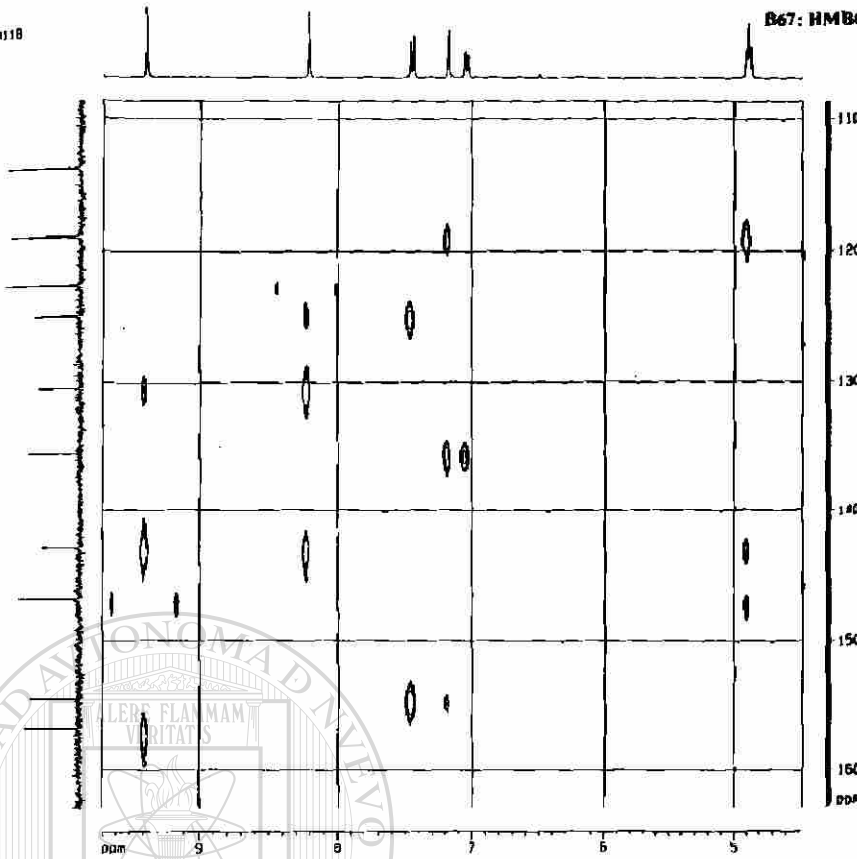
BR100: 0



U A N L

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

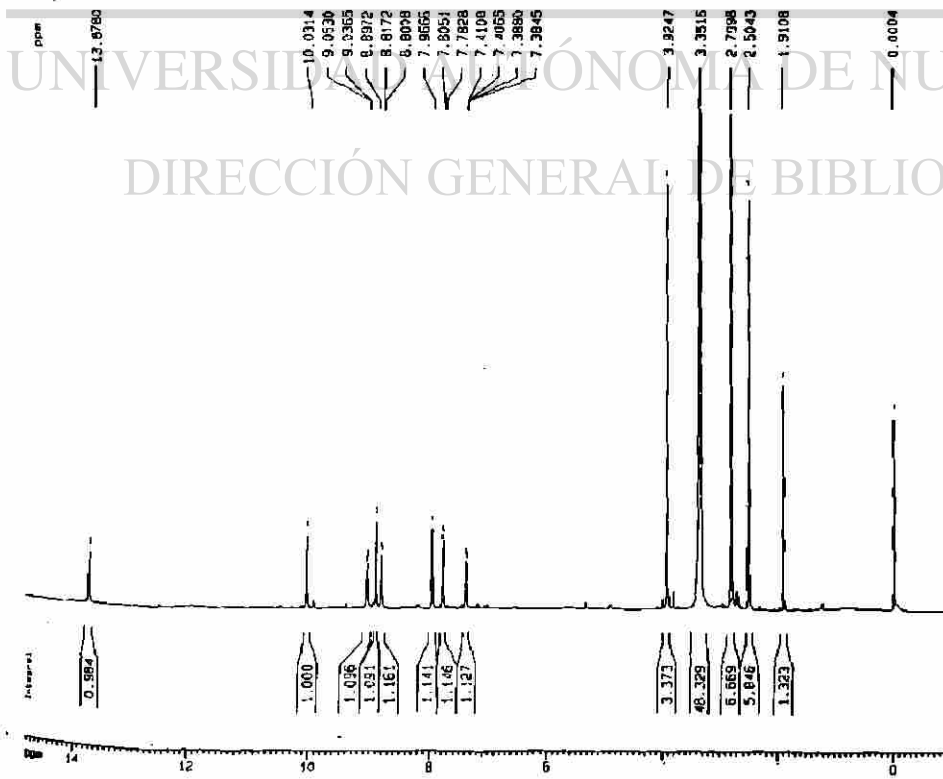
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



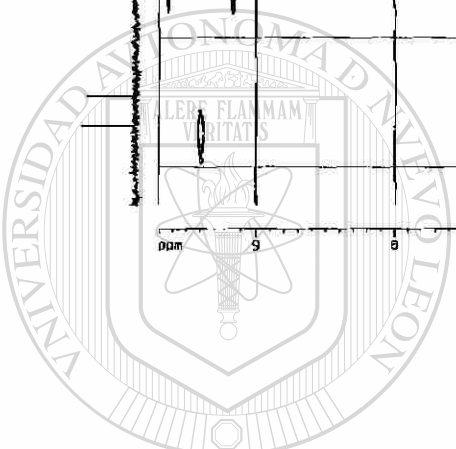
Current Data Parameters
 NAME: EYPM15C
 EXPNO: 1
 PROCNO: 1
 F2 - Acquisition Parameters
 Date_: 990508
 Time: 17 04
 INSTRUM: spect
 PROCPR: 5 mm Avic170
 PULPROG: zgpg30
 TD: 32768
 SOLVENT: DMSO
 NS: 64
 DS: 4
 SWH: 6410.206 Hz
 FIDRES: 0.180238 Hz
 AQ: 2.6422219 sec
 RG: 456.1
 DR: 79.000 usec
 DE: 8.00 usec
 TE: 300.0 K
 D1: 1.5000000 sec
 P1: 8.00 usec
 DE: 8.00 usec
 SFO1: 400.1529981 MHz
 NUC1: 1H
 PL1: -1.00 dB
 F2 - Processing parameters
 SI: 0192
 SF: 400.1500132 MHz
 WDW: EM
 SSB: 0
 LB: 0.30 Hz
 GB: 0
 PC: 0.10
 10 MHz elec operators
 CH: 20.00 cm
 FFP: 15.025 mm
 F1: 6011.95 Hz
 F2: 0.995 mm
 F3: -308.30 Hz
 FWHM: 0.00162 mm/cw
 FZCW: 328.51295 mm/cw

EYPM15C

B68: ¹H-RMN, Espectro completo.



Current Data Parameters
 NAME: EYPM15C
 EXPNO: 1
 PROCNO: 1
 F2 - Acquisition Parameters
 Date_: 990508
 Time: 17 04
 INSTRUM: spect
 PROCPR: 5 mm Avic170
 PULPROG: zgpg30
 TD: 32768
 SOLVENT: DMSO
 NS: 64
 DS: 4
 SWH: 6410.206 Hz
 FIDRES: 0.180238 Hz
 AQ: 2.6422219 sec
 RG: 456.1
 DR: 79.000 usec
 DE: 8.00 usec
 TE: 300.0 K
 D1: 1.5000000 sec
 P1: 8.00 usec
 DE: 8.00 usec
 SFO1: 400.1529981 MHz
 NUC1: 1H
 PL1: -1.00 dB
 F2 - Processing parameters
 SI: 0192
 SF: 400.1500132 MHz
 WDW: EM
 SSB: 0
 LB: 0.30 Hz
 GB: 0
 PC: 0.10
 10 MHz elec operators
 CH: 20.00 cm
 FFP: 15.025 mm
 F1: 6011.95 Hz
 F2: 0.995 mm
 F3: -308.30 Hz
 FWHM: 0.00162 mm/cw
 FZCW: 328.51295 mm/cw

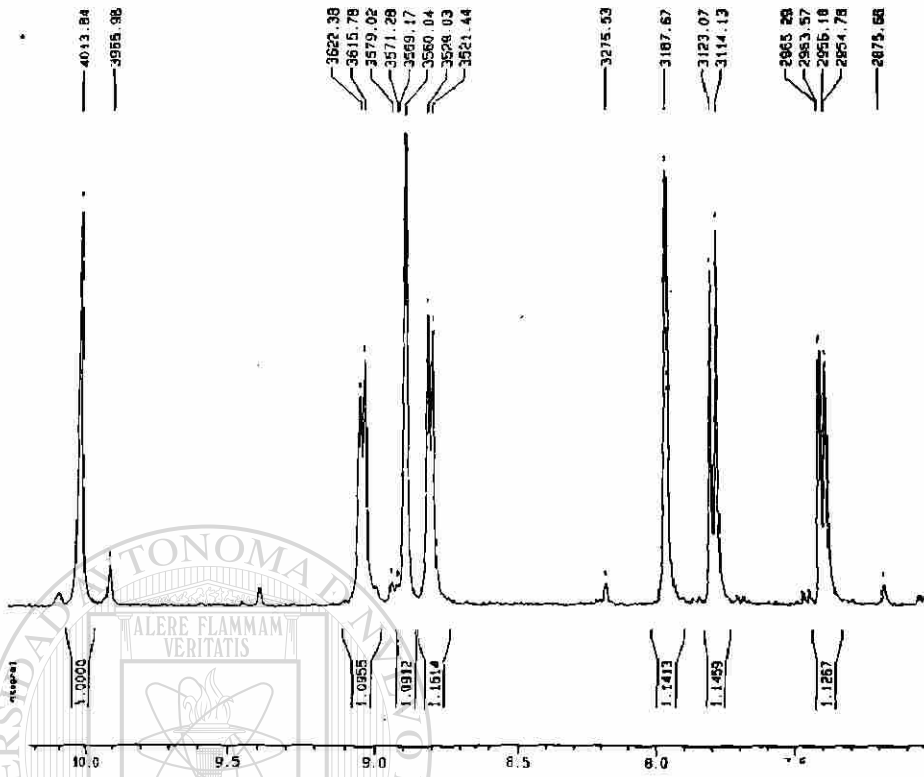


U
A
N
L

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
 DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

EPM15C

B69: ¹H-RMN. Amplific6n.



Current Data Parameters
 NAME EPM15C
 EXPNO 1
 PROCNO 1

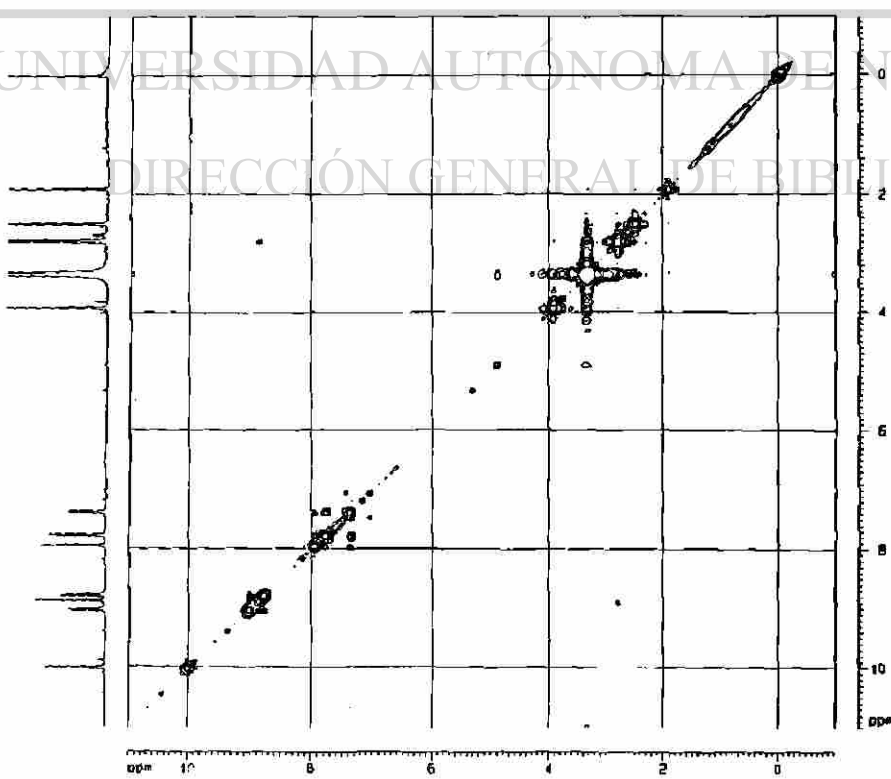
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 990609
 Time 17.04
 INSTRUM spect
 PROCNO 5 w Multisw
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 64
 DS 4
 SWH 6410.258 Hz
 FIDRES 0.169236 Hz
 AQ 2.6422212 sec
 RG 424
 SD 78.000 usec
 DE 8.00 usec
 TE 300.2 K
 DS 1.00000000 sec
 PI 0.00 usec
 DE 0.00 usec
 SFO1 400.1320001 MHz
 MUC1 14
 RL1 1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 8182
 SF 400.1300012 MHz
 MD 0
 SSB 0
 LB 0.20 Hz
 GB 0
 DC 0.10

1D NMR list parameters
 CH 20.00 cm
 F1P 10.304 ppm
 F1 4131.81 Hz
 F2P 7.024 ppm
 F2 2810.87 Hz
 PPMCH 0.00000 ppm/cm
 MCH 86.02180 Hz/cm

EPM 15C

B70: COSY completo.



Current Data Parameters
 NAME EPM15C
 EXPNO 1
 PROCNO 1

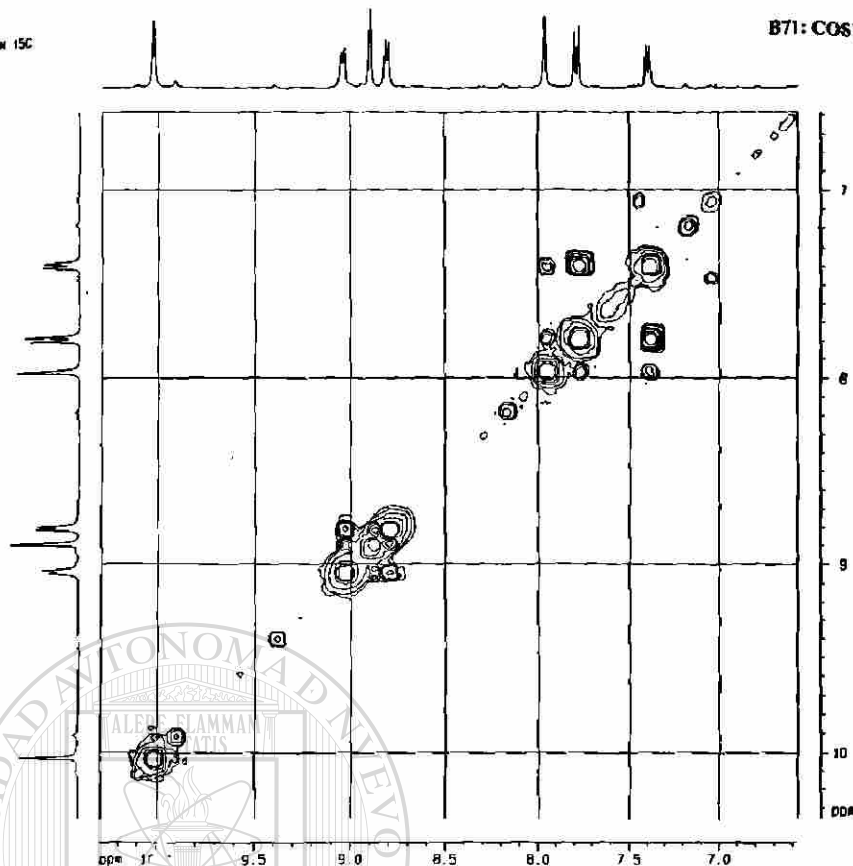
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 990609
 Time 17.04
 INSTRUM spect
 PROCNO 5 w Multisw
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 64
 DS 4
 SWH 6410.258 Hz
 FIDRES 0.169236 Hz
 AQ 2.6422212 sec
 RG 424
 SD 78.000 usec
 DE 8.00 usec
 TE 300.2 K
 DS 1.00000000 sec
 PI 0.00 usec
 DE 0.00 usec
 SFO1 400.1320001 MHz
 MUC1 14
 RL1 1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 8182
 SF 400.1300012 MHz
 MD 0
 SSB 0
 LB 0.20 Hz
 GB 0
 DC 0.10

1D NMR list parameters
 CH 20.00 cm
 F1P 10.304 ppm
 F1 4131.81 Hz
 F2P 7.024 ppm
 F2 2810.87 Hz
 PPMCH 0.00000 ppm/cm
 MCH 86.02180 Hz/cm

EVPN 15C

B71: COSY, Ampliación.



```

Current Data Parameters
NAME      EVPN15C
PROCNO    1

F2 - Acquisition Parameters
Date_     990819
Time      11 08
INSTRUM   spect
PROBHD    5 mm Mult.1H
PULPROG   zgpg30
TD         32768
SOLVENT   DMSO
NS         8192
DS         4
SWH        21251.725 Hz
FIDRES     0.057108 Hz
AQ         0.7682676 sec
RG         32768
OR         23.200 usec
DE         0.00 usec
TE         300.2 K
d11        0.030000 sec
d12        16.00 usec
CPDPRG2   waltz16
PCPD2      105.00 vsec
SFO2       400.1318005 MHz
NUC2       1H
PL2        -3.00 usec
P1         2.0000000 sec
DE         0.00 usec
SF01       100.6230418 MHz
NUC1       13C
PL1        -1.00 usec

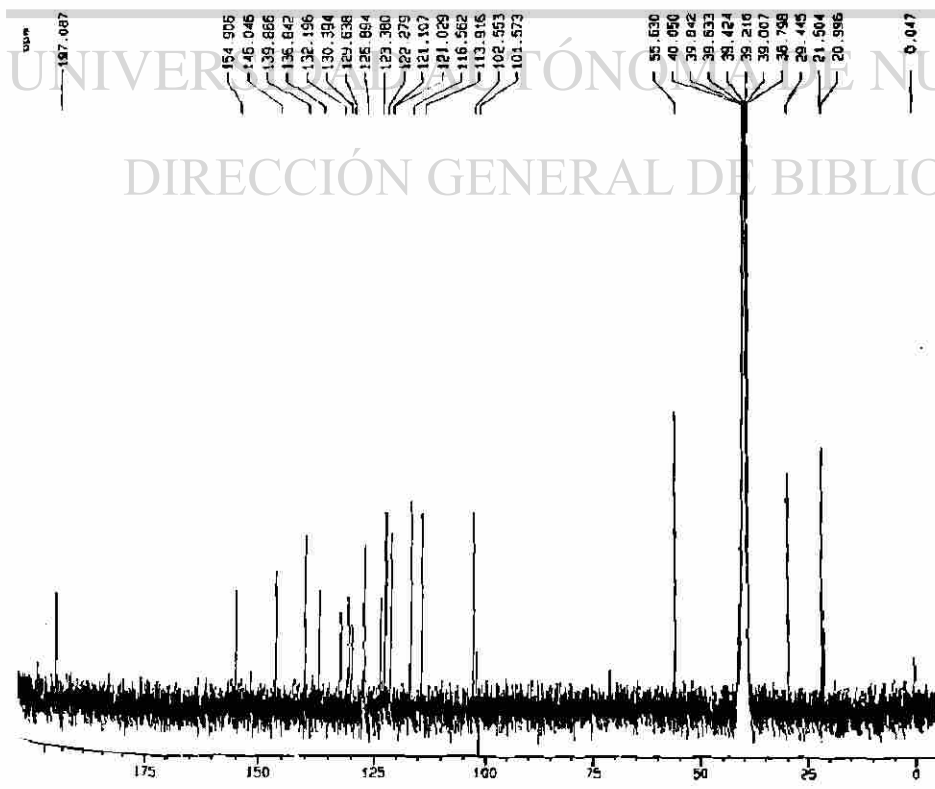
F1 - Processing parameters
SI         32768
SF         100.6126730 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         1.00 Hz
GB         0
PC         1.40

F0 - Acquisition Parameters
SI         32768
SF         100.6126730 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         1.00 Hz
GB         0
PC         1.40

F0 - Processing parameters
SI         32768
SF         100.6126730 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         1.00 Hz
GB         0
PC         1.40
  
```

EVPN15C

B72: ¹³C-RMN completo.



```

Current Data Parameters
NAME      EVPN15C
PROCNO    1

F2 - Acquisition Parameters
Date_     990819
Time      11 08
INSTRUM   spect
PROBHD    5 mm Mult.1H
PULPROG   zgpg30
TD         32768
SOLVENT   DMSO
NS         8192
DS         4
SWH        21251.725 Hz
FIDRES     0.057108 Hz
AQ         0.7682676 sec
RG         32768
OR         23.200 usec
DE         0.00 usec
TE         300.2 K
d11        0.030000 sec
d12        16.00 usec
CPDPRG2   waltz16
PCPD2      105.00 vsec
SFO2       400.1318005 MHz
NUC2       1H
PL2        -3.00 usec
P1         2.0000000 sec
DE         0.00 usec
SF01       100.6230418 MHz
NUC1       13C
PL1        -1.00 usec

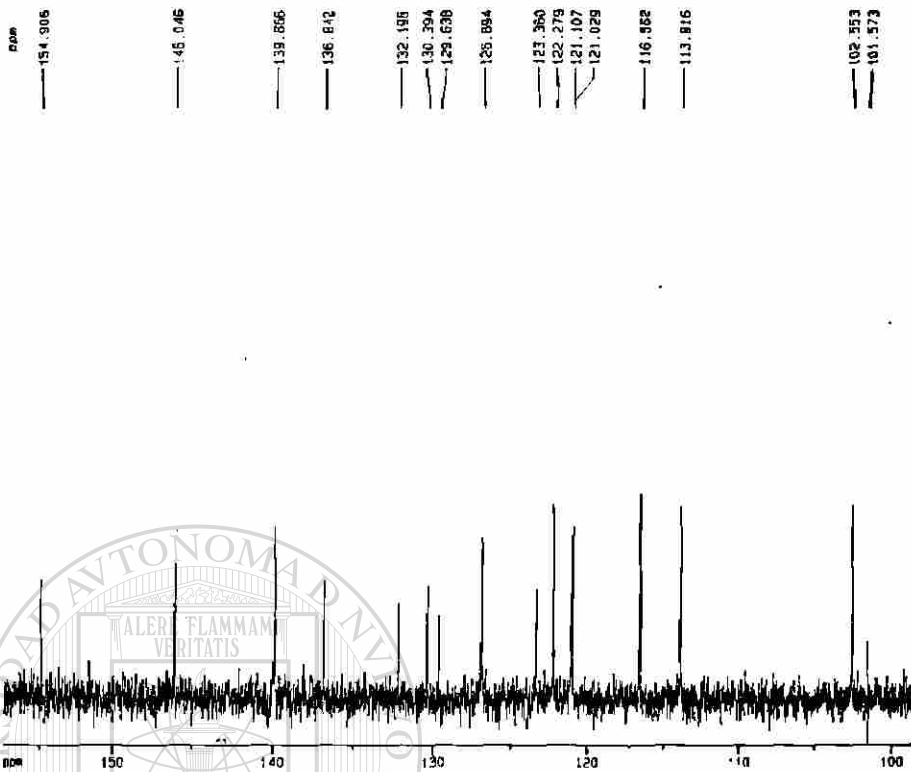
F1 - Processing parameters
SI         32768
SF         100.6126730 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         1.00 Hz
GB         0
PC         1.40

F0 - Acquisition Parameters
SI         32768
SF         100.6126730 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         1.00 Hz
GB         0
PC         1.40

F0 - Processing parameters
SI         32768
SF         100.6126730 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         1.00 Hz
GB         0
PC         1.40
  
```

EVK15C

B73: ¹³C-RMN, amplificación.

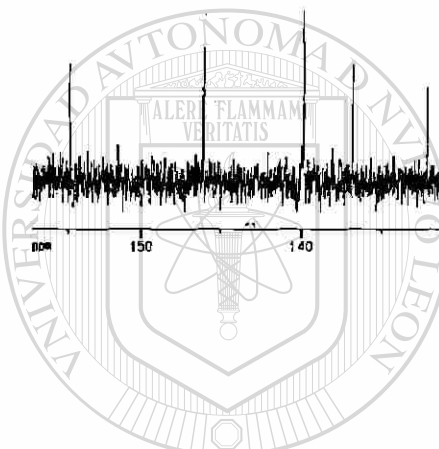


Current Data Parameters
NAME EVK15C
EXPNO 3
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 090810
Time 1.00
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Multis
PULPROG zgpg
TD 32768
SOLVENT DMSO
NS 8182
DS 8
SMA 21551.725 Hz
FIDRES 0.65796 Hz
AQ 0.760276 sec
RG 32768
OR 23.200 usec
DE 8.00 usec
TE 300.2 K
d11 0.030000 sec
d12 16.00 dB
COPROG2 multif1
PCPR2 100.00 usec
SF02 400.1318000 MHz
NUC2 13C
PL2 -3.00 dB
D1 2.0000000 sec
P1 10.25 usec
DE 8.00 usec
SF01 100.6230410 MHz
NUC1 13C
PL1 -1.00 dB

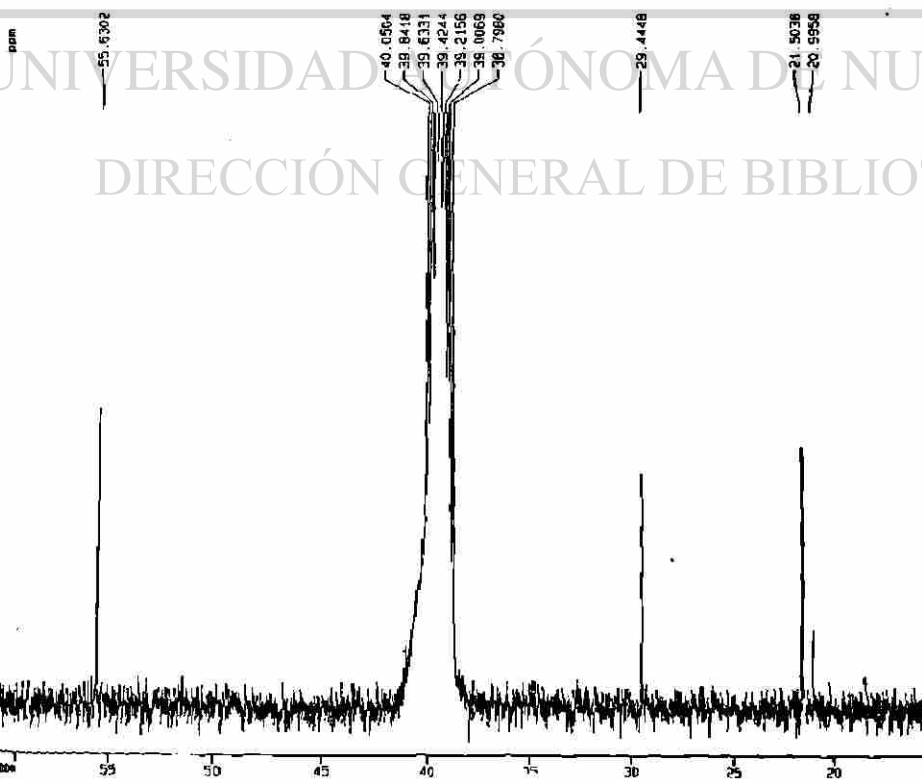
F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 100.6196230 MHz
MHZ 0
SFO 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.40

10 MHz data parameters
CX 20.00 cm
F1F 61.156 ppm
F1 154.87 MHz
F2F 15.325 ppm
F2 1567.41 MHz
PUNCH 2.27680 cm/Hz
HZC 200.000



EVK15C

B74: ¹³C-RMN, amplificación.



Current Data Parameters
NAME EVK15C
EXPNO 3
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 090810
Time 1.00
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Multis
PULPROG zgpg
TD 32768
SOLVENT DMSO
NS 8182
DS 8
SMA 21551.725 Hz
FIDRES 0.65796 Hz
AQ 0.760276 sec
RG 32768
OR 23.200 usec
DE 8.00 usec
TE 300.2 K
d11 0.030000 sec
d12 16.00 dB
COPROG2 multif1
PCPR2 100.00 usec
SF02 400.1318000 MHz
NUC2 13C
PL2 -3.00 dB
D1 2.0000000 sec
P1 10.25 usec
DE 8.00 usec
SF01 100.6230410 MHz
NUC1 13C
PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 100.6196230 MHz
MHZ 0
SFO 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.40

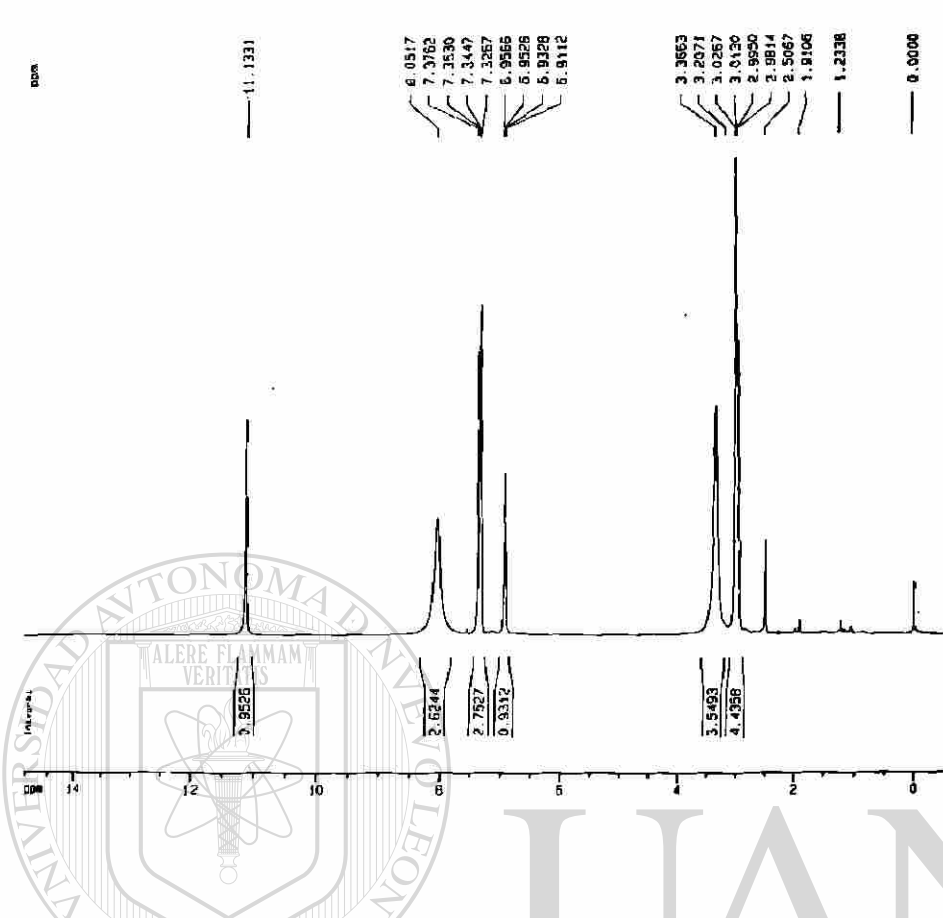
10 MHz data parameters
CX 20.00 cm
F1F 61.156 ppm
F1 154.87 MHz
F2F 15.325 ppm
F2 1567.41 MHz
PUNCH 2.27680 cm/Hz
HZC 200.000

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



EVP-7H/I

B75: ¹H-RMN, Espectro normal.

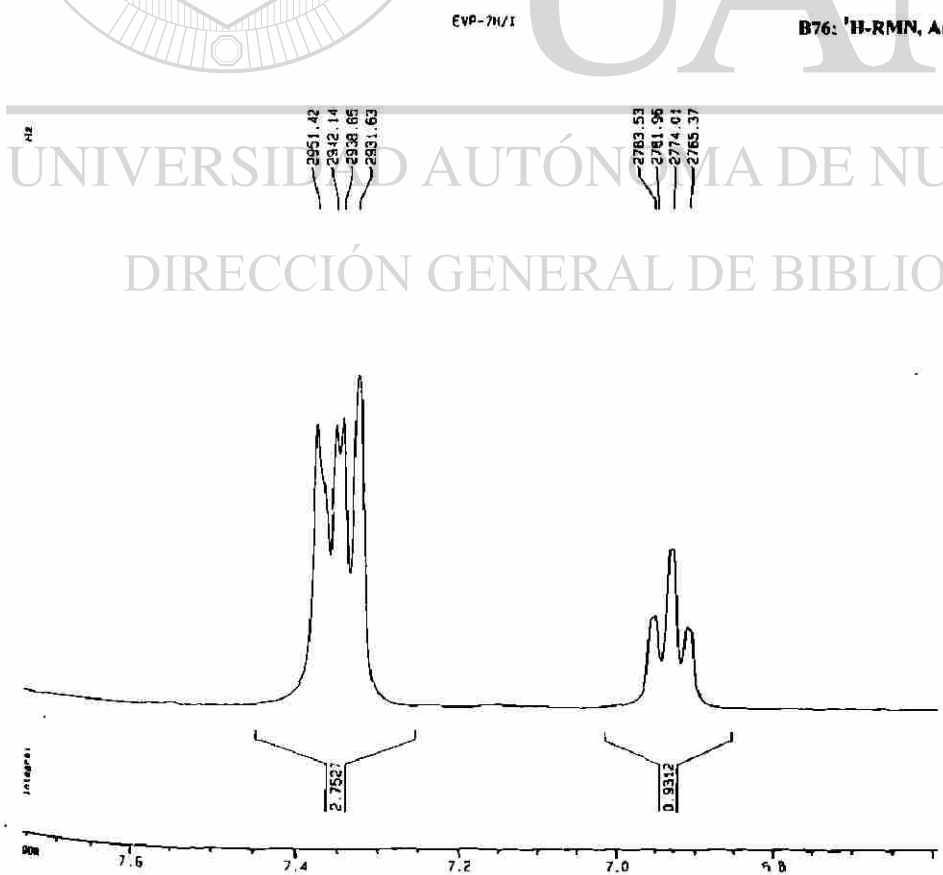


Current Data Parameters
 NAME (EVP7H)
 EXPNO 1
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 080823
 Time 11 41
 INSTRUM spect
 PROBO 5 mm Multisw
 PULPROG zg
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 32
 DS 2
 SFO 600.001 MHz
 FIDRES 0.200453 Hz
 AQ 2.388676 sec
 RG 327.5
 DR 73.200 usec
 DE 8.00 usec
 TE 300.2 K
 D1 1.0000000 sec
 P1 12.50 usec
 DE 8.00 usec
 SFO1 400.130054 MHz
 NUC1 1H
 PC 1.00

F2 - Processing parameters
 SI 16384
 SF 400.130054 MHz
 NH 64
 SH 0
 LB 0.38 Hz
 GB 0
 PC 1.00

1D MR 1st parameters
 CE 20.00 cm
 F1P 15.000 ppm
 F1 600.125 MHz
 F2P -0.500 ppm
 F2 -200.06 MHz
 PRIN 0.77509 ppm/cm
 N2CH 310.10077 MHz/cm

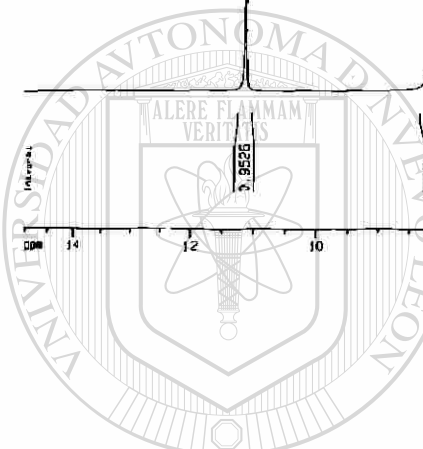


Current Data Parameters
 NAME (EVP7H)
 EXPNO 1
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 080823
 Time 11 41
 INSTRUM spect
 PROBO 5 mm Multisw
 PULPROG zg
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 32
 DS 2
 SFO 600.001 MHz
 FIDRES 0.200453 Hz
 AQ 2.388676 sec
 RG 327.5
 DR 73.200 usec
 DE 8.00 usec
 TE 300.2 K
 D1 1.0000000 sec
 P1 12.50 usec
 DE 8.00 usec
 SFO1 400.130054 MHz
 NUC1 1H
 PC 1.00

F2 - Processing parameters
 SI 16384
 SF 400.130054 MHz
 NH 64
 SH 0
 LB 0.38 Hz
 GB 0
 PC 1.00

1D MR 1st parameters
 CE 20.00 cm
 F1P 1.757 ppm
 F1 603.85 MHz
 F2P 6.504 ppm
 F2 2638.51 MHz
 PRIN 0.05815 ppm/cm
 N2CH 23.26745 MHz/cm



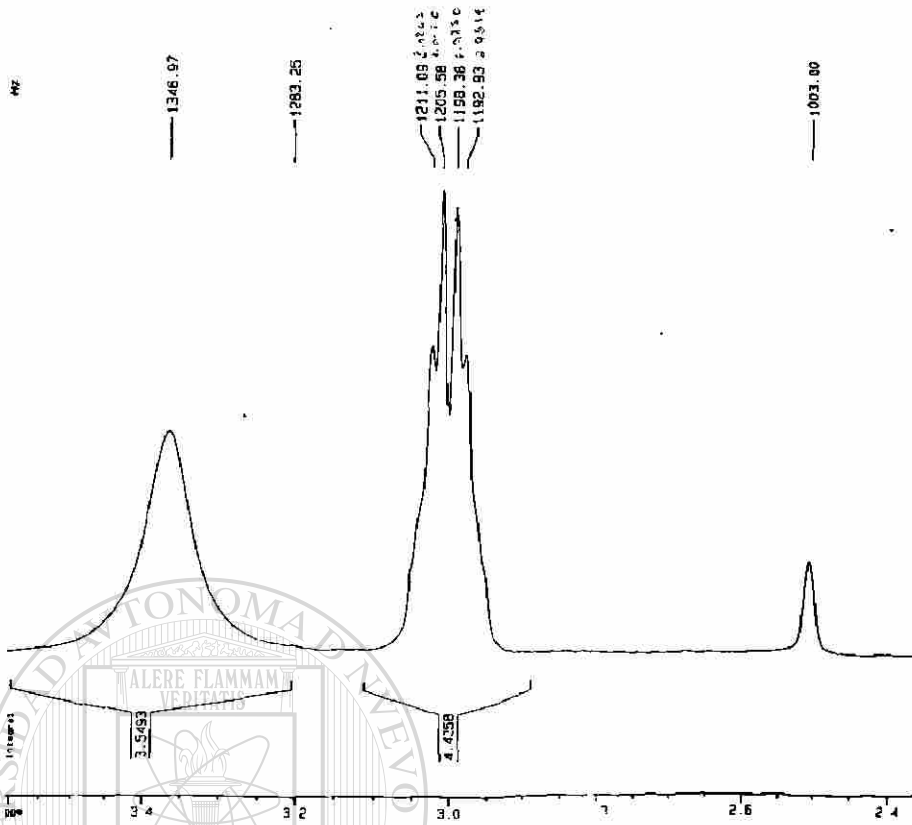
U A N L

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

EVP-7H/1

B77: ¹H-RMN. Ampliación.

