

## 1. Introducció General a l'espectroscopia.

Naturalesa de la radiació. Energies corresponents a les diferents classes de radiació. Transicions atòmiques i moleculars. Regles de selecció. Processos químics que afecten a l'amplada natural de línia d'una línia espectral.

## 2. Magnetisme.

Introducció. Tipus de comportament magnètic. L'equació de Van Vleck. Aplicacions de les mesures de susceptibilitat. Efectes intramoleculars. Equilibris alt-baix spin. Mesurament de la susceptibilitat magnètica.

## 3. Espectroscopia de Ressonància Magnètica Nuclear. Aspectes fonamentals.

Introducció. Descripció clàssica de l'experiment de NMR. Les equacions de Bloch. Definicions. Comportament d'una barra magnètica en un camp magnètic. Sistema d'eixos rotatori. Vectors de magnetització i relaxació. La transició de NMR. Les equacions de Bloch. L'experiment de NMR.

Descripció mecanoquàntica de l'experiment de NMR. Propietats de  $I_z$ . Probabilitats de transició. Efectes de relaxació i mecanismes. Mesura del Chemical Shift. Aplicacions senzilles del Chemical Shift. Spin-Spin splitting. Efecte de l'splitting spin-spin en l'espectre. Protons no equivalents. Efecte del número i natura dels enllaços en l'acoplament spin-spin. Descripció qualitativa d'un mecanisme per acoplament de spin-spin. Aplicacions de l'acoplament spin-spin a la determinació estructural. Factors que influèncien la forma de l'espectre de NMR. Efecte de les reaccions químiques. Espectre de sistemes on la magnitud de  $J$  es propera a  $\Delta$ . Efectes en l'espectre de nuclis amb moments quadrupolars. NMR en transformada de Fourier. Principis. Mesura de  $T_1$  per FTS. L'espectre NMR de nuclis quadrupolars.

## 4. Espectroscopia de Ressonància Magnètica Nuclear. Principis addicionals.

Espectres de segon ordre. Introducció. Tractament mecanoquàntic complet de l'acoplament. Efectes de les magnituds relatives de  $J$  i  $\Delta$  en l'espectre d'una molècula AB. Sistemes de segon ordre més complicats. Experiments de doble ressonància i spin Tickling. Introducció. Simplificació espectral. Contribucions al Chemical Shift. Contribucions locals al Chemical Shift. Contribucions anisotròpiques al Chemical Shift.

## 5. Espectroscopia de ressonància paramagnètica electrònica.

Introducció. Splitting nuclear hiperfí. L'àtom d'hidrogen. Presentació de l'espectre. Splitting hiperfí en sistemes isotròpics que impliquen més d'un nucli. Contribucions a la constant d'acoplament hiperfí en sistemes isotròpics. Efectes anisotròpics. Anisotropia en el valor de  $g$ . Anisotropia en l'acoplament hiperfí. El EPR d'estat triplets. Interacció nuclear quadrupolar. Amplada de línia en EPR. L'Hamiltonià de spin.

## 6. Mètodes de ionització. Espectroscopia de masses.

Càlcul de l'intensitat i forma del pic molecular d'especies que contenen àtoms amb diferents abundancies isotòpiques.

Prof. F. Texeira

4º cur

curso: 84-85

- 4 JUNY 1985 J. Casati

