

22 F
1985

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: de Física

ASIGNATURA: PARAMETROS MAGNETICOS Y ESTRUCTURA MOLECULAR I.

CARRERA/S ; Doctorado en Cs. Físicas

ORIENTACION:

PLAN:

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA: 1 (un) cuatrimestre

HORAS DE CLASE: a) Teóricas...3 (tres)...hs. b) Problemas..... hs.
 x comprende seminarios y problemas
 c) Laboratorio..... hs. d) Seminarios..... hs.
 c) Totales...3 (tres).....hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS:

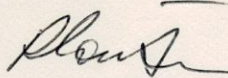
- I) La señal de resonancia magnética nuclear. Los corrimientos químicos. Referencias y solventes. Constantes de acoplamiento. Espectros de primer orden. Equivalencia magnética. El fenómeno de desacople, el espectrógrafo de onda continua. Aspectos experimentales: la muestra y el espectro.
- II) El operador hamiltoniano de spines nucleares. Interpretación de espectros sencillos. La aproximación X. Sistemas con un sólo núcleo X; espectros satélites: espectros de carbono-13 acoplados. Espectros con núcleo magnéticamente equivalentes.
- III) Ecuaciones de Bloch. Saturación. Efectos de pulsos de radiofrecuencias. "Free induction decay" y espectros por transformada de Fourier. Mediciones de los tiempos de relajación T_1 y T_2 . El origen de la relajación de los núcleos de spin $1/2$. Teoría de la relajación.
- IV) El origen electrónico del apantallamiento magnético. El término paramagnético. Constantes de apantallamiento en moléculas grandes. Anisotropía magnética de los enlaces vecinos. Corrientes de anillo. Dipolos eléctricos de grupos vecinos. Puentes de hidrógeno. Efectos de solvente sobre los corrimientos químicos. Relaciones empíricas. Corrimiento químico anisotrópico. Aspectos estereoquímicos del corrimiento químico. Los corrimientos químicos y la Tabla periódica.

- V) Acoplamiento entre los espines electrónicos y nucleares. El modelo vectorial de Dirac. Interacciones de Fermi, orbital y dipolar. El efecto de la razón giromagnética. Acoplamientos entre núcleos directamente ligados. Efectos de la hibridización. Acoplamientos H-H vicinales y de largo alcance. Mecanismos de transmisión de las constantes de acoplamiento. Acoplamientos transmitidos por los sistemas electrónicos pi y sigma. El acoplamiento "through-space". Aspectos estereoquímicos de los acoplamientos entre las especies isotópicas más comunes. Los acoplamientos de spin y la tabla periódica.

BIBLIOGRAFIA

- 1) R.K.Harris, Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, Pitman, Londres 1983.
- 2) J.L.Marshall, Carbon-Carbon and Carbon-proton NMR Couplings, Verlag, Deerfield Beach, 1983.
- 3) R.K.Harris y B.E. Mann, NMR and the periodic Table, Academic, Londres, 1978.
- 4) Artículos científicos tomados de la bibliografía más reciente, en particular del Progress in NMR Spectroscopy, Annual Reports in NMR Spectroscopy y Specialist Periodical Reports in NMR Spectroscopy.

Firma del Profesor:



Aclaración de Firma: Dr. Rubén H. Contreras

Firma del Director:



DR. EDUARDO E. CASELLI
A/C. DEL DESPACHO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

24 SET. 1985