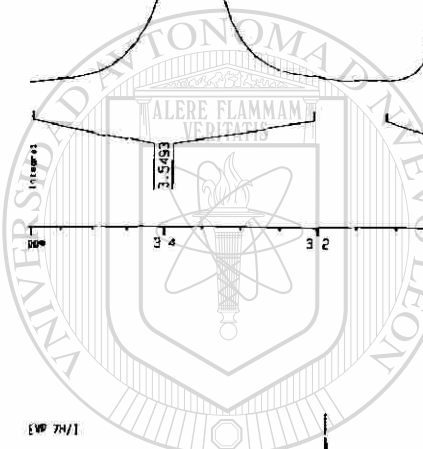


Current Data Parameters
NAME: B77
EXPNO: 1
PROCNO: 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_: 200803
Time: 11:41
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm Nalimha
PULPROG: zgpg30
TD: 32768
SOLVENT: DMSO
NS: 2
DS: 32
SWH: 8830.001 Hz
FIDRES: 0.208453 Hz
AQ: 2.398675 sec
RG: 372.5
Dw: 73.200 usec
DE: 8.00 usec
TE: 300.0 K
D1: 1.0000000 sec
P1: 17.50 usec
DE: 8.00 usec
SFO1: 400.130054 MHz
NUC1: 1H
PL1: -3.00 dB

F2 - Processing parameters
SI: 32768
SF: 400.130054 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 0.30 Hz
GB: 0
PC: 1.00

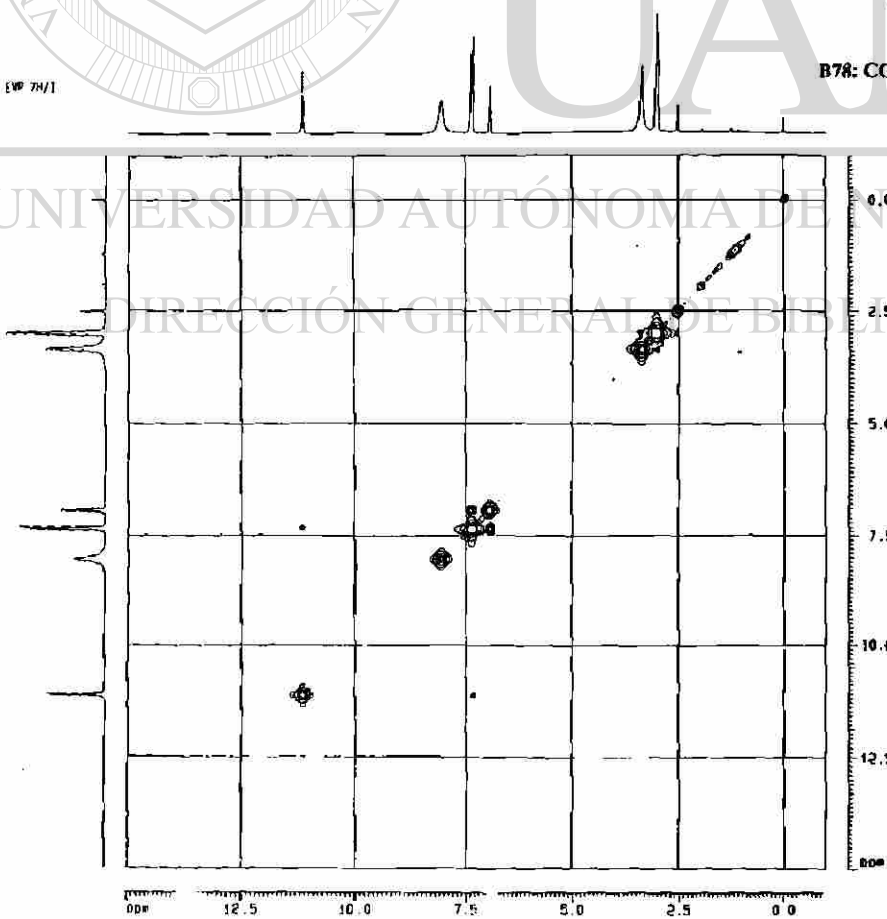
GDMS plot parameters
CX: 20.00 cm
FID: 3.000 usec
F1: 1442.56 Hz
F2: 2.359 usec
F3: 943.81 Hz
PROBHD: 0.00237 mm/cm
NUC1: 24.99726 Hz/cm



U A N L

EVP 7H/1

B78: COSY completo.



Current Data Parameters
NAME: B78
EXPNO: 2
PROCNO: 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_: 200803
Time: 11:40
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm Nalimha
PULPROG: zgpg30
TD: 32768
SOLVENT: DMSO
NS: 2
DS: 32
SWH: 8830.001 Hz
FIDRES: 0.208453 Hz
AQ: 2.398675 sec
RG: 372.5
Dw: 73.200 usec
DE: 8.00 usec
TE: 300.0 K
D1: 1.0000000 sec
P1: 17.50 usec
DE: 8.00 usec
SFO1: 400.130054 MHz
NUC1: 1H
PL1: -3.00 dB

F2 - Processing parameters
SI: 32768
SF: 400.130054 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 0.30 Hz
GB: 0
PC: 1.00

F1 - Processing parameters
SI: 32768
SF: 400.130054 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 0.30 Hz
GB: 0
PC: 1.00

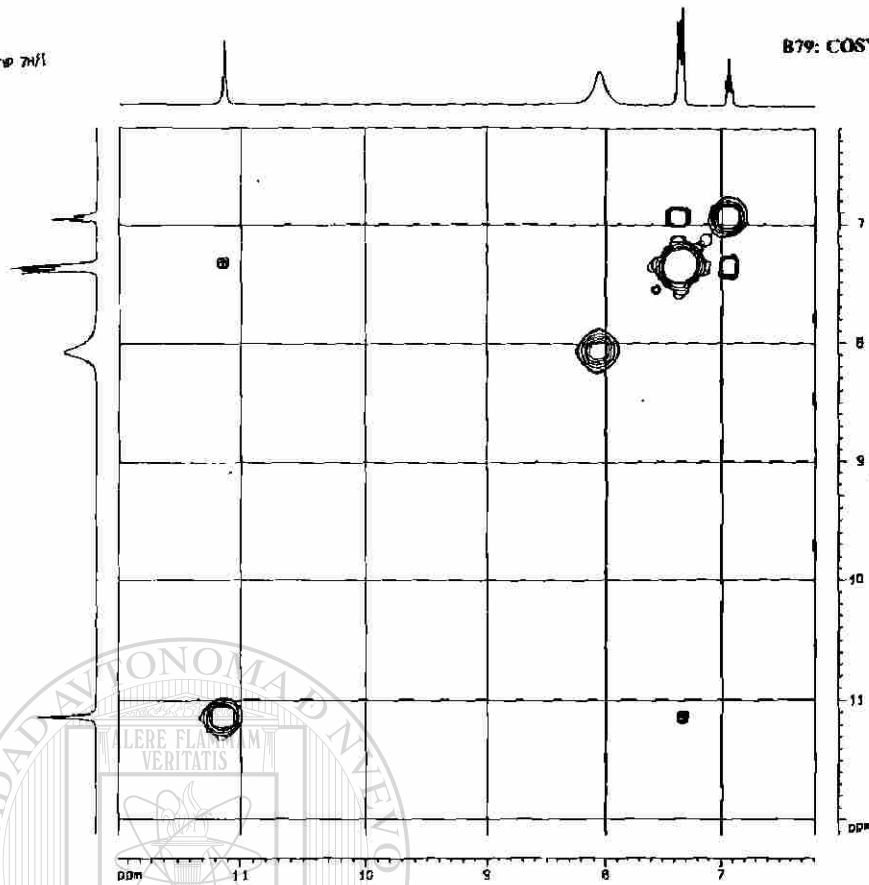
GDMS plot parameters
CX: 20.00 cm
FID: 3.000 usec
F1: 1442.56 Hz
F2: 2.359 usec
F3: 943.81 Hz
PROBHD: 0.00237 mm/cm
NUC1: 24.99726 Hz/cm

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

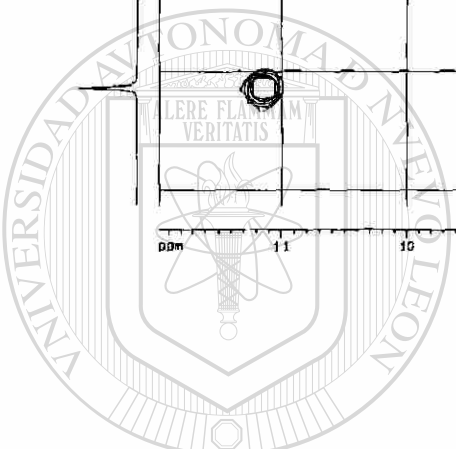
7/1

B79: COSY. Ampliación.



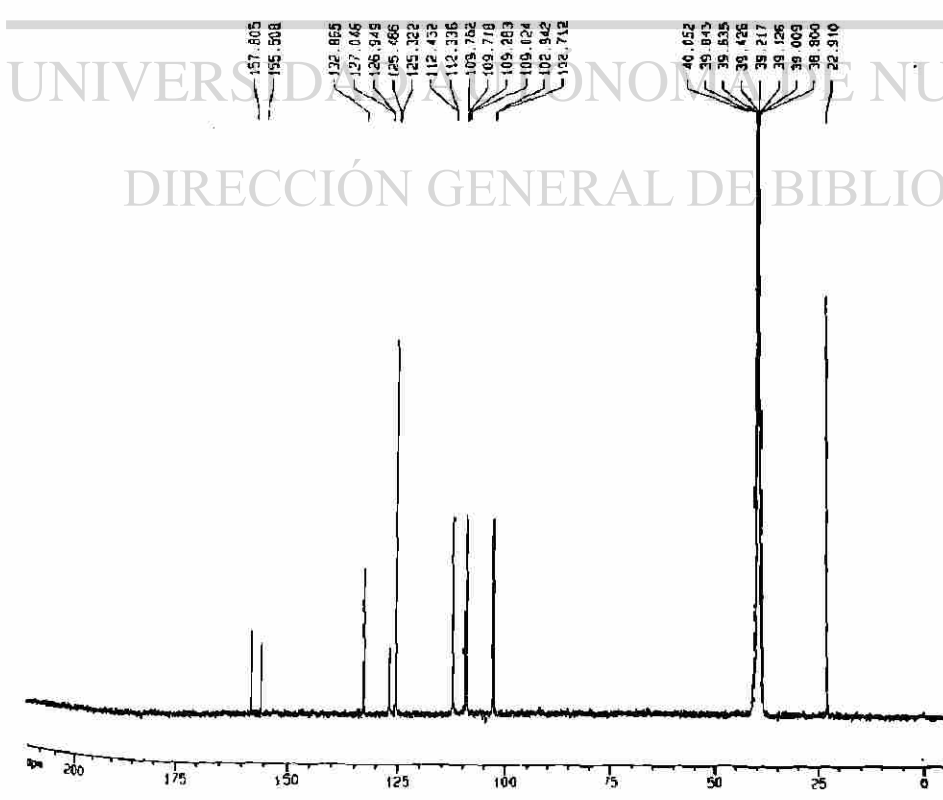
Current Data Parameters

NAME	EXP791
PROCNO	1
F2 - Acquisition Parameters	
Date_	11-08-82
Time	11:48
INSTRUM	masfr
PROBHD	5 mm Mult 100
PULPROG	zgpg30
TD	65536
SI	32768
SD	0.000000 sec
DE	0.000000 sec
TE	300.2 K
D1	0.000000 sec
D11	0.000000 sec
D12	0.000000 sec
PL13	18.00 dB
Q1	2.0000000 sec
CPROG2	waltz16
PCPD2	100.00 MHz
SFO2	400.1314005 MHz
NUC2	13C
PL2	-3.00 dB
PL12	18.00 dB
PL4	10.00 MHz
DE	0.00 MHz
SFO1	100.6232688 MHz
NUC1	13C
PL1	-1.00 dB
F2 - Processing parameters	
SI	32768
SF	100.6232688 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	3.00 Hz
GB	0
PC	1.00
90 deg rot parameters	
CR	20.00 deg
F1	214.752 MHz
F2	-5.140 MHz
PHASE2	10.90571 MHz/CP
HYPER	400.1314005 MHz/CP



EXP 7/1

B80: ¹³C-RMN, Espectro normal.



Current Data Parameters

NAME	EXP791
EXPNO	3
PROCNO	1
F2 - Acquisition Parameters	
Date_	080887
Time	10:12
INSTRUM	masfr
PROBHD	5 mm Mult 100
PULPROG	zgpg30
TD	65536
SI	32768
SD	0.000000 sec
DE	0.000000 sec
TE	300.2 K
D1	0.000000 sec
D11	0.000000 sec
D12	0.000000 sec
PL13	18.00 dB
Q1	2.0000000 sec
CPROG2	waltz16
PCPD2	100.00 MHz
SFO2	400.1314005 MHz
NUC2	13C
PL2	-3.00 dB
PL12	18.00 dB
PL4	10.00 MHz
DE	0.00 MHz
SFO1	100.6232688 MHz
NUC1	13C
PL1	-1.00 dB
F2 - Processing parameters	
SI	32768
SF	100.6232688 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	3.00 Hz
GB	0
PC	1.00
90 deg rot parameters	
CR	20.00 deg
F1	214.752 MHz
F2	-5.140 MHz
PHASE2	10.90571 MHz/CP
HYPER	400.1314005 MHz/CP

EVP 7H/1

B81: ¹³C-RMN, Ampliación.

ppm
157.905
155.508

132.965

127.045
126.949
126.486
125.322

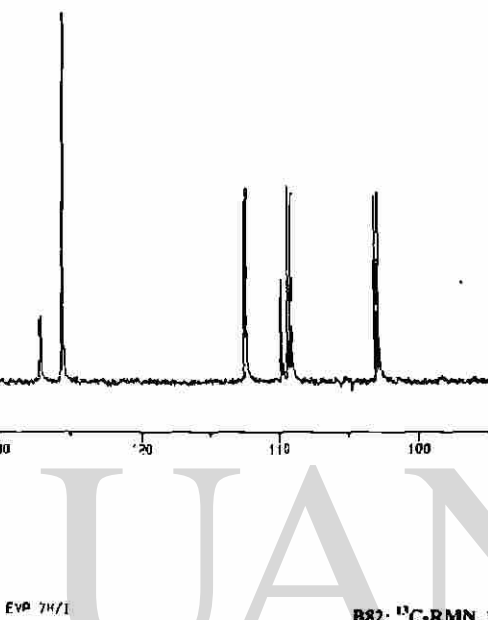
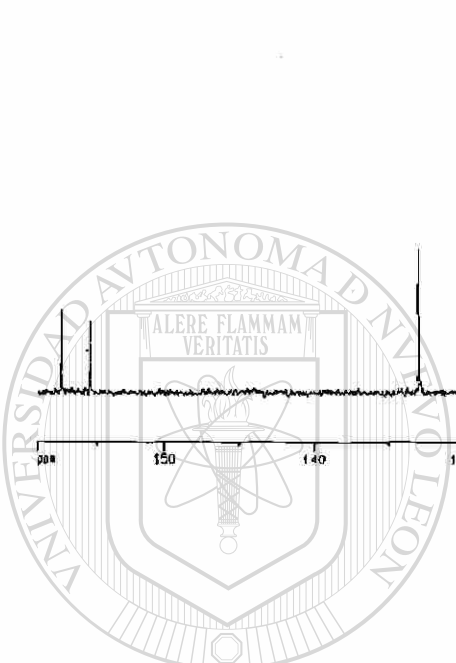
112.432
112.335
109.752
109.718
109.283
109.024

102.942
102.712

Current Data Parameters
NAME (EVP7H)
EXPNO 3
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 200827
Time 18 12
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Multinu
PULPROG zgpg
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 19831
DS 8
SWH 22123.865 Hz
FIDRES 0.337564 Hz
AQ 1.481176 sec
RG 6324
DM 22.800 msec
DE 0.50 msec
TE 300.0 K
SI 0.000000 sec
AQ 0.000000 sec
PL13 16.00 dB
DI 2.000000 sec
DPPHSG 181.116
NORM2 165.00 msec
SF02 400.138005 MHz
NUC2 13
PL2 -3.00 dB
PL12 16.00 dB
PI 10.75 msec
DE 0.00 msec
SF01 100.623369 MHz
NUC1 13C
PL1 0.00 dB

F2 - Processing Parameters
SI 32768
SF 100.623369 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 3.00 Hz
GB 0
MC 1.00
10 MHz plot parameters
CX 20.00 sec
FIP 100.000 MHz
F1 100.623369 MHz
F2 100.623369 MHz
F3 100.623369 MHz
OPRES 3.25000 MHz/sec
PC 375.89181 MHz



EVP 7H/1

B82: ¹³C-RMN, DEPT-135.

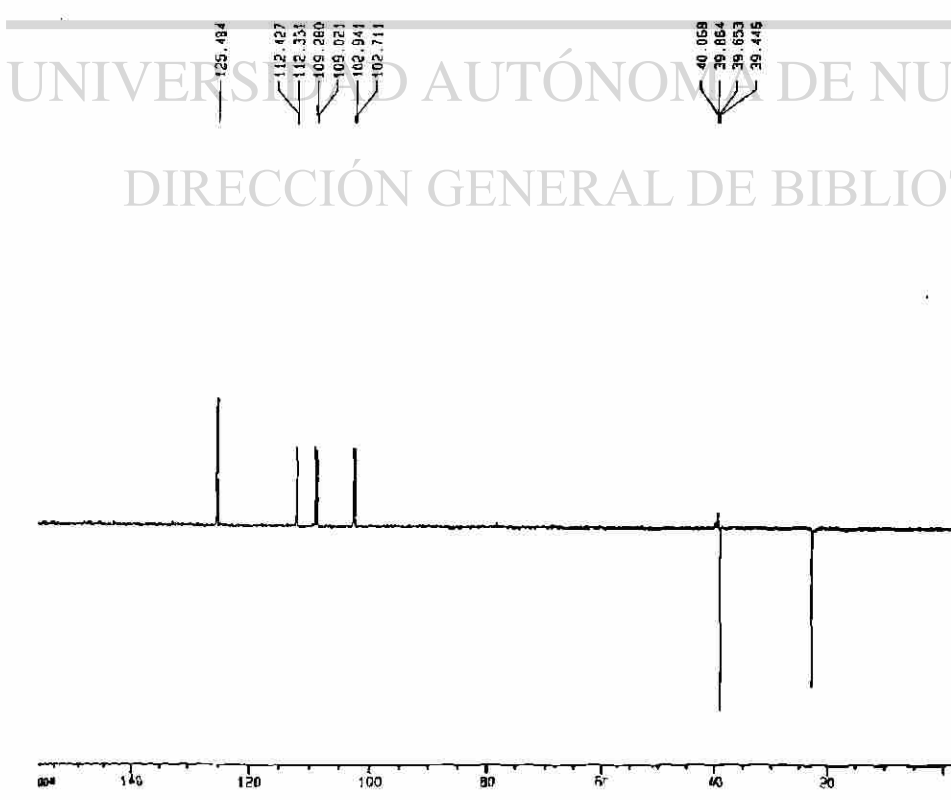
125.484
112.427
112.351
105.280
105.021
102.941
102.711

40.069
39.864
39.653
39.445

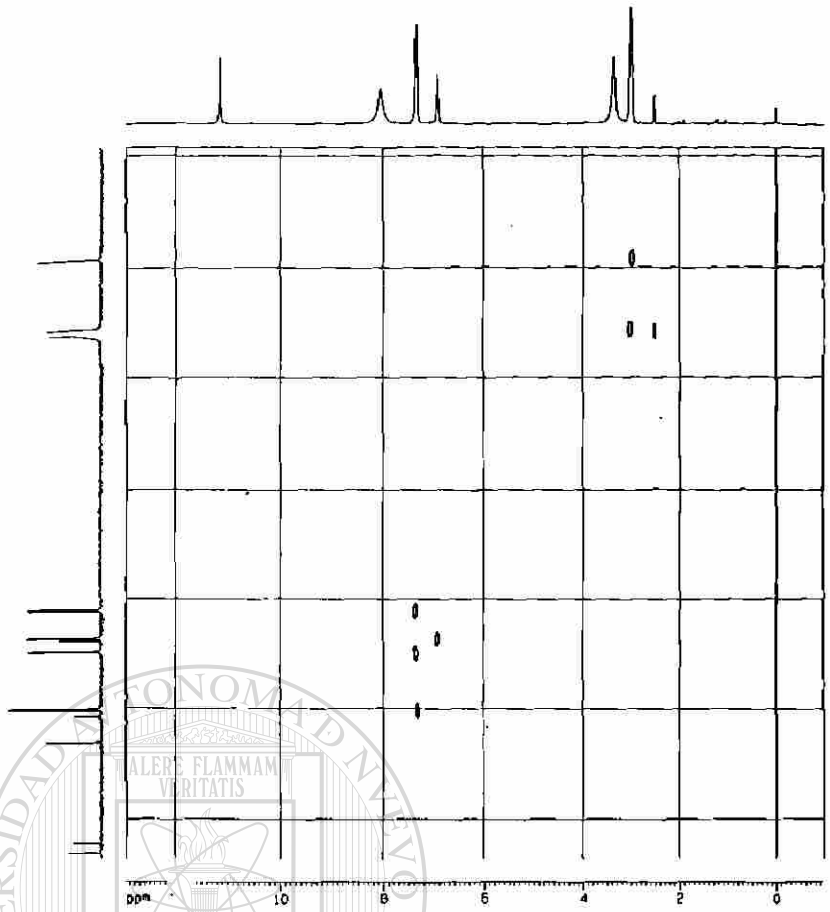
Current Data Parameters
NAME (EVP7H)
EXPNO 1
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 200827
Time 15 21
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Multinu
PULPROG 0sec135
TD 32768
SOLVENT DMSO
NS 6167
DS 8
SWH 16101.226 Hz
FIDRES 0.492012 Hz
AQ 1.012372 sec
RG 32768
DM 20.900 msec
DE 0.50 msec
TE 300.0 K
SI 0.000000 sec
AQ 0.000000 sec
PL13 18.25 dB
DI 20.5 msec
DPPHSG 12.30 msec
NUC2 13
PL2 -3.00 dB
SF02 400.138005 MHz
NUC2 13
SF01 100.623369 MHz
NUC1 13C
PL1 -1.00 dB
PL12 18.00 dB
PI 0.00 msec
DE 0.00 msec
OPRES 3.25000 MHz/sec
PC 375.89181 MHz

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 100.623369 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 3.00 Hz
GB 0
MC 1.00
10 MHz plot parameters
CX 20.00 sec
FIP 100.000 MHz
F1 100.623369 MHz
F2 100.623369 MHz
F3 100.623369 MHz
OPRES 3.25000 MHz/sec
PC 375.89181 MHz

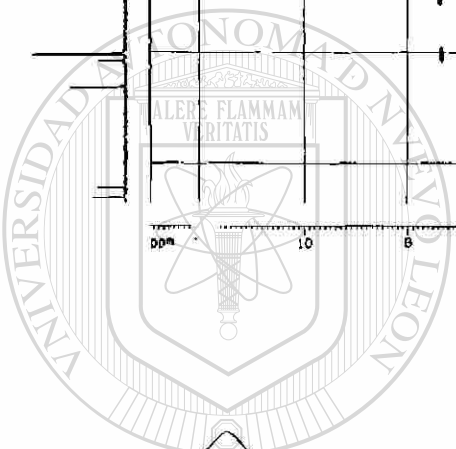


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



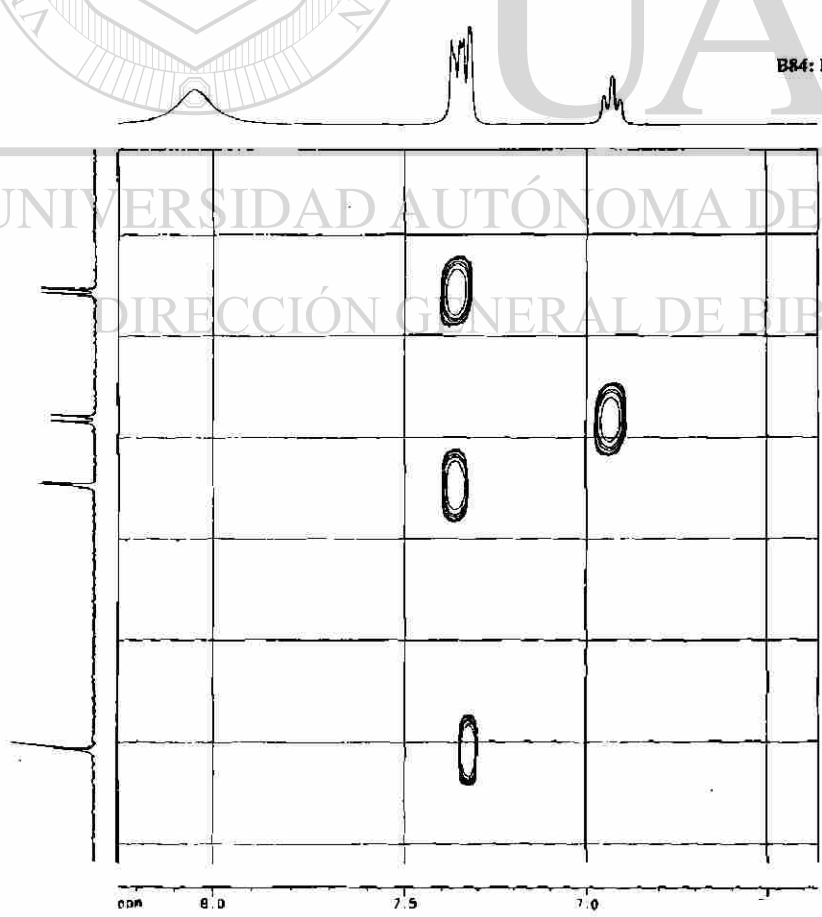
B83: HMQC.

Chemical Shift (ppm)	Assignment
10.0	...
9.5	...
9.0	...
8.5	...
8.0	...
7.5	...
7.0	...
6.5	...
6.0	...
5.5	...
5.0	...
4.5	...
4.0	...
3.5	...
3.0	...
2.5	...
2.0	...
1.5	...
1.0	...
0.5	...



U A N L

B84: HMQC, Ampliación.



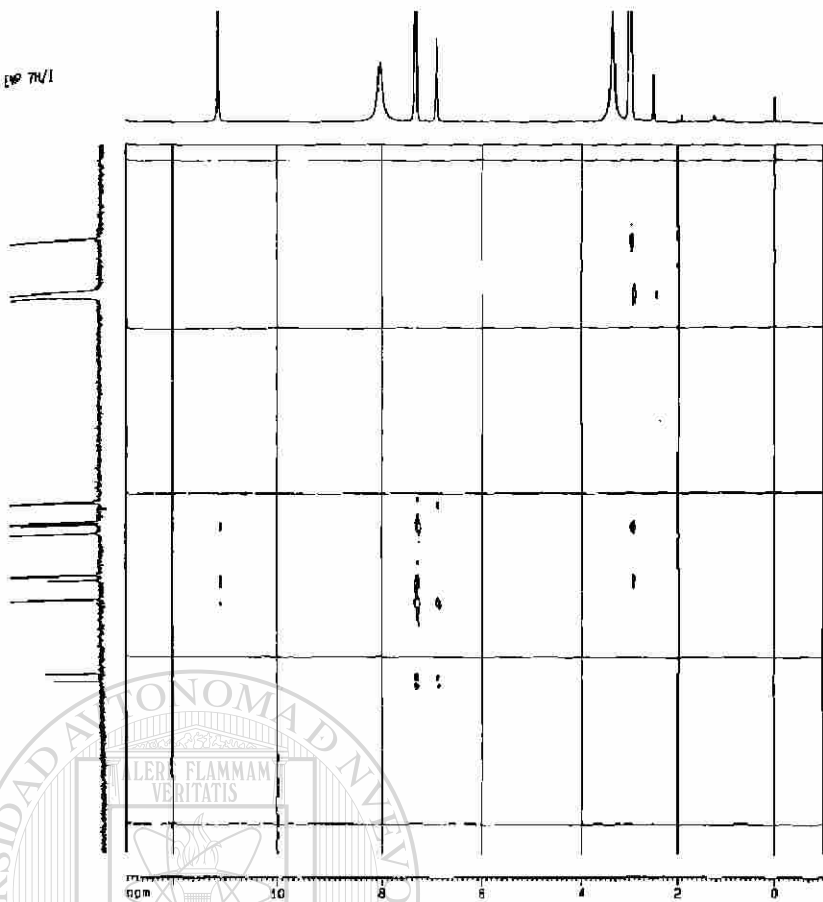
Chemical Shift (ppm)	Assignment
100	...
105	...
110	...
115	...
120	...
125	...

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

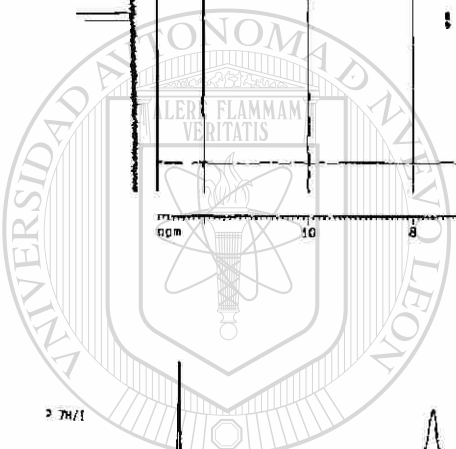


ppm 7H/I



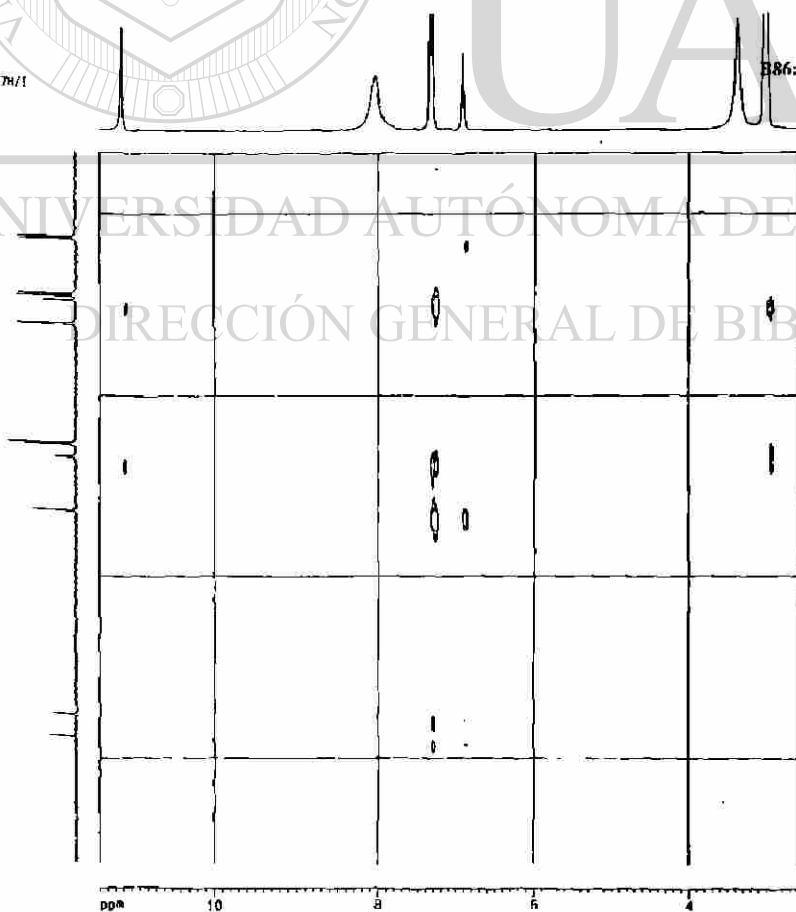
B85: HMBC.

