



DATOS GENERALES

Nombre del curso

MÉTODOS INSTRUMENTALES AVANZADOS

PRESENTACIÓN GENERAL

Justificación

Este curso aborda la fundamentación de los métodos instrumentales más utilizados en el análisis químico para la identificación, elucidación estructural y la aplicación de algunos de ellos en el estudio de mecanismos de reacción, moléculas de importancia biológica y ambiental.

OBJETIVOS GENERALES DEL CURSO

Que el estudiante desarrolle habilidades en la interpretación de los resultados que lo lleven a la correcta identificación y caracterización de compuestos químicos, así como a la evaluación de propiedades moleculares de interés.

UNIDADES, OBJETIVOS PARTICULARES Y TEMAS

UNIDAD 1

Espectroscopia UV-visible

Objetivos particulares

Conocer la fundamentación de la espectroscopia UV-visible, así como sus aplicaciones en el análisis de compuestos químicos de importancia biológica.

Temas

- 1.1 Fundamentación.
- 1.2 Análisis cualitativo.
- 1.3 Aplicación de la espectroscopia UV (análisis de compuestos químicos de importancia biológica y ambiental).

UNIDAD 2

Espectroscopia infrarroja

Objetivos particulares

Conocer las bases de la espectroscopia infrarroja y su uso para la elucidación estructural de compuestos orgánicos, así como sus aplicaciones en las áreas químico-biológicas y ambientales.

Temas

- 2.1 Fundamentación.
- 2.2 Análisis espectral.
- 2.3 Moléculas orgánicas.
- 2.4 Aplicaciones biológicas, ambientales y farmacéuticas.

UNIDAD 3
Espectrometría de masas
Objetivos particulares
<ul style="list-style-type: none"> • Conocer la fundamentación de la espectrometría de masas y su utilidad en la elucidación estructural. • Identificar los fragmentos moleculares más comunes en sistemas orgánicos y analizar diversos patrones de fragmentación de compuestos orgánicos. • Conocer los alcances de la espectrometría de masas en cuanto a sus aplicaciones en la elucidación estructural de compuestos de importancia biológica y ambiental.
Temas
3.1 Fundamentación. 3.2 Instrumentación. 3.3 Métodos de ionización y detección. 3.4 Análisis de patrones de fragmentación. 3.5 Aplicaciones biológicas y ambientales.

UNIDAD 4
Resonancia magnética nuclear
Objetivos particulares
<ul style="list-style-type: none"> • Conocer las bases de la espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear (RMN). • Analizar espectros de RMN 1D y 2D para llevar a cabo la elucidación estructural de diversas familias de compuestos orgánicos.
Temas
4.1 Propiedades magnéticas de los núcleos. 4.2 Instrumentación. 4.3 Elucidación estructural. <ul style="list-style-type: none"> 4.3.1 RMN 1D. 4.3.2 RMN 2D.

UNIDAD 5
Electroquímica molecular
Objetivos particulares
<ul style="list-style-type: none"> • Conocer los aspectos fundamentales de los procesos electroquímicos y su clasificación. • Conocer las bases generales de la técnica de Voltamperometría Cíclica y su importancia en el estudio de compuestos orgánicos de interés biológico. • Analizar el comportamiento voltamperométrico de ejemplos seleccionados de sistemas reconocidos por su importancia biológica. • Conocer algunas de las aplicaciones de la electroquímica en el estudio de sistemas orgánicos y química verde.
Temas
5.1 Principios de la electroquímica. 5.2 Electroquímica molecular y técnicas electroanalíticas. 5.3 Voltamperometría cíclica: Fundamento y su uso en estudios de mecanismos de reacción. 5.4 Algunas aplicaciones de la electroquímica. <ul style="list-style-type: none"> 5.4.1 Electrosíntesis. 5.4.2 Su utilización en química verde.

UNIDAD 6
Métodos cromatográficos
Objetivos particulares
<ul style="list-style-type: none"> • Conocer la fundamentación de los métodos cromatográficos, cromatografía de gases y HPLC. • Interpretar cromatogramas para análisis de tipo cualitativo. • Conocer y analizar las diferentes metodologías usadas para el análisis cuantitativo.
Temas
<p>6.1 Fundamentación. 6.2 Cromatografía de gases. 6.3 Aplicaciones al análisis cualitativo y cuantitativo. 6.4 Cromatografía de HPLC. 6.5 Aplicaciones al análisis cualitativo y cuantitativo. 6.6 Uso de eluentes amigables con el ambiente (eluentes verdes) mecanismos de reacción.</p>

TÉCNICAS DIDÁCTICAS Y ASPECTOS METODOLÓGICOS
<p>De enseñanza:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Exposición con apoyo tecnológico variado. • Moderar debate. • Lectura comentada. • Estudio de casos. • Organización de trabajo. • Seguimiento de tareas. <p>De aprendizaje:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Exposición de motivos y metas. • Debate sobre el conocimiento adquirido. • Búsqueda de fuentes de información. • Consulta en fuentes de información. • Lectura, síntesis e interpretación.

