

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE
CHIHUAHUA



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE
CHIHUAHUA

UNIDAD ACADÉMICA:
PROGRAMA DEL CURSO:
Elucidación estructural

DES:	INGENIERÍA Y CIENCIAS
Programa(s) académico(s)	Químico
Tipo de Materia: <i>Obligatoria / Optativa</i>	Obligatoria
Clave de la Materia:	PQ704
Semestre:	7
Área en plan de estudios (B,P,E, O):	P, E
Total de horas por semana:	7
Laboratorio o Taller:	4
h./semana trabajo presencial/virtual	3
h./semana laboratorio/taller	4
h. trabajo extra-clase:	
Total de horas por semestre: <i>Total de horas semana por 16 semanas</i>	112
Créditos totales:	7
Fecha de actualización:	Enero 2023
Prerrequisito (s):	Química del grupo carbonilo; Métodos ópticos

DESCRIPCIÓN DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE/ CURSO:

La Química es la ciencia que estudia la materia y sus cambios a un nivel molecular. Para identificar la estructura molecular a esta escala existen varias técnicas modernas. Un grupo de estas técnicas se basan en la interacción de la radiación con la materia. Estos fenómenos están cuantizados y siguen una serie de leyes. Dichas técnicas son conocidas como técnicas espectroscópicas. La información que brindan las espectroscopias es importante porque ofrecen datos relevantes sobre la forma en que se enlazan las moléculas y su ambiente electrónico. Las técnicas espectroscópicas son una herramienta necesaria en el ejercicio profesional del químico. Por ello, la instrucción en esta área es primordial en la formación de los licenciados en química.

En este curso se revisarán las técnicas espectroscópicas que proveen información estructural a nivel molecular: Espectroscopia infrarroja, espectrometría de masas y resonancia magnética nuclear. Se revisarán las bases teóricas de las técnicas y las estrategias de interpretación de estas. Al finalizar el curso, el estudiante será capaz de determinar la estructura molecular de una muestra problema a través de la interpretación de los espectros de infrarrojo, masas y resonancia magnética nuclear.

COMPETENCIA PRINCIPAL QUE SE DESARROLLA:*Competencias básicas: Solución de problemas**Competencias disciplinares básicas: Ciencias químicas*

Al término del curso el estudiante conoce los diferentes tipos de técnicas espectroscópicas para la elucidación estructural. Entiende las bases teóricas de las diferentes técnicas espectroscópicas. Es capaz de interpretar espectros y proponer la estructura molecular de una muestra problema. El estudiante con este conocimiento adquirido es capaz de proponer soluciones creativas y sustentables a problemas específicos de procesos químicos de interés en el área de la salud, ambiental y energía.

OTRAS COMPETENCIAS A LAS QUE SE CONTRIBUYE CON EL DESARROLLO DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE/CURSO:

Se escribe el nombre y tipo de la competencia (B, P, E u O). Se describe la definición general de la (s) competencia (s) a fortalecer con esta unidad de aprendizaje.

(B) INFORMACIÓN DIGITAL: *Opera con responsabilidad social y ética: herramientas, equipos informáticos, recursos digitales; para localizar, evaluar y transformar la información, que contribuyan al logro de metas personales, sociales, ocupacionales y educativas.*

(CDB) FUNDAMENTOS DE ANÁLISIS FÍSICOS: *Resuelve de forma analítica problemas relacionados con fenómenos físicos con la finalidad de sustentar la comprensión de las ciencias químicas e ingenieriles.*

(E2) INOVACIÓN CIENTÍFICO- TECNOLÓGICAS: *Aplica el método científico en el desarrollo de proyectos de innovación y/o solución de problemas de naturaleza química con un enfoque ético.*

(E3) SÍNTESIS Y FORMULACIÓN: *Diseña y/o modifica métodos y operaciones encaminados a la elaboración, purificación, formulación y caracterización de sustancias y productos, con un enfoque sostenible.*

(E4) CONTROL ANALÍTICO: *Diseña procedimientos de análisis químico, evalúa e interpreta resultados en mediciones analíticas, para control de procesos y productos.*