Channel Name	Frequency (MHz)	Chemical Shift (ppm)	Integration
F2 - Acquisition Parameters			
NUC1	125.761		
NUC2	125.761		
PROBHD	5 mm QNP 1H/13		
PROB	QNP 1H/13		
PULPROG	zgpg30		
PC	120		
PD	1.00		
PE	1.00		
PF	1.00		
PG	1.00		
PH	1.00		
PI	1.00		
PJ	1.00		
PK	1.00		
PL	1.00		
PM	1.00		
PN	1.00		
PO	1.00		
PP	1.00		
PQ	1.00		
PR	1.00		
PS	1.00		
PT	1.00		
PV	1.00		
PW	1.00		
PX	1.00		
PY	1.00		
PZ	1.00		
RG	327.680		
RG2	327.680		
RG3	327.680		
RG4	327.680		
RG5	327.680		
RG6	327.680		
RG7	327.680		
RG8	327.680		
RG9	327.680		
RG10	327.680		
RG11	327.680		
RG12	327.680		
RG13	327.680		
RG14	327.680		
RG15	327.680		
RG16	327.680		
RG17	327.680		
RG18	327.680		
RG19	327.680		
RG20	327.680		
RG21	327.680		
RG22	327.680		
RG23	327.680		
RG24	327.680		
RG25	327.680		
RG26	327.680		
RG27	327.680		
RG28	327.680		
RG29	327.680		
RG30	327.680		
RG31	327.680		
RG32	327.680		
RG33	327.680		
RG34	327.680		
RG35	327.680		
RG36	327.680		
RG37	327.680		
RG38	327.680		
RG39	327.680		
RG40	327.680		
RG41	327.680		
RG42	327.680		
RG43	327.680		
RG44	327.680		
RG45	327.680		
RG46	327.680		
RG47	327.680		
RG48	327.680		
RG49	327.680		
RG50	327.680		
RG51	327.680		
RG52	327.680		
RG53	327.680		
RG54	327.680		
RG55	327.680		
RG56	327.680		
RG57	327.680		
RG58	327.680		
RG59	327.680		
RG60	327.680		
RG61	327.680		
RG62	327.680		
RG63	327.680		
RG64	327.680		
RG65	327.680		
RG66	327.680		
RG67	327.680		
RG68	327.680		
RG69	327.680		
RG70	327.680		
RG71	327.680		
RG72	327.680		
RG73	327.680		
RG74	327.680		
RG75	327.680		
RG76	327.680		
RG77	327.680		
RG78	327.680		
RG79	327.680		
RG80	327.680		
RG81	327.680		
RG82	327.680		
RG83	327.680		
RG84	327.680		
RG85	327.680		
RG86	327.680		
RG87	327.680		
RG88	327.680		
RG89	327.680		
RG90	327.680		
RG91	327.680		
RG92	327.680		
RG93	327.680		
RG94	327.680		
RG95	327.680		
RG96	327.680		
RG97	327.680		
RG98	327.680		
RG99	327.680		
RG100	327.680		



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

ppm 7H/I

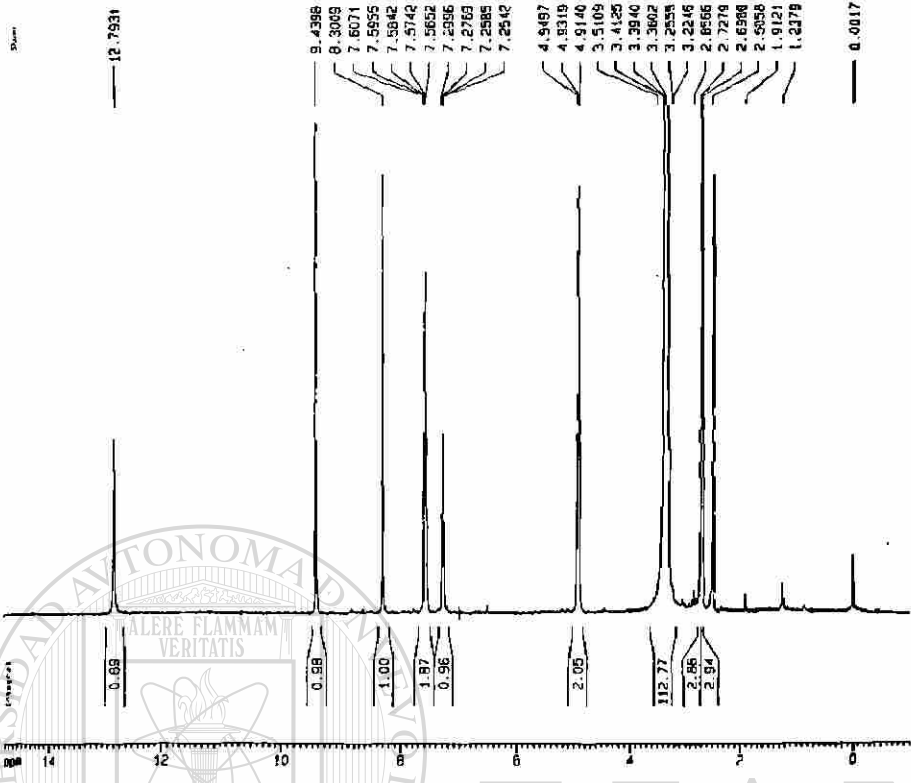


B86: HMBC, Ampliación.

Channel Name	Frequency (MHz)	Chemical Shift (ppm)	Integration
F2 - Acquisition Parameters			
NUC1	125.761		
NUC2	125.761		
PROBHD	5 mm QNP 1H/13		
PROB	QNP 1H/13		
PULPROG	zgpg30		
PC	120		
PD	1.00		
PE	1.00		
PF	1.00		
PG	1.00		
PH	1.00		
PI	1.00		
PJ	1.00		
PK	1.00		
PL	1.00		
PM	1.00		
PN	1.00		
PO	1.00		
PP	1.00		
PQ	1.00		
PR	1.00		
PS	1.00		
PT	1.00		
PV	1.00		
PW	1.00		
PX	1.00		
PY	1.00		
PZ	1.00		
RG	327.680		
RG2	327.680		
RG3	327.680		
RG4	327.680		
RG5	327.680		
RG6	327.680		
RG7	327.680		
RG8	327.680		
RG9	327.680		
RG10	327.680		
RG11	327.680		
RG12	327.680		
RG13	327.680		
RG14	327.680		
RG15	327.680		
RG16	327.680		
RG17	327.680		
RG18	327.680		
RG19	327.680		
RG20	327.680		
RG21	327.680		
RG22	327.680		
RG23	327.680		
RG24	327.680		
RG25	327.680		
RG26	327.680		
RG27	327.680		
RG28	327.680		
RG29	327.680		
RG30	327.680		
RG31	327.680		
RG32	327.680		
RG33	327.680		
RG34	327.680		
RG35	327.680		
RG36	327.680		
RG37	327.680		
RG38	327.680		
RG39	327.680		
RG40	327.680		
RG41	327.680		
RG42	327.680		
RG43	327.680		
RG44	327.680		
RG45	327.680		
RG46	327.680		
RG47	327.680		
RG48	327.680		
RG49	327.680		
RG50	327.680		
RG51	327.680		
RG52	327.680		
RG53	327.680		
RG54	327.680		
RG55	327.680		
RG56	327.680		
RG57	327.680		
RG58	327.680		
RG59	327.680		
RG60	327.680		
RG61	327.680		
RG62	327.680		
RG63	327.680		
RG64	327.680		
RG65	327.680		
RG66	327.680		
RG67	327.680		
RG68	327.680		
RG69	327.680		
RG70	327.680		
RG71	327.680		
RG72	327.680		
RG73	327.680		
RG74	327.680		
RG75	327.680		
RG76	327.680		
RG77	327.680		
RG78	327.680		
RG79	327.680		
RG80	327.680		
RG81	327.680		
RG82	327.680		
RG83	327.680		
RG84	327.680		
RG85	327.680		
RG86	327.680		
RG87	327.680		
RG88	327.680		
RG89	327.680		
RG90	327.680		
RG91	327.680		
RG92	327.680		
RG93	327.680		
RG94	327.680		
RG95	327.680		
RG96	327.680		
RG97	327.680		
RG98	327.680		
RG99	327.680		
RG100	327.680		

EVPH 9C

B87: ¹H-RMN, Espectro completo.



Current Data Parameters
 NAME EVMPC
 EXPNO 5
 PROCNO 1

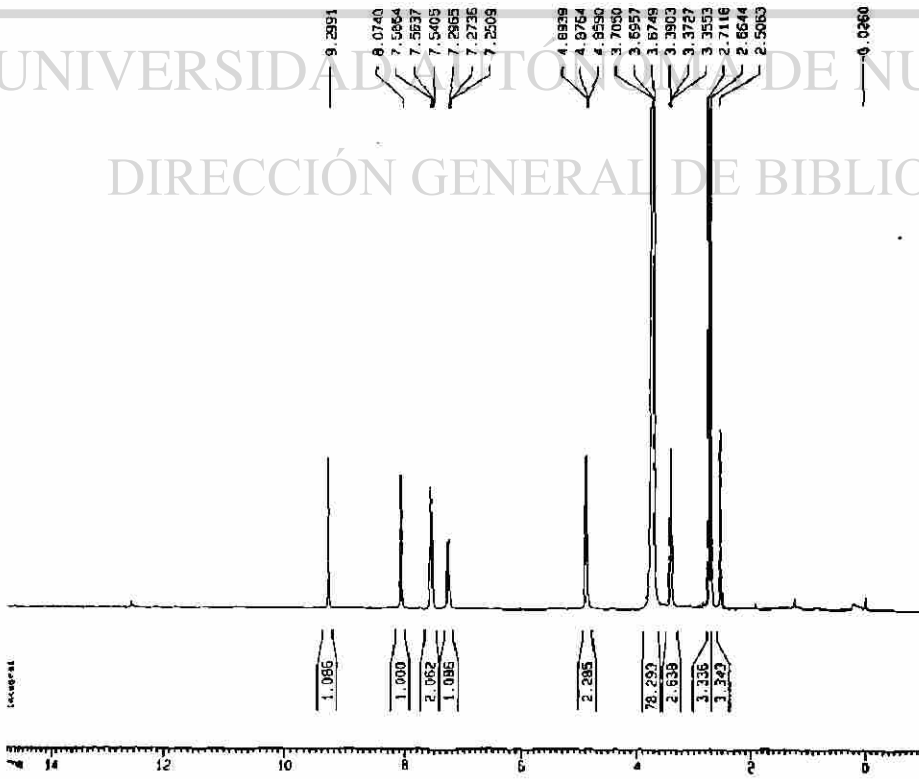
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 08/02/05
 Time 15:50
 INSTRUM spect
 PROBRD 5 mm Nucleus
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 TO 0.99999999
 SOLVENT DMSO
 NS 16
 DS 4
 SFO1 6410.256 Hz
 FIDRES 0.195625 Hz
 AQ 2.9559540 sec
 RG 128
 DA 78.000 usec
 DE 8.00 usec
 TE 300.2 K
 D1 1.80000000 sec
 P1 12.50 usec
 DE 8.00 usec
 SFO1 400.1326017 MHz
 NUC1 1H
 PL1 -3.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 16384
 SF 400.1300000 MHz
 NQ 4
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

10 MHz plot parameters
 CX 20.00 cm
 FXP 15.010 ppm
 F1 8005.64 Hz
 F2P -1.010 ppm
 F2 400.22 MHz
 WPCW 0.80182 ppm/cm
 WCN 320.51285 Hz/cm

EVPND CINTERCAMBIO

B88: ¹H-RMN, Intercambio con D₂O.



Current Data Parameters
 NAME EVMPC
 EXPNO 5
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 08/02/05
 Time 17:30
 INSTRUM spect
 PROBRD 5 mm Nucleus
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 TO 0.99999999
 SOLVENT DMSO
 NS 32
 DS 4
 SFO1 6410.256 Hz
 FIDRES 0.195625 Hz
 AQ 2.9559540 sec
 RG 128
 DA 78.000 usec
 DE 8.00 usec
 TE 300.2 K
 D1 1.80000000 sec
 P1 12.50 usec
 DE 8.00 usec
 SFO1 400.1326017 MHz
 NUC1 1H
 PL1 -3.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 16384
 SF 400.1300000 MHz
 NQ 4
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

10 MHz plot parameters
 CX 20.00 cm
 FXP 15.000 ppm
 F1 8001.35 Hz
 F2P -1.000 ppm
 F2 400.13 MHz
 WPCW 0.80000 ppm/cm
 WCN 320.51285 Hz/cm

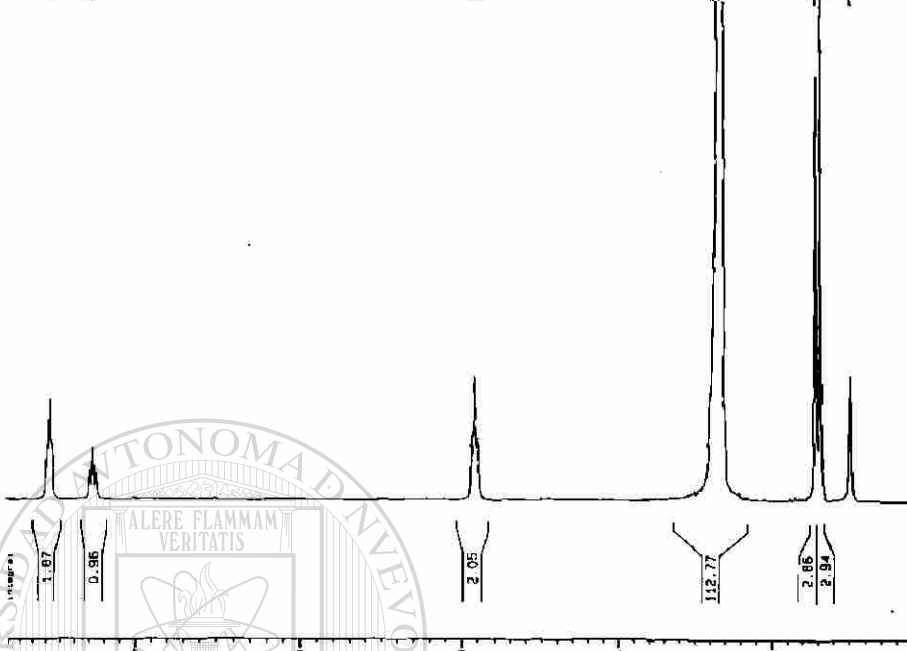
B89: ¹H-RMN, Ampliación.

116
 30.43.82
 30.38.18
 30.34.66
 30.30.65
 30.27.05
 29.20.78
 28.11.69
 28.04.32
 28.02.62

1980.51
 1873.40
 1866.26

1366.44
 1358.03
 1344.53

1091.30
 1079.88
 1002.83

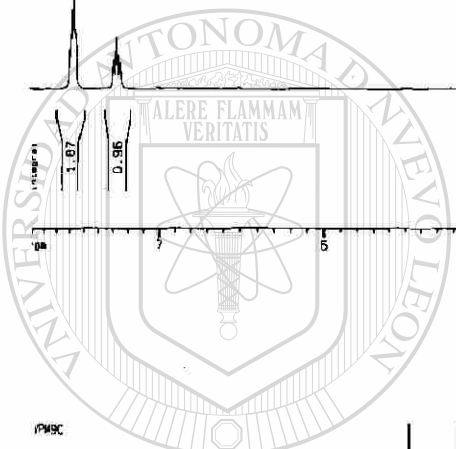


Current Data Parameters
 NAME EVO90C
 EXPNO 1
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 980528
 Time 15:52
 INSTRUM spect
 PROCNO 2 on Multispec
 PULPROG zgpg30
 TO 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 16
 DS 4
 SWH 6410.256 Hz
 FIDRES 0.195675 Hz
 AQ 2.5285340 sec
 RG 128
 SH 78 000 spec
 EC 8.00 usec
 TE 300.0 K
 C1 1.00000000 sec
 SFO1 400.1324017 MHz
 DE 0.00 usec
 SF01 400.1324017 MHz
 NUC1 1H
 PC 1.00

F2 - Processing parameters
 SI 10384
 SF 400.1300000 MHz
 WDM 0
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

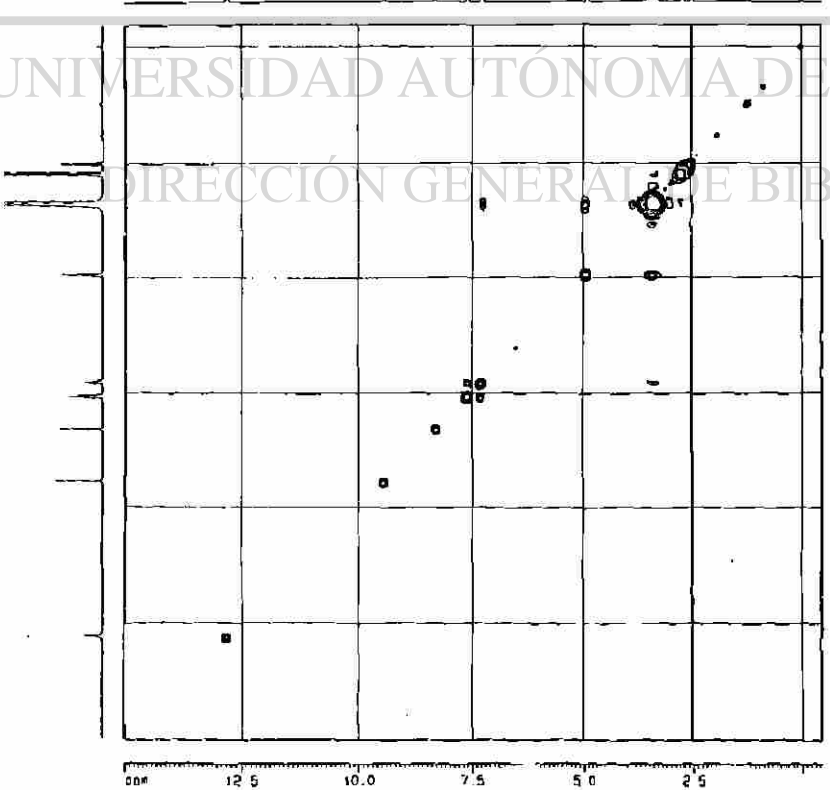
90 MHz plot parameters
 CX 20.00 cm
 F1P 7.932 ppm
 F1 3173.95 Hz
 F2P 2.051 ppm
 F2 836.72 Hz
 PPRM 0.29206 ppm/cm
 HQCM 116.06156 Hz/cm



U A N L

PMBC

B90: COSY completo.



Current Data Parameters
 NAME EVO90C
 EXPNO 1
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 980528
 Time 15:52
 INSTRUM spect
 PROCNO 2 on Multispec
 PULPROG zgpg30
 TO 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 16
 DS 4
 SWH 6410.256 Hz
 FIDRES 0.195675 Hz
 AQ 2.5285340 sec
 RG 128
 SH 78 000 spec
 EC 8.00 usec
 TE 300.0 K
 C1 1.00000000 sec
 SFO1 400.1324017 MHz
 DE 0.00 usec
 SF01 400.1324017 MHz
 NUC1 1H
 PC 1.00

F1 - Acquisition Parameters
 SI 10384
 SF 400.1300000 MHz
 WDM 0
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

F2 - Processing parameters
 SI 10384
 SF 400.1300000 MHz
 WDM 0
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

F1 - Processing parameters
 SI 10384
 SF 400.1300000 MHz
 WDM 0
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

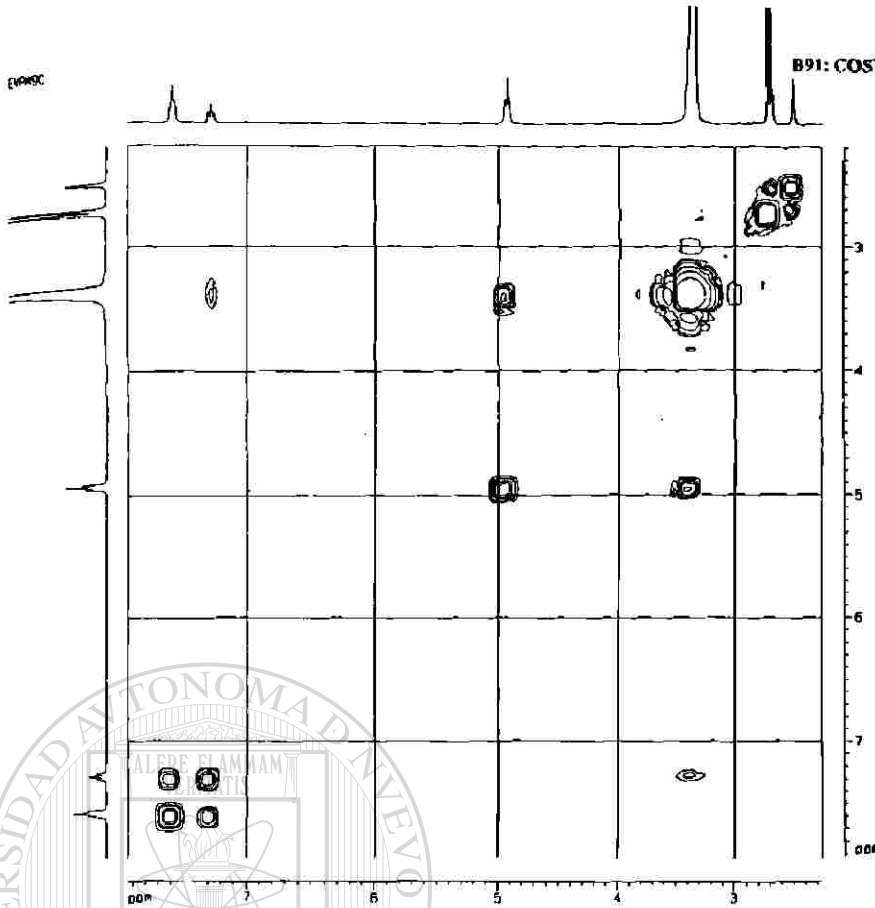
90 MHz plot parameters
 CX 20.00 cm
 F1P 7.932 ppm
 F1 3173.95 Hz
 F2P 2.051 ppm
 F2 836.72 Hz
 PPRM 0.29206 ppm/cm
 HQCM 116.06156 Hz/cm

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECA

ECPM9C

B91: COSY, Ampliación.

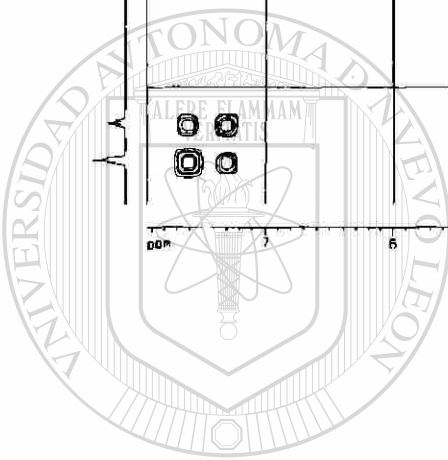


Current Date Parameters
 NAME ECPM9C
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 990813
 Time 8.25
 INSTRUM spect
 PROCNO 2 in Multisw
 PULPROG zgpg
 TO 625.6
 SOLVENT DMSO
 NS 3276
 DS 8
 SWH 21891.725 MHz
 FIDRES 0.326933 MHz
 AQ 1.5204832 sec
 RG 6328
 DB 23.200 umsec
 GB 8.00 umsec
 PC 300.0 K
 AT 0.0300000 sec
 A2 0.0002000 sec
 FL13 16.00 dB
 Q1 2.0000000 sec
 CQPRG2 nullr16
 PCOC 185.00 umsec
 SECF 400.1316805 MHz
 NUC2 13
 PL2 -3.00 dB
 PL12 16.00 dB
 PL 10.25 umsec
 DE 8.00 umsec
 SF01 100.6231288 MHz
 NUC1 13C
 PL1 -1.00 dB

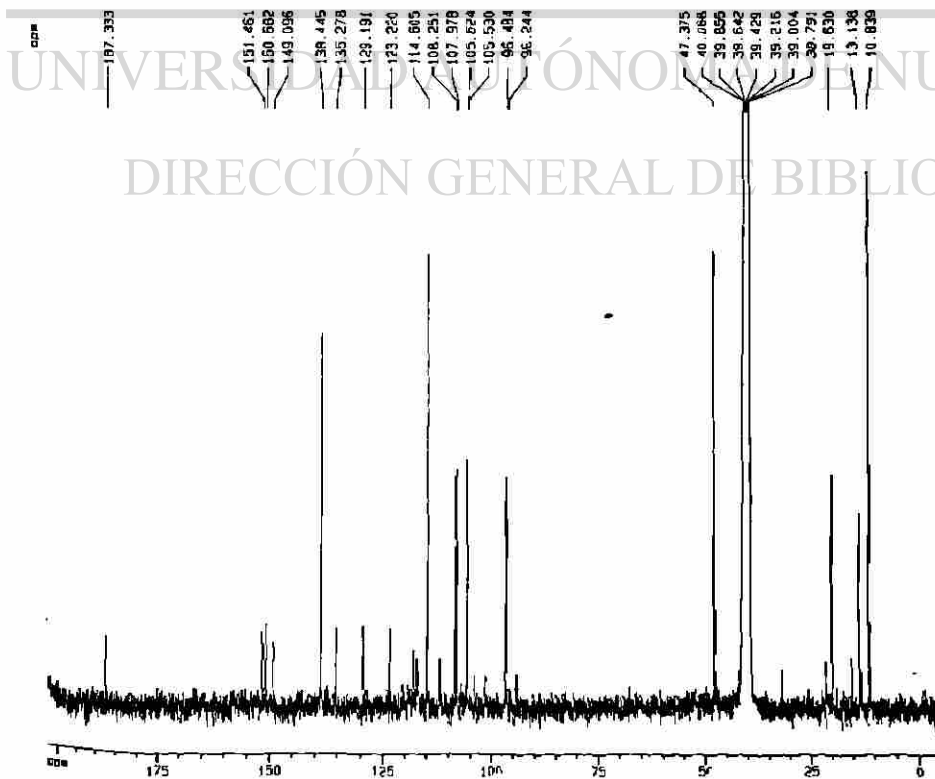
F2 - Processing parameters
 SI 3276
 SF 400.1316805 MHz
 DS 8
 SSB 3.00 MHz
 GB 0
 PC 1.40

1D and 2D parameters
 CH 20.00 MHz
 F1P 216.080 MHz
 F1 211.26394 MHz
 F2P -5.800 MHz
 F2 -513.87 MHz
 HPCP 16.75000 MHz/CH
 HPCX 1681.59521 MHz/CH



ECPM9C

B92: ¹³C-RMN, Espectro normal.



Current Date Parameters
 NAME ECPM9C
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 990813
 Time 8.25
 INSTRUM spect
 PROCNO 2 in Multisw
 PULPROG zgpg
 TO 625.6
 SOLVENT DMSO
 NS 3276
 DS 8
 SWH 21891.725 MHz
 FIDRES 0.326933 MHz
 AQ 1.5204832 sec
 RG 6328
 DB 23.200 umsec
 GB 8.00 umsec
 PC 300.0 K
 AT 0.0300000 sec
 A2 0.0002000 sec
 FL13 16.00 dB
 Q1 2.0000000 sec
 CQPRG2 nullr16
 PCOC 185.00 umsec
 SECF 400.1316805 MHz
 NUC2 13
 PL2 -3.00 dB
 PL12 16.00 dB
 PL 10.25 umsec
 DE 8.00 umsec
 SF01 100.6231288 MHz
 NUC1 13C
 PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 3276
 SF 400.1316805 MHz
 DS 8
 SSB 3.00 MHz
 GB 0
 PC 1.40

1D and 2D parameters
 CH 20.00 MHz
 F1P 216.080 MHz
 F1 211.26394 MHz
 F2P -5.800 MHz
 F2 -513.87 MHz
 HPCP 16.75000 MHz/CH
 HPCX 1681.59521 MHz/CH

187.353
 151.461
 150.582
 149.036
 136.445
 135.278
 129.191
 123.220
 114.605
 108.251
 107.978
 105.624
 105.530
 85.484
 85.244

47.375
 40.068
 39.855
 38.642
 38.429
 38.215
 38.004
 36.791
 19.630
 13.138
 10.830

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE LEÓN
 DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

ECPM9C

B93: ¹³C-RMN, Ampliación

ppm

151.481
150.882
143.086

138.445
135.278

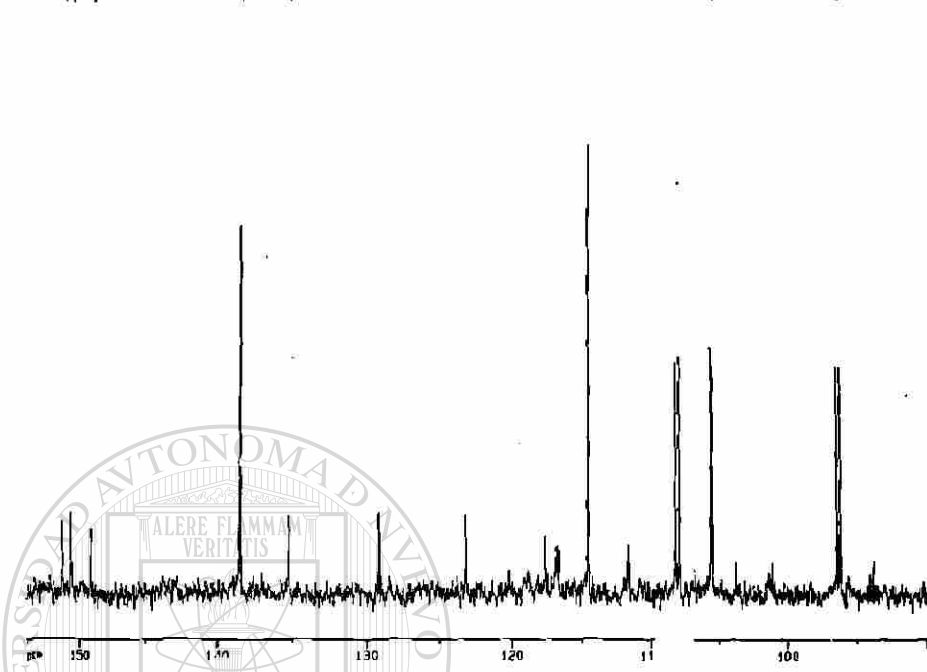
129.191

123.220

114.605

108.251
107.978
105.824
105.530

96.484
96.244



Current Data Parameters

NAME ECPM9C

EXPNO 2

PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date_ 990813

Time 9 25

INSTRUM spect

PROBHD 5 mm Multinn

PULPROG zgpg

TD 65536

SF 125.760

WDW EM

SSB 0

LB 3.00 Hz

GB 0

PC 1.40

F2 - Processing parameters

SI 32768

SF 100.6135088 MHz

WDW EM

SSB 0

LB 3.00 Hz

GB 0

PC 1.40

10 user parameters

CZ 20.00 cm

F1P 150.000 ppm

F1 15095.09 Hz

F2P 90.000 ppm

F2 8975.21 Hz

RGPR 3.75000 ppm/Hz

WDW 308.99990 Hz/Hz

Hz

15238.0
15160.7
15001.1

13625.4
13610.8

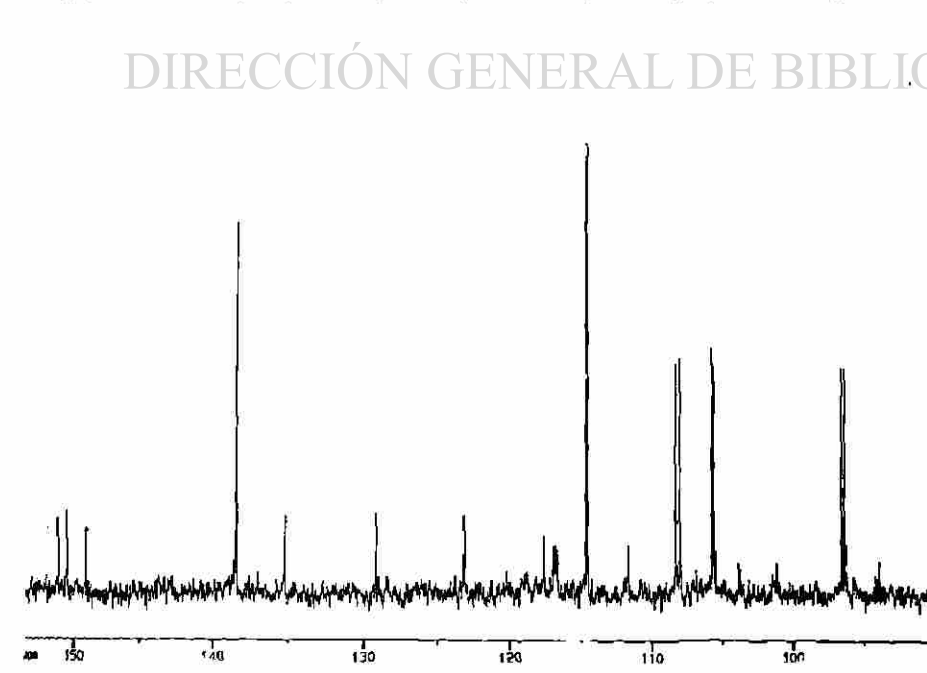
12390.4

12397.6

11530.8

10891.5
10884.0
10627.2
10617.8

9707.6
9683.5



Current Data Parameters

NAME ECPM9C

EXPNO 2

PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date_ 990813

Time 9 25

INSTRUM spect

PROBHD 5 mm Multinn

PULPROG zgpg

TD 65536

SF 125.760

WDW EM

SSB 0

LB 3.00 Hz

GB 0

PC 1.40

F2 - Processing parameters

SI 32768

SF 100.6135088 MHz

WDW EM

SSB 0

LB 3.00 Hz

GB 0

PC 1.40

10 user parameters

CZ 20.00 cm

F1P 150.000 ppm

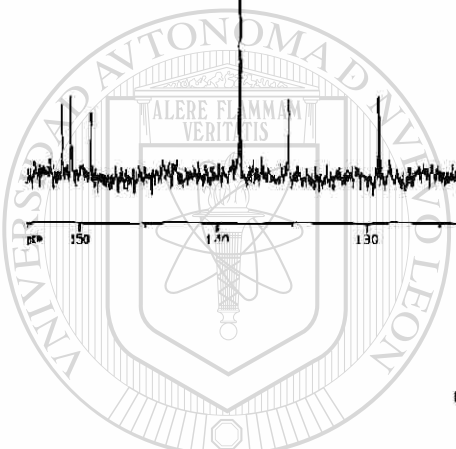
F1 15095.09 Hz

F2P 90.000 ppm

F2 8975.21 Hz

RGPR 3.75000 ppm/Hz

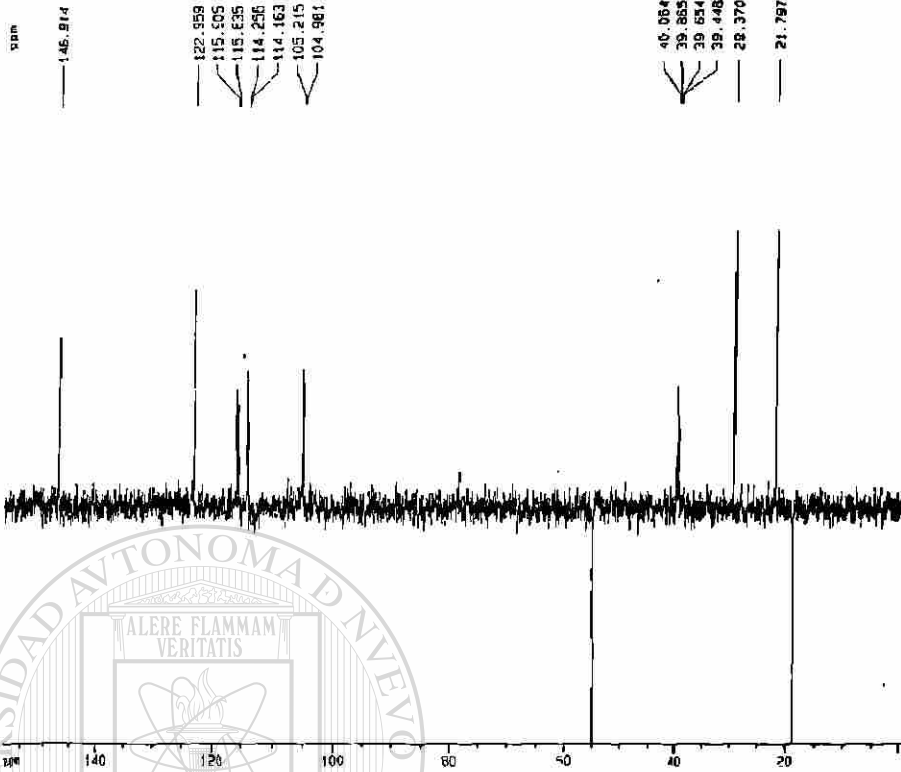
WDW 308.99990 Hz/Hz



U A N L

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECA

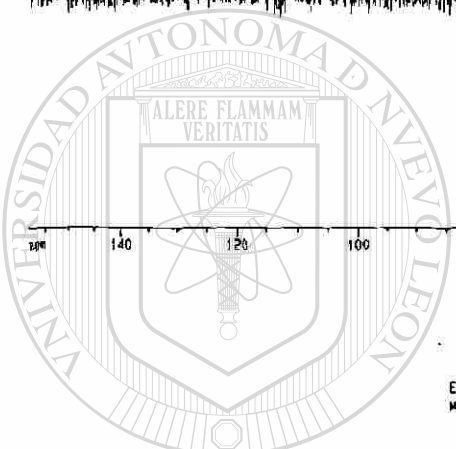


Current Data Parameters
 NAME EVPH9C
 EXPNO 1
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 950511
 Time 9.25
 INSTRUM spect
 PROBRG 5 mm Multin
 PULPROG zg
 TD 32768
 SOLVENT MeOH
 NS 128
 DS 4
 SFO1 400.146377 MHz
 FIDRES 0.185238 Hz
 AQ 2.6422219 sec
 RG 450
 DM 78.000 umol
 DE 0.00 umol
 TE 300.0 K
 D1 1.5000000 sec
 P1 9.00 umol
 DE 0.00 umol
 SFO1 400.146377 MHz
 NUC1 13C
 PL1 -1.00 dB

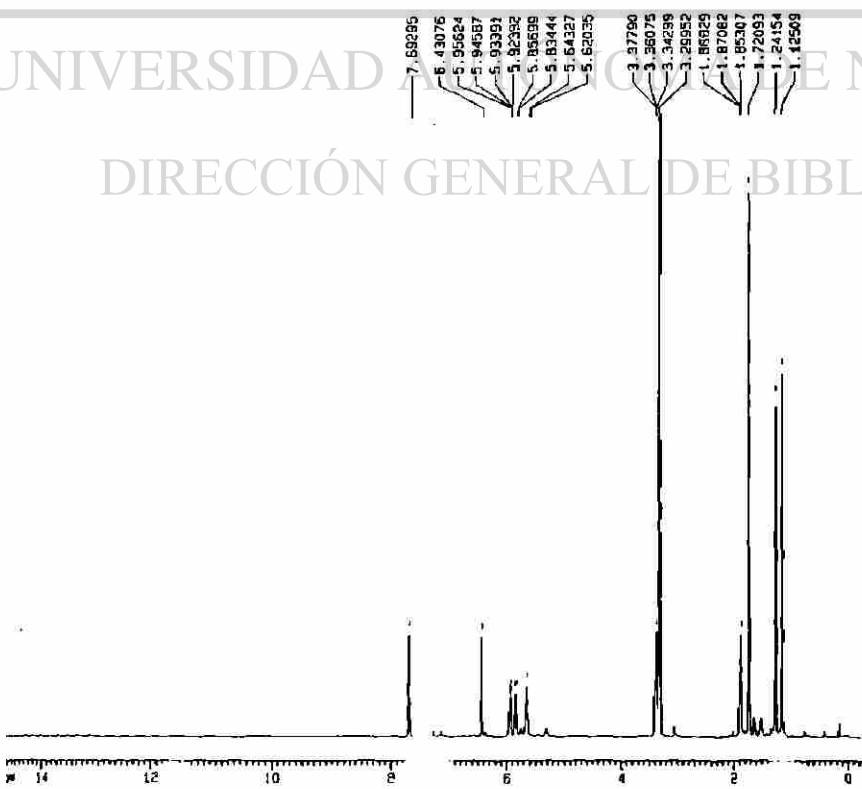
F2 - Processing parameters
 SI 32768
 SF 100.617026 MHz
 EQ 0
 SFO 0
 LB 0.30 MHz
 GB 0
 PC 1.00

10 mm data parameters
 CR 20.00 cm
 FLP 15.010 ppm
 F1 8005.83 MHz
 F2P -1.010 ppm
 F2 8004.82 MHz
 AFMCH 0.00102 ppm/cm
 LFCM 300.51257 MHz/cm



EVPH 9C
METANOL

B96: ¹H-RMN, Espectro normal.



