



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
PLAN DE ESTUDIOS DE LA LICENCIATURA
EN QUÍMICA INDUSTRIAL



PROGRAMA DE LA ASIGNATURA DE:									
Espectroscopia									
IDENTIFICACIÓN DE LA ASIGNATURA									
MODALIDAD:		Curso							
TIPO DE ASIGNATURA:		Teórico– Práctica							
SEMESTRE EN QUE SE IMPARTE:		Séptimo							
CARÁCTER DE LA ASIGNATURA:		Obligatoria							
NÚMERO DE CRÉDITOS:		10							
HORAS A LA SEMANA:	6	TEÓRICAS:	4	PRÁCTICAS:	2	SEMANAS DE CLASE:	16	TOTAL DE HORAS:	96

SERIACIÓN: Si (X) No () Obligatoria () Indicativa (X)
ASIGNATURA ANTECEDENTE: Química Orgánica III
ASIGNATURA SUBSECUENTE: Ninguna

OBJETIVOS GENERALES:

Al finalizar el curso el alumno será capaz de revisar, analizar y aplicar el desarrollo de las diversas teorías y modelos para la interpretación de espectros con base a la estructura química a partir de resultados de UV-Vis, Infrarrojo, RMN y espectrómetro de Gases Masas.

ÍNDICE TEMÁTICO			
UNIDAD	TEMAS	HORAS TEÓRICAS	HORAS PRÁCTICAS
1	Conceptos Fundamentales	2	0
2	Espectroscopia Ultravioleta – Visible	5	7
3	Espectroscopia del Infrarrojo	9	7
4	Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear	13	9
5	Espectrometría de Masas	9	9
6	Interpretación de Espectros	26	0
TOTAL DE HORAS TEÓRICAS		64	0
TOTAL DE HORAS PRÁCTICAS		0	32
TOTAL DE HORAS		96	

CONTENIDO TEMÁTICO

1. Conceptos Fundamentales

- 1.1 Historia de la espectroscopia. Interacción materia radiación.
- 1.2 Definiciones Espectroscopia 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.

2. Espectroscopia Ultravioleta – Visible

- 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} .

3. Espectroscopia del Infrarrojo

- 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.

4. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear

- 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.

5. Espectrometría de Masas

- 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.

6. Interpretación de Espectros

- 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 prácticas asignadas se dedicarán al desarrollo de experiencias de aprendizaje experimentales en cualquiera de las siguientes modalidades:

Prácticas: Manejo de equipos como uv-vis e infrarrojo.

Experiencias demostrativas: Manejo de equipos como Resonancia Magnética Nuclear y Cromatógrafo de Gases acoplado a espectrómetro de masas.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- Breitmaier, E. (2002). *Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry: A Practical Guide* (Third revised edition). England: Wiley and Sons.
- Kalsi, P. S. (2004). *Spectroscopy of Organic Compounds*. (sixth edition). New Age International Publisher LTD.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA.

- Guillet, A. (2001). *An introduction to electronic absorption spectroscopy in organic chemistry*. London: Ed. E. Arnold.
- Pretsch, et al. (2000). *Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos*. España: Alhambra.

SITIOS WEB RECOMENDADOS

- <http://www.dgbiblio.unam.mx> (librunam, tesiunam, bases de datos digitales)
- <http://www.fundacioncien.es/cursos/Triptico-3y4.pdf>
- <http://www.oci.uzh.ch/group.pages/zerbe/NMR.pdf>

SUGERENCIAS DIDÁCTICAS RECOMENDADAS PARA IMPARTIR LA ASIGNATURA

SUGERENCIAS DIDÁCTICAS	UTILIZACIÓN EN EL CURSO
Exposición oral	✓
Exposición audiovisual	✓
Actividades prácticas dentro de clase	✓
Ejercicios fuera del aula	✓
Seminarios	✓
Lecturas obligatorias	✓
Trabajo de investigación	✓
Prácticas de taller	✓
Otras	

MECANISMOS DE EVALUACIÓN

ELEMENTOS UTILIZADOS PARA EVALUAR EL PROCESO ENSEÑANZA-APRENDIZAJE	UTILIZACIÓN EN EL CURSO
Exámenes parciales	✓
Examen final	✓
Trabajos y tareas fuera del aula	✓
Actividades Prácticas	✓
Exposición de seminarios por los alumnos	✓
Participación en clase	✓
Asistencia	✓

PERFIL PROFESIOGRÁFICO REQUERIDO PARA IMPARTIR LA ASIGNATURA			
LICENCIATURA	POSGRADO	ÁREA INDISPENSABLE	ÁREA DESEABLE
Químico, QFB, QI	Posgrado en Ciencias Químicas	Química Orgánica	Química Industrial
Con experiencia docente			