

Espectroscopia aplicada/Química 2004

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN

LICENCIATURA EN: QUÍMICA.

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: ESPECTROSCOPIA APLICADA.

ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

DEPARTAMENTO DE: CIENCIAS QUÍMICAS.
SECCIÓN DE: QUÍMICA ORGÁNICA.

CICLO AL QUE PERTENECE: PROFESIONAL.

REQUISITO DE SERIACIÓN: QUÍMICA ORGÁNICA III.

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: OBLIGATORIA.

TIPO DE ASIGNATURA: TEÓRICO-PRÁCTICA.

MODALIDAD: CURSO / LABORATORIO.

SEMESTRE: 7°.

NÚMERO DE HORAS /SEMANA/ SEMESTRE:

TEORÍA:

4

PRÁCTICA:

2

N° DE CRÉDITOS:

10

CLAVE

1716

OBJETIVO GENERAL DE LA ASIGNATURA.

Revisar, analizar y aplicar el desarrollo de las diversas teorías y modelos para la elucidación de estructuras orgánicas

UNIDAD 1: CONCEPTOS FUNDAMENTALES.

Número de horas de teoría: 2

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Comprender la importancia de la interacción radiación electromagnética en las moléculas y su relación con la espectroscopía de absorción-emisión.

- 1.1 Historia de la espectroscopía. Interacción materia radiación.
- 1.2 Definiciones Espectroscopía vs Espectrometría
- 1.3 Características de la radiación electromagnética. Espectro electromagnético.
- 1.4 Intensidad de la radiación absorbida. Ley de Lambert Bourget y Ley de Beer.
- 1.5 Relación señal ruido, sensibilidad y poder de resolución de un espectrómetro de absorción.

UNIDAD 2: ESPECTROSCOPIA ULTRAVIOLETA – VISIBLE.

Número de horas de teoría: 4.

Número de horas de laboratorio: 4.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Comprender la importancia del cálculo de la λ_{\max} como parámetro de referencia en la estructura química.

- 2.1 Ubicación de la Región Ultravioleta y Visible del Espectro Electromagnético.
- 2.2 Esquema del Espectrofotómetro Ultravioleta – Visible.
- 2.3 Bandas de Absorción. Intensidad y Posición.
- 2.4 Grupos cromóforos. Grupos auxocromos. Concepto de Color. Corrimientos.
- 2.5 Tipos de transiciones electrónicas en compuestos orgánicos con electrones σ , electrones π y pares de electrones libres.
- 2.6 Efecto de la conjugación sobre las transiciones electrónicas.
- 2.7 Reglas de Woodward-Fisher para polienos
- 2.8 Reglas de Woodward para el grupo carbonilo
- 2.9 Reglas de Scott para sistemas aromáticos.
- 2.10 Aplicación de la Espectroscopia Ultravioleta – Visible. Cálculo de la λ_{\max}

UNIDAD 3: ESPECTROSCOPIA DEL INFRARROJO.

Número de horas de teoría: 8.

Número de horas de laboratorio: 8.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Identificar en base a la forma y posición de la banda en el espectro de IR el o los grupos funcionales presentes en una molécula orgánica.

- 3.1 Introducción histórica.
- 3.2 Instrumentación y técnicas de preparación de la muestra
- 3.3 Ubicación del IR en el Espectro Electromagnético.
- 3.4 Tipos de vibraciones en moléculas poliatómicas.
- 3.5 Características de la Carta espectral
- 3.6 Posición y forma de las bandas en base al grupo funcional.

3.7 Interpretación de Espectros.

UNIDAD 4: ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR.

Número de horas de teoría: 15.

Número de horas de laboratorio: 12.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

En base a los desplazamientos químicos y a las interacciones spin-spin, tanto de hidrógeno como de carbono ¹³, determinar el esqueleto base de la estructura química.

4.1 Introducción histórica.

4.2 Instrumentación y manejo de la muestra.

4.3 Propiedades magnéticas de los núcleos. Efecto de un campo magnético sobre un núcleo de spin no nulo.

4.4 Población de niveles Zeeman. Saturación de la señal. Factor de saturación.

4.5 Procesos de relajación.

4.6 El espectro de Resonancia Magnética Nuclear. Posición de las señales. Desplazamiento químico. Intensidad de la señal.

4.7 Factores de acoplamiento spin-spin. Multiplicidad de una señal.

4.8 Experimentos en RMN APT, DEPT, COSY, HETCOR

4.9 Interpretación de Espectros

UNIDAD 5: ESPECTROMETRÍA DE MASAS.

Número de horas de teoría: 10.

Número de horas de laboratorio: 8.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

En base a los fragmentos de una estructura química, establecer las conexiones de los diferentes grupos presentes en la molécula y reconocimiento del ión molecular y pico base.

5.1 Reseña histórica.

5.2 Instrumentación y manejo de la muestra.

5.3 Terminología especial en espectrometría de masas.

5.4 El espectro de masas.

5.5 Picos representativos e iones que los caracterizan.

5.6 Reglas de fragmentación.

UNIDAD 6: ELUCIDACIÓN DE ESTRUCTURAS ORGÁNICAS.

Número de horas de teoría: 25.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Aplicar lo aprendido en las unidades anteriores conjuntamente con el conocimiento de las diferentes técnicas espectroscópicas para la elucidación de una estructura química

6.1 Tratamiento de la Fórmula Molecular

6.2 Determinación del Grado de Insaturación.

6.3 Cálculo de Espectros utilizando software especializado.

6.4. Análisis integral de espectros.

Las horas asignadas al laboratorio se dedicarán al desarrollo de experiencias de aprendizaje experimentales en cualquiera de las siguientes modalidades:

Prácticas, experiencias de cátedra y proyectos de aplicación relacionadas con las unidades temáticas correspondientes. El tiempo de laboratorio asignado a cada unidad comprende: La investigación previa que realiza el alumno, introducción a la práctica, desarrollo experimental, discusión de resultados, elaboración del informe y evaluación.

METODOLOGÍA ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

- Exposición por parte del profesor.
- Resolución de problemas de aplicación (interpretación de espectros).
- Exposición de algunos temas por parte de los alumnos.
- Utilización de software especializado informativo de las diferentes técnicas espectroscópicas y para realizar interpretación de espectros.

PROPUESTA DE EVALUACIÓN.

Dos exámenes parciales.
Resolución de series de problemas.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DEL DOCENTE.

Profesional del Área de la Química con conocimientos sobre Espectroscopia, preferentemente posgrado y experiencia en docencia.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA.

1. Lambert, Joseph B., Herbert F. Shurvell, David A. Lighner and R. Graham Cooks. *Organic structural spectroscopy*, Prentice Hall, New Jersey, 1998.
2. R. J., Abraham, J. Fisher, P. Loftus. *Introduction to NMR spectroscopy*, John Wiley and Sons, New York, 1998.
3. Lee, Terrence A. *A Beginner's guide to mass spectral interpretation*, John Wiley and Sons, West Sussex, England, 1998.
4. Silverstein, R. *Identificación espectroscópica de compuestos orgánicos*, 5ª., John Wiley and Sons, New York, 1997.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA.

1. Standard Proton NMR Spectra Collection, Satdler Research Laboratories (1967-1996).
2. Standard Carbo-13 NMR Spectra Collection, Satdler Research Laboratories (1967-1996).
3. A, Guillam. *An introduction to electronic absorption spectroscopy in organic chemistry*, Ed. E. Arnold, London, 1998.
4. Pretsch et al. *Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos*, Alambra, España, 1996.