Current Data Parameters
 NAME EVPH9CM
 EXPNO 1
 PROCNO 1

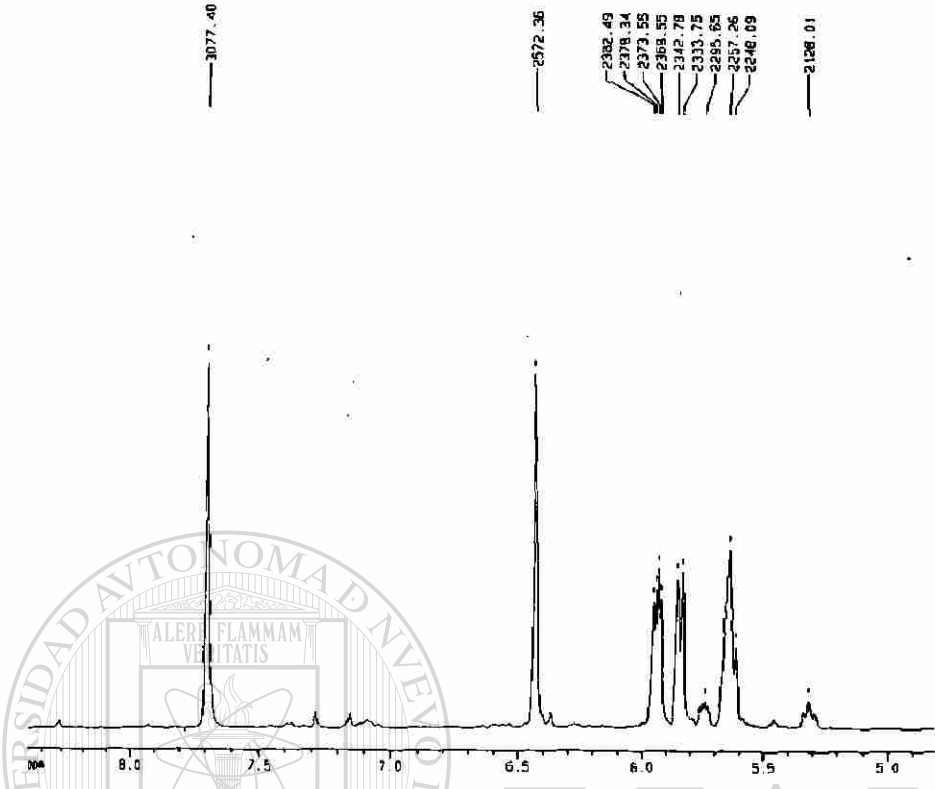
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 950511
 Time 9.25
 INSTRUM spect
 PROBRG 5 mm Multin
 PULPROG zg
 TD 32768
 SOLVENT MeOH
 NS 128
 DS 4
 SFO1 400.146377 MHz
 FIDRES 0.185238 Hz
 AQ 2.6422219 sec
 RG 450
 DM 78.000 umol
 DE 0.00 umol
 TE 300.0 K
 D1 1.5000000 sec
 P1 9.00 umol
 DE 0.00 umol
 SFO1 400.146377 MHz
 NUC1 1H
 PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 32768
 SF 100.617026 MHz
 EQ 0
 SFO 0
 LB 0.30 MHz
 GB 0
 PC 1.00

10 mm data parameters
 CR 20.00 cm
 FLP 15.010 ppm
 F1 8005.83 MHz
 F2P -1.010 ppm
 F2 8004.82 MHz
 AFMCH 0.00102 ppm/cm
 LFCM 300.51257 MHz/cm

EYPH 9C
METANOL

B97: ¹H-RMN, Ampliación.

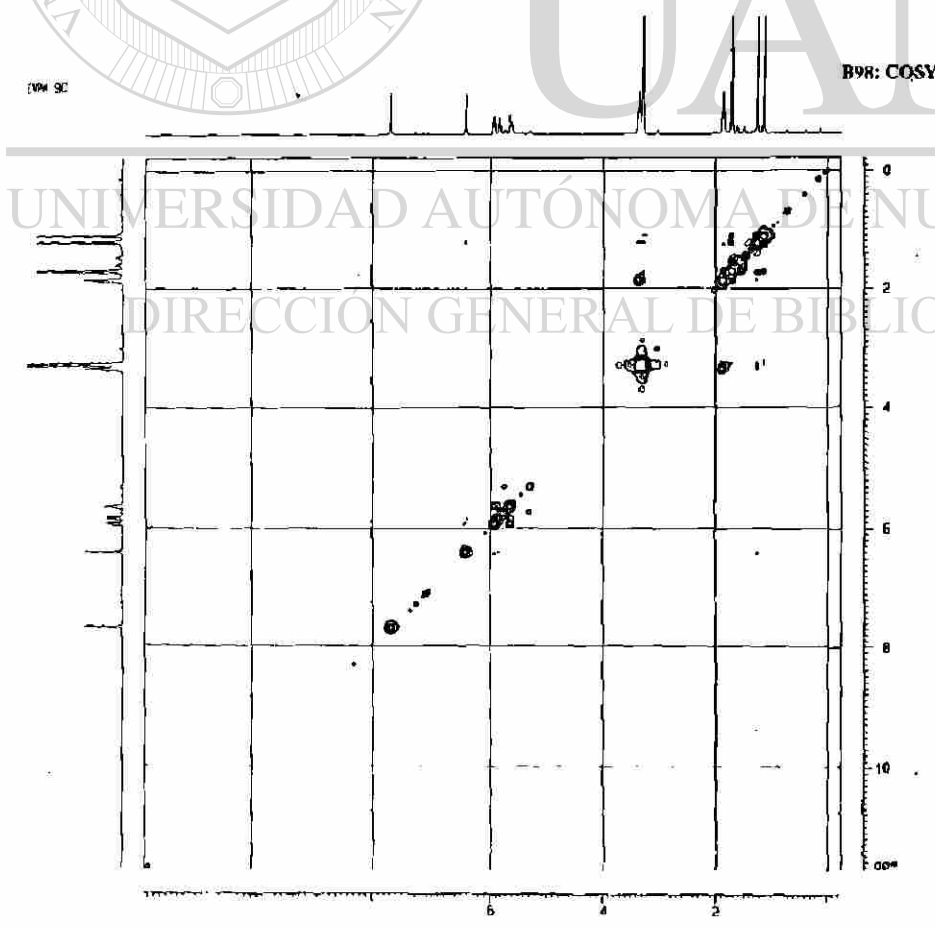


```
Current Data Parameters
NAME      EYPH9C
EXPNO    1
PROCNO   1

F2 - Acquisition Parameters
Date_    200611
Time     9 26
INSTRUM  spect
PROBHD   5 mm HLLHMQ
PULPROG  zgpg30
TD        32768
SOLVENT  meth
NS        128
DS        4
SWH       6410.250 Hz
AQ        0.165230 sec
RG        3.8422219 sec
RB        456.0
DM        75.000 usec
DE        0.00 usec
TE        300.0 K
D1        1.50000000 sec
E1        0.00 usec
DE        0.00 usec
SFO4     400.1320000 MHz
NUC1      1H
P1        12.00
PL1       -1.00 dB

F2 - Processing parameters
SI        6132
SF        400.1320000 MHz
WDW       EM
SSB       0
LB        0.30 Hz
GB        0
PC        1.00

#0 NMR list parameters
CX        20.00 cc
F1P       0.482 ppm
F1        338.64 Hz
F2P       4.810 ppm
F2        1924.71 Hz
PROBHD    5 mm HLLHMQ
NUC1      1H
NUC2      13C
```



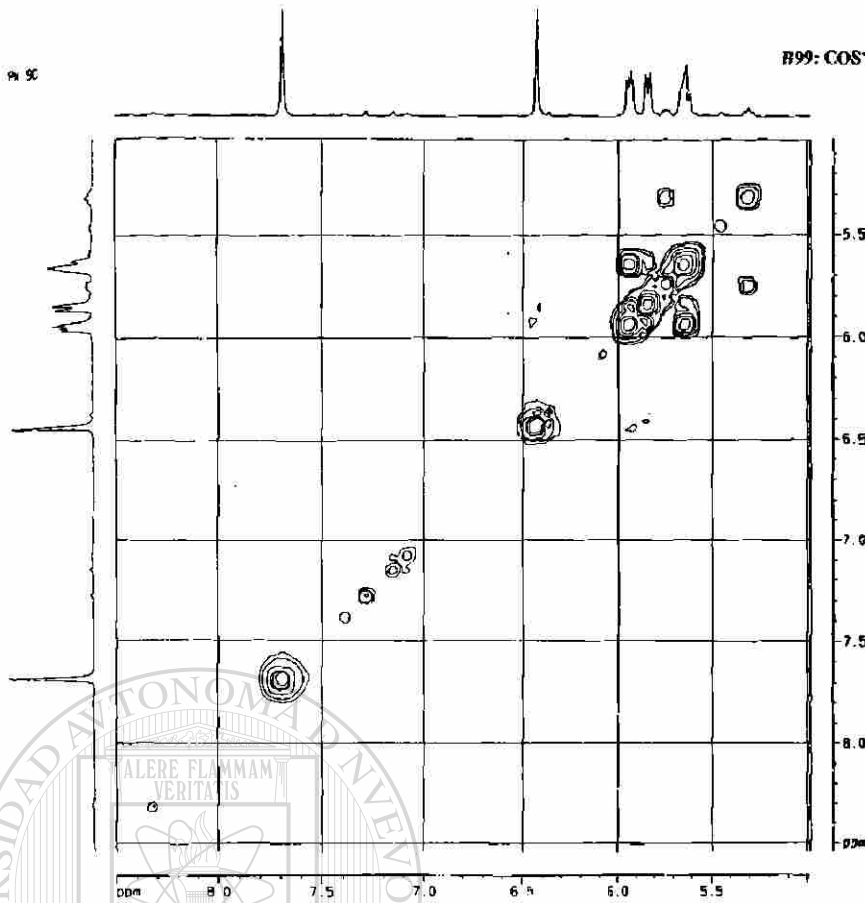
B98: COSY completo.

```
Current Data Parameters
NAME      EYPH9C
EXPNO    1
PROCNO   1

F2 - Acquisition Parameters
Date_    200611
Time     9 21
INSTRUM  spect
PROBHD   5 mm HLLHMQ
PULPROG  zgpg30
TD        32768
SOLVENT  meth
NS        128
DS        4
SWH       6410.250 Hz
AQ        0.165230 sec
RG        3.8422219 sec
RB        456.0
DM        75.000 usec
DE        0.00 usec
TE        300.0 K
D1        1.50000000 sec
E1        0.00 usec
DE        0.00 usec
SFO4     400.1320000 MHz
NUC1      1H
P1        12.00
PL1       -1.00 dB

F2 - Processing parameters
SI        6132
SF        400.1320000 MHz
WDW       EM
SSB       0
LB        0.30 Hz
GB        0
PC        1.00

#0 NMR list parameters
CX        20.00 cc
F1P       0.482 ppm
F1        338.64 Hz
F2P       4.810 ppm
F2        1924.71 Hz
PROBHD    5 mm HLLHMQ
NUC1      1H
NUC2      13C
```



```

Current Data Parameters
NAME          EVFW9825
EXPNO        1
PROCNO       1

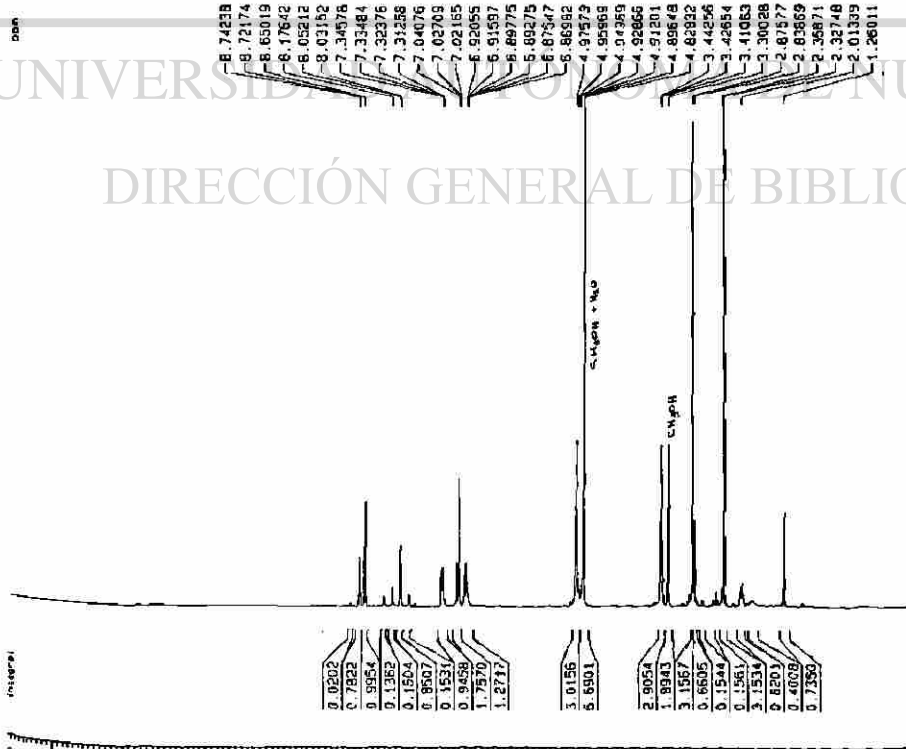
F2 - Acquisition Parameters
Date_         981005
Time         18 07
INSTRUM      spect
PROBHD       5 mm Multinu
PULPROG      zg
TD           32768
SOLVENT      h2o
NS           32
DS           4
SWH          6419.256 Hz
FIDRES      0.125625 Hz
AQ          2.5255540 sec
RG          327.5
SH          78.000 usec
DE          8.00 usec
TE          300.0 K
D1          1.0000000 sec
P1          12.00 usec
DE          8.00 usec
SFO1        400.126013 MHz
NUC1         1H
P1          -3.00 usec

F2 - Processing parameters
SI           16384
SF          400.130113 MHz
WDW          EM
SSB          0
LB          0.30 Hz
GB          0
PC          1.00

1D zero out parameters
CX          20.00 usec
FAP         15.010 usec
F1          8006.04 Hz
F2P         -1.019 usec
F2          -204.22 Hz
RGPR        0.0102 ppm/cy
RGPC        370.51295 Hz/cy
  
```

EVFW9825

B100: ¹H-RMN, Espectro completo.



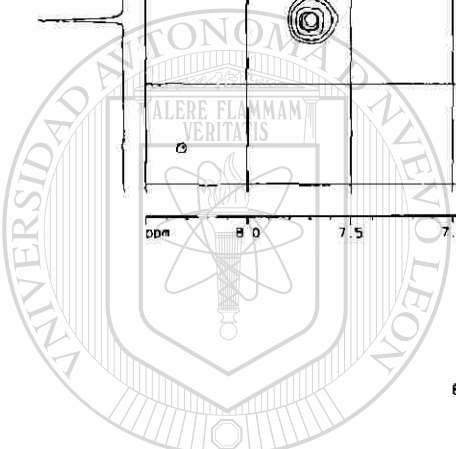
```

Current Data Parameters
NAME          EVFW9825
EXPNO        1
PROCNO       1

F2 - Acquisition Parameters
Date_         981005
Time         18 07
INSTRUM      spect
PROBHD       5 mm Multinu
PULPROG      zg
TD           32768
SOLVENT      h2o
NS           32
DS           4
SWH          6419.256 Hz
FIDRES      0.125625 Hz
AQ          2.5255540 sec
RG          327.5
SH          78.000 usec
DE          8.00 usec
TE          300.0 K
D1          1.0000000 sec
P1          12.00 usec
DE          8.00 usec
SFO1        400.126013 MHz
NUC1         1H
P1          -3.00 usec

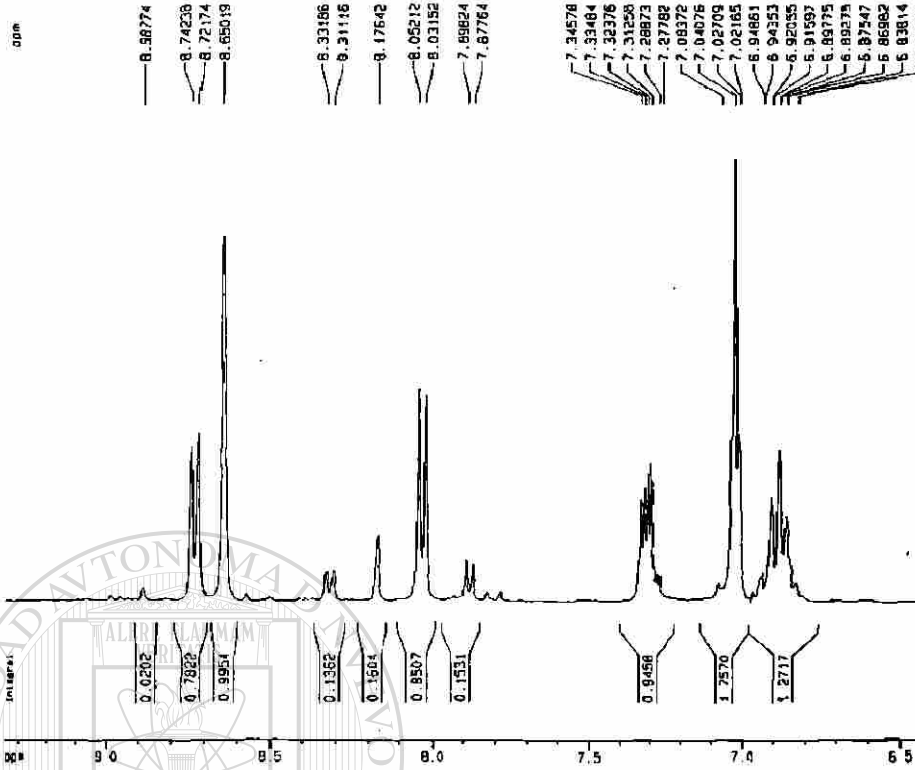
F2 - Processing parameters
SI           16384
SF          400.130113 MHz
WDW          EM
SSB          0
LB          0.30 Hz
GB          0
PC          1.00

1D zero out parameters
CX          20.00 usec
FAP         15.010 usec
F1          8006.04 Hz
F2P         -1.019 usec
F2          -204.22 Hz
RGPR        0.0102 ppm/cy
RGPC        370.51295 Hz/cy
  
```



EVPW825

B101: ¹H-RMN, Ampliación.



Current Data Parameters
NAME: EVPW825
EXPNO: 1
PROCNO: 1

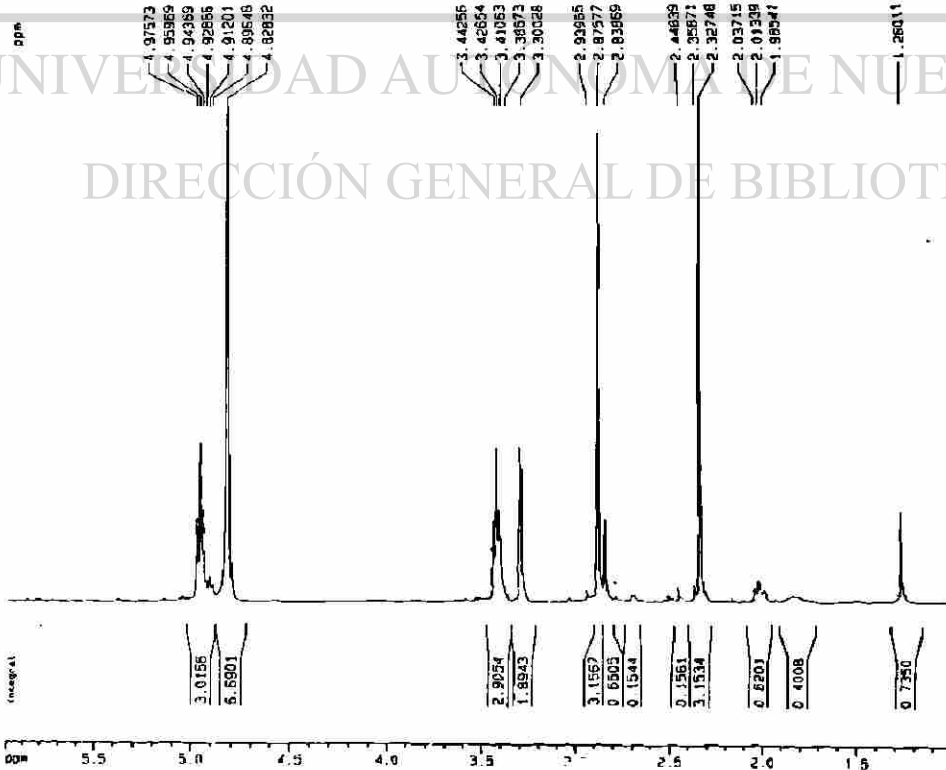
F2 - Acquisition Parameters
Date_: 081005
Time: 18 07
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm Mx11mm
PULPROG: zgpg
TD: 32768
SOLVENT: MeOH
NS: 32
DS: 4
SWH: 6410.256 Hz
FIDRES: 0.195625 Hz
AQ: 2.9299540 sec
RG: 322.5
CW: 10.000 usec
DE: 8.00 usec
TE: 300.2 K
DT: 1.0000000 sec
PH: 12.30 usec
DE: 8.00 usec
SFO1: 400.1326017 MHz
NUC1: 1H
P1: -3.00 dB

F2 - Processing parameters
SI: 16384
SF: 400.1300113 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 0.30 Hz
GB: 0
PC: 1.00

GD NMR stat parameters
CX: 20.00 cm
F1P: 0.350 ppm
F1: 2400.76 Hz
F2P: 1.000 ppm
F2: 400.13 Hz
APPCN: 0.25000 ppm/cm
MPCN: 100.03226 Hz/cm

EVPW825

B102: ¹H-RMN, Ampliación.



Current Data Parameters
NAME: EVPW825
EXPNO: 1
PROCNO: 1

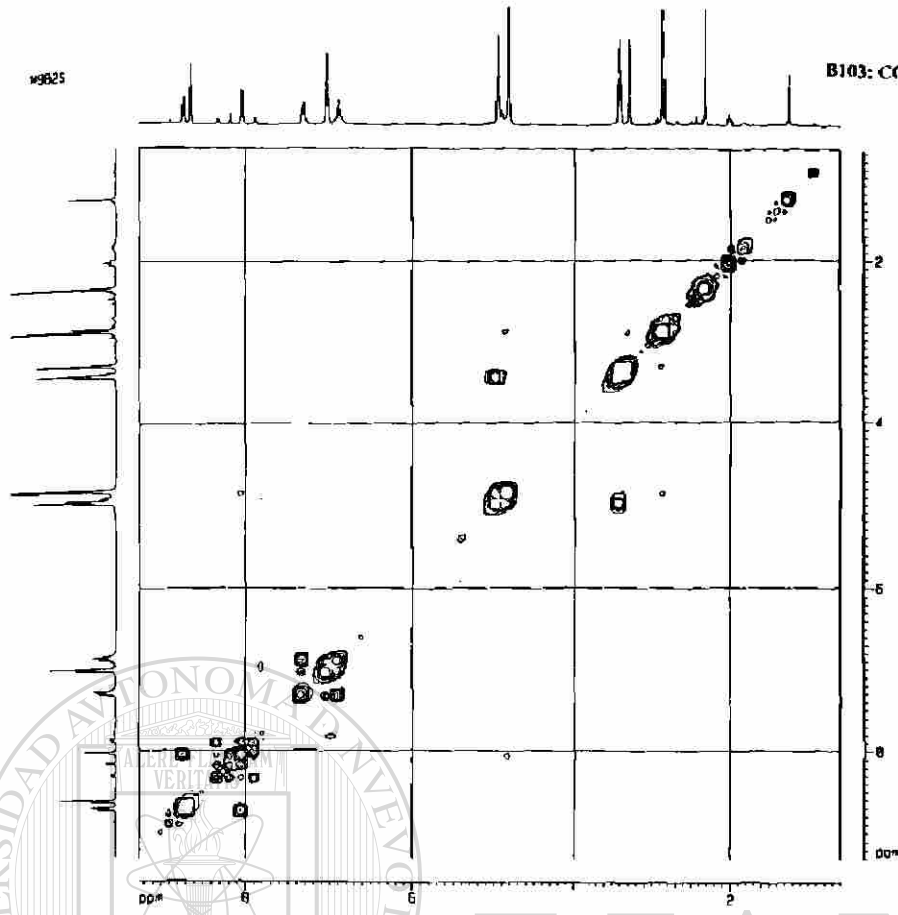
F2 - Acquisition Parameters
Date_: 081005
Time: 18 07
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm Mx11mm
PULPROG: zgpg
TD: 32768
SOLVENT: MeOH
NS: 32
DS: 4
SWH: 6410.256 Hz
FIDRES: 0.195625 Hz
AQ: 2.9299540 sec
RG: 322.5
CW: 10.000 usec
DE: 8.00 usec
TE: 300.2 K
DT: 1.0000000 sec
PH: 12.30 usec
DE: 8.00 usec
SFO1: 400.1326017 MHz
NUC1: 1H
P1: -3.00 dB

F2 - Processing parameters
SI: 16384
SF: 400.1300113 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 0.30 Hz
GB: 0
PC: 1.00

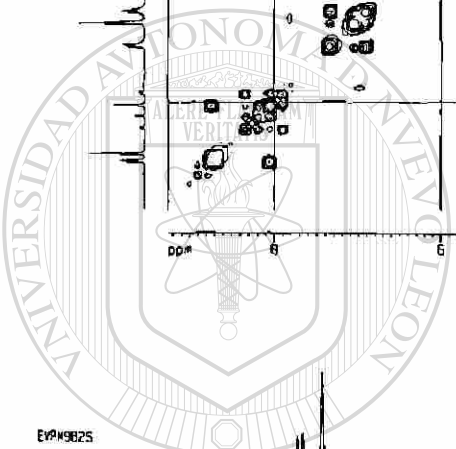
GD NMR stat parameters
CX: 20.00 cm
F1P: 0.350 ppm
F1: 2400.76 Hz
F2P: 1.000 ppm
F2: 400.13 Hz
APPCN: 0.25000 ppm/cm
MPCN: 100.03226 Hz/cm

9825

B103: COSY completo.



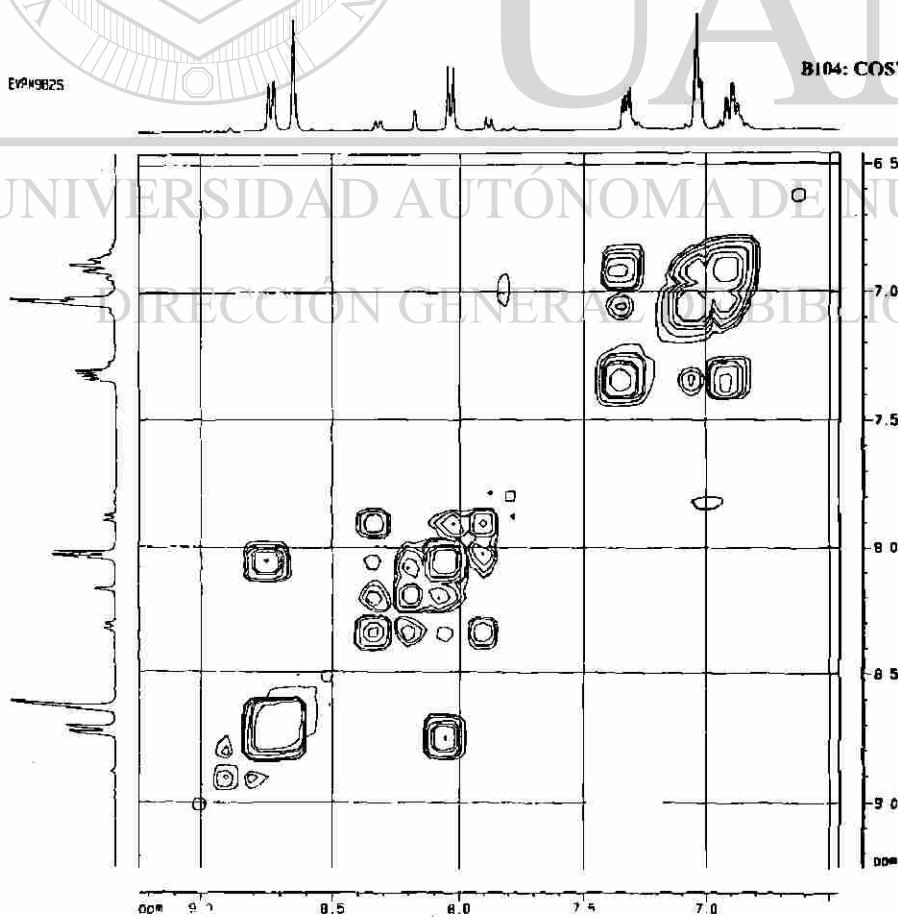
Current Data Parameters
 Name: 9825
 ExpNo: 1
 F2 Acquisition Parameters
 Date_ :
 Time: 11:00
 Instrument: spect
 Program: 1
 Name: 9825
 ExpNo: 1
 F1 Acquisition Parameters
 Date_ :
 Time: 11:00
 Instrument: spect
 Program: 1
 Name: 9825
 ExpNo: 1
 F2 Processing parameters
 SI: 32768
 SF: 400.1463000 MHz
 AQ: 1.00000000
 EQ: 0.00000000
 LB: 0.00 Hz
 GB: 0
 PC: 1.00
 F1 Processing parameters
 SI: 32768
 SF: 400.1463000 MHz
 AQ: 1.00000000
 EQ: 0.00000000
 LB: 0.00 Hz
 GB: 0
 PC: 1.00
 2D and 1D parameters
 CH1: 15.00 MHz
 CH2: 15.00 MHz
 F2PULP: 15.00 MHz
 F1PULP: 15.00 MHz
 C1: 1.00000000
 C2: 1.00000000
 C3: 1.00000000
 C4: 1.00000000
 C5: 1.00000000
 C6: 1.00000000
 C7: 1.00000000
 C8: 1.00000000
 C9: 1.00000000
 C10: 1.00000000
 C11: 1.00000000
 C12: 1.00000000
 C13: 1.00000000
 C14: 1.00000000
 C15: 1.00000000
 C16: 1.00000000
 C17: 1.00000000
 C18: 1.00000000
 C19: 1.00000000
 C20: 1.00000000
 C21: 1.00000000
 C22: 1.00000000
 C23: 1.00000000
 C24: 1.00000000
 C25: 1.00000000
 C26: 1.00000000
 C27: 1.00000000
 C28: 1.00000000
 C29: 1.00000000
 C30: 1.00000000
 C31: 1.00000000
 C32: 1.00000000
 C33: 1.00000000
 C34: 1.00000000
 C35: 1.00000000
 C36: 1.00000000
 C37: 1.00000000
 C38: 1.00000000
 C39: 1.00000000
 C40: 1.00000000
 C41: 1.00000000
 C42: 1.00000000
 C43: 1.00000000
 C44: 1.00000000
 C45: 1.00000000
 C46: 1.00000000
 C47: 1.00000000
 C48: 1.00000000
 C49: 1.00000000
 C50: 1.00000000
 C51: 1.00000000
 C52: 1.00000000
 C53: 1.00000000
 C54: 1.00000000
 C55: 1.00000000
 C56: 1.00000000
 C57: 1.00000000
 C58: 1.00000000
 C59: 1.00000000
 C60: 1.00000000
 C61: 1.00000000
 C62: 1.00000000
 C63: 1.00000000
 C64: 1.00000000
 C65: 1.00000000
 C66: 1.00000000
 C67: 1.00000000
 C68: 1.00000000
 C69: 1.00000000
 C70: 1.00000000
 C71: 1.00000000
 C72: 1.00000000
 C73: 1.00000000
 C74: 1.00000000
 C75: 1.00000000
 C76: 1.00000000
 C77: 1.00000000
 C78: 1.00000000
 C79: 1.00000000
 C80: 1.00000000
 C81: 1.00000000
 C82: 1.00000000
 C83: 1.00000000
 C84: 1.00000000
 C85: 1.00000000
 C86: 1.00000000
 C87: 1.00000000
 C88: 1.00000000
 C89: 1.00000000
 C90: 1.00000000
 C91: 1.00000000
 C92: 1.00000000
 C93: 1.00000000
 C94: 1.00000000
 C95: 1.00000000
 C96: 1.00000000
 C97: 1.00000000
 C98: 1.00000000
 C99: 1.00000000
 C100: 1.00000000



U A N L

9825

B104: COSY, Ampliación.

