

Departament de Química  
Unitat de Química Orgànica  
Edifici C  
08193 Bellaterra, Barcelona  
Catalonia, Spain  
Fax: +34-93-581.1265



Prof. Francesc Sánchez-Ferrando  
Phone: +34-93-581.1271  
E-mail: Francesc.Sanchez@uab.es

Prof. Joan Sola Casadevall  
Phone: +34-93-581.2128  
E-mail: Joan.Sola@uab.es

## 20572 DETERMINACIÓ ESTRUCTURAL PROGRAMA

Curs 2004-2005  
Segon Semestre

- 1.- **Espectroscòpia electrònica (UV, VIS).** El mètode experimental. Definicions: cromòfors, efectes. Absorpcions característiques. Diens i enones: regles de Woodward-Fieser. Efectes del dissolvent. Altres cromòfors.
- 2.- **Espectroscòpia de vibració (IR, Raman).** El mètode experimental. Distribució general de les absorpcions. 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.
- 3.- **Espectrometria de masses.** Resolució espectral. Anàlisi isotòpica. Processos de fragmentació: trencaments homolítics i heterolítics.
- 4.- **Fragmentacions en EM.** Fragmentacions associades a grups funcionals. Exemples.
- 5.- **RMN: Mètode experimental.** L'espectròmetre. Preparació de mostres: dissolvents. Presentació dels espectres: desplaçament químic, constants d'acoblament, escales, referències.
- 6.- **RMN de  $^1\text{H}$ : Desplaçament químic.** Mecanismes de blindatge. Relacions tòpiques. Factors que afecten el desplaçament  $\delta$ : anisotropia magnètica, efectes del dissolvent. Correlacions: hidrògens units a carboni, hidrògens units a altres àtoms. Exemples.
- 7.- **RMN de  $^1\text{H}$ : Acoblament spin-spin.** Constants d'acoblament. Equació de Karplus. Sistemes de spins: relació  $\Delta\nu/J$ , espectres de primer i de segon ordre. Exemples.
- 8.- **RMN de  $^1\text{H}$ : 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.
- 9.- **RMN de  $^{13}\text{C}$ .** Generalitats. Presentació d'espectres ("broad band", "off resonance", DEPT). Desplaçament químic: additivitat. Acoblament spin-spin. Anàlisi dels espectres.
- 10.- **RMN en química inorgànica.** RMN de  $^1\text{H}$  en compostos i complexos inorgànics: organometàl·lics, fosfines, hidrurs. RMN de  $^{31}\text{P}$ : fosfats, fosfines i derivats. Complexos metàl·lics. RMN de  $^{13}\text{C}$ : organometàl·lics, carbonils metàl·lics. RMN multinuclear:  $^{14}\text{N}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{27}\text{Al}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{59}\text{Co}$ ,  $^{103}\text{Rh}$ ,  $^{195}\text{Pt}$ ,  $^{113}\text{Cd}$ ,  $^{199}\text{Hg}$ .
- 11.- **Ressonància de spin electrònic.** Generalitats. Exemples.
- 12.- **Determinació estructural.** Aplicació conjunta de les diferents tècniques espectroscòpiques. Exemples.

## **BIBLIOGRAFIA**

### **LLIBRES DE TEXT**

- D.H. Williams, I. Fleming, *Spectroscopic methods in organic chemistry*, McGraw-Hill, London, 1995. ISBN 0-07-709147-7.
- R. Silverstein, G.C. Bassler, T.C. Morrill, *Spectrometric identification of organic compounds*, Wiley, New York, 1991. ISBN 0-471-63404-2.
- R. V. Parish, *NMR, NQR, EPR, and Mössbauer spectroscopy in inorganic chemistry*, Ellis Horwood, New York, 1990. ISBN 0-13-625518-3.
- R.J. Abraham, J. Fisher, P. Loftus, *Introduction to NMR spectroscopy*, Wiley, Chichester, 1988. ISBN 0-471-91894-6.
- R.S. Drago, *Physical methods for chemists (2<sup>nd</sup> Ed.)*, Saunders, Ft. Worth, 1992. ISBN 0-03-075176-4.

### **LLIBRES DE CONSULTA**

- E.A.V. Ebsworth, D.W.H. Rankin, S.Cradock, *Structural methods in inorganic chemistry*, Blackwell, Oxford, 1991. ISBN 0-632-02963-3.
- K. Nakamoto, *Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds (5<sup>th</sup> Ed.)*, Wiley, New York, 1997. ISBN 0-471-16394-5 (Part A) i 0-471-16392-9 (Part B).

### **LLIBRES DE PROBLEMES**

- L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, *Organic structures from spectra (2<sup>nd</sup> Ed.)*, Wiley, Chichester, 1995. ISBN 0-471-95631-7.
- R. Davis, C.H.J. Wells, *Spectral problems in organic chemistry*, International Textbook, Glasgow, 1984. ISBN 0-7002-0288-9.
- P.L. Fuchs, C.A. Bunnell, *Carbon-13 NMR based organic spectral problems*, Wiley, New York, 1979. ISBN 0-471-04907-7.

### **LLIBRES DE TAULES**

- E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon, *Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos*, Alhambra, Madrid, 1980. ISBN 84-205-0762-8.
- E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon, *Tablas para la determinación estructural por métodos espectroscópicos*, Springer, Barcelona, 1998. ISBN 84-07-00501-0. Conté un útil CD que permet calcular desplaçaments químics de  $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  a partir de l'estructura, que també permet dibuixar.
- E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera, R. Martínez, *Determinación estructural de compuestos orgánicos*, Springer, Barcelona, 2001. ISBN 84-07-00526-6. Conté un útil CD que permet calcular desplaçaments químics de  $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  a partir de l'estructura, que també permet dibuixar.

### **INTERNET**

Podeu trobar cursos *on line*, exàmens resolts, problemes, *software* i molts hipervincles útils a la plana web de l'assignatura:

<http://einstein.uab.es/fsanchezf/>