

**UNIVERSIDAD VERACRUZANA**  
**Doctorado en Investigación Químico-Biológica**

DATOS GENERALES
Nombre del Curso
<b>Espectroscopia y elucidación estructural</b>

PRESENTACIÓN GENERAL
<b>Justificación</b>
Los métodos Espectroscópicos son métodos ópticos que se basan en la interacción de la luz con la materia. Esta interacción es tan específica que nos permite identificar qué tipo de muestra interactúa y que cantidad de materia interactuó, es decir los métodos espectroscópicos permiten realizar análisis cualitativos y cuantitativos de muchísimas muestras tanto orgánicas como inorgánicas y por lo tanto el fundamento es el más utilizado para los laboratorios de análisis de prácticamente toda la industria y del área de la salud. Esta asignatura teórica y/o práctica forma parte de las materias optativas del programa de Doctorado en Investigación Químico-Biológica, en ella sólo se abordarán los aspectos cualitativos relacionados con la obtención de la estructura del compuesto analizado, utilizando diversas técnicas para este fin.

OBJETIVOS GENERALES DEL CURSO Y UNIDAD DE COMPETENCIA
<b>Objetivos Generales:</b> Elucidar la estructura química compuestos orgánicos a partir de las señales y bandas observadas en los espectros de UV-Vis, infrarrojo, masas y resonancia magnética nuclear. Adquirir el suficiente conocimiento para diseñar la mejor manera de enfrentarse a un determinado problema de determinación estructural conociendo la información que proporciona o aporta cada tipo de espectro. Conocer las aplicaciones y limitaciones de las diferentes técnicas espectroscópicas.
<b>Unidad de competencia:</b> En un ambiente de responsabilidad y compromiso, el estudiante aplica los principios fundamentales de las técnicas espectroscópicas, con la finalidad de realizar la elucidación de su estructura.

UNIDADES, OBJETIVOS PARTICULARES TEMAS
<b>UNIDAD 1</b>
1. Introducción
<b>Objetivos particulares</b>
Conocer y comprender los conceptos básicos de la interacción de la materia con el espectro electromagnético.
<b>Temas</b>
1.1 Investigación espectroscópica de una estructura
1.2 El espectro electromagnético

1.3	Peso Molecular y Fórmula Molecular	Isómeros Estructurales y Estereoisómeros
-----	------------------------------------	--

## UNIDAD 2

### 2. Espectroscopía de UV-Vis

#### Objetivos particulares

Conocer y comprender los conceptos básicos de la espectroscopía UV-Vis.  
Aprender las reglas que rigen las absorciones de los compuestos orgánicos y las absorciones de los grupos funcionales más comunes.

#### Temas

- 2.1 Introducción a la Espectroscopia UV-VIS y la Instrumentación.
- 2.2 Las reglas de Woodward-Fieser.
- 2.3 Aplicaciones de la espectroscopía UV-VIS.
- 2.4 Resolución de problemas.

## UNIDAD 3

### 3. Espectroscopía de Infrarrojo

#### Objetivos particulares

Conocer y comprender los conceptos básicos de la espectroscopía Infrarrojo.  
Aprender las absorciones de los grupos funcionales más comunes.

#### Temas

- 3.1 Introducción a la espectroscopía infrarroja.
- 3.2 Fundamentos y aplicaciones.
- 3.3 Instrumentación de la Espectroscopia Infrarroja.
- 3.4 La transformada de Fourier (FTIR).
- 3.5 Bandas de absorción características y grupos funcionales.
- 3.6 Aplicaciones de la espectroscopía infrarroja
- 3.7 Resolución de problemas

## UNIDAD 4

### 4. Espectrometría de Masas

#### Objetivos particulares

Conocer y comprender los conceptos básicos de la espectrometría de Masas  
Aprender los patrones básicos de fragmentación de los grupos funcionales más comunes.

#### Temas

- 4.1 Espectrometría de masas. (EM)
- 4.2 Instrumentación de la EM.
- 4.3 Patrones de fragmentación.
- 4.4 Aplicaciones de la espectrometría de Masas.
- 4.5 Resolución de problemas.

## UNIDAD 5

## 5. Resonancia Magnética Nuclear

### Objetivos particulares

Conocer y comprender los conceptos básicos de la Resonancia Magnética Nuclear Interpretar las señales generadas en un espectro de resonancia magnética nuclear de Hidrógeno y Carbono, de acuerdo con su desplazamiento químico, multiplicidad, integración y su constante de acoplamiento.