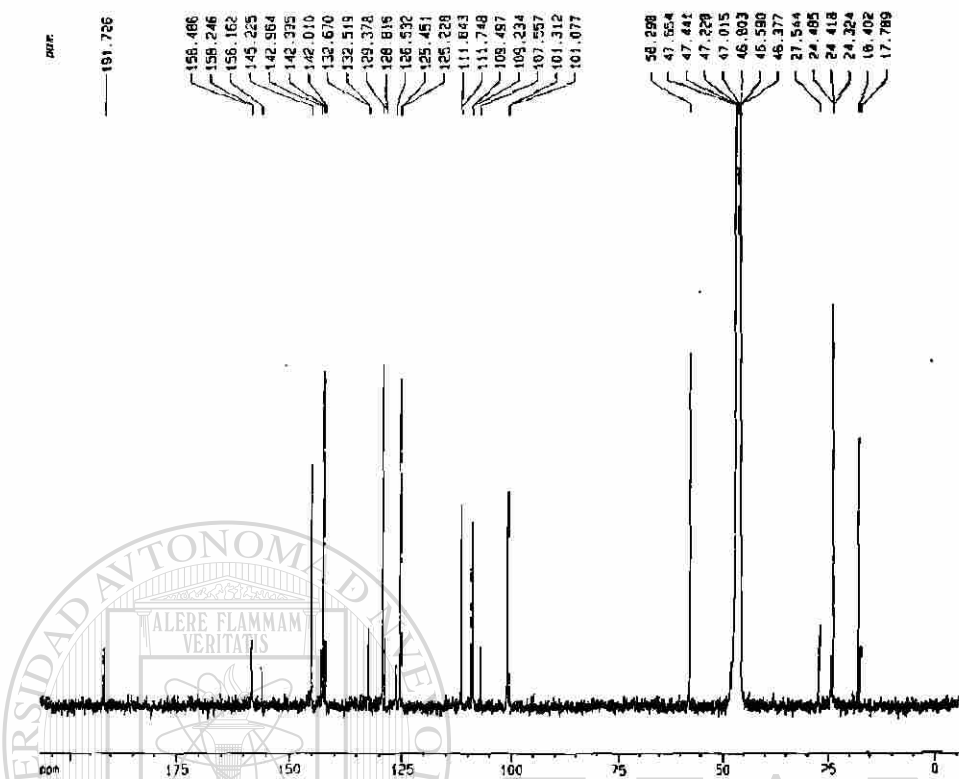


Current Data Parameters
 Name: 9825
 ExpNo: 1
 F2 Acquisition Parameters
 Date_ :
 Time: 11:00
 Instrument: spect
 Program: 1
 Name: 9825
 ExpNo: 1
 F1 Acquisition Parameters
 Date_ :
 Time: 11:00
 Instrument: spect
 Program: 1
 Name: 9825
 ExpNo: 1
 F2 Processing parameters
 SI: 32768
 SF: 400.1463000 MHz
 AQ: 1.00000000
 EQ: 0.00000000
 LB: 0.00 Hz
 GB: 0
 PC: 1.00
 F1 Processing parameters
 SI: 32768
 SF: 400.1463000 MHz
 AQ: 1.00000000
 EQ: 0.00000000
 LB: 0.00 Hz
 GB: 0
 PC: 1.00
 2D and 1D parameters
 CH1: 15.00 MHz
 CH2: 15.00 MHz
 F2PULP: 15.00 MHz
 F1PULP: 15.00 MHz
 C1: 1.00000000
 C2: 1.00000000
 C3: 1.00000000
 C4: 1.00000000
 C5: 1.00000000
 C6: 1.00000000
 C7: 1.00000000
 C8: 1.00000000
 C9: 1.00000000
 C10: 1.00000000
 C11: 1.00000000
 C12: 1.00000000
 C13: 1.00000000
 C14: 1.00000000
 C15: 1.00000000
 C16: 1.00000000
 C17: 1.00000000
 C18: 1.00000000
 C19: 1.00000000
 C20: 1.00000000
 C21: 1.00000000
 C22: 1.00000000
 C23: 1.00000000
 C24: 1.00000000
 C25: 1.00000000
 C26: 1.00000000
 C27: 1.00000000
 C28: 1.00000000
 C29: 1.00000000
 C30: 1.00000000
 C31: 1.00000000
 C32: 1.00000000
 C33: 1.00000000
 C34: 1.00000000
 C35: 1.00000000
 C36: 1.00000000
 C37: 1.00000000
 C38: 1.00000000
 C39: 1.00000000
 C40: 1.00000000
 C41: 1.00000000
 C42: 1.00000000
 C43: 1.00000000
 C44: 1.00000000
 C45: 1.00000000
 C46: 1.00000000
 C47: 1.00000000
 C48: 1.00000000
 C49: 1.00000000
 C50: 1.00000000
 C51: 1.00000000
 C52: 1.00000000
 C53: 1.00000000
 C54: 1.00000000
 C55: 1.00000000
 C56: 1.00000000
 C57: 1.00000000
 C58: 1.00000000
 C59: 1.00000000
 C60: 1.00000000
 C61: 1.00000000
 C62: 1.00000000
 C63: 1.00000000
 C64: 1.00000000
 C65: 1.00000000
 C66: 1.00000000
 C67: 1.00000000
 C68: 1.00000000
 C69: 1.00000000
 C70: 1.00000000
 C71: 1.00000000
 C72: 1.00000000
 C73: 1.00000000
 C74: 1.00000000
 C75: 1.00000000
 C76: 1.00000000
 C77: 1.00000000
 C78: 1.00000000
 C79: 1.00000000
 C80: 1.00000000
 C81: 1.00000000
 C82: 1.00000000
 C83: 1.00000000
 C84: 1.00000000
 C85: 1.00000000
 C86: 1.00000000
 C87: 1.00000000
 C88: 1.00000000
 C89: 1.00000000
 C90: 1.00000000
 C91: 1.00000000
 C92: 1.00000000
 C93: 1.00000000
 C94: 1.00000000
 C95: 1.00000000
 C96: 1.00000000
 C97: 1.00000000
 C98: 1.00000000
 C99: 1.00000000
 C100: 1.00000000

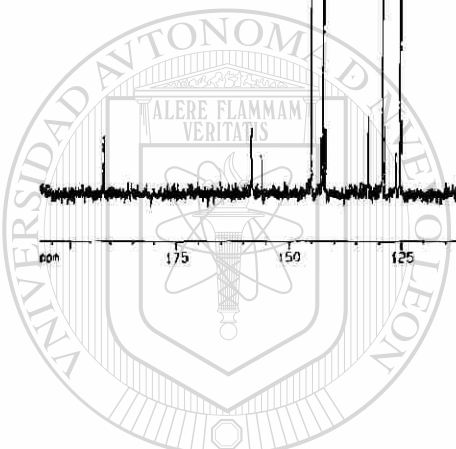
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
 DIRECCION GENERAL DE BIBLIOTECAS

EVPNSB2S

B105: ¹³C-RMN, Espectro normal.

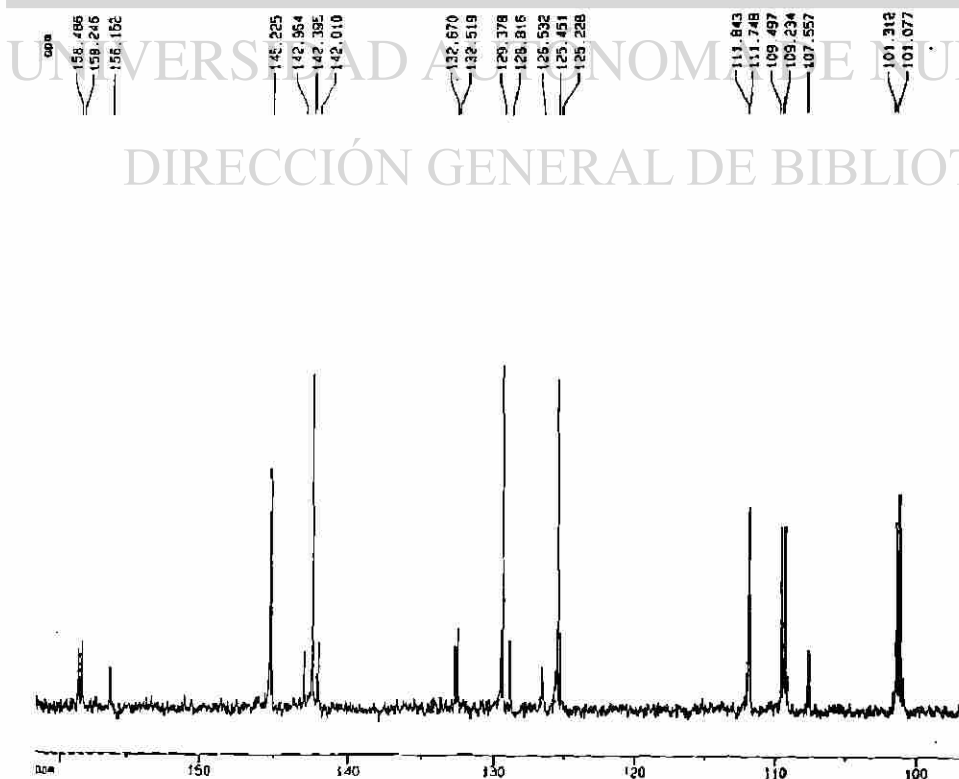


Current Data Parameters
 NAME [EVPNSB2S]
 EXPNO 1
 PROCNO 1
 F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 08/08/05
 Time 3:57
 INSTRUM spect
 PROCNO 5
 PULPROG zgpg
 TD 65536
 SOLVENT dmso
 NS 8192
 DS 8
 SM 2198.725 Hz
 FIDRES 0.320853 Hz
 AQ 1.5204952 sec
 RG 16384
 OR 23.200 usec
 DE 9.00 usec
 TE 300.0 K
 d11 0.0300000 sec
 d12 0.0000000 sec
 PL13 18.00 dB
 O1 2.0000000 sec
 CPDPRG2 waltz16
 PCPD2 105.00 usec
 SF02 400.1316000 MHz
 NUC2 13
 PL2 -3.00 dB
 PL12 18.00 dB
 P1 10.25 usec
 DE 9.00 usec
 SF01 100.6230418 MHz
 NUC1 13C
 PL1 -1.00 dB
 F2 Processing parameters
 SI 32768
 SF 100.6128270 MHz
 MDW 0 Hz
 SSB 0
 LB 3.00 Hz
 GB 0
 PC 1.40
 10 MHz data parameters
 CX 20.00 cm
 F1P 200.429 MHz
 F1 200.900 MHz
 F2P -5.576 MHz
 F2 -561.02 MHz
 PPM2 10.71023 ppm/cg
 NUC2 131.50518 MHz/cm



EVPNSB2S

B106: ¹³C-RMN, Ampliación.



Current Data Parameters
 NAME [EVPNSB2S]
 EXPNO 1
 PROCNO 1
 F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 08/08/05
 Time 3:57
 INSTRUM spect
 PROCNO 5
 PULPROG zgpg
 TD 65536
 SOLVENT dmso
 NS 8192
 DS 8
 SM 2198.725 Hz
 FIDRES 0.320853 Hz
 AQ 1.5204952 sec
 RG 16384
 OR 23.200 usec
 DE 9.00 usec
 TE 300.0 K
 d11 0.0300000 sec
 d12 0.0000000 sec
 PL13 18.00 dB
 O1 2.0000000 sec
 CPDPRG2 waltz16
 PCPD2 105.00 usec
 SF02 400.1316000 MHz
 NUC2 13
 PL2 -3.00 dB
 PL12 18.00 dB
 P1 10.25 usec
 DE 9.00 usec
 SF01 100.6230418 MHz
 NUC1 13C
 PL1 -1.00 dB
 F2 Processing parameters
 SI 32768
 SF 100.6128270 MHz
 MDW 0 Hz
 SSB 0
 LB 3.00 Hz
 GB 0
 PC 1.40
 10 MHz data parameters
 CX 20.00 cm
 F1P 200.429 MHz
 F1 200.900 MHz
 F2P -5.576 MHz
 F2 -561.02 MHz
 PPM2 10.71023 ppm/cg
 NUC2 131.50518 MHz/cm

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON
 DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

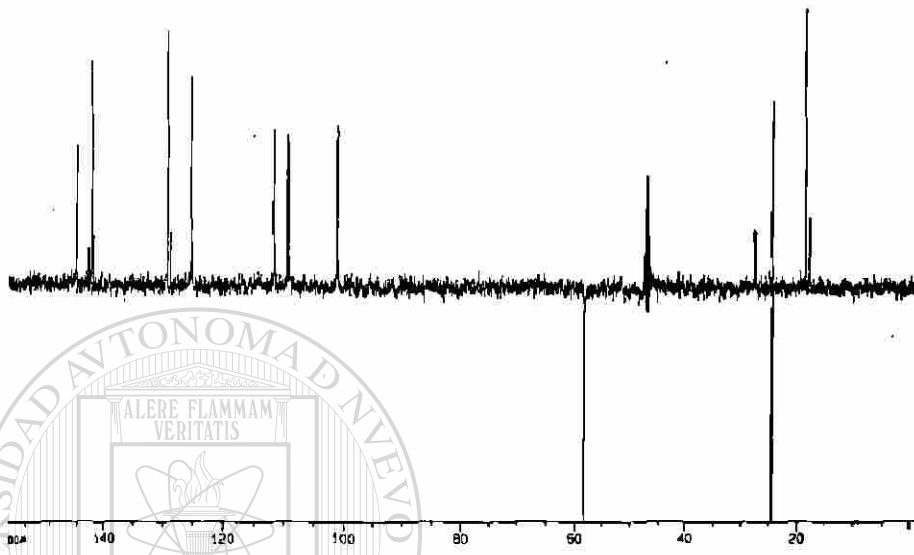
145.232
142.554
142.402
142.017

129.384
128.822
125.456
125.234

111.849
111.795
109.504
109.241
109.064
101.319
101.084

47.735
47.520
47.307
47.094
47.000
46.882
46.785

27.549
24.425
19.410
17.795

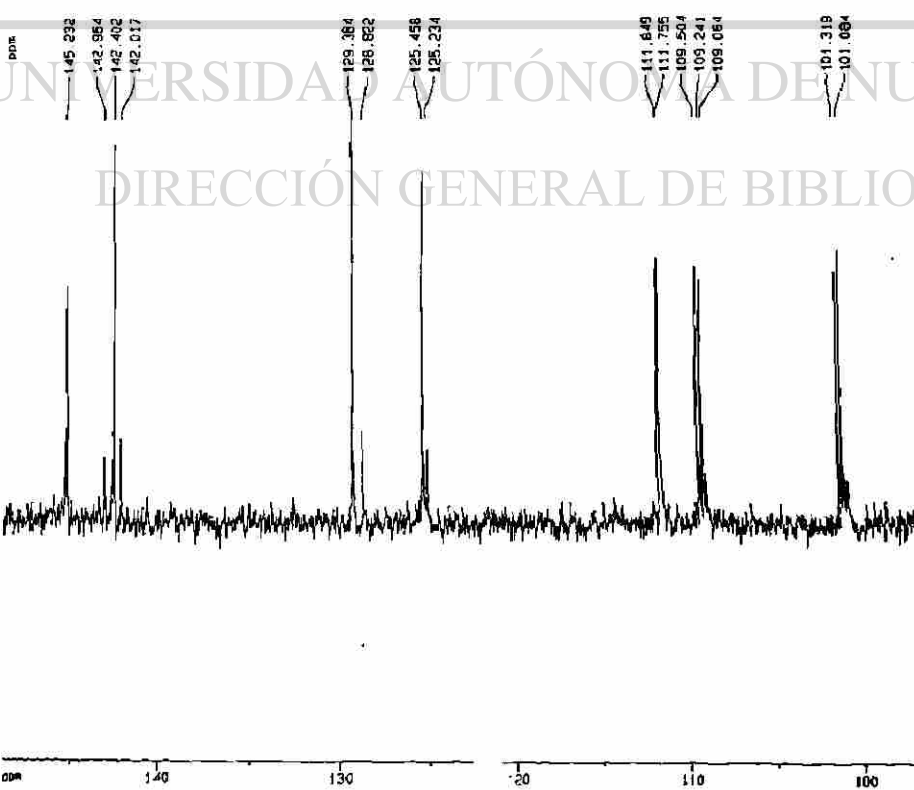
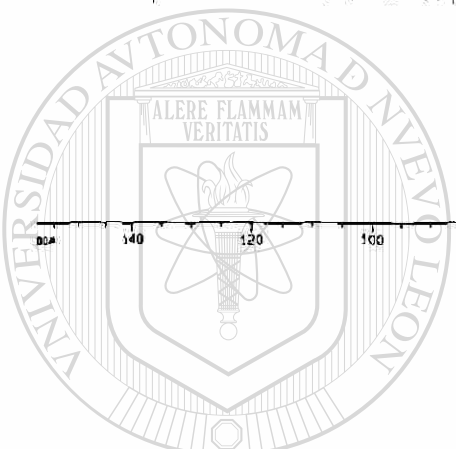


Current Data Parameters
NAME: EVPMB25
EXPNO: 4
PROCNO: 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_: 04/08
Time: 8:56
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm HLL113
PULPROG: zgpg30
TD: 65536
SOLVENT: DMSO
NS: 513
DS: 4
SWH: 16181.229 Hz
FIDRES: 0.42312 Hz
AQ: 1.025812 sec
RG: 32768
INJ: 30.000 uvol
EX: 6.00 uvol
TE: 300.0 K
F1: 101.25 MHz
SFO: 125.760 MHz
NUC1: 13C
NUC2: 1H
SFO1: 400.146300 MHz
VPC1: 1.3C
SFO2: 400.146300 MHz
VPC2: 1H
SFO3: 100.626777 MHz
VPC3: 1.3C
SFO4: 100.626777 MHz
VPC4: 1H
SFO5: 100.626777 MHz
VPC5: 1H
SFO6: 100.626777 MHz
VPC6: 1H
SFO7: 100.626777 MHz
VPC7: 1H
SFO8: 100.626777 MHz
VPC8: 1H
SFO9: 100.626777 MHz
VPC9: 1H
SFO10: 100.626777 MHz
VPC10: 1H

F2 - Processing parameters
SI: 32768
SF: 100.626777 MHz
WDW: EM
SSB: 0
GB: 0
PC: 1.40

F0 - 13C-RMN, DEPT-135.
Ampliación.



145.232
142.554
142.402
142.017

129.384
128.822
125.456
125.234

111.849
111.795
109.504
109.241
109.064
101.319
101.084

47.735
47.520
47.307
47.094
47.000
46.882
46.785

27.549
24.425
19.410
17.795

Current Data Parameters
NAME: EVPMB25
EXPNO: 4
PROCNO: 1

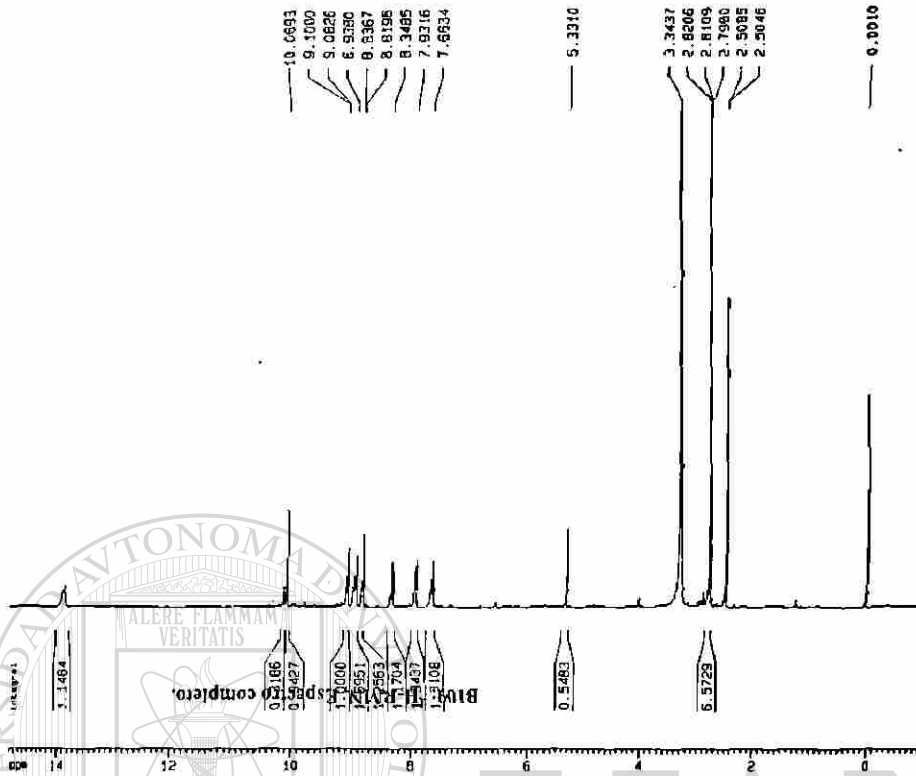
F2 - Acquisition Parameters
Date_: 04/08
Time: 8:56
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm HLL113
PULPROG: zgpg30
TD: 65536
SOLVENT: DMSO
NS: 513
DS: 4
SWH: 16181.229 Hz
FIDRES: 0.42312 Hz
AQ: 1.025812 sec
RG: 32768
INJ: 30.000 uvol
EX: 6.00 uvol
TE: 300.0 K
F1: 101.25 MHz
SFO: 125.760 MHz
NUC1: 13C
NUC2: 1H
SFO1: 400.146300 MHz
VPC1: 1.3C
SFO2: 400.146300 MHz
VPC2: 1H
SFO3: 100.626777 MHz
VPC3: 1.3C
SFO4: 100.626777 MHz
VPC4: 1H
SFO5: 100.626777 MHz
VPC5: 1H
SFO6: 100.626777 MHz
VPC6: 1H
SFO7: 100.626777 MHz
VPC7: 1H
SFO8: 100.626777 MHz
VPC8: 1H
SFO9: 100.626777 MHz
VPC9: 1H
SFO10: 100.626777 MHz
VPC10: 1H

F2 - Processing parameters
SI: 32768
SF: 100.626777 MHz
WDW: EM
SSB: 0
GB: 0
PC: 1.40

F0 - 13C-RMN, DEPT-135.
Ampliación.

EVMP13E

B109: ¹H-RMN, Espectro completo.



Current Data Parameters
 NAME EVMP13E
 EXPNO 3
 PROCNO 1

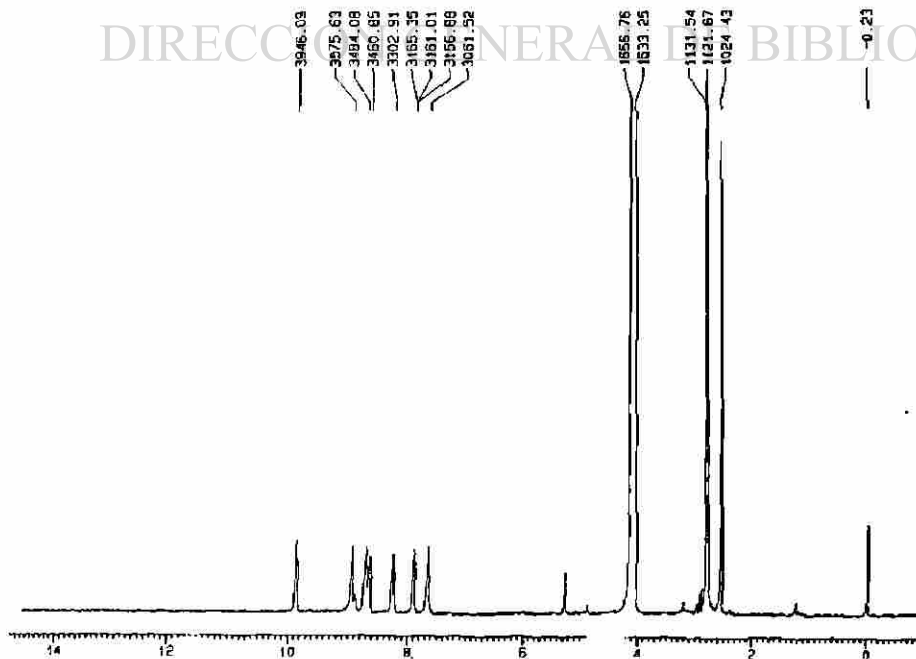
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 200317
 Time 8 16
 INSTRUM spect
 PROBRD 5 mm Multinu
 PULPROG zg
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 128
 DS 4
 SWH 6410.256 Hz
 FIDRES 0.185625 Hz
 AQ 2.555948 sec
 RG 812.7
 DW 78.000 usec
 DE 8.00 usec
 TE 300.0 K
 D1 1.8000000 sec
 P1 12.50 usec
 DE 8.00 usec
 SF01 400.1326024 MHz
 NUC1 1H
 PL1 -3.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 16384
 SF 400.1300015 MHz
 NH 1
 SFO 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

10 MHz plot parameters
 CX 20.00 cm
 FIDP 15.000 ppm
 F1 6001.95 Hz
 F2 -1.000 ppm
 F2 -400.13 Hz
 GPCCH 0.00000 ppm/cm
 N2CH 320.01280 Hz/cm

EVMP13E

B110: ¹H-RMN, Intercambio con D₂O.



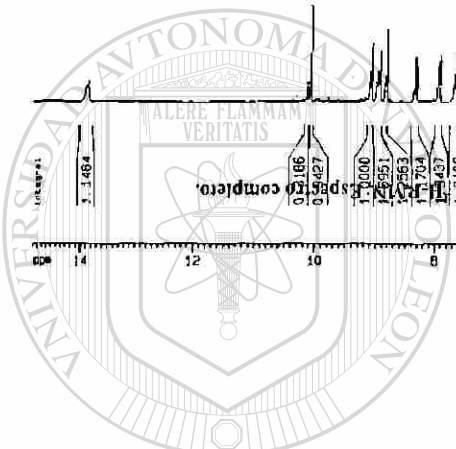
Current Data Parameters
 NAME EVMP13E
 EXPNO 11
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 200325
 Time 14 18
 INSTRUM spect
 PROBRD 5 mm Multinu
 PULPROG zg
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 128
 DS 4
 SWH 6410.256 Hz
 FIDRES 0.185625 Hz
 AQ 2.555948 sec
 RG 812.7
 DW 78.000 usec
 DE 8.00 usec
 TE 300.0 K
 D1 1.8000000 sec
 P1 12.50 usec
 DE 8.00 usec
 SF01 400.1326024 MHz
 NUC1 1H
 PL1 -3.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 16384
 SF 400.1299803 MHz
 NH 1
 SFO 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

10 MHz plot parameters
 CX 20.00 cm
 FIDP 15.010 ppm
 F1 6005.03 Hz
 F2 -1.010 ppm
 F2 -404.22 Hz
 GPCCH 0.00102 ppm/cm
 N2CH 320.01280 Hz/cm

INTERCAMBIO
0.1 820



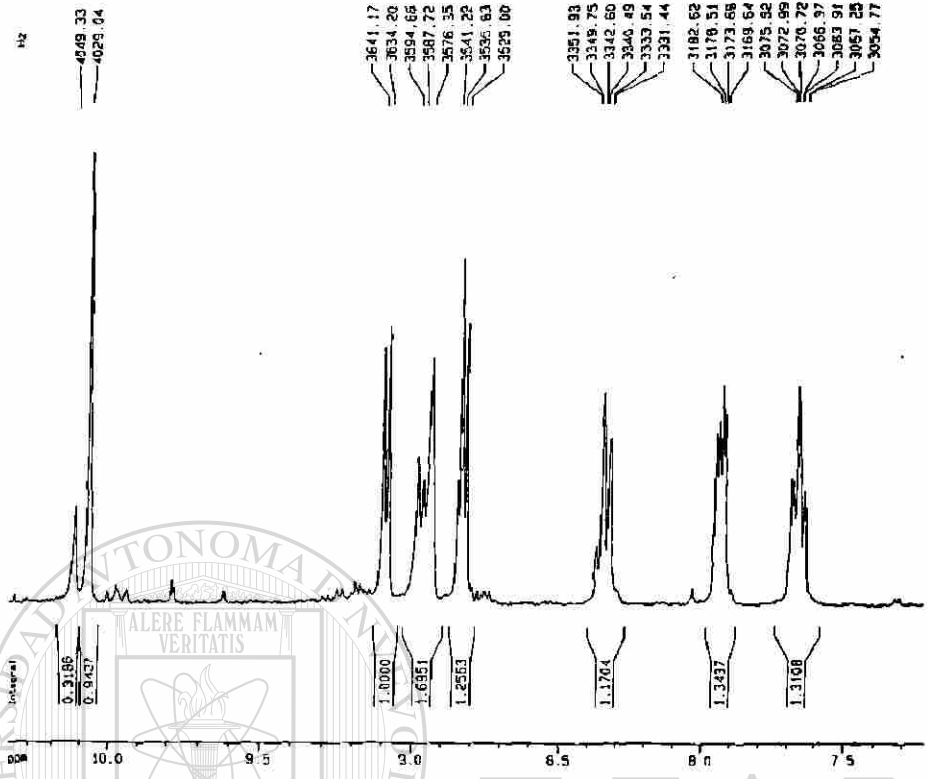
U A N L

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

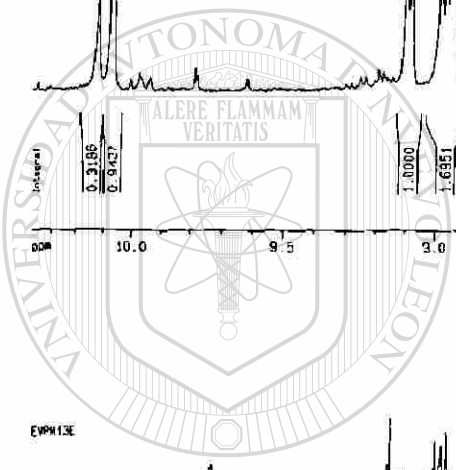
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

EVMP13E

B111: ¹H-RMN, Ampliación.



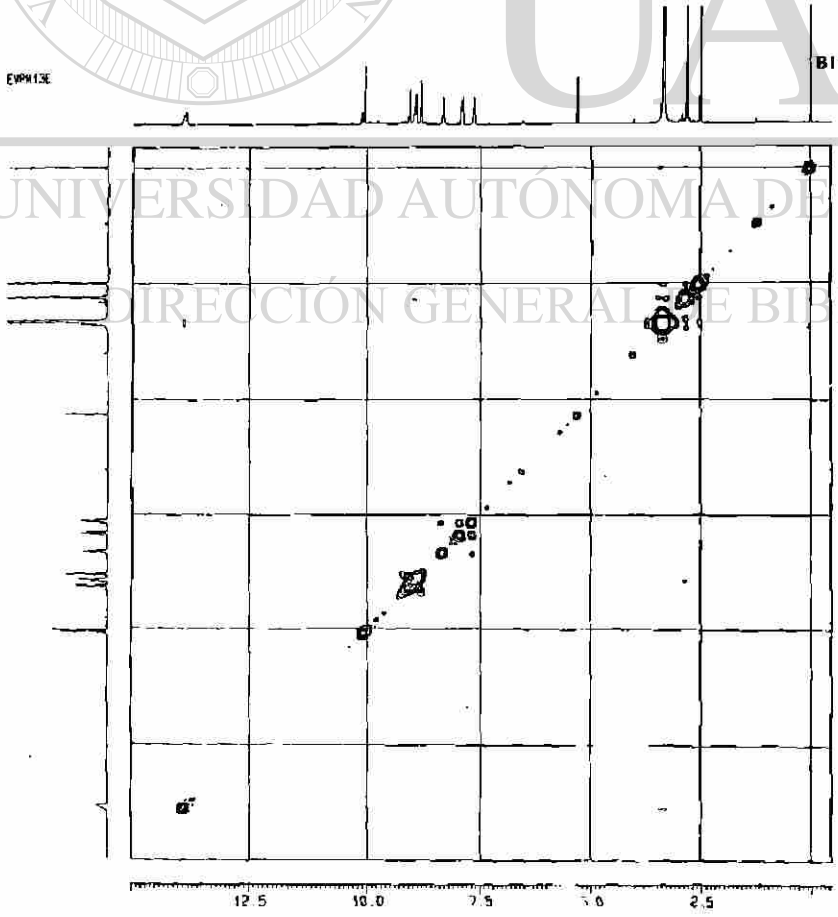
Current Data Parameters
 NAME: EVMP13E
 F2 - Acquisition Parameters
 Date_: 9/23/17
 Time: 8:16
 INSTRUM: spect
 PROCNO: 5 de Multisim
 F2 - Processing parameters
 SI: 16384
 SF: 400 1300015 Hz
 NS: 64
 DS: 4
 SWH: 5410.256 Hz
 FIDRES: 0.155325 Hz
 AQ: 2.925940 sec
 RG: 612.7
 DN: 78.000 usac
 DE: 8.00 usac
 TE: 300.0 K
 DI: 1.0000000 sec
 P1: 12.50 usac
 CE: 8.00 usac
 SF01: 400 1328024 Hz
 NUC1: 1H
 P1: 3.00 sec
 ID - Acquisition parameters
 CX: 20.00 cm
 F1P: 10.362 MHz
 F1: 4154.32 MHz
 F2: 7.226 MHz
 F2: 2892.15 Hz
 WPCW: 0 15772 ppm/cm
 W/CW: 83 108.78 Hz/cm



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

EVMP13E

B112: COSY completa.



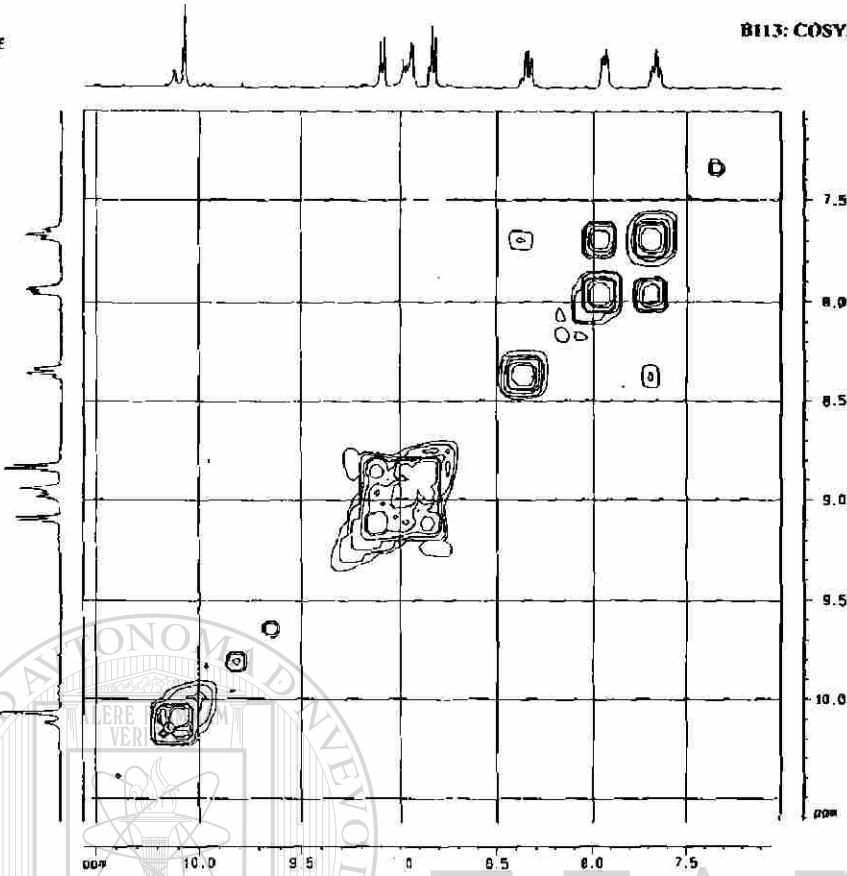
Current Data Parameters
 NAME: EVMP13E
 F2 - Acquisition Parameters
 Date_: 9/23/17
 Time: 8:17
 INSTRUM: spect
 PROCNO: 5 de Multisim
 F2 - Processing parameters
 SI: 16384
 SF: 400 1300015 Hz
 NS: 64
 DS: 4
 SWH: 5410.256 Hz
 FIDRES: 0.155325 Hz
 AQ: 2.925940 sec
 RG: 612.7
 DN: 78.000 usac
 DE: 8.00 usac
 TE: 300.0 K
 DI: 1.0000000 sec
 P1: 12.50 usac
 CE: 8.00 usac
 SF01: 400 1328024 Hz
 NUC1: 1H
 P1: 3.00 sec
 ID - Acquisition parameters
 CX: 20.00 cm
 F1P: 10.362 MHz
 F1: 4154.32 MHz
 F2: 7.226 MHz
 F2: 2892.15 Hz
 WPCW: 0 15772 ppm/cm
 W/CW: 83 108.78 Hz/cm

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

MIS

B113: COSY, Ampliación.

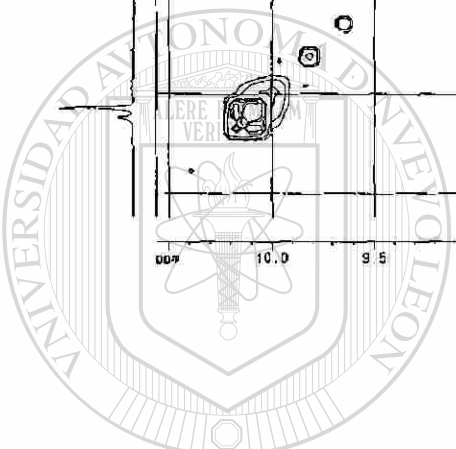


```

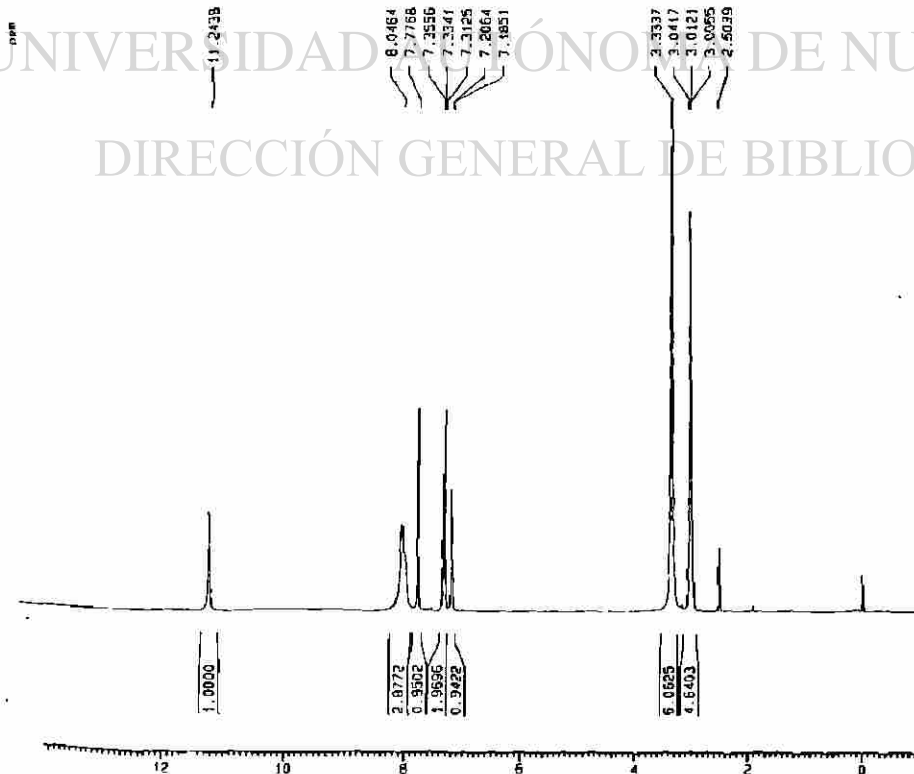
Current Data Parameters
NAME      (vnmr)
EXPNO    1
PROCNO   1
F2 - Acquisition Parameters
Date_    901006
Time     20 36
INSTRUM  socr
PROBHD   5 mm Mx119
PULPROG  zgpg30
TD       32768
SOLVENT  DMSO
NS       32
DS       2
SWH      6410.256 Hz
FIDRES   0.195625 Hz
AQ       2.3529540 SEC
RG       750
IN       78.000 usec
DE       8.00 usec
TE       300.0 K
D1       1.0000000 sec
P1       12.50 usec
DE       8.00 usec
SFO1     400.136024 MHz
NUC1      1H
PC1       -3.00 dB
F2 - Processing parameters
SI       15384
SF       400.136015 MHz
WDW      EM
SSB      0
LB       0.30 Hz
GB       0
PC       1.00
TD M90 plot parameters
CX       20.00 cm
F1P      15.010 ppm
F1       6005.04 Hz
F2P      -1.018 ppm
F2       -404.22 Hz
PPH1     0.80102 sec/cm
MCH      320.51285 Hz/cm
  
```

EVPMBO

B114: ¹H-RMN, Espectro completo.



