

Determinació estructural

Codi 20572

2n semestre

Professor: F. Sánchez, F. Sánchez

Requisits: Estructura atòmica i enllaç (aprovada), Espectroscòpia (matricular-se)

- Espectroscòpia electrònica (UV, VIS).
El mètode experimental. Definicions: cromòfors, efectes. Absorcions característiques. Diens i enones: regles de Woodward-Fieser. Efecte del dissolvent. Altres cromòfors.
- Espectroscòpia de vibració (IR, RAMAN).
El mètode experimental. Distribució general de les absorcions. Els diferents grups funcionals orgànics (hidrocarburs, compostos carbonílics, hidroxílics, ponts d'hidrogen, derivats nitrogenats...) Frequències de vibració en compostos i complexos inorgànics. Interpretació dels espectres.
- Espectrometria de masses.
Resolució espectral. Anàlisi isotòpica. Processos de fragmentació: trencaments homolítics i heterolítics.
- Fragmentacions en EM.
Fragmentacions associades a grups funcionals. Exemples.
- RMN: Mètode experimental.
L'espectròmetre. Preparació de mostres: dissolvents. Presentació dels espectres: desplaçament químic, constants d'acoblament, escales, referències.
- RMN de ^1H : Desplaçament químic.
Mecanismes de blindatge. Relacions tòpiques. Factors que afecten el desplaçament. Anisotropia magnètica, efectes del dissolvent. Correlacions: hidrògens units a carboni, hidrògens units a altres àtoms. Exemples.
- RMN de ^1H : Acoblament spin-spin.
Constants d'acoblament. Equació de Karplus. Sistemes de spins: espectres de primer i segon ordre. Exemples.
- RMN de ^1H : 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. Efecte nuclear Overhauser (nOe), exemples.
- RMN de ^{13}C .
Generalitats. Presentació d'espectres (broad band, off resonance). Desplaçament químic:

additivitat. Acoblament spin-spin. Anàlisi dels espectres.

- RMN en química inorgànica.
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 ,
 ^{103}Rh , ^{195}Pt , ^{113}Cd , ^{199}Hg .
- Ressonància de spin electrònic.
Generalitats. Exemples.
- Determinació estructural.
Aplicació conjunta de les diferents tècniques espectroscòpiques. Exemples.