

DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL Llicenciatura en Química

PROGRAMA

INTRODUCCIÓ. Interacció radiació-matèria. Espectroscòpies. Objectius del curs.

ESPECTROSCÒPIA DE RESSONÀNCIA MAGNÈTICA NUCLEAR

- Lliçó 1.- **EL MÈTODE EXPERIMENTAL.** L'espectròmetre. Preparació de mostres: dissolvents. Presentació dels espectres: desplaçament químic, constants d'acoblament, escales, referències.
- Lliçó 2.- **^1H -RMN.**- El desplaçament químic: mecanismes de blindatge. Relacions tòpiques. Factors que afecten δ : anisotropia magnètica, efectes del dissolvent. Correlacions: hidrògens units a carboni, hidrògens units a altres àtoms. Exemples.
- Lliçó 3.- **^1H -RMN.**- Acoblament spin-spin: mecanisme de contacte de Fermi. Constants d'acoblament. Equació de Karplus. Sistemes de spins: relació $\Delta\nu/J$, espectres de primer i de segon ordre. Exemples.
- Lliçó 4.- **^1H -RMN.**- Anàlisi dels espectres. Fenòmens que depenen del temps. Mètodes d'anàlisi. Simplificació dels espectres: variació del camp magnètic, desacoblament de spins, reactius de desplaçament químic.
- Lliçó 5.- **^{13}C -RMN.**- Generalitats. Desacoblament heteronuclear de banda ampla ("*broad band*"). Desacoblament heteronuclear "*off resonance*". Desplaçament químic: additivitat. Acoblament spin-spin. Anàlisi dels espectres.
- Lliçó 6.- **RMN EN QUÍMICA INORGÀNICA.**- Nuclis actius poc abundants. Pics satèl·lit. Nuclis amb moment quadrupolar. Acoblements en sistemes de spin $I > 1/2$. Fenòmens d'intercanvi. Fluxionalitat. RMN de ^1H en compostos i complexos inorgànics: Organometàl·lics, Fosfines, Hidrurs. RMN de ^{31}P : Fosfats, Fosfines i derivats. Complexos metàl·lics. RMN de ^{13}C : Organometàl·lics, Carbonils metàl·lics. RMN multinuclear: ^{14}N , ^{15}N , ^{19}F , ^{27}Al , ^{29}Si , ^{59}Co , ^{103}Rh , ^{195}Pt , ^{113}Cd , ^{199}Hg .
- Lliçó 7.- **MÈTODES AVANÇATS.**- Efecte nuclear Overhauser (NOE). Sequències de pulsos. Correlacions homo- i heteronuclears.

ESPECTROSCÒPIA DE VIBRACIÓ (IR, RAMAN)

- Lliçó 8.- **GENERALITATS.**- El mètode experimental. Tipus de vibracions: tensió i deformació. Distribució general de les absorpcions.

Lliçó 9.- **FREQÜÈNCIES CARACTERÍSTIQUES**. - Els diferents grups funcionals orgànics (hidrocarburs, compostos carbonílics, hidroxílics, ponts d'hidrogen, derivats nitrogenats,...). Freqüències de vibració en compostos i complexos inorgànics. Interpretació dels espectres.

ESPECTROMETRIA DE MASSES

Lliçó 10.- **GENERALITATS**. - Resolució espectral. Anàlisi isotòpica. Processos de fragmentació: trencaments homolítics i heterolítics. Fragmentacions associades a grups funcionals. Exemples.

ESPECTROSCÒPIA ELECTRÒNICA (UV, VIS)

Lliçó 11.- **GENERALITATS**. - El mètode experimental. Definicions: cromòfors, efectes. Absorcions característiques. Diens i enones: regles de Woodward-Fieser. Efectes del dissolvent. Altres cromòfors.

BIBLIOGRAFIA

LLIBRES DE TEXT GENERALS:

- R.J. Abraham i P. Loftus, *Proton and Carbon-13 NMR Spectroscopy. An Integrated Approach*, Heyden, London, 1979.
- E. Breitmaier, *Structural Elucidation by NMR in Organic Chemistry*, Wiley, New York, 1993.
- E.A.V. Ebsworth, D.W.H. Rankin i S. Cradock, *Structural Methods in Inorganic Chemistry*, 2a ed., Blacwell Scientific Publication, Oxford, 1991.
- R.S. Drago, *Physical Methods for Chemists*, Saunders, 1992.
- W. Kemp, *Organic Spectroscopy, Structures from Spectra*, 3a ed., McMillan, 1991.
- K. Nakamoto, *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*, 4a ed., Wiley-Interscience, New York, 1986.
- R.V. Parish, *NMR, NQR, EPR, and Mössbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry*, Ellis Horwood, London, 1990.
- D.J. Pasto i C.R. Johnson, *Determinación de Estructuras Orgánicas*, Reverté, Barcelona, 1974.
- J.K.M. Sanders i B.K. Hunter, *Modern NMR Spectroscopy*, Oxford University Press, 1993.
- R.M. Silverstein, G.C. Bassler i T.C. Morrill, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 5a ed., Wiley, New York, 1991.

LLIBRES DE PROBLEMES:

- R. Davis i C.H.J. Wells, *Spectral Problems in Organic Chemistry*, International Textbook, Glasgow, 1984.
- P.L. Fuchs i C.A. Bunnell, *Carbon-13 NMR Based Organic Spectral Problems*. Wiley, New York, 1979.
- S. Sternhell i J.R. Kalman, *Organic Structures from Spectra*, Wiley, Chichester, 1986.
- D.H. Williams i I. Fleming, *Spectroscopic Methods in Organic Chemistry*, 4a ed. revisada, McGraw-Hill, London, 1989.

LLIBRES DE TAULES:

- E. Prestch, T. Clerc, J. Seibl, i W. Simon, *Tablas para la Elucidación Estructural de Compuestos Orgánicos por Métodos Espectroscópicos*, 2a ed., Alhambra, Madrid, 1985.