UANL

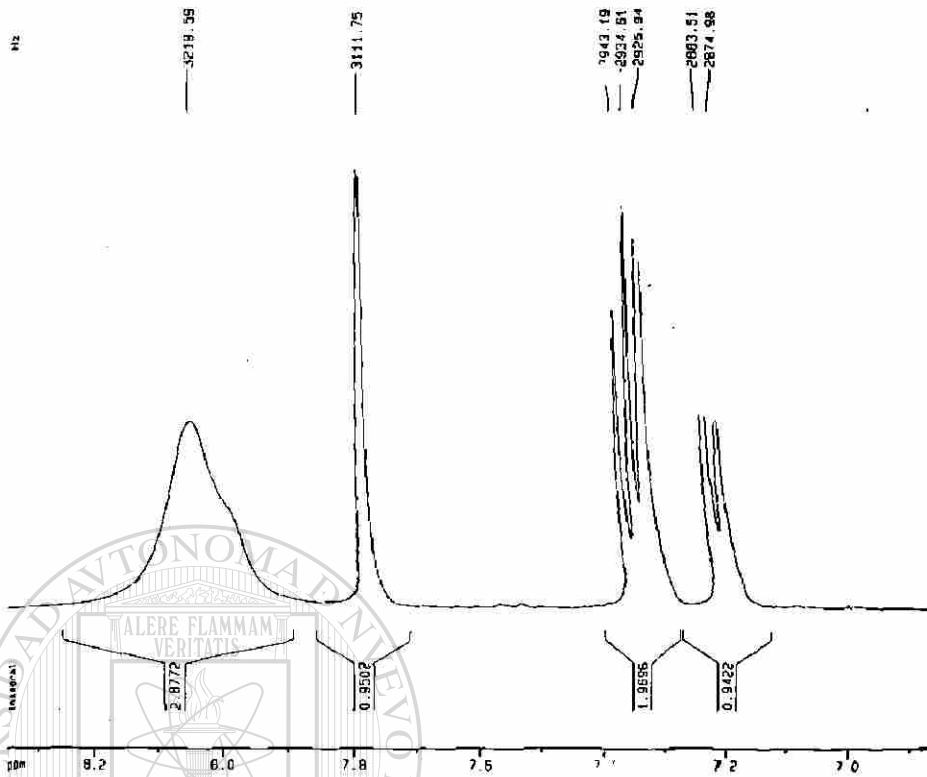


```

Current Data Parameters
NAME      (vnmr)
EXPNO    1
PROCNO   1
F2 - Acquisition Parameters
Date_    901006
Time     20 36
INSTRUM  socr
PROBHD   5 mm Mx119
PULPROG  zgpg30
TD       32768
SOLVENT  DMSO
NS       32
DS       2
SWH      6410.256 Hz
FIDRES   0.195625 Hz
AQ       2.3529540 SEC
RG       750
IN       78.000 usec
DE       8.00 usec
TE       300.0 K
D1       1.0000000 sec
P1       12.50 usec
DE       8.00 usec
SFO1     400.136024 MHz
NUC1      1H
PC1       -3.00 dB
F2 - Processing parameters
SI       15384
SF       400.136015 MHz
WDW      EM
SSB      0
LB       0.30 Hz
GB       0
PC       1.00
TD M90 plot parameters
CX       20.00 cm
F1P      15.010 ppm
F1       6005.04 Hz
F2P      -1.018 ppm
F2       -404.22 Hz
PPH1     0.80102 sec/cm
MCH      320.51285 Hz/cm
  
```

EVP480

B115: ¹H-RMN, Ampliación.



Current Data Parameters

NAME	EVP480
EXPNO	1
PROCNO	1

F2 - Acquisition Parameters

DATE_	081008
TIME	20 36
INSTRUM	sdmci
PROBHD	5 mm Multinu
PULPROG	zgpg30
TD	32768
SOLVENT	DMSO
NS	32
DS	2
SWH	8410.200 Hz
FIDRES	0.135675 Hz
AQ	2.555640 sec
RG	256
CH	10.000 MHz
DE	0.00 MHz
TE	300.0 K
D1	1.0000000 sec
P1	12.50 MHz
DE	0.00 MHz
SFO1	400.1328024 MHz
HWET	14
PL1	-3.00 dB

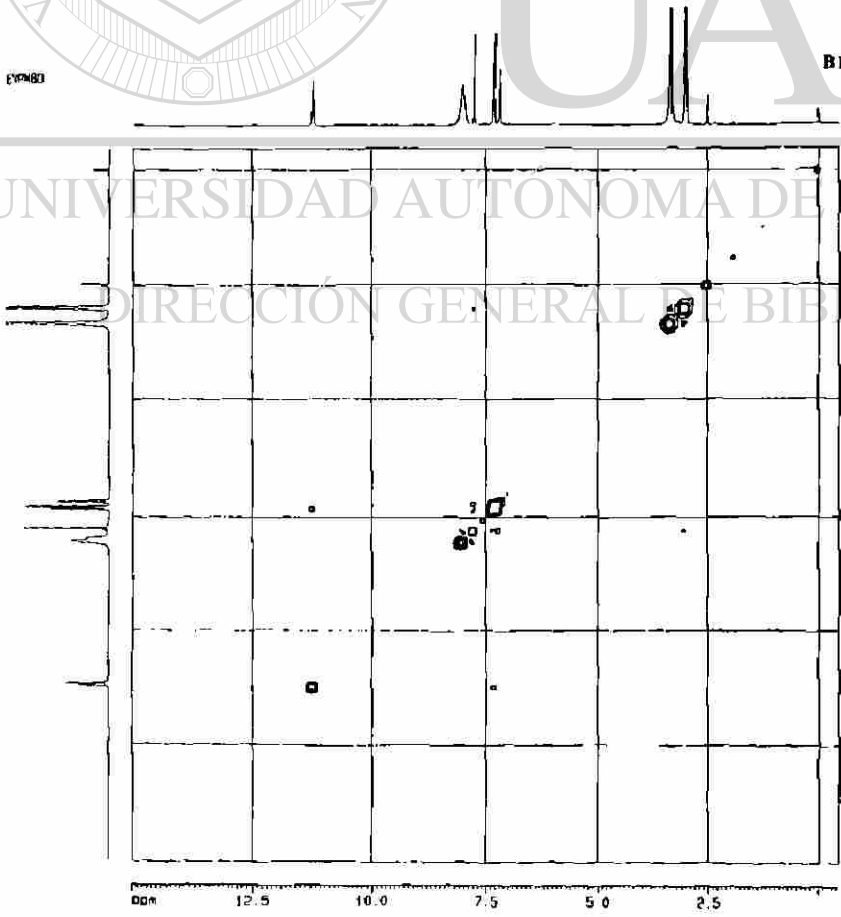
F2 - Processing parameters

SI	16384
SF	400.1300000 MHz
WDW	EM
SSB	0
LR	0.30 Hz
GB	0
PC	1.00

1D 2D data parameters

CH	20.00 cm
F1P	0.302 ppm
F2P	3345.97 Hz
F3P	5.801 ppm
FZ	27.45 3d Hz
PRCH	0.07500 ppm/cm
WDW	30.03251 Hz/cm

B116: COSY completa.



Current Data Parameters

NAME	EVP480
EXPNO	1
PROCNO	1

F2 - Acquisition Parameters

DATE_	081008
TIME	20 36
INSTRUM	sdmci
PROBHD	5 mm Multinu
PULPROG	zgpg30
TD	32768
SOLVENT	DMSO
NS	32
DS	2
SWH	8410.200 Hz
FIDRES	0.135675 Hz
AQ	2.555640 sec
RG	256
CH	10.000 MHz
DE	0.00 MHz
TE	300.0 K
D1	1.0000000 sec
P1	12.50 MHz
DE	0.00 MHz
SFO1	400.1328024 MHz
HWET	14
PL1	-3.00 dB
PL2	0.00 dB
PL3	0.00 dB

F2 - Processing parameters

SI	16384
SF	400.1300000 MHz
WDW	EM
SSB	0
LR	0.30 Hz
GB	0
PC	1.00

F1 - Acquisition parameters

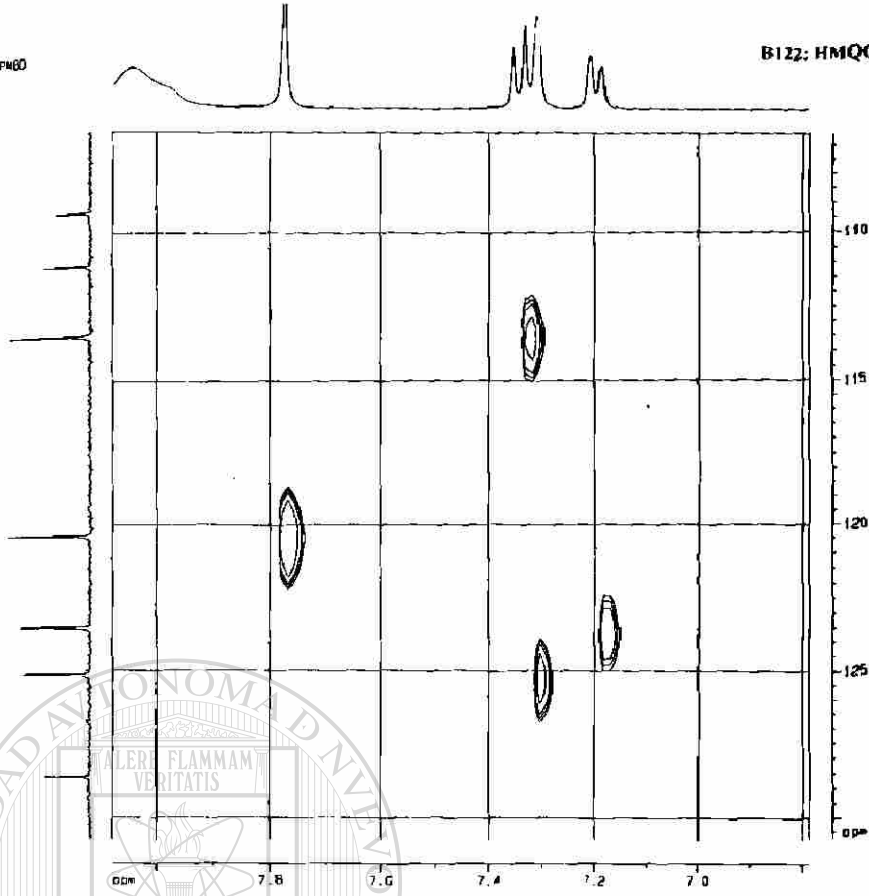
SI	16384
SF	400.1300000 MHz
WDW	EM
SSB	0
LR	0.30 Hz
GB	0
PC	1.00

2D 2D data parameters

CH1	15.00 cm
CH2	15.00 cm
F1P1	15.807 ppm
F2P1	0.000 ppm
F1P2	0.000 ppm
F2P2	15.807 ppm
FZ	27.45 3d Hz
PRCH	0.07500 ppm/cm
WDW	30.03251 Hz/cm

EVMBO

B122: HMQC, Ampliación.



Default Data Parameters

NAME	122000
EXPNO	1
PROCNO	1

F2 - Acquisition Parameters

DATE_	202308
TIME	20.24
INSTRUM	nmr1
PROBHD	5 mm Huj111mm
PULPROG	zgpg30
RG	655
SA NVM	32768
SI	32
SD	32768
DE	1
AS	32768 32768
AF	3 4.99517 Hz
AP	0.000000000
CP	0.000000000
OC	0.000000000
TE	300.2 K

F1 - Acquisition Parameters

NUC1	13C
NUC2	1H
PCPD1	100.6267 MHz
PCPD2	500.136263 MHz
SI	1024
SD	1024

F2 - Processing parameters

SI	1024
SP	400.136263 MHz
MD	32768
SD	1
LB	0.00 Hz
GB	0
PC	0.00

F1 - Processing parameters

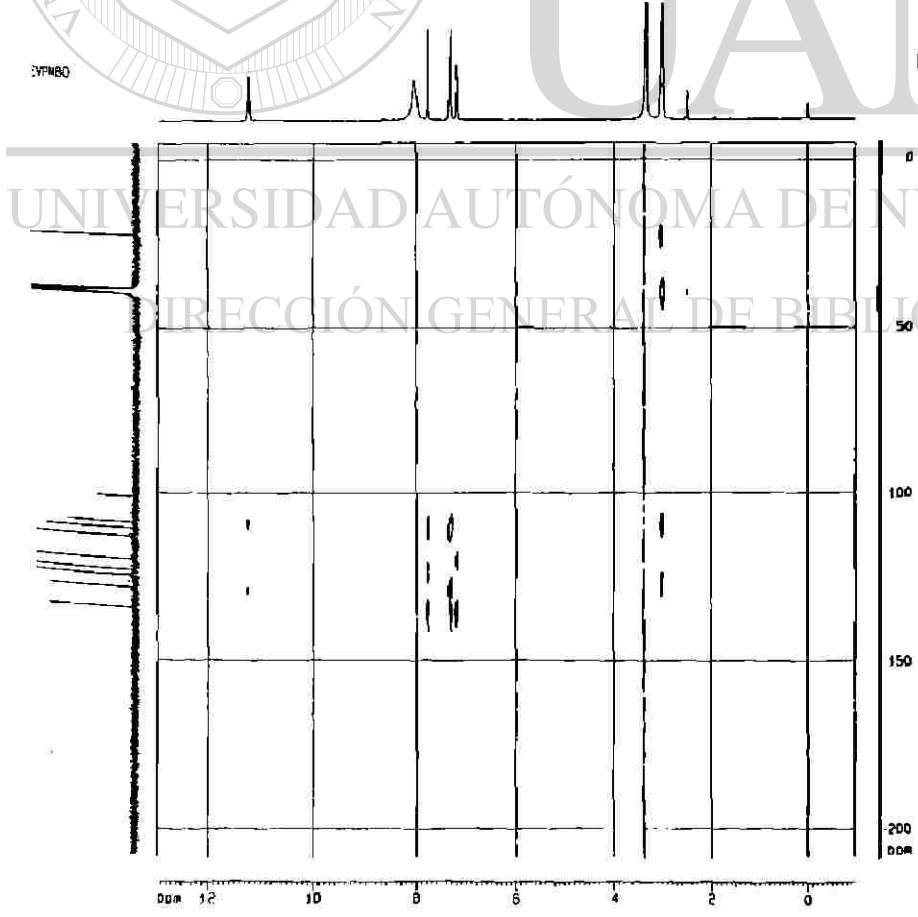
SI	512
SP	500.136263 MHz
MD	32768
SD	2
LB	0.00 Hz
GB	0

2D data parameters

SI	1024
SP	100.6267 MHz
MD	32768
SD	1
LB	0.00 Hz
GB	0
PC	0.00

EVMBO

B123: HMBC.



Default Data Parameters

NAME	123000
EXPNO	1
PROCNO	1

F2 - Acquisition Parameters

DATE_	202308
TIME	1.47
INSTRUM	nmr1
PROBHD	5 mm Huj111mm
PULPROG	zgpg30
RG	655
SA NVM	32768
SI	32
SD	32768
DE	1
AS	32768 32768
AF	3 4.99517 Hz
AP	0.000000000
CP	0.000000000
OC	0.000000000
TE	300.2 K

F1 - Acquisition Parameters

NUC1	13C
NUC2	1H
PCPD1	100.6267 MHz
PCPD2	500.136263 MHz
SI	1024
SD	1024

F2 - Processing parameters

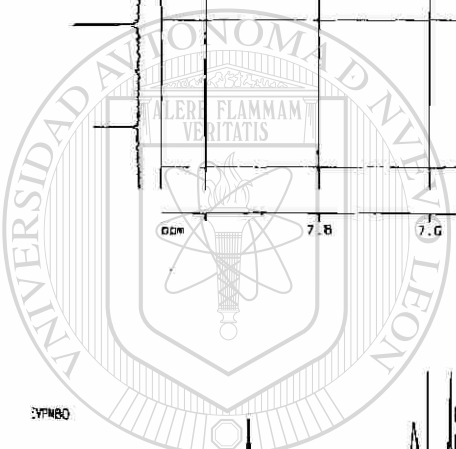
SI	1024
SP	400.136263 MHz
MD	32768
SD	1
LB	0.00 Hz
GB	0
PC	0.00

F1 - Processing parameters

SI	512
SP	500.136263 MHz
MD	32768
SD	2
LB	0.00 Hz
GB	0

2D data parameters

SI	1024
SP	100.6267 MHz
MD	32768
SD	1
LB	0.00 Hz
GB	0
PC	0.00

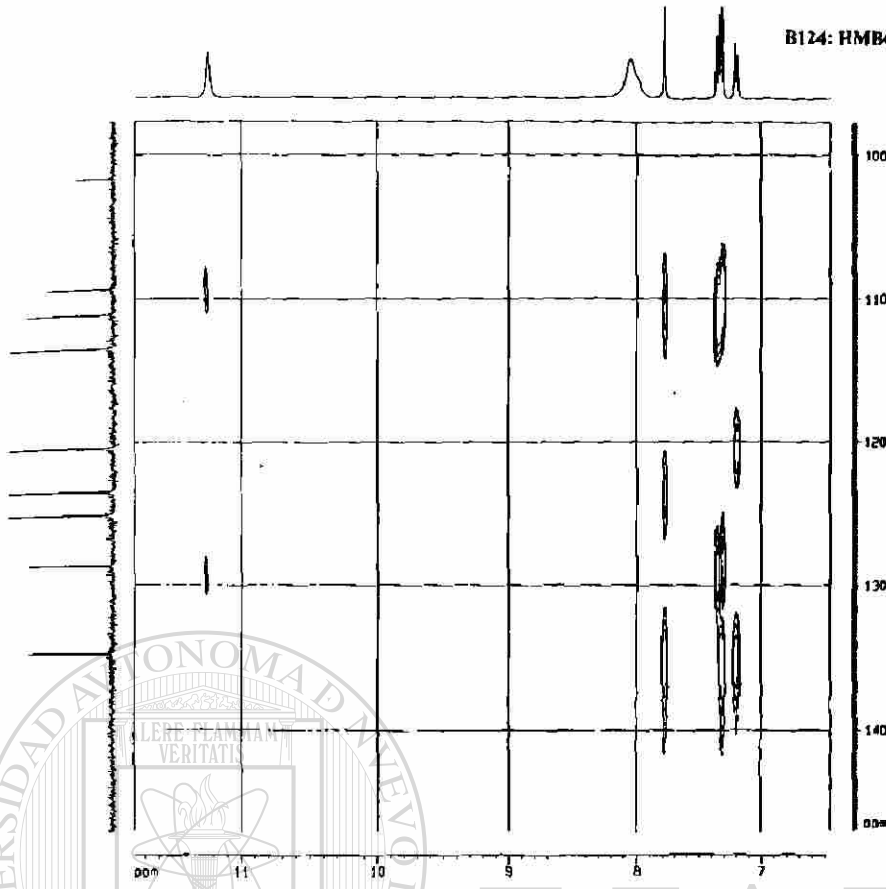


UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

B124: HMBC, Ampliación.

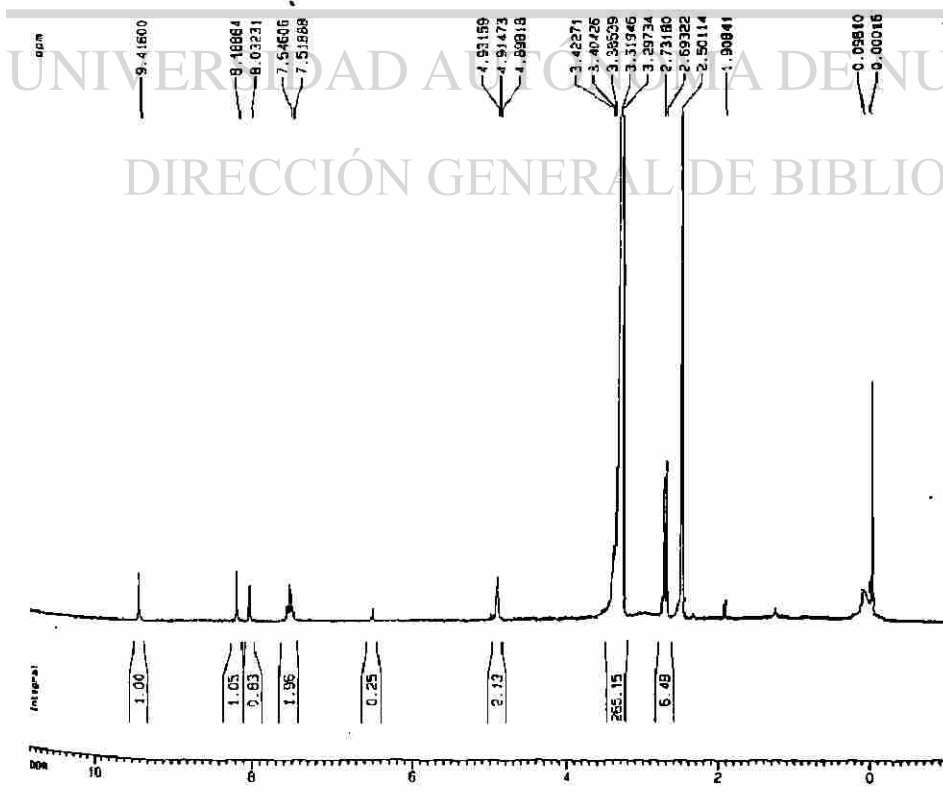


```

Current Data Parameters
NAME      EPM108
EXPNO     1
PROCNO    1
F2 - Acquisition Parameters
Date_     201107
Time      17:15
INSTRUM   spect
PROBHD    5 mm Nalima
PULPROG   zgpg30
TD         32768
SOLVENT   DMSO
NS         32
DS         4
SWH        4007.850 Hz
FIDRES     0.146719 Hz
AQ         3.407620 sec
RG         574.7
DB         164.000 usec
DE         0.00 usec
TE         300.0 K
D1         1.80000000 sec
d11        12.50 usec
DE         0.00 usec
SF01       400.1320021 MHz
NUC1       1H
PC1        -3.00 dB
F2 - Processing parameters
SI         16384
SF         400.1300026 MHz
MD         EN
SSB        0
LB         0.30 Hz
GB         0
PC         1.00
SD - Acquisition Parameters
CT         20.00 usec
F1P        11.000 MHz
F1         400.143 MHz
F2P        -1.000 MHz
F2         -400.13 MHz
DWDW1      0.50000 MHz/Hz
HYDR       240.07800 MHz/Hz
    
```

EPM108

B125: ¹H-RMN, Espectro completo.

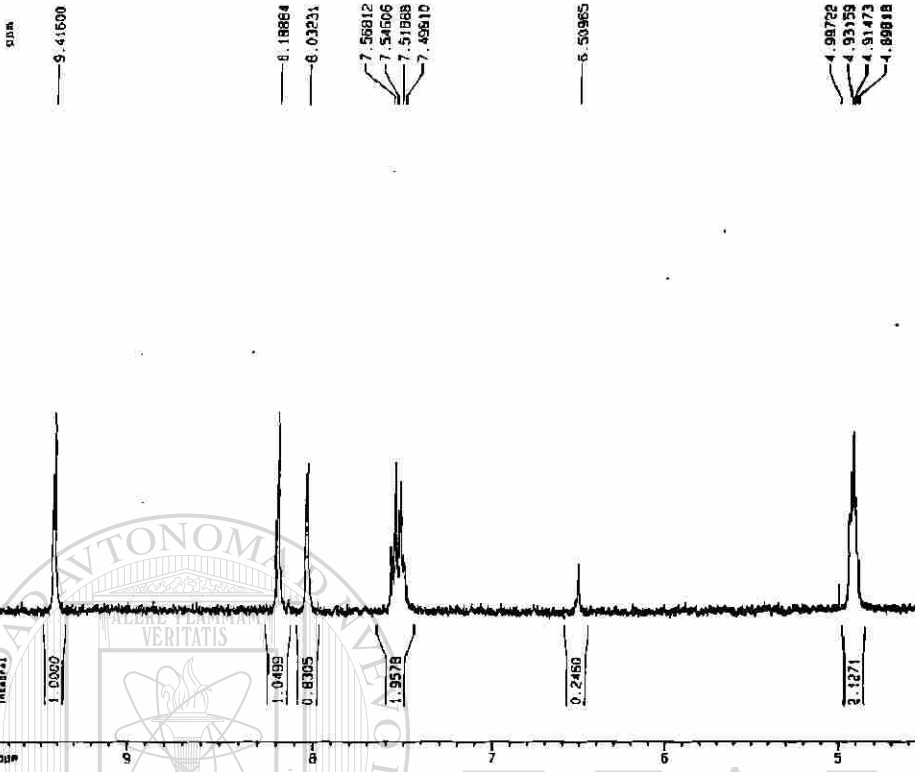


```

Current Data Parameters
NAME      EPM108
EXPNO     1
PROCNO    1
F2 - Acquisition Parameters
Date_     201107
Time      17:15
INSTRUM   spect
PROBHD    5 mm Nalima
PULPROG   zgpg30
TD         32768
SOLVENT   DMSO
NS         32
DS         4
SWH        4007.850 Hz
FIDRES     0.146719 Hz
AQ         3.407620 sec
RG         574.7
DB         164.000 usec
DE         0.00 usec
TE         300.0 K
D1         1.80000000 sec
d11        12.50 usec
DE         0.00 usec
SF01       400.1320021 MHz
NUC1       1H
PC1        -3.00 dB
F2 - Processing parameters
SI         16384
SF         400.1300026 MHz
MD         EN
SSB        0
LB         0.30 Hz
GB         0
PC         1.00
SD - Acquisition Parameters
CT         20.00 usec
F1P        11.000 MHz
F1         400.143 MHz
F2P        -1.000 MHz
F2         -400.13 MHz
DWDW1      0.50000 MHz/Hz
HYDR       240.07800 MHz/Hz
    
```

EVPH108

B126: ¹H-RMN, Ampliación.



Current Data Parameters
 NAME (vpr108)
 EXPNO 1
 PROCNO 1

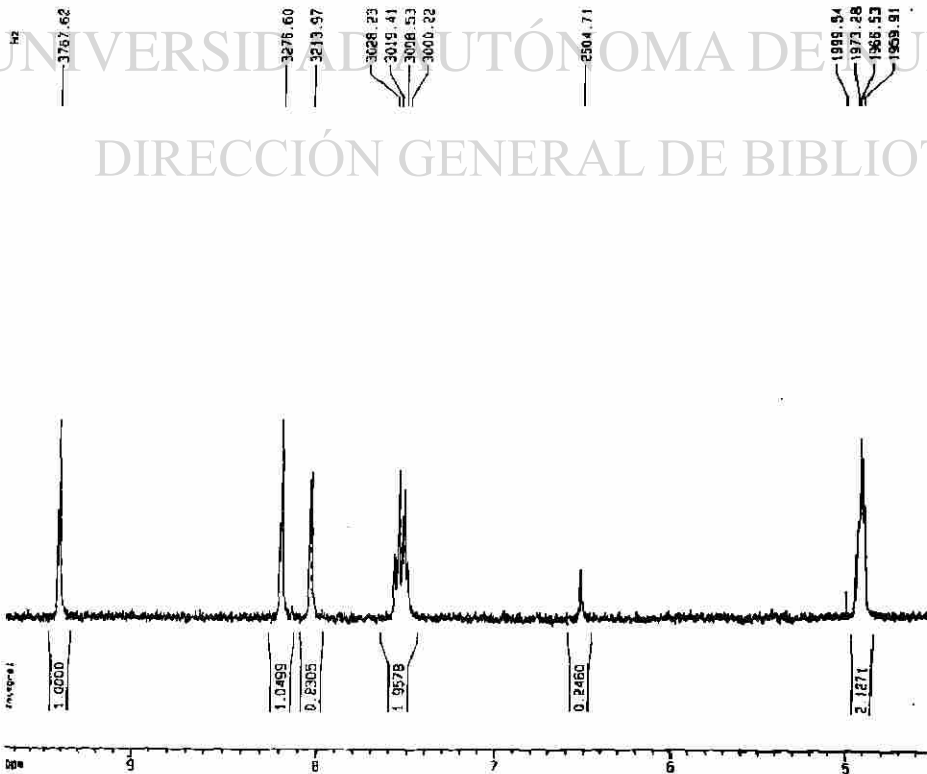
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 08/20/7
 Time 17:11
 INSTRUM spect
 PROCNO 5 = 04/11/04
 PULPROG zg
 TO 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 32
 DS 4
 SM 4007.602 Hz
 FIDRES 0.146718 Hz
 AQ 3.4078220 sec
 RG 574.7
 DR 164.000 usec
 DE 8.00 usec
 TE 300.0 K
 D1 1.00000000 sec
 P1 12.50 usec
 DE 8.00 usec
 SFO1 400.132001 MHz
 NUC1 1H
 PL1 -3.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 16384
 SF 400.1300026 MHz
 KHZ 0
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

ID non list parameters
 CR 20.00 cm
 F1P 9.776 ppm
 F1 3812.38 Hz
 F2P 4.526 ppm
 F2 1811.70 Hz
 DPMSF 0.26250 ppm/cm
 HZCF 105.03413 Hz/cm

EVPH108

B127: ¹H-RMN, Ampliación.

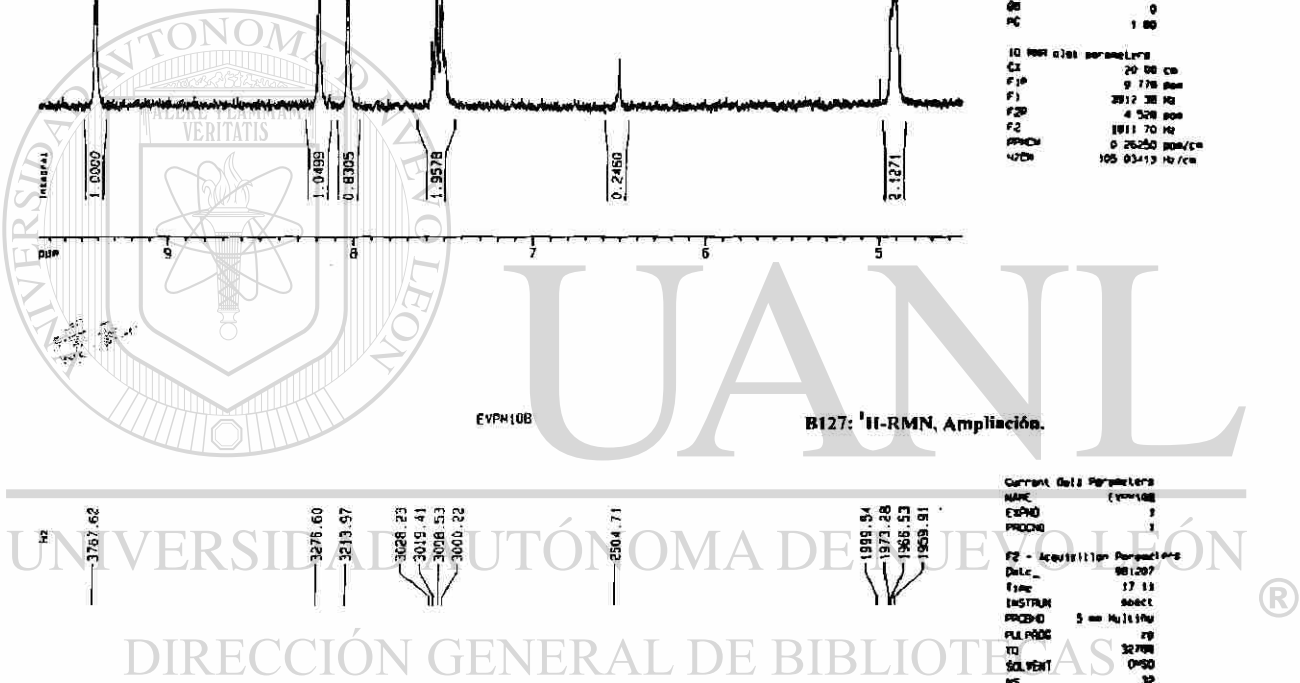


Current Data Parameters
 NAME (vpr108)
 EXPNO 1
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 08/20/7
 Time 17:11
 INSTRUM spect
 PROCNO 5 = 04/11/04
 PULPROG zg
 TO 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 32
 DS 4
 SM 4007.602 Hz
 FIDRES 0.146718 Hz
 AQ 3.4078220 sec
 RG 574.7
 DR 164.000 usec
 DE 8.00 usec
 TE 300.0 K
 D1 1.00000000 sec
 P1 12.50 usec
 DE 8.00 usec
 SFO1 400.132001 MHz
 NUC1 1H
 PL1 -3.00 dB

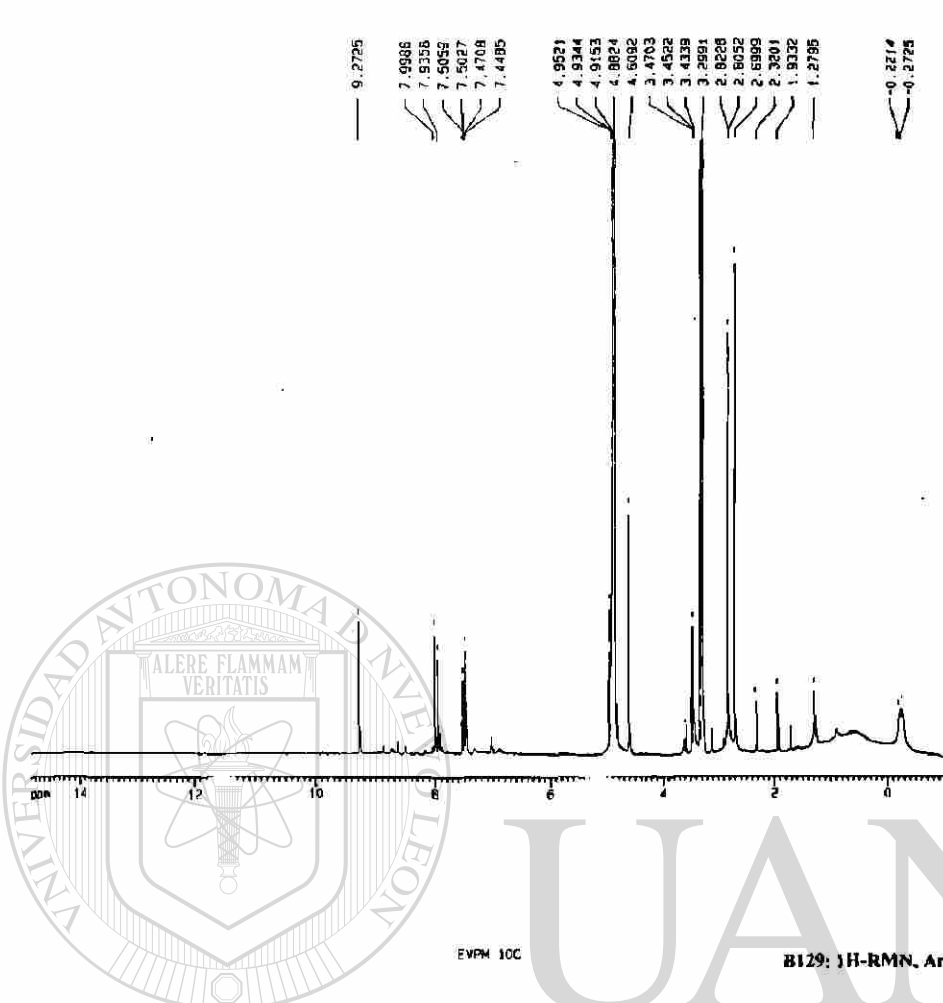
F2 - Processing parameters
 SI 16384
 SF 400.1300026 MHz
 KHZ 0
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

ID non list parameters
 CR 20.00 cm
 F1P 9.776 ppm
 F1 3812.38 Hz
 F2P 4.526 ppm
 F2 1811.70 Hz
 DPMSF 0.26250 ppm/cm
 HZCF 105.03413 Hz/cm



EYPM 10C

B128: ¹H-RMN, Espectro completo.



