1968

Prof. Dra. D.G. de Kowaleski Prof. Dra. H. Pezzano

- 1.-- Propiedades magnéticas de núcleo. Métodos de observación del magnetismo nuclear. Niveles de energía de un campo magnético. Teoría de la resonancia magnética. Absorción de energía y relajación spin-red. Efecto de campos magnéticos alternativos.--
- 2.- Propiedades de moléculas en un campo magnético. Efectos inter e intramoleculares. El efecto de pantalla electrónica. La interacción J entre spins nucleares. Teorías. Efecto J y magnitudes moleculares. Efecto angular. Efecto de la temperatura. Signo de J. Anomalías en las constantes de gran alcance.-
- 3.- La experiencia de resonancia magnática nuclear. Métodos alta resolución. Medición del espectro de RMN. Mediciones relativas a señales de referencia.-
- 4.- Análisis de espectros de RMN. Métodos de análisis. Estudio de diversos tipos de espectros. Caso de dos spins. Sistema de 3 núcleos: tipo A<sub>2</sub>B. ABC, Ax<sub>2</sub>, AKX, ABX<sub>2</sub> ABX<sub>3</sub>. Sistemas de dos tipos de núcleos: tipo A<sub>3</sub>B, A<sub>2</sub>B<sub>2</sub>. Métodos de cálculo por interacción. Aplicación del cálculo automático al análisis de espectros.-
- 5.- Espectros de resonancia múltiple. Aplicaciones de la doble resonancia con un campo H<sub>2</sub> intenso. Aplicaciones con un campo H<sub>2</sub> relativamente débil. Determinación del signo relativo de las constantes de interacción.
- 6.- Efecto Overhausses nuclear; Indor Ipdor. Contracción de multipletes. Intercambio. Relajación cuadrupolar.-
- 7.— Espectroscopía de RMN de otros núcleos: 13 C, F,N. Rotación interna restringuida. Unión tipo H. Efecto de solvente.—
- 8.- Propiedades electromagnéticas de los núcleos y estructura nuclear. Aplicaciones de la resonancia magnética nuclear para determinar estructura de moléculas. Efectos químicos en resonancia magnética nuclear y en susceptibilidad diamagnética. Forma y ancho de líneas en resonancias nucleares. Tiempos de relajación en mediciones de resonancia nuclear.
- 9.- Espectros de resonancia magnética nuclear de grupos orgánicos simples.

  Mediciones de relajación protónica para el estudio de combinaciones iónicas. Correlación de corrimientos químicos en la resonancia magnética protónica con las electronegatividades de substituyentes. Corrimiento de resonancia magnética de fósforo. Resonancia cuadrupolar. Resonancia magnética protónica en un cristal único (CINH<sub>A</sub>).--
- 10.-Principios generales de la magnetoquímica: aplicación al estudio de la estructura molecular. Diamagnetismo y paramagnetismo. Determinación de la susceptibilidad magnética y su aplicación al estudio de cobados de valebcia. Cambios de susceptibilidad magnética en reacciones químicas.

- 11.- Método de absorción de resonancia paramagnética en la magnetoquímica de apuestos orgánicos. Resonancia y dispersión paramagnética. Interacciones del spin electrónico. Radicales libres. Deslocalización de electrones en compuestos orgánicos. Semiquinonas.-
- 12.— Relajación de spin en soluciones de radicales libres. Reparación hiperfina. Estrechamiento de líneas de absorción por intercambio. Biradicales y moléculas triplete. Espectros de metales de transición y de sus
  complejos; factores que influyen sobre la estructura hiperfina. Interacción metal semiquinona.—
- 13.- Resonancia paramagnética en moléculas dañadas por irradiación. Radicales foto inducidos. Rol radicales libres en procesos cinéticos. Métodos experimentales. Contribución de la resonancia paramagnética de spin a la bioquímica y a la biología.-

-----000 -----

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

AÑO 1968

## PROGRAMA SINTETICO DE TERMODINAMICA ESTADISTICA

- 1.- Principios de la mecánica estadística clásica (especie de fases, teorema de Liouvillo, el problema ergódico, el teorema y su interpretación).-
- 2.- Estadísticas cufacicas (matriz densidad, ecuación maestra de Pauli).-
- 3.- <u>Poblaciones microcanónica, canónica y megalocanónica</u> (analogías termodinámicas relaciones mutuas, el método de Dawin-Fawler, Distribu de Felmi-Dirac y Einstein-Bose).-
- 4.- Fructuaciones y cambios de estado.-
- 5.- Teoría cinética y fenómenos de transporte (la ecuación de Boltzmann y su solución, difusión y termodifusión).-
- 6.- La teoría estadística de los gases reales.-
- 7.- <u>La teoría estadística líquidos y soluciones</u> (modelos celulares, reticulares, huecos, racimos; uso de funciones de distribución).-

agosto, de 1968.-