DOMINIOS (Se toman de las competencias)	OBJETOS DE ESTUDIO (Contenidos, temas y subtemas)	RESULTADOS DE APRENDIZAJE	METODOLOGÍA (Estrategias, secuencias, recursos didácticos)	EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO
<p><i>Solución de problemas</i></p> <p>1. Aplica diferentes técnicas de observación pertinentes en la solución de problemas.</p> <p>2. Identifica soluciones con base en diferentes fuentes de información confiables incluyendo la revisión de bibliografía internacional (en otros</p>	<p>1. ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL.</p> <p>a. Introducción. Fundamentos y reglas de selección. El espectro de IR, Absorciones características Absorciones IR de: hidrocarburos, compuestos oxigenados (cetonas, óxidos, etc.) compuestos halogenados. compuestos con nitrógeno, fósforo y azufre (aminas, sulfatos, fosfinas y sus compuestos de coordinación) y compuestos aromáticos Bandas de compuestos adicionales.</p>	<p>Interpreta espectros de IR y deduce la presencia de grupos funcionales a partir de fórmulas moleculares de compuestos orgánicos.</p> <p>Interpreta espectros Raman dando información química y estructural del material analizado a través la asignación de bandas</p>	<p>Guías de Estudio Esquemas Diagramas de Flujo Reportes de Laboratorio Investigación documental</p>	<p>Guías de Estudio Esquemas Diagramas de Flujo Reportes de Laboratorio Investigación documental</p>

<p>idiomas). 3. Propone soluciones creativas e innovadoras asumiendo una actitud responsable</p>	<p>b.Espectroscopia Raman. Efecto Raman. Reglas de Selección.</p>			
<p>INFORMACIÓN DIGITAL</p> <p>1. Elige fuentes de información y las discrimina por su relevancia, pertinencia y confiabilidad.</p> <p>2. Emplea navegadores y buscadores para gestionar, localizar, almacenar, recuperar y clasificar información, considerando los derechos de autor.</p> <p>3. Maneja recursos documentales y electrónicos que apoyan a la comunicación y la búsqueda de información. Considerando las nuevas tecnologías disponibles.</p> <p>CIENCIAS QUÍMICAS</p>	<p>2. RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR. Fundamentación teórica. Fenómenos de resonancia. Desplazamiento químico. Acoplamiento espín-espín. Anchura de línea. Intensidad. Espectros de RMN y estructura molecular. Moléculas con posiciones nucleares fijas. Movilidad molecular. Proceso de intercambio químico. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear de ^1H. Preparación de muestras y registro de espectros (técnicas CW y PFT). Desplazamientos químicos de ^1H. Acoplamientos ^1H, ^1H. Acoplamientos con otros núcleos. Correlación del desplazamiento químico de ^1H-elemento estructural. Sistemas de incrementos para la estimación de los desplazamientos químicos ^1H. Datos de ^1H-RMN de algunos compuestos más importantes. Métodos especiales.</p> <p>Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear de ^{13}C. Preparación de muestras</p>	<p>Interpreta espectros unidimensionales de RMN, Calcula las constantes de acoplamiento para conocer la conectividad de los átomos de una molécula para elucidar sus posibles estructuras moleculares.</p> <p>Interpreta espectros bidimensionales de RMN para determinar la estructura molecular de compuestos más complejos</p> <p>Interpreta espectros de RMN de otros núcleos.</p>	<p>Investigación documental Construcción de modelos moleculares Exposiciones Proyectos de investigación</p>	<p>Investigación documental Construcción de modelos moleculares Exposiciones Proyectos de investigación</p>