Current Data Parameters
 NAME EYPM10C
 PROCNO 1

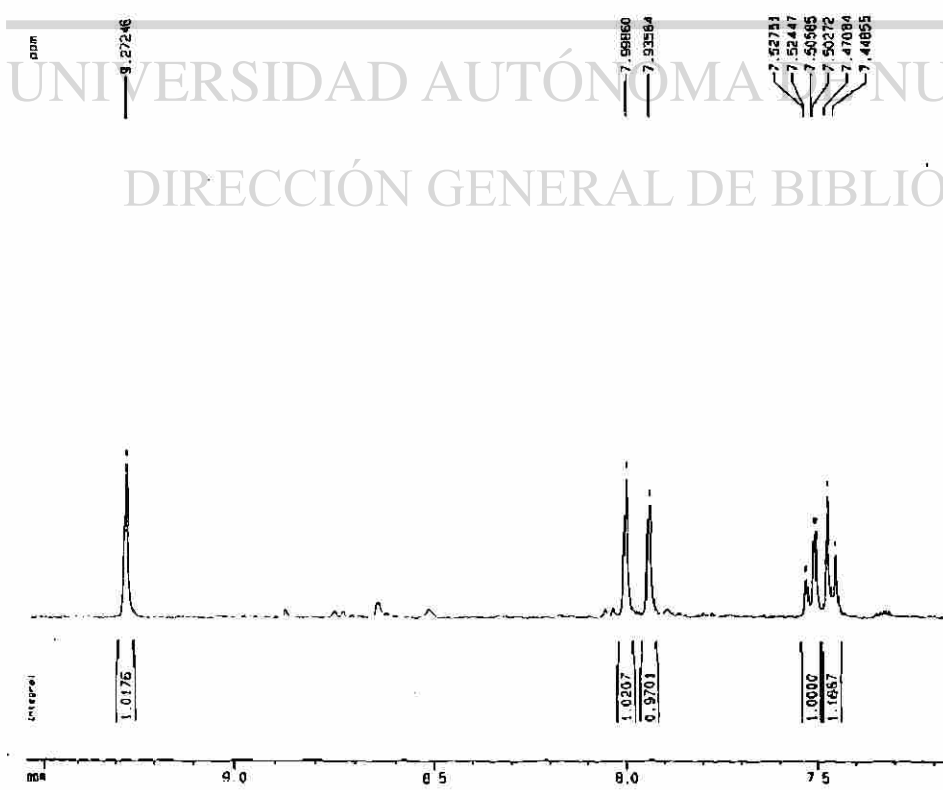
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 200612
 Time 11 18
 INSTRUM spect
 PROCNO 5 no Multis
 PULPROG zg
 TD 3274
 SOLVENT MeOH
 NS 256
 DS 4
 SFO 640 256 Hz
 FIDRES 0.189238 Hz
 AQ 2.6422219 sec
 RG 456 1
 DM 78 000 ussec
 DE 8.00 ussec
 TE 300.0 K
 D1 1.50000000 sec
 P1 9.00 ussec
 DE 8.00 ussec
 SFO1 400 1300118 MHz
 NUC1 1H
 PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 8192
 SF 400 1300118 MHz
 MM EM
 SS 0
 LB 0.30 Hz
 BR 0
 PC 1.00

10 MHz plot parameters
 CR 20.00 cm
 F1P 5.551 668
 F1 3802.00 Hz
 F2P 2.180 200
 F2 264.75 Hz
 SFO1P 0 11957 ppm/cp
 SFO2 47 5242 Hz/cp

EYPM 10C

B129: ¹H-RMN, Ampliación.



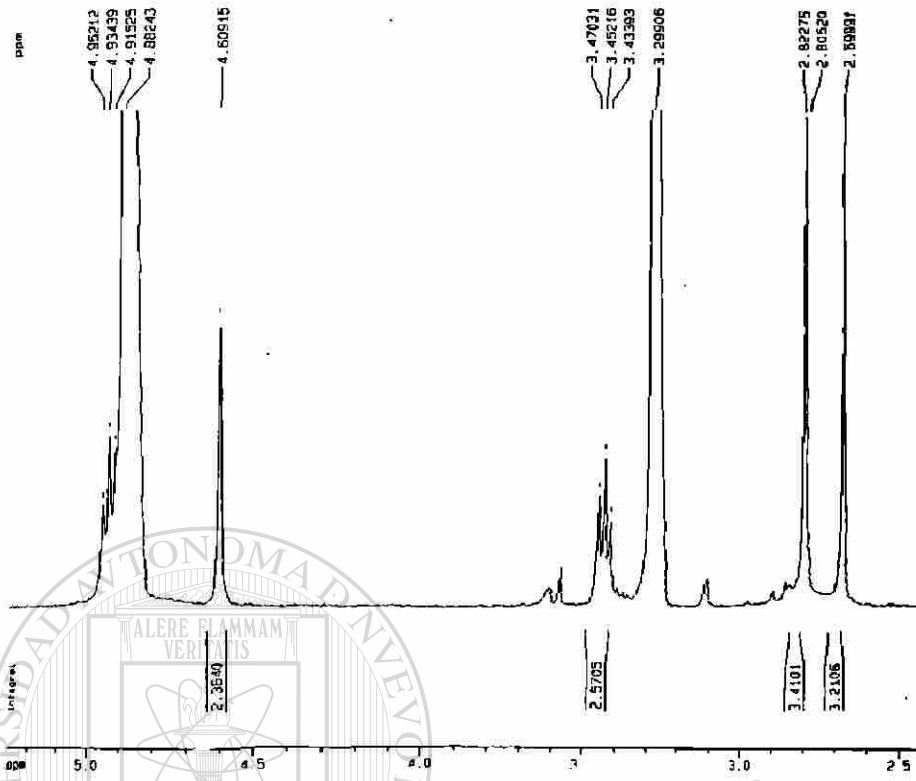
Current Data Parameters
 NAME EYPM10C
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 200612
 Time 11 18
 INSTRUM spect
 PROCNO 5 no Multis
 PULPROG zg
 TD 3274
 SOLVENT MeOH
 NS 256
 DS 4
 SFO 640 256 Hz
 FIDRES 0.189238 Hz
 AQ 2.6422219 sec
 RG 456 1
 DM 78 000 ussec
 DE 8.00 ussec
 TE 300.0 K
 D1 1.50000000 sec
 P1 9.00 ussec
 DE 8.00 ussec
 SFO1 400 1300118 MHz
 NUC1 1H
 PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 8192
 SF 400 1300118 MHz
 MM EM
 SS 0
 LB 0.30 Hz
 BR 0
 PC 1.00

10 MHz plot parameters
 CR 20.00 cm
 F1P 5.551 668
 F1 3802.00 Hz
 F2P 2.180 200
 F2 264.75 Hz
 SFO1P 0 11957 ppm/cp
 SFO2 47 5242 Hz/cp

B130: 1H-RMN, Ampliación.

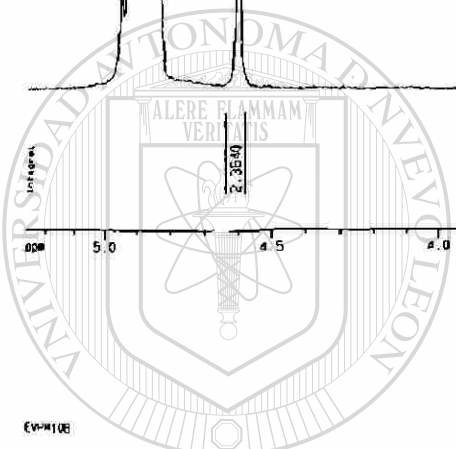


Current Data Parameters
 NAME: EVDH10C
 PROCD: 1

F2 - Acquisition Parameters
 DATE: 2006/2
 TIME: 11:10
 INSTRUM: spect
 PROBHD: 5 mm BbBbo
 PULPROG: zgpg30
 TD: 32768
 SOLVENT: d2o
 NS: 256
 DS: 4
 SWH: 8410.256 Hz
 FIDRES: 0.100234 Hz
 AQ: 2.6422219 sec
 RG: 456.1
 QR: 70.000 usec
 QE: 0.00 usec
 TE: 300.0 K
 D1: 1.5000000 sec
 P1: 1.00 usec
 DE: 0.00 usec
 SF01: 400.132001 MHz
 NUC1: 1H
 PL1: -1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI: 6192
 SF: 400.130018 MHz
 NQ: 0
 SN: 0
 LB: 0.30 Hz
 GB: 0
 PC: 0.00

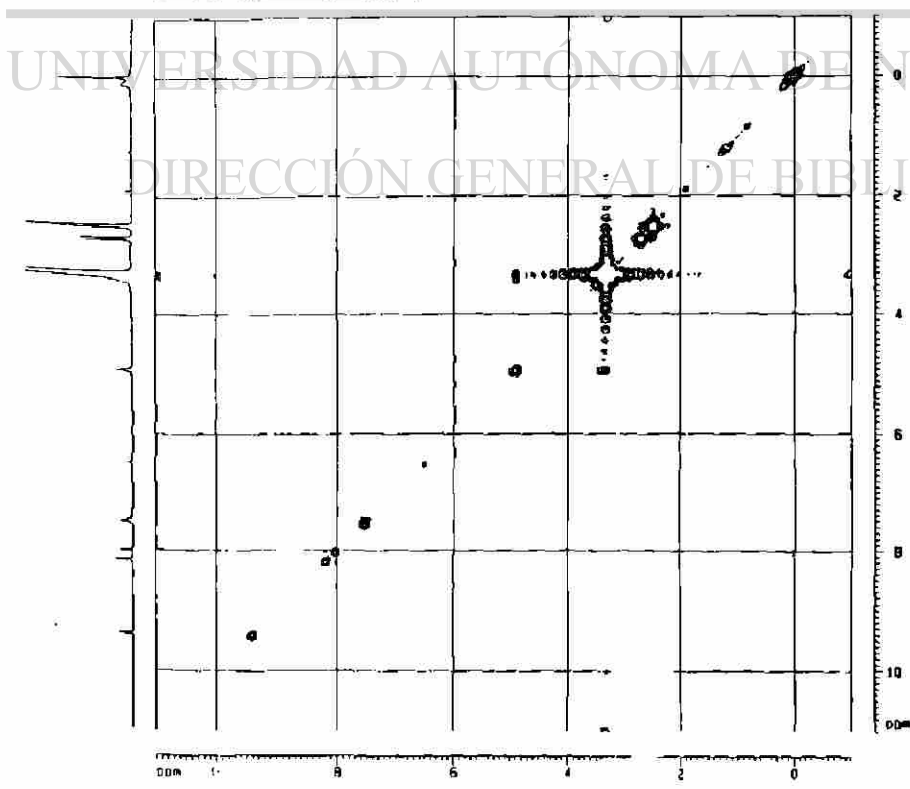
TD and SFC parameters
 CX: 20.00 cm
 FSP: 3.278 mm
 F1: 2181.00 Hz
 F2: 2.422 mm
 F3: 969.08 Hz
 WPCW: 0.14270 mm/cm
 WDR: 97.09849 Hz/cm



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
 DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECA

EVDH10C

B131: COSY completo.

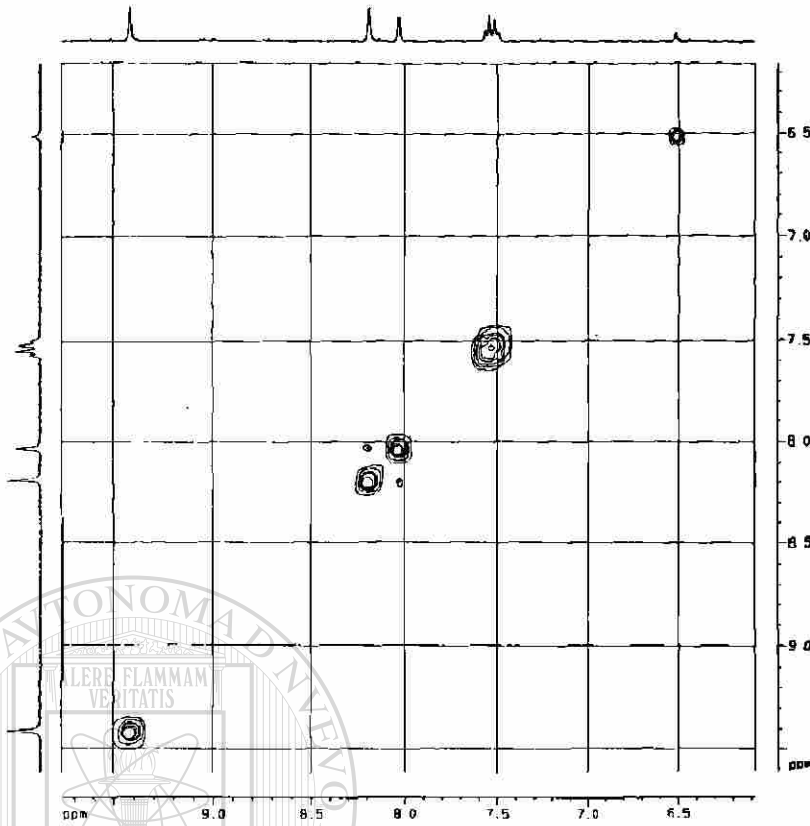


Current Data Parameters
 NAME: EVDH10C
 PROCD: 1

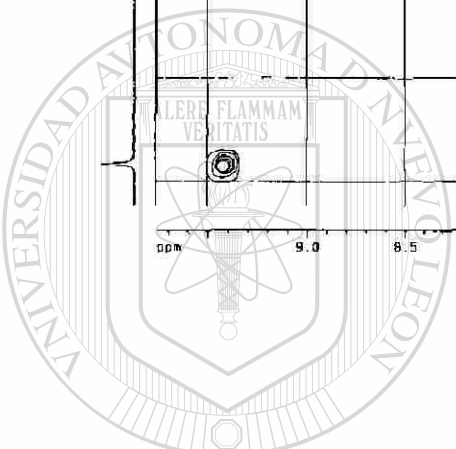
F2 - Acquisition Parameters
 DATE: 2006/2
 TIME: 11:10
 INSTRUM: spect
 PROBHD: 5 mm BbBbo
 PULPROG: zgpg30
 TD: 32768
 SOLVENT: d2o
 NS: 256
 DS: 4
 SWH: 8410.256 Hz
 FIDRES: 0.100234 Hz
 AQ: 2.6422219 sec
 RG: 456.1
 QR: 70.000 usec
 QE: 0.00 usec
 TE: 300.0 K
 D1: 1.5000000 sec
 P1: 1.00 usec
 DE: 0.00 usec
 SF01: 400.132001 MHz
 NUC1: 1H
 PL1: -1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI: 6192
 SF: 400.130018 MHz
 NQ: 0
 SN: 0
 LB: 0.30 Hz
 GB: 0
 PC: 0.00

TD and SFC parameters
 CX: 20.00 cm
 FSP: 3.278 mm
 F1: 2181.00 Hz
 F2: 2.422 mm
 F3: 969.08 Hz
 WPCW: 0.14270 mm/cm
 WDR: 97.09849 Hz/cm

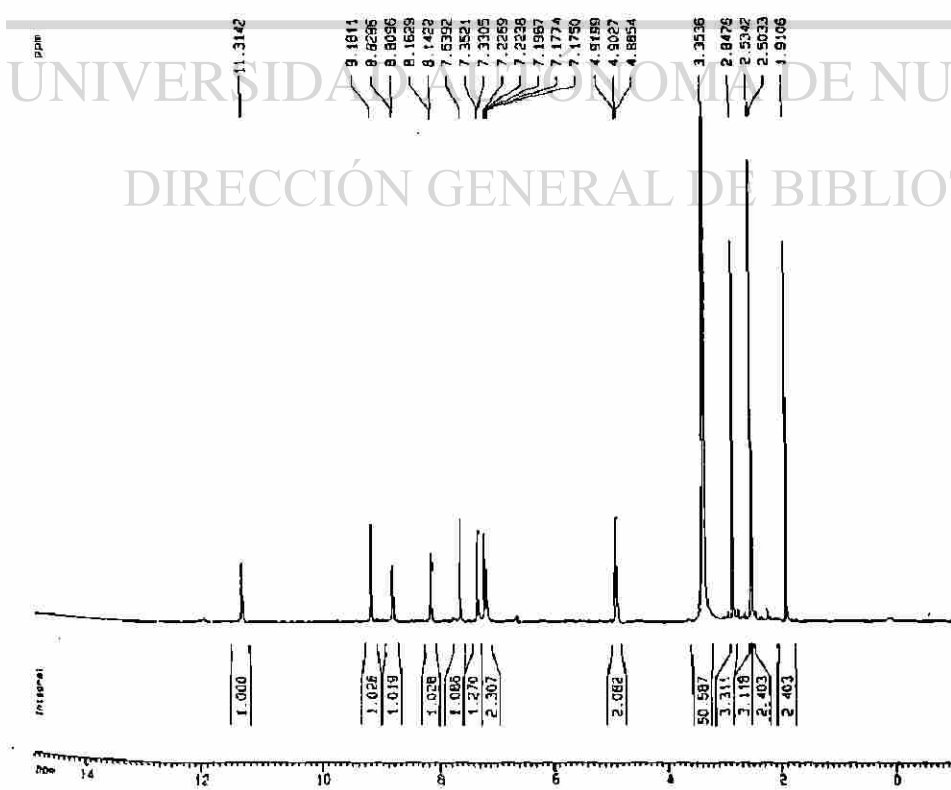


Current Data Parameters
 NAME EPM108
 EXPNO 2
 PROCNO 1
 F2 - Acquisition Parameters
 DATE_ 081210
 TIME 20.00
 INSTRUM spect
 PROBR1 5 in Multiv
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 8
 DS 2
 SSB 6490.256 Hz
 FIDRES 0.195625 Hz
 AQ 2.5059540 sec
 RG 256
 ON 78.000 usec
 DE 9.00 usec
 TE 300.0 K
 O1 1.0000000 sec
 P1 12.50 usec
 DE 9.00 usec
 SF01 400.1328024 MHz
 NUC1 H1
 PL1 -3.00 dB
 F2 - Processing parameters
 SI 10.00
 SF 400.1300015 MHz
 MS 0
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00
 10 MHz offset parameters
 EX 20.00 MHz
 FXP 15.000 MHz
 FS 0.00135 Hz
 FZ 1.000 MHz
 FZP -400.13 Hz
 WPCF 0.0000000000
 WCP 300.10400 MHz



EPM10C2

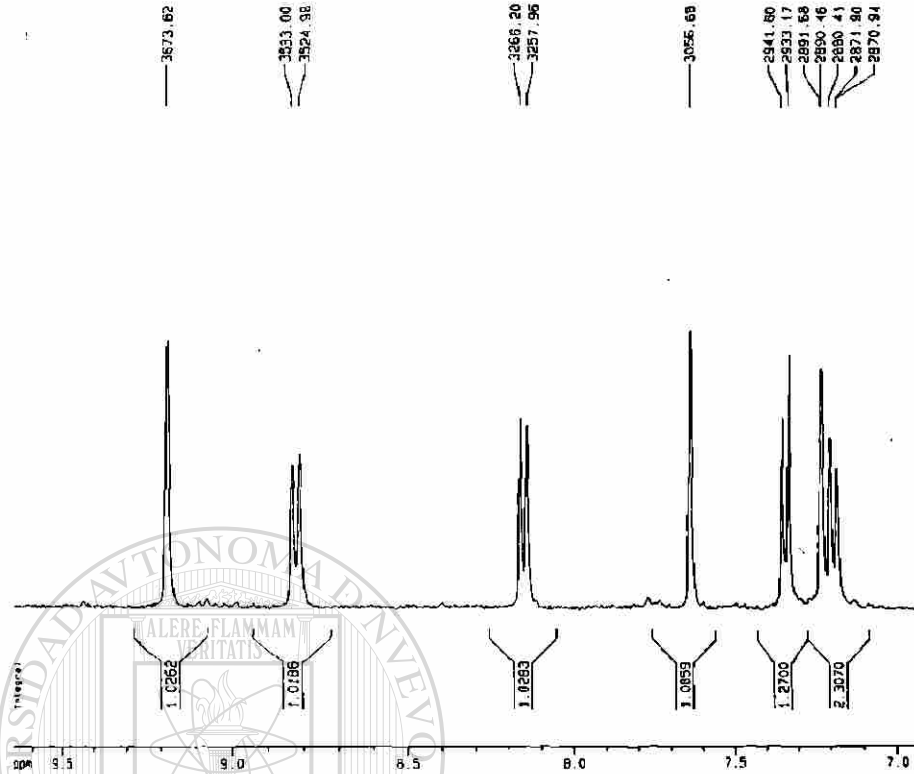
B133: 1H-RMN, Espectro completo.



Current Data Parameters
 NAME EPM10C2
 EXPNO 1
 PROCNO 1
 F2 - Acquisition Parameters
 DATE_ 081210
 TIME 20.00
 INSTRUM spect
 PROBR1 5 in Multiv
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 8
 DS 2
 SSB 6490.256 Hz
 FIDRES 0.195625 Hz
 AQ 2.5059540 sec
 RG 256
 ON 78.000 usec
 DE 9.00 usec
 TE 300.0 K
 O1 1.0000000 sec
 P1 12.50 usec
 DE 9.00 usec
 SF01 400.1328024 MHz
 NUC1 H1
 PL1 -3.00 dB
 F2 - Processing parameters
 SI 10.00
 SF 400.1300015 MHz
 MS 0
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00
 10 MHz offset parameters
 EX 20.00 MHz
 FXP 15.000 MHz
 FS 0.00135 Hz
 FZ 1.000 MHz
 FZP -400.13 Hz
 WPCF 0.0000000000
 WCP 300.10400 MHz

EYPN10C2

B134: ¹H-RMN, Ampliación.



Current Data Parameters
 NAME EYPN10C2
 EXPNO 1
 PROCNO 1

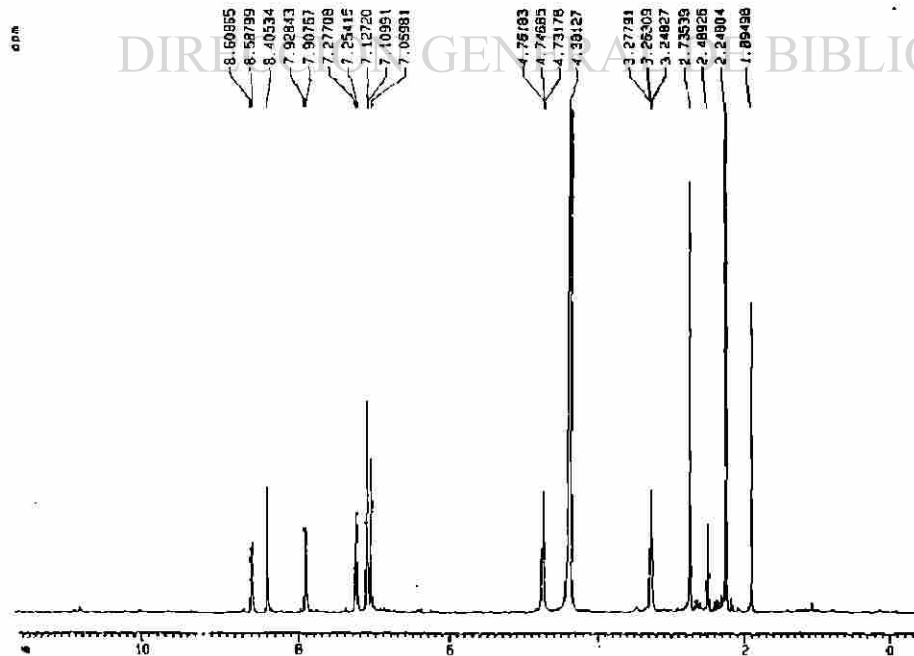
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 981218
 Time 20 00
 INSTRUM spect
 PROBR0 5 mm Multinu
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 8
 DS 2
 SSB 0
 FIDRES 0.18525 Hz
 AQ 2.5559340 sec
 RG 256
 CM 38 000 usbt
 DE 8.00 usec
 TE 300.0 K
 D1 1.0000000 sec
 P1 12.50 usec
 DE 8.00 usec
 SF01 400.132624 MHz
 NUC1 H
 PL1 -3.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 16384
 SF 400.130681 MHz
 MDW 64
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

10 MHz int parameters
 CX 20.00 cm
 F1P 9.673 ppm
 F1 3870.61 MHz
 F2P 5.529 ppm
 F2 2172.85 MHz
 FWHZ 0.1728 ppm/MHz
 NUZH 54 88884 Hz/cm

EYPN10C2a
 Intercambio con D₂O

B135: ¹H-RMN, Intercambio con D₂O.



Current Data Parameters
 NAME EYPN10C2a
 EXPNO 16
 PROCNO 1

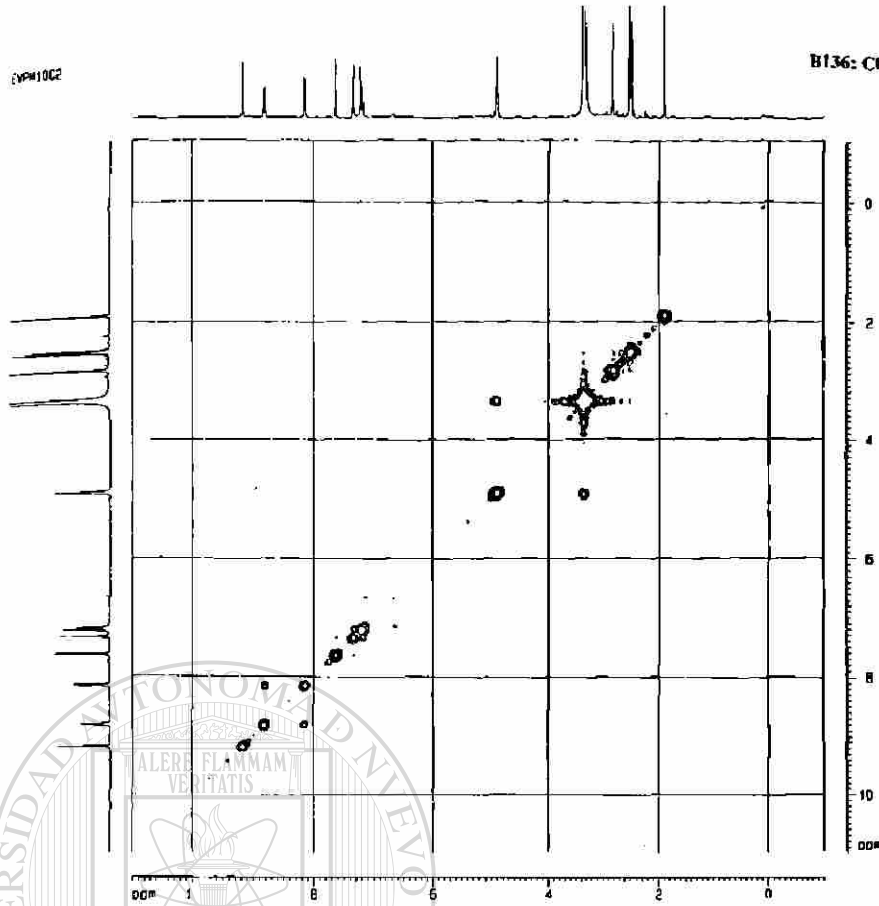
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 980728
 Time 13 03
 INSTRUM spect
 PROBR0 5 mm Multinu
 PULPROG zgpg30
 TD 16384
 SOLVENT DMSO
 NS 8
 DS 2
 SSB 0
 FIDRES 0.362754 Hz
 AQ 1.8515574 sec
 RG 128
 CM 100 000 usbt
 DE 8.00 usec
 TE 300.0 K
 D1 0.0200000 sec
 P1 0.0000000 sec
 DE 8.00 usec
 SF01 400.132624 MHz
 NUC1 H
 PL1 -3.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 8192
 SF 400.130681 MHz
 MDW 64
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

10 MHz int parameters
 CX 20.00 cm
 F1P 8.609 ppm
 F1 4761.35 MHz
 F2P 1.095 ppm
 F2 453.94 MHz
 FWHZ 0.0123 ppm/MHz
 NUZH 247 2724 MHz/cm

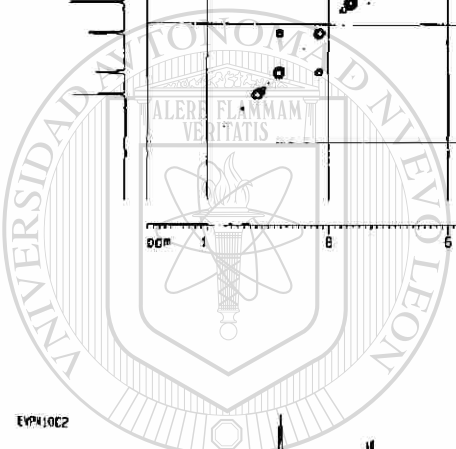
EVW10C2

B136: COSY completa.



Current Data Parameters

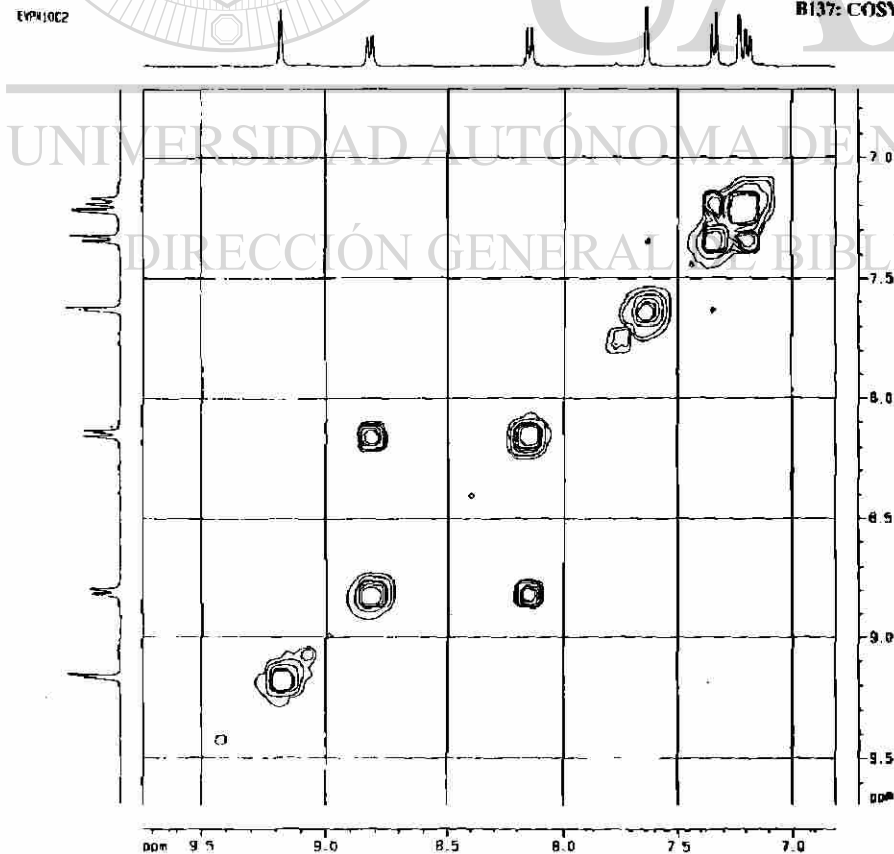
NAME	EVW10C2
EXPNO	1
F2	Acquisition Parameters
NUC1	13C
NUC2	13C
PROBHD	5 mm QNP1H/13
PULPROG	zgpg30
TD	65536
SI	32768
SD	4096
F2DELTA	0.000000 sec
DE	0.000000 sec
TE	300.2 K
TD0	65536
SI0	32768
SD0	4096
F2P2	0.0000000 sec
F2P3	0.0000000 sec
F2P4	0.0000000 sec
F2P5	0.0000000 sec
F2P6	0.0000000 sec
F2P7	0.0000000 sec
F2P8	0.0000000 sec
F2P9	0.0000000 sec
F2P10	0.0000000 sec
F2P11	0.0000000 sec
F2P12	0.0000000 sec
F2P13	0.0000000 sec
F2P14	0.0000000 sec
F2P15	0.0000000 sec
F2P16	0.0000000 sec
F2P17	0.0000000 sec
F2P18	0.0000000 sec
F2P19	0.0000000 sec
F2P20	0.0000000 sec
F2P21	0.0000000 sec
F2P22	0.0000000 sec
F2P23	0.0000000 sec
F2P24	0.0000000 sec
F2P25	0.0000000 sec
F2P26	0.0000000 sec
F2P27	0.0000000 sec
F2P28	0.0000000 sec
F2P29	0.0000000 sec
F2P30	0.0000000 sec
F2P31	0.0000000 sec
F2P32	0.0000000 sec
F2P33	0.0000000 sec
F2P34	0.0000000 sec
F2P35	0.0000000 sec
F2P36	0.0000000 sec
F2P37	0.0000000 sec
F2P38	0.0000000 sec
F2P39	0.0000000 sec
F2P40	0.0000000 sec
F2P41	0.0000000 sec
F2P42	0.0000000 sec
F2P43	0.0000000 sec
F2P44	0.0000000 sec
F2P45	0.0000000 sec
F2P46	0.0000000 sec
F2P47	0.0000000 sec
F2P48	0.0000000 sec
F2P49	0.0000000 sec
F2P50	0.0000000 sec
F2P51	0.0000000 sec
F2P52	0.0000000 sec
F2P53	0.0000000 sec
F2P54	0.0000000 sec
F2P55	0.0000000 sec
F2P56	0.0000000 sec
F2P57	0.0000000 sec
F2P58	0.0000000 sec
F2P59	0.0000000 sec
F2P60	0.0000000 sec
F2P61	0.0000000 sec
F2P62	0.0000000 sec
F2P63	0.0000000 sec
F2P64	0.0000000 sec
F2P65	0.0000000 sec
F2P66	0.0000000 sec
F2P67	0.0000000 sec
F2P68	0.0000000 sec
F2P69	0.0000000 sec
F2P70	0.0000000 sec
F2P71	0.0000000 sec
F2P72	0.0000000 sec
F2P73	0.0000000 sec
F2P74	0.0000000 sec
F2P75	0.0000000 sec
F2P76	0.0000000 sec
F2P77	0.0000000 sec
F2P78	0.0000000 sec
F2P79	0.0000000 sec
F2P80	0.0000000 sec
F2P81	0.0000000 sec
F2P82	0.0000000 sec
F2P83	0.0000000 sec
F2P84	0.0000000 sec
F2P85	0.0000000 sec
F2P86	0.0000000 sec
F2P87	0.0000000 sec
F2P88	0.0000000 sec
F2P89	0.0000000 sec
F2P90	0.0000000 sec
F2P91	0.0000000 sec
F2P92	0.0000000 sec
F2P93	0.0000000 sec
F2P94	0.0000000 sec
F2P95	0.0000000 sec
F2P96	0.0000000 sec
F2P97	0.0000000 sec
F2P98	0.0000000 sec
F2P99	0.0000000 sec
F2P100	0.0000000 sec



U A N L
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECA

EVW10C2

B137: COSY, Ampliación.