### Temas

- 5.1 Introducción a la RMN  $^1\text{H}$ , fundamentos.
- 5.2 Instrumentación.
- 5.3 Técnica de pulsos-transformada de Fourier.
- 5.4 Características de los espectros de RMN  $^1\text{H}$ .
- 5.5 Desplazamiento químico (efectos de protección y desprotección).
- 5.6 Multiplicidad de las señales.
- 5.7 La constante de acoplamiento.
- 5.8 Integración.
- 5.9 Patrones de acoplamiento.
- 5.10 Aplicaciones de la RMN  $^1\text{H}$
- 5.11 Introducción a la RMN  $^{13}\text{C}$ , instrumentación.
- 5.12 Características de los espectros de RMN  $^{13}\text{C}$ .
- 5.13 Desplazamiento químico (efectos de protección y desprotección).
- 5.14 Espectros acoplados y desacoplados.
- 5.15 El experimento APT.
- 5.16 El experimento DEPT.
- 5.17 Estrategias para la elucidación estructural.
- 5.18 Aplicaciones de la RMN de  $^{13}\text{C}$ .
- 5.19 Características generales de experimentos 2D.
- 5.20 Experimentos Bidimensionales (COSY y HETCOR)
- 5.21 Resolución de problemas

### TÉCNICAS DIDÁCTICAS Y ASPECTOS METODOLÓGICOS

Analogías.  
Discusión de temas.  
Informes.  
Problemarios.  
Modelaje.  
Simulación.  
Lectura e interpretación de textos.  
Estudios de caso.  
Aprendizaje basado en problemas.  
Elaboración de tareas

## EQUIPO NECESARIO

### **Materiales didácticos:**

Libros  
Revistas científicas  
Antologías  
Artículos de investigación  
Pintarrón  
Plumones  
Borrador

### **Recursos didácticos:**

Aula de cómputo  
Software especializado  
Proyector  
Computadora  
Internet  
Biblioteca virtual  
Eminus

## BIBLIOGRAFÍA

1. Crew, P.; Rodríguez, J. y Jaspars, H. Organic Structure Analysis; Oxford Univ. Press: Oxford, 1998.
2. Sternhell, S.; Kalman, J.R. "Organic Structures from Spectra", 3ª Ed.; John Wiley and Sons: Chichester, 2002.
3. Duddeck, H.; Dietrich, W.; Toth, G.; Elucidación Estructural por RMN, 3ª Ed. Springer Verlag Iberica: España, 2000.
4. Whittaker, D.; Interpreting Organic Spectra; Royal Society of Chemistry: Cambridge, England, 2000.
5. Silverstein, R.; Webster, F.; Spectrometric Identification of Organic Compounds, 6ª Ed.; John Wiley and Sons: Chichester, 1998.
6. Hesse, M.; Meier, H.; Zeeh, B.; Spectroscopic Methods in Organic Chemistry; Thieme: Stuttgart, 1997.
7. Pretsch, E.; Bühlmann, P.; Affolter, C. Structure Determination of Organic Compounds; Springer-Verlag: Berlin, 2009.
8. Pavia, D.L.; Lampman, G.M.; Kriz, G.S.; Vyvyan, J.R.; Introduction to Spectroscopy; Brooks/Cole: Belmont, CA, 2009.

## REFERENCIAS ELECTRÓNICAS (Última fecha de acceso)

[http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/4.1InstrumentacionEspectrometriadeMasas\\_2462.pdf](http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/4.1InstrumentacionEspectrometriadeMasas_2462.pdf)  
Último acceso: febrero 2021.

<https://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/virttxtjml/spectrpy/nmr/nmr1.htm> Último acceso: febrero 2021.

<https://www.orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/tutorial.shtml> Último acceso: febrero 2021.

[https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre\\_index.cgi](https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi) Último acceso: febrero 2021.

### Otros Materiales de Consulta:

1. Mitchell, T. N., Costisella, B. (2007). NMR – From spectra to structures: an experimental approach. 2a ed, New York: Springer.
2. Joseph, P., Díaz, T. E. (1998). Elementos de resonancia magnética nuclear de hidrógeno. México: Iberoamérica.
3. Derome, A. E. (1987). Modern NMR techniques for chemistry research. Londres: Pergamon Books Ltd.
4. Nakanishi, K. (1998). Infrared absorption spectroscopy. 2a edición. San Francisco:Emerson-Adams Press.
5. Bellamy, L. J. (1975). The Infrared spectra of complex molecules. Londres: Methuen.
6. Bases de datos del American Chemical Society, Science Direct, Springer, Scifinder.

### EVALUACIÓN

#### SUMATIVA

Aspecto a Evaluar	Forma de Evaluación	Evidencia	Porcentaje
Aprendizaje de los contenidos	Examen	Examen escrito	35
	Resolución de problemas	Reporte escrito	30
	Presentaciones orales	Archivos de Presentación	35
Total			100