



Universitat Autònoma de Barcelona
Departament de Química

PROGRAMA DE DOCTORADO: Química

NOMBRE ASIGNATURA	Determinació estructural en química inorgànica
Profesor/es	Real Obradors, Juli Sola Casadevall, Joan
Programa de la asignatura	1) Espectroscòpia de RMN (^1H , ^{31}P , ^{13}C , ^{195}Pt i altres nuclis metàl·lics) en compostos inorgànics. Interpretació i determinació dels paràmetres espectroscòpics per simulació. 2a) RMN en estat sòlid . Acoblament dipolar directe. Anisotropia de l'apantallament nuclear. Tècniques per a optimitzar la resolució: Rotació entorn de l'angle màgic (MAS), seqüències de polsos, combinades (CRAMPS), CP/MAS. 2b) Espectroscòpia de ressonància paramagnètica electrònica (RPE-RSE) . Sistemes isotròpics (en solució). Sistemes anisotròpics (en solució congelada, sòlids en pols, sòlids dopats)
Objetivos	Part 1) Interpretació d'espectres de RMN experimentals de 1r i 2n ordre en compostos inorgànics on pugui haver-hi nuclis actius poliisòtopics. Determinació dels paràmetres espectroscòpics per simulació via ordinador. Part 2. a) Estudi de les interaccions associades al fenomen de RMN en mostres sòlides. La seva influència en els espectres i comparació amb el fenomen en solució. Introducció a algunes tècniques abans esmentades, que permeten aproximar el comportament del sistema en estat sòlid al comportament en solució, tot millorant la resolució dels espectres ("line narrowing"). b) Estudi del fenomen de RPE-RSE i la seva comparació amb el de RMN, tant en solució (sistemes isotròpics) com en els diferents enregistraments d'espectres en fase sòlida (sistemes anisotròpics). Interpretació d'espectres de radicals orgànics i de complexos metàl·lics.
Metodología	La part 1 (10 hores) és essencialment pràctica i es duu a terme íntegrament a l'Aula d'Informàtica, amb cada alumne treballant directament a l'ordinador amb el programa de simulació i sota la supervisió del professor. La part 2 (10 hores) és d'explicació a l'aula per part del professor, amb la utilització de transparències i alguna simulació a l'ordinador. Es presenten els diferents aspectes teòrics, es discuteix posteriorment la seva influència en els espectres i es duu a terme finalment la seva interpretació, tot treballant a classe un bon nombre d'exercicis pràctics.
Criterios de evaluación	A la part 1 l'avaluació és continuada i els alumnes han d'anar interpretant, cadascú pel seu compte i davant de l'ordinador, un cert nombre d'espectres. A la part 2 es duu a terme una avaluació escrita senzilla , on els alumnes han d'explicar breument algunes qüestions de caire teòric i resoldre uns quants exercicis d'interpretació d'espectres.