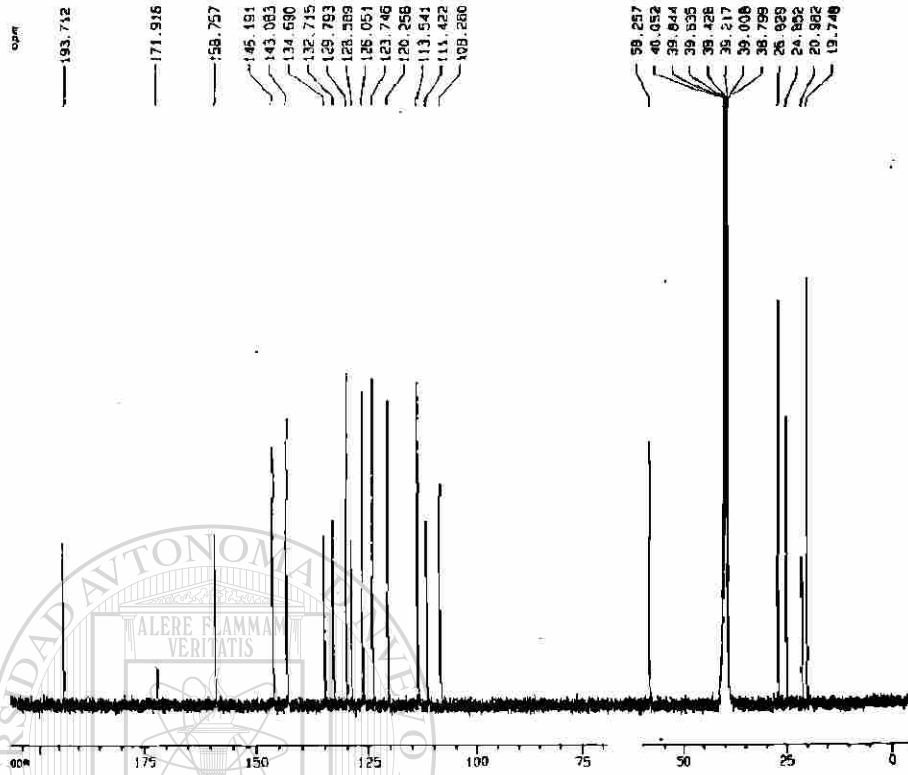


Current Data Parameters

NAME	EVW10C2
EXPNO	1
F2	Acquisition Parameters
NUC1	13C
NUC2	13C
PROBHD	5 mm QNP1H/13
PULPROG	zgpg30
TD	65536
SI	32768
SD	4096
F2DELTA	0.000000 sec
DE	0.000000 sec
TE	300.2 K
TD0	65536
SI0	32768
SD0	4096
F2P2	0.0000000 sec
F2P3	0.0000000 sec
F2P4	0.0000000 sec
F2P5	0.0000000 sec
F2P6	0.0000000 sec
F2P7	0.0000000 sec
F2P8	0.0000000 sec
F2P9	0.0000000 sec
F2P10	0.0000000 sec
F2P11	0.0000000 sec
F2P12	0.0000000 sec
F2P13	0.0000000 sec
F2P14	0.0000000 sec
F2P15	0.0000000 sec
F2P16	0.0000000 sec
F2P17	0.0000000 sec
F2P18	0.0000000 sec
F2P19	0.0000000 sec
F2P20	0.0000000 sec
F2P21	0.0000000 sec
F2P22	0.0000000 sec
F2P23	0.0000000 sec
F2P24	0.0000000 sec
F2P25	0.0000000 sec
F2P26	0.0000000 sec
F2P27	0.0000000 sec
F2P28	0.0000000 sec
F2P29	0.0000000 sec
F2P30	0.0000000 sec
F2P31	0.0000000 sec
F2P32	0.0000000 sec
F2P33	0.0000000 sec
F2P34	0.0000000 sec
F2P35	0.0000000 sec
F2P36	0.0000000 sec
F2P37	0.0000000 sec
F2P38	0.0000000 sec
F2P39	0.0000000 sec
F2P40	0.0000000 sec
F2P41	0.0000000 sec
F2P42	0.0000000 sec
F2P43	0.0000000 sec
F2P44	0.0000000 sec
F2P45	0.0000000 sec
F2P46	0.0000000 sec
F2P47	0.0000000 sec
F2P48	0.0000000 sec
F2P49	0.0000000 sec
F2P50	0.0000000 sec
F2P51	0.0000000 sec
F2P52	0.0000000 sec
F2P53	0.0000000 sec
F2P54	0.0000000 sec
F2P55	0.0000000 sec
F2P56	0.0000000 sec
F2P57	0.0000000 sec
F2P58	0.0000000 sec
F2P59	0.0000000 sec
F2P60	0.0000000 sec
F2P61	0.0000000 sec
F2P62	0.0000000 sec
F2P63	0.0000000 sec
F2P64	0.0000000 sec
F2P65	0.0000000 sec
F2P66	0.0000000 sec
F2P67	0.0000000 sec
F2P68	0.0000000 sec
F2P69	0.0000000 sec
F2P70	0.0000000 sec
F2P71	0.0000000 sec
F2P72	0.0000000 sec
F2P73	0.0000000 sec
F2P74	0.0000000 sec
F2P75	0.0000000 sec
F2P76	0.0000000 sec
F2P77	0.0000000 sec
F2P78	0.0000000 sec
F2P79	0.0000000 sec
F2P80	0.0000000 sec
F2P81	0.0000000 sec
F2P82	0.0000000 sec
F2P83	0.0000000 sec
F2P84	0.0000000 sec
F2P85	0.0000000 sec
F2P86	0.0000000 sec
F2P87	0.0000000 sec
F2P88	0.0000000 sec
F2P89	0.0000000 sec
F2P90	0.0000000 sec
F2P91	0.0000000 sec
F2P92	0.0000000 sec
F2P93	0.0000000 sec
F2P94	0.0000000 sec
F2P95	0.0000000 sec
F2P96	0.0000000 sec
F2P97	0.0000000 sec
F2P98	0.0000000 sec
F2P99	0.0000000 sec
F2P100	0.0000000 sec

EVPN10C2

B138: ¹³C-RMN, Espectro normal.

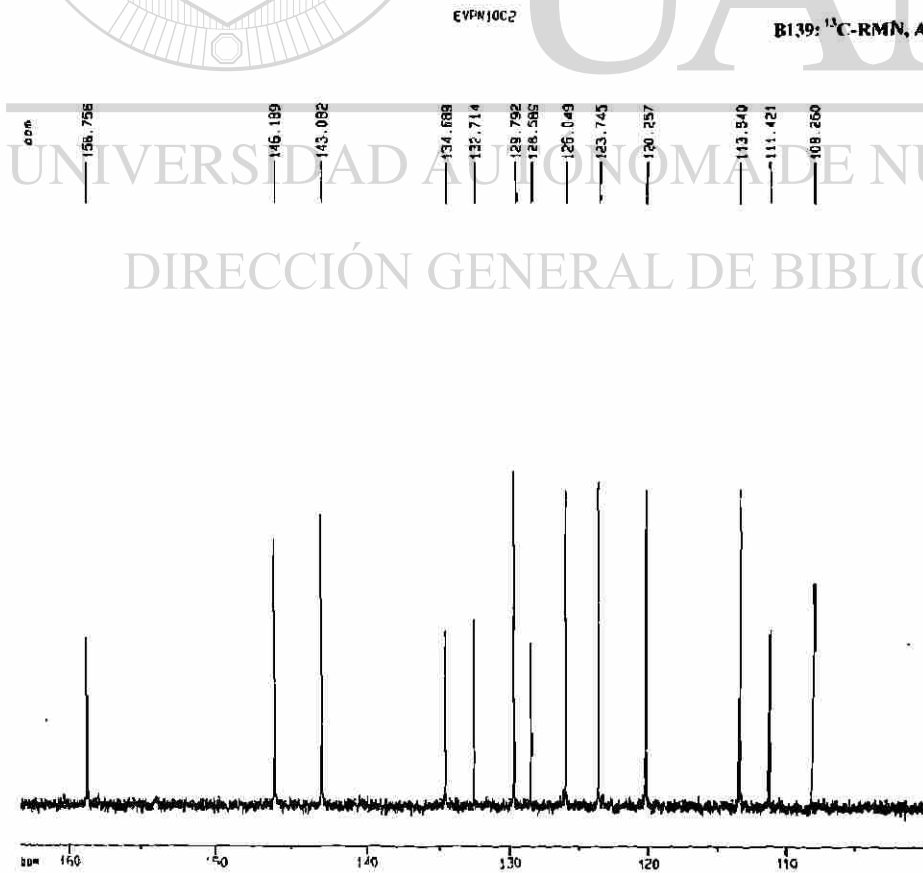


Current Data Parameters
 NAME EVPN10C2
 EXPNO 3
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 DATE_ 08/21/11
 TIME 5:40
 INSTRUM spect
 PROBNM 5 mm Multinu
 PULPROG zgpg
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 10240
 DS 8
 SWH 21261.723 Hz
 FIDRES 0.657706 Hz
 AQ 0.7602976 sec
 RG 16384
 CB 23.200 MHz
 DE 8.00 MHz
 TE 300.2 K
 SFO1 0.0300000 MHz
 SFO2 0.0002700 MHz
 PL13 15.00 dB
 Q1 2.0000000 MHz
 CPOPRG2 waltz16
 PPOPR2 100.00 MHz
 SFO2 400.1316000 MHz
 HWC2 14
 PL2 -3.00 dB
 PL12 15.00 dB
 P1 10.25 MHz
 DE 8.00 MHz
 SFO1 100.6230418 MHz
 NUC1 13C
 PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 32768
 SF 100.6128472 MHz
 NDM 24
 SSB 0
 LB 1.00 MHz
 GB 0
 PC 1.40

10 MHz plot parameters
 CX 20.00 cm
 FXP 164.000 ppm
 F1 160.093 MHz
 F2 -5.000 ppm
 F2P 100.017 ppm
 SFO 100.6128472 MHz
 HWC 120.052706 MHz

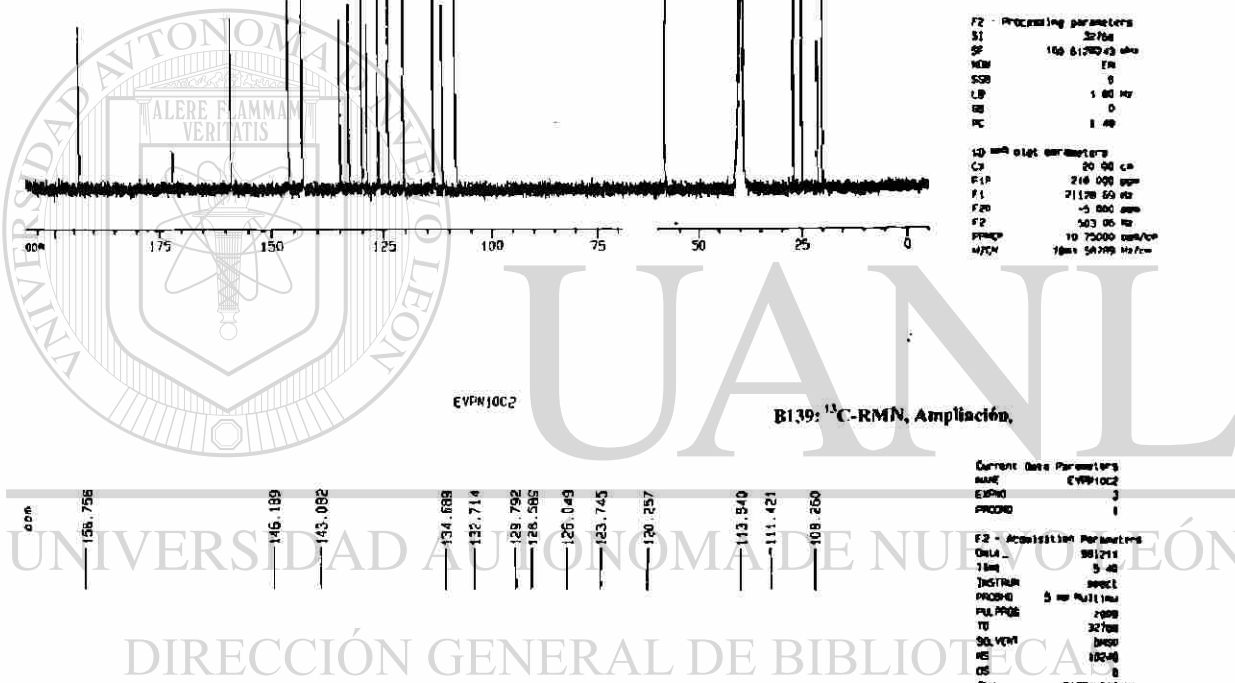


Current Data Parameters
 NAME EVPN10C2
 EXPNO 3
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 DATE_ 08/21/11
 TIME 5:40
 INSTRUM spect
 PROBNM 5 mm Multinu
 PULPROG zgpg
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 10240
 DS 8
 SWH 21261.723 Hz
 FIDRES 0.657706 Hz
 AQ 0.7602976 sec
 RG 16384
 CB 23.200 MHz
 DE 8.00 MHz
 TE 300.2 K
 SFO1 0.0300000 MHz
 SFO2 0.0002700 MHz
 PL13 15.00 dB
 Q1 2.0000000 MHz
 CPOPRG2 waltz16
 PPOPR2 100.00 MHz
 SFO2 400.1316000 MHz
 HWC2 14
 PL2 -3.00 dB
 PL12 15.00 dB
 P1 10.25 MHz
 DE 8.00 MHz
 SFO1 100.6230418 MHz
 NUC1 13C
 PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
 SI 32768
 SF 100.6128472 MHz
 NDM 24
 SSB 0
 LB 1.00 MHz
 GB 0
 PC 1.40

10 MHz plot parameters
 CX 20.00 cm
 FXP 164.000 ppm
 F1 160.093 MHz
 F2 -5.000 ppm
 F2P 100.017 ppm
 SFO 100.6128472 MHz
 HWC 120.052706 MHz



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

EVPM10C2

B140: ¹³C-RMN, DEPT-135.

ppm

147.137
144.029

130.739
126.987
124.691
121.204

114.485

77.501

40.836
40.629
40.421
40.340
40.270

27.776
21.929
20.699

Current list of Parameters

NAME EVPM10C2

UNIT 1

PROB 1

F2 - Acquisition Parameters

File_ 001211

1.00 12.28

INSTRUM spect

PROBHD 5 mm HLL100

PULPROG zgpg30

TD 32768

SOLVENT DMSO

NS 8

DS 8

SWH 96000 MHz

FIDRES 0.500200 Hz

AQ 0.583000 sec

RG 64

GB 16.384

PC 30.000 MHz

TE 300.2 K

SI 48.75 MHz

CO2 20.5 MHz

W 12.50 MHz

SI 75.0 MHz

ORIG? 145.000000 Hz

Q2 0.003480 Hz

Q12 0.000200 Hz

Q31.1 0.000431 Hz

Q1 7.000000 Hz

ZF2 -3.00 MHz

NUC1 400.131000 MHz

NUC2 1H

NUC3 400.520000 MHz

ZF1 -1.00 MHz

ZF2 16.00 MHz

JE 6.00 MHz

OPPROG 401216

PROG 105.00 MHz

F2 - Processing parameters

SI 32768

SF 400.131000 MHz

WDW EM

SSB 0

LB 1.00 Hz

GC 1.40

10 MHz list parameters

CS 20.50 MHz

CP 160.000 MHz

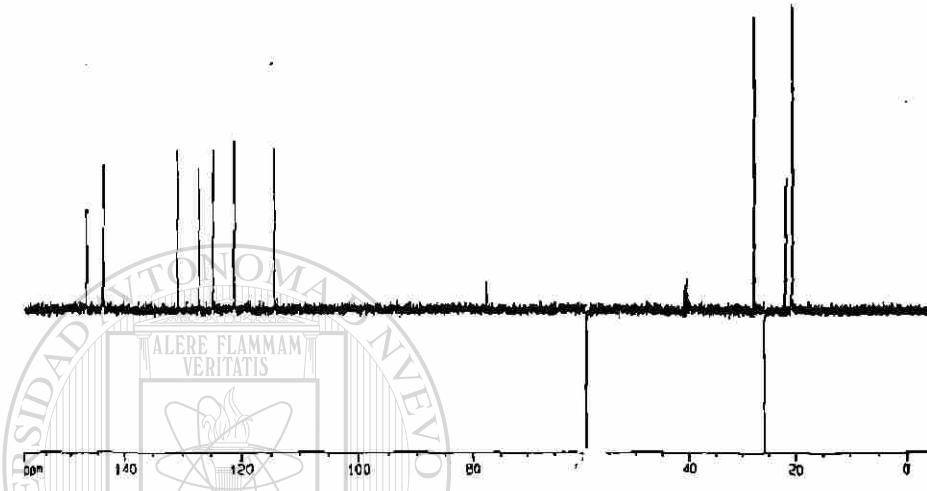
LI 160.000 MHz

LO -5.000 MHz

F2 -501.00 MHz

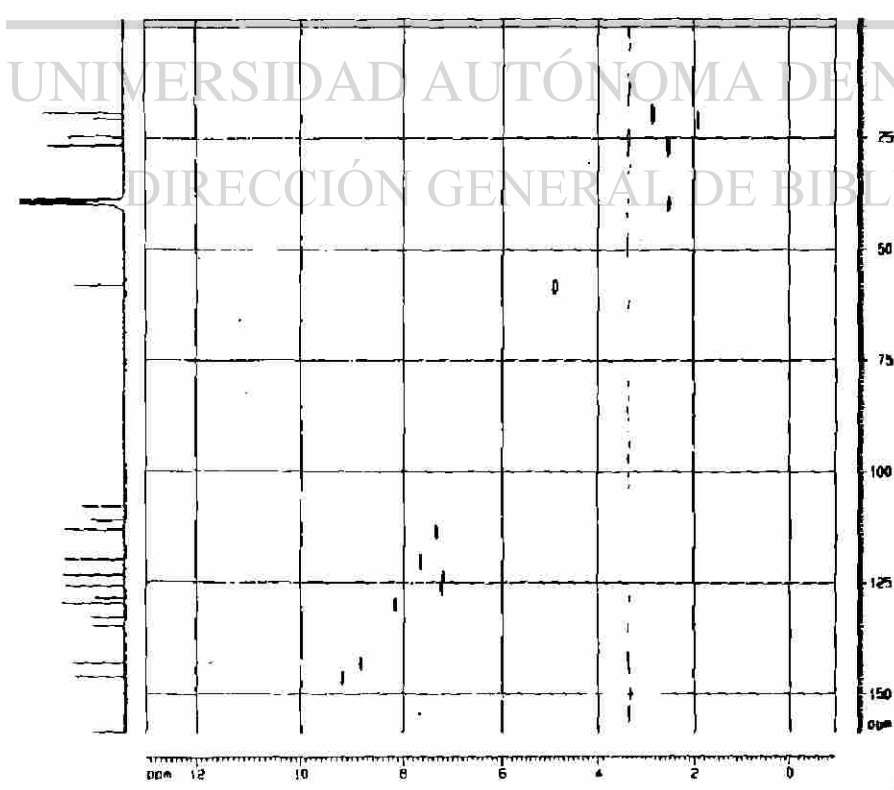
PROG 0.200000 MHz

PROG 820.000000 MHz



EVPM10C2

B141: HMQC.



Current list of Parameters

NAME B141

UNIT 1

PROB 1

F2 - Acquisition Parameters

File_ 001211

1.00 12.28

INSTRUM spect

PROBHD 5 mm HLL100

PULPROG zgpg30

TD 32768

SOLVENT DMSO

NS 8

DS 8

SWH 96000 MHz

FIDRES 0.500200 Hz

AQ 0.583000 sec

RG 64

GB 16.384

PC 30.000 MHz

TE 300.2 K

SI 48.75 MHz

CO2 20.5 MHz

W 12.50 MHz

SI 75.0 MHz

ORIG? 145.000000 Hz

Q2 0.003480 Hz

Q12 0.000200 Hz

Q31.1 0.000431 Hz

Q1 7.000000 Hz

ZF2 -3.00 MHz

NUC1 400.131000 MHz

NUC2 1H

NUC3 400.520000 MHz

ZF1 -1.00 MHz

ZF2 16.00 MHz

JE 6.00 MHz

OPPROG 401216

PROG 105.00 MHz

F2 - Processing parameters

SI 32768

SF 400.131000 MHz

WDW EM

SSB 0

LB 1.00 Hz

GC 1.40

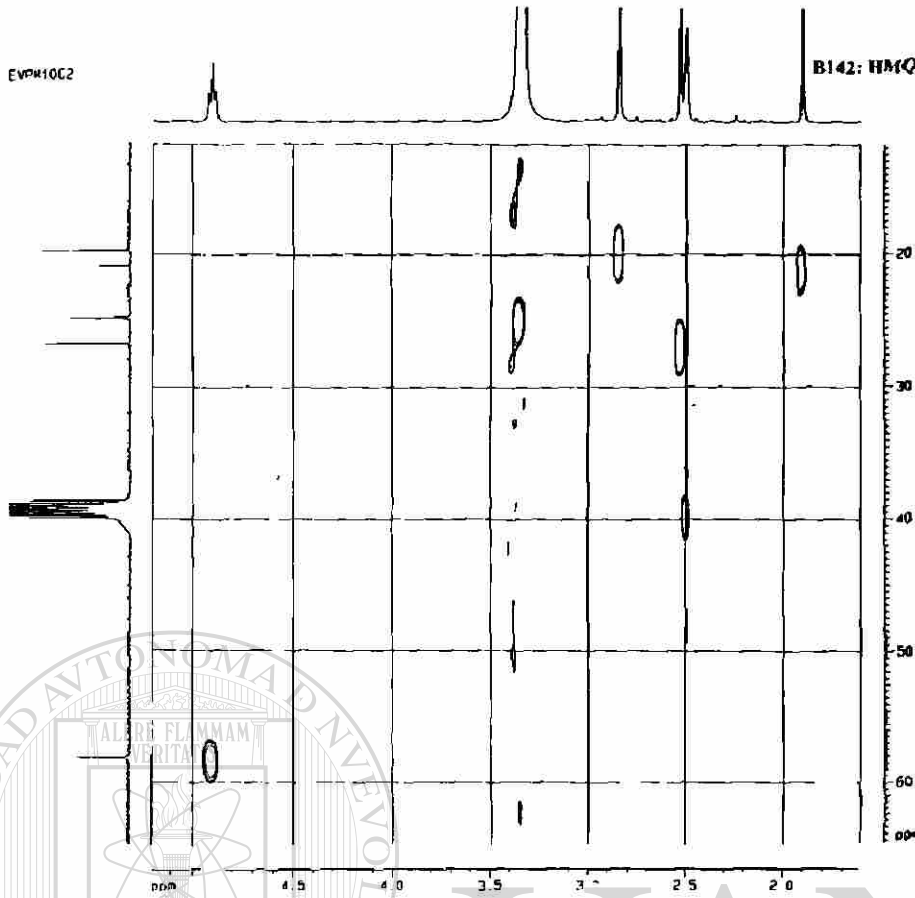
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



EVPK10C2

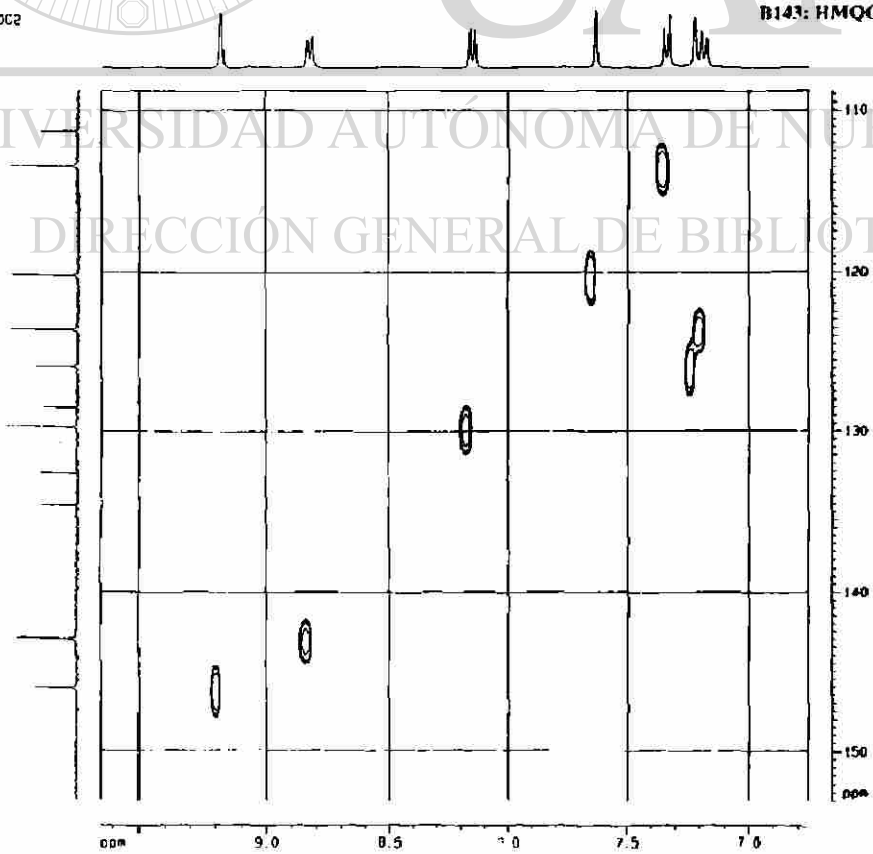
B142: HMQC, Ampliación.



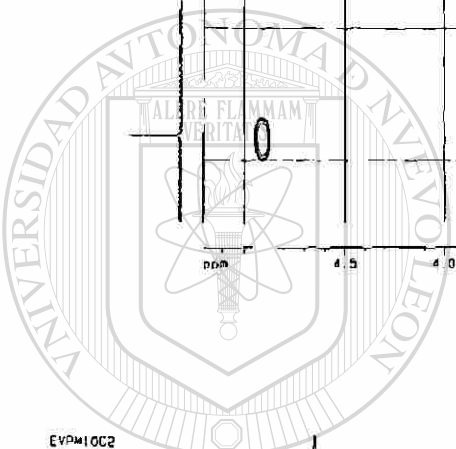
1H (ppm)	13C (ppm)	Assignment
2.5	25	CH2
3.2	25	CH2
3.5	35	CH
3.5	45	CH
4.2	55	CH

EVPK10C2

B143: HMQC, Ampliación.



1H (ppm)	13C (ppm)	Assignment
8.5	145	CH
8.8	145	CH
7.5	125	CH
7.8	125	CH
7.2	135	CH
7.5	135	CH



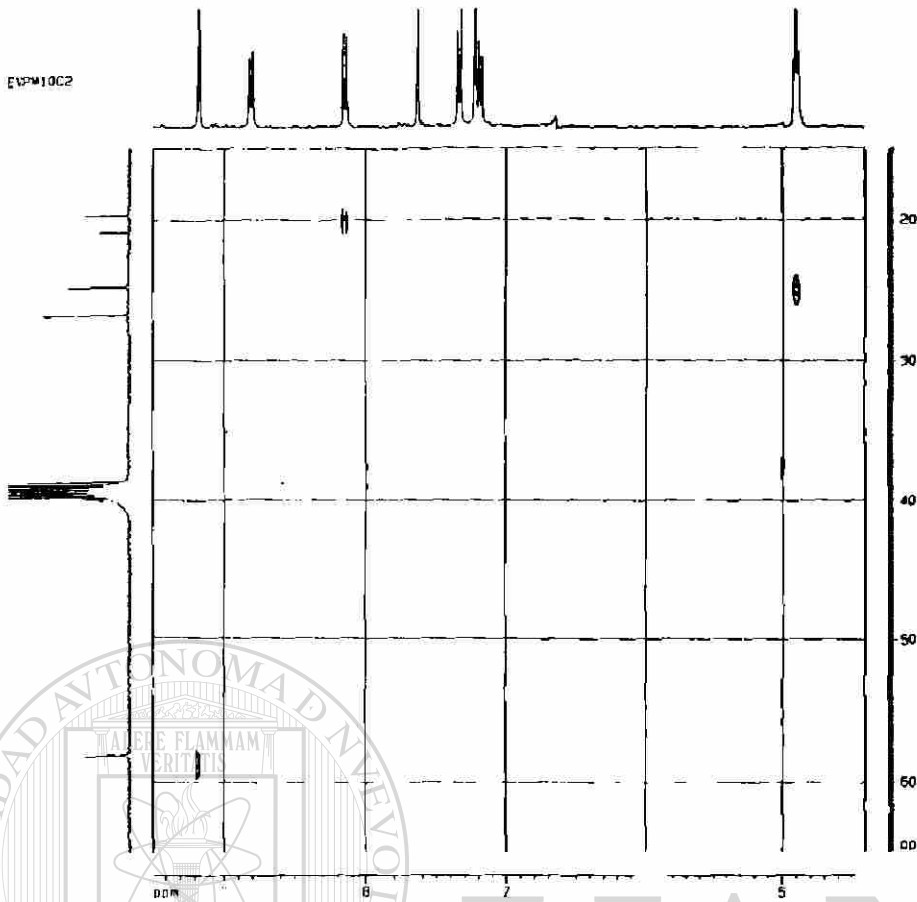
UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECA



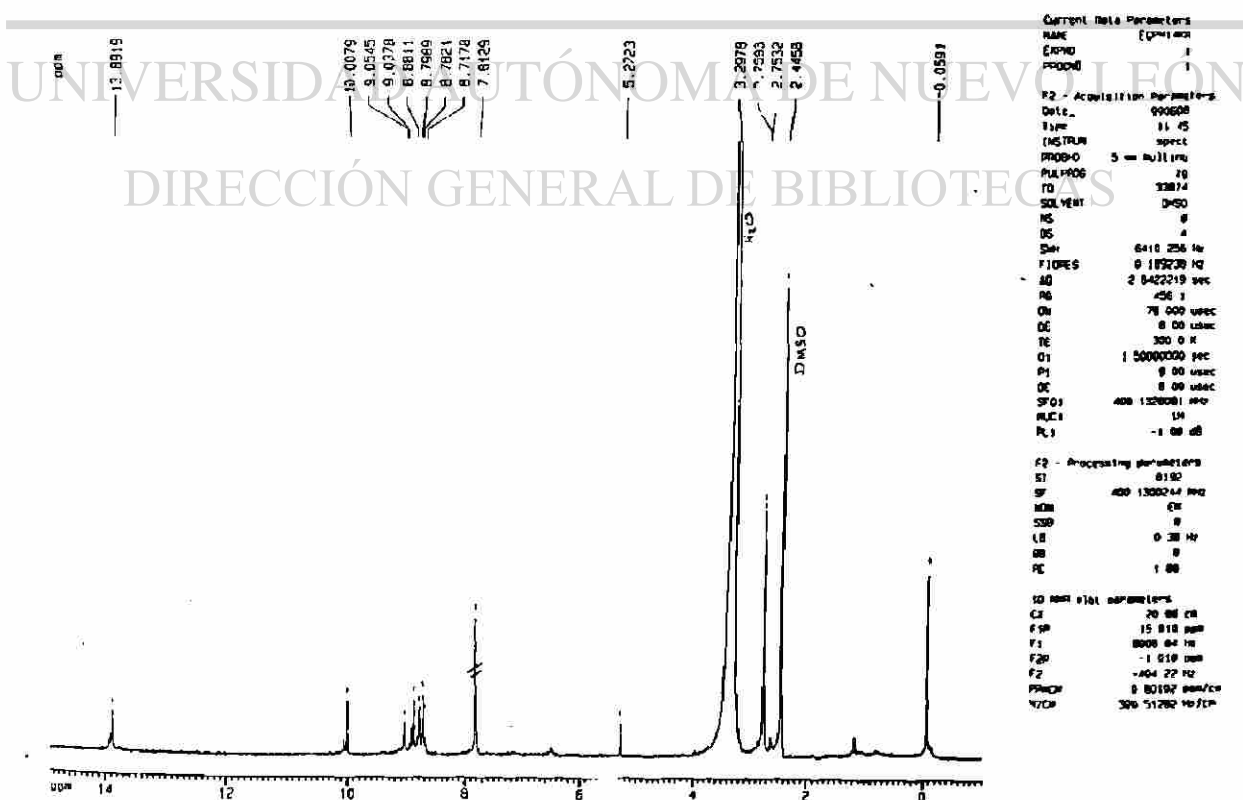
EVP10C2



Current Data Parameters
 NAME
 EXPNO
 PROCNO
 F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 000608
 Time 11 45
 INSTRUM spect
 PROBO 5 = null (m)
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 4
 DS 4
 Sfr 6410.256 Hz
 FIDRES 0.182239 Hz
 AQ 2.8422219 sec
 RG 426 1
 OR 78 900 usec
 DE 0.00 usec
 TE 300.0 K
 O1 1.5000000 sec
 P1 0.00 usec
 PC 0.00 usec
 SFO1 400.126061 MHz
 NUC1 1H
 PC1 -1.00 dB
 F2 - Processing parameters
 SI 8192
 SF 400.1300244 MHz
 NH 64
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00
 F0 - 1st parameters
 SI 20.00 MHz
 F1 15.818 MHz
 F2 8008.04 Hz
 F3 -1.610 MHz
 F4 -404.22 Hz
 PPHC 0.80197 ppm/cycle
 N2C 300.51282 Hz/cycle

EVP1 4KR

B144: ¹H-RMN, Espectro normal.



Current Data Parameters
 NAME
 EXPNO
 PROCNO
 F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 000608
 Time 11 45
 INSTRUM spect
 PROBO 5 = null (m)
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 SOLVENT DMSO
 NS 4
 DS 4
 Sfr 6410.256 Hz
 FIDRES 0.182239 Hz
 AQ 2.8422219 sec
 RG 426 1
 OR 78 900 usec
 DE 0.00 usec
 TE 300.0 K
 O1 1.5000000 sec
 P1 0.00 usec
 PC 0.00 usec
 SFO1 400.126061 MHz
 NUC1 1H
 PC1 -1.00 dB
 F2 - Processing parameters
 SI 8192
 SF 400.1300244 MHz
 NH 64
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00
 F0 - 1st parameters
 SI 20.00 MHz
 F1 15.818 MHz
 F2 8008.04 Hz
 F3 -1.610 MHz
 F4 -404.22 Hz
 PPHC 0.80197 ppm/cycle
 N2C 300.51282 Hz/cycle

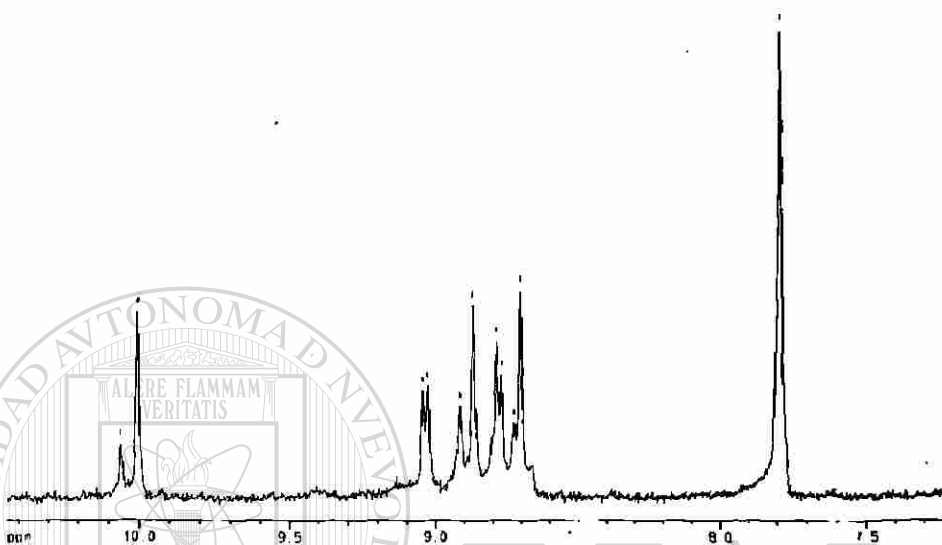
EYPM 14KR

B145: ¹H-RMN, Ampliación.

ppm
10.0632
10.0079

9.0545
9.0378
8.9262
8.8611
8.7989
8.7821
8.7409
8.7178

7.8128

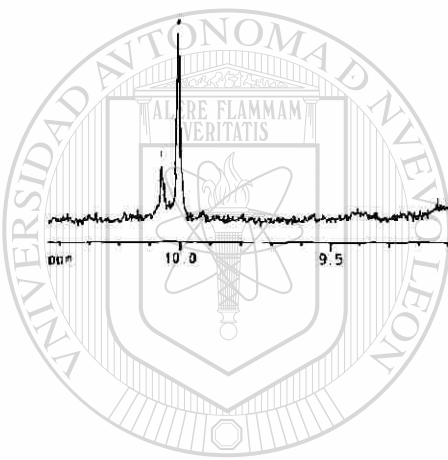


Current Data Parameters
NAME vcm1408
EXPNO 1
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
DATE_ 200608
Time 11 45
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm HXILM4
PULPROG zg
TD 32768
SOLVENT DMSO
NS 8
DS 4
SFO 400.146 MHz
FIDRES 0.189239 Hz
AQ 2.642219 sec
RG 409.1
DE 79.000 usec
TE 300.2 K
D1 1.5000000 sec
P1 9.00 usec
DE 9.00 usec
SFO1 400.146000 MHz
RUE1 34
PL1 -1.00 dB

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 400.146000 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.30 Hz
GB 0
PC 1.00

IQ non plot parameters
CX 20.00 cm
SIP 10.439 ppm
F3 4176.91 Hz
F2P 7.223 ppm
F2 2980.29 Hz
FWDI 0.16678 ppm/cm
WCH 64.53091 Hz/cm



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



