

Departamento de Química
Unidad de Química
Orgánica
Edificio C 08193 Bellaterra,
Barcelona Catalonia, Spain
Fax: +34-93-581.1265



20572 DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

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

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

1.-Espectroscopia electrónica (UV, VIS). El método experimental. Definiciones: cromóforos, efectos. Absorciones características. Dienes y enonas: reglas de Woodward-Fieser. Efectos del disolvente. Otros cromóforos.

2.-Espectroscopia de vibración (IR, Raman). El método experimental. Distribución general de las absorciones. Los diferentes grupos funcionales orgánicos (hidrocarburos, compuestos carbonílicos, hidroxilitos, puentes de hidrógeno, derivados nitrogenados...). Frecuencias de vibración en compuestos y complejos inorgánicos. Interpretación de los espectros.

3.-Espectrometría de masas. Resolución espectral. Análisis isotópica. Procesos de fragmentación: roturas homolíticas y heterolíticas.

4.-Fragmentaciones en EM. Fragmentaciones asociadas a grupos funcionales. Ejemplos.

5.-RMN: Método experimental. El espectrómetro. Preparación de muestras: disolventes. Presentación de los espectros: desplazamiento químico, constantes de acoplamiento, escaleras, referencias.

6.-RMN de ^1H : Desplazamiento químico. Mecanismos de blindaje. Relaciones tópicas. Factores que afectan el desplazamiento d: anisotropía magnética, efectos del disolvente. Correlaciones: hidrógenos unidos a carbono, hidrógenos unidos a otros átomos. Ejemplos.

7.-RMN de ^1H : Acoplamiento spin-spin. Constantes de acoplamiento. Ecuación de Karplus. Sistemas de spins: relación Dn/J , espectros de primero y de segundo orden. Ejemplos.

8.-RMN de ^1H : Análisis de los espectros. Fenómenos que dependen del tiempo. Métodos de análisis. Simplificación de los espectros: variación del campo magnético, desacoplamiento de spins, reactivos de desplazamiento químico. Efecto nuclear Overhauser (nOe), ejemplos.

9.-RMN de ^{13}C . Generalidades. Presentación de espectros ("broad band", "off resonance", DEPT). Desplazamiento químico: aditividad. Acoplamiento spin-spin. Análisis de los espectros.

10.-RMN en química inorgánica. RMN de ^1H en compuestos y complejos inorgánicos: organometálicos, fosfinas, hidruros. RMN de ^{31}P : fosfatos, fosfinas y derivados. Complejos metálicos. RMN de ^{13}C : organometálicos, carbonilos metálicos. RMN multinuclear: ^{14}N , ^{15}N , ^{19}F , ^{27}Al , ^{29}Si , ^{59}Co , ^{103}Rh , ^{195}Pt , ^{113}Cd , ^{199}Hg .

11.-Resonancia de spin electrónico. Generalidades. Ejemplos.

12.-Determinación estructural. Aplicación conjunta de las diferentes técnicas espectroscópicas. Ejemplos.

BIBLIOGRAFÍA

LIBROS DE TEXTO

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 (2nd Ed.)*, Saunders, Ft. Worth, 1992. ISBN 0-03-075176-4.

LIBROS DE CONSULTA

E.A.V. Ebsworth, D.W.H. Rankin, S. Craddock, *Structural methods in inorganic chemistry*, Blackwell, Oxford, 1991. ISBN 0-632-02963-3.

K. Nakamoto, *Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds (5th Ed.)*, Wiley, New York, 1997. ISBN 0-471-16394-5 (Part A) i 0-471-16392-9 (Part B).

LIBROS DE PROBLEMAS

L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, *Organic structures from spectra (2nd 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.

LIBROS DE TABLAS

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. Contiene un útil CD que permite calcular desplazamientos químicos de ^1H y ^{13}C a partir de la estructura, que también permite dibujar.

E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera, R. Martínez, *Determinación estructural de compuestos orgánicos*, Springer, Barcelona, 2001. ISBN 84-07-00526-6. Contiene un útil CD que permite calcular desplazamientos químicos de ^1H i ^{13}C a partir de la estructura, que también permite dibujar.

INTERNET

Podéis encontrar cursos *on line*, exámenes resueltos, problemas, *software* y muchos hipervínculos útiles en la plana web de la asignatura:

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