EQUIPO NECESARIO
<ul style="list-style-type: none"> • Equipo de cómputo. • Video proyector. • Recursos multimedia interactivos. • Pintarrón. • Marcadores. • Programas (aplicaciones). • Software especializado.

BIBLIOGRAFÍA
<ul style="list-style-type: none"> • Silverstein, R.M.; Webster, F.X.; Kiemle, D.; Spectrometric identification of organic compounds, Jhon Wiley & Sons, 2005 (ISBN-10: 0471393622, ISBN-13:978-0471393627). • F.W. McLafferty, F. Turecek, Interpretation of Mass Spectra, Fourth Edition, University Science Books, California, 1993. (ISBN-10: 0935702253, ISBN-13:978-0935702255). • Gross, J.H.; Mass Spectrometry: A textbook. Ed Springer Verlag 2006 (ISBN-

10:3540407391, ISBN-13: 978-3540407393).

- De Hoffman, E. Mass Spectrometry: Principles and Applications, Ed. Wiley-Interscience 2013 (ISBN-13: 978-0470033104, ISBN-10: 047003310X).
- Larkin, P. Infrared and Raman Spectroscopy: Principles and Spectral Interpretation, Ed. Elsevier 2011 (ISBN-13: 978-0123869845, ISBN-10: 0123869846).
- Breitmaier, E.; Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry, 3a edición, John Wiley and Sons, 2002 (ISBN-10: 0470850078, ISBN-13: 978-0470850077).
- Friebolin, H.; Basic One and Two Dimensional NMR Spectroscopy Ed. Wiley VCH 2005 (ISBN-10: 03527312331, ISBN-13: 978-3527312337).
- Macomber R.S.; A complete introduction to Modern NMR Spectroscopy Wiley Interscience 1st edition 2008 (ISBN-10: 0471157368, ISBN-13: 978-0471157366).
- Neil E. Jacobsen; NMR Data Interpretation Explained: Understanding 1D and 2D NMR Spectra of Organic Compounds and Natural Products, Ed. Wiley 1st edition 2016. ISBN: 978-1-118-37022-3.
- Neil E. Jacobsen; NMR Spectroscopy Explained: Simplified Theory, Applications and Examples for Organic Chemistry and Structural Biology, Ed. Wiley John and Sons; 2007. ISBN-10: 9780471730965.
- Dong, M. W.; Modern HPLC for Practicing Scientists John Wiley & Sons, Inc. 2006 (ISBN-10: 047172789X, ISBN-13: 978-0471727897).
- Ed. Grob, R.; Barry, E.; Modern Practice of Gas Chromatography 4 Ed. Wiley & Sons 2004 (ISBN-10: 0471229830, ISBN-13: 978-0471229834).
- Bard, A.J.; Faulkner, L. R.; Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications. Wiley, 2000 (ISBN-10: 471043729, ISBN-13: 978-0471043720).

REFERENCIAS ELECTRÓNICAS

- doi:10.1016/S0022-0728(02)01483-3. J. Electroanal. Chem., 2003, 543, 73-81 (Sep 2010).
- doi:10.1016/j.jelechem.2004.07.021. J. Electroanal. Chem., 2004, 574, 33–39 (Sep 2010).
- <http://dx.doi.org/10.1016/j.electacta.2014.04.082>. Electrochim. Acta, 2014, 133, 546–554.
- DOI: 10.1039/c4ob00823e. Org. Biomol. Chem., 2014, 12, 5981–5989 (Ago 2014).
- <http://dx.doi.org/10.1016/j.jelechem.2015.01.003>. J. Electroanal. Chem., 2015, 740, 95–104 (Ago 2015).
- <http://dx.doi.org/10.1016/j.jelechem.2017.07.023>. J. Electroanal. Chem., 2017, 801, 104–113 (Jul 2017).
- DOI: 10.1021/jacs.7b09176. J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 15239–15244 (Oct 2018).
- DOI: 10.1021/acs.chemrev.7b00271. Chem. Rev. 2018, 118, 4485–4540 (Oct 2018).

OTROS MATERIALES DE CONSULTA

- Bases de datos como Scifinder, Isi Web of Science y las bases de datos electrónicas disponibles en el CONRICyT.

EVALUACIÓN		
Sumatoria		
Forma de Evaluación	Concepto	Porcentaje
	Participación (resolución de problemas, exposiciones y discusión de artículos)	20 %
	Exámenes escritos	70 %
	Trabajos escritos	10 %
	TOTAL	100 %