<p>1. Interpreta datos derivados de las observaciones y mediciones experimentales relacionándolos con la teoría.</p>	<p>y registro de espectros. Desplazamientos químicos de ^{13}C. Acoplamiento ^{13}C, ^1H. Acoplamiento del ^{13}C con otros núcleos (D, F, N, P). Acoplamiento ^{13}C, ^{13}C. Correlación del desplazamiento químico del ^{13}C-elemento estructural. Sistemas de incrementos para la estimación de los desplazamientos químicos de ^{13}C. Métodos especiales.</p> <p>Combinación de las espectroscopias de ^1H y de ^{13}C- RMN. Utilización de bancos de datos. Datos de RMN de ^1H de ^{13}C de ejemplos representativos de compuestos más importantes.</p>			
<p>FUNDAMENTOS DE ANÁLISIS FÍSICOS</p> <p>1. Comprende los conceptos de partícula, onda, fuerza, energía y campo para interpretar y resolver problemas de las ciencias químicas e ingenieriles.</p> <p>2. Identifica las variables, ecuaciones de estado y funciones termodinámicas para explicar procesos fisicoquímicos.</p> <p>3. Reconoce las leyes termodinámicas y las aplica en</p>	<p>ESPECTROSCOPIA DE MASAS.</p> <p>Principios básicos de espectrometría de masas. Métodos de formación, aceleración y registro de iones. Fragmentación. Ion molecular. Fragmentos iónicos positivos. Fragmentos iónicos positivos de doble carga. Iones negativos. Iones metaestables. Fragmentos neutros. Ion molecular. Picos isotópicos. Fórmula mínima. Mecanismos de fragmentación de las familias más representativas de compuestos orgánicos. Mecanismos de fragmentación de</p>	<p>Interpreta espectros de masas proponiendo estructuras moleculares a partir de los patrones de fragmentación. Utiliza el método científico para la resolución de problemas de interpretación química, mediante el trabajo en equipo (E2, B2, B5)</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Pruebas escritas • Exposiciones • Realización de audios y videos • Registro de observaciones • Series de problemas a resolver • Registro de procedimientos, observaciones y resultados de prácticas de laboratorio en bitácora • Elaboración de reportes de prácticas de laboratorio • Elaboración de mapas conceptuales 	<ul style="list-style-type: none"> • Pruebas escritas • Exposiciones • Realización de audios y videos • Registro de observaciones • Series de problemas a resolver • Registro de procedimientos • Observaciones y resultados de prácticas de laboratorio en bitácora • Elaboración

procesos fisicoquímicos.	compuestos covalentes y de coordinación.			n de reportes de prácticas de laboratorio • Elaboración de mapas conceptuales
E2 INOVACIÓN CIENTIFICO-TECNOLÓGICAS 1. Define la hipótesis de estudio con base en el método científico para resolución de problemas de índole química (H). 2. Selecciona el procedimiento adecuado para solucionar el problema con base en la hipótesis de trabajo (H). 3. Muestra ética profesional en la colección y el manejo de sus datos en bitácora (A). 4. Compara resultados y crea conocimiento para la adecuada toma de decisiones de un determinado campo de trabajo (H).	INTERPRETACIÓN CONJUNTA Integración de espectros UV, IR, Raman, RMN y Masas. Determina específicamente la estructura molecular de compuestos orgánicos utilizando de forma conjunta los espectros de UV, IR, Raman, RMN y Masas	Integra los espectros de UV, IR, Raman, RMN y Masas para la interpretación conjunta y obtención de la estructura molecular de compuestos orgánicos. Utiliza el método científico para la resolución de problemas de interpretación química, mediante el trabajo en equipo (E2, B2, B5)	• Presentación escrita de protocolos de investigación • Presentación oral y/o escrita de los avances en el desarrollo de la investigación • Material audiovisual del trabajo de investigación. • Presentación escrita de conclusiones y replanteamiento	• Presentación escrita de protocolos de investigación • Presentación oral y/o escrita de los avances en el desarrollo de la investigación • Material audiovisual del trabajo de investigación. • Presentación escrita de conclusiones y replanteamiento

FUENTES DE INFORMACIÓN (Bibliografía, direcciones electrónicas)	EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES (Criterios, ponderación e instrumentos)
Hesse, M.; Meier, H.; Zeeh, B. Métodos espectroscópicos en química orgánica. Ed. Síntesis, 2ª edición. 2005. Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz, G.S.; Vyvyan, J.R. Introduction to spectroscopy. Ed. Cengage Learning, 4a edición. 2009. Silverstein, R. M.; Webster F.X.; Kiemle, D. Spectrometric identification of organic compounds. Ed John Wiley & Sons, 7a edición. 2005	<ul style="list-style-type: none"> • Guías de estudio 30% • Reportes de laboratorio 10% • Evaluaciones escritas 40% • Bitácora de Laboratorio 10% • Evidencia Integradora 10%

<p>Duddeck, Helmut. Structure elucidation by modern NMR. Traducción y versión española Antonio Herrera Fernández; 3a ed. Revisada; Barcelona : Springer-Iberica, 2000; 211pp.</p> <p>Castells, J., Camps F., Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos, 2ª ed, Madrid : Alhambra, 1985</p>	
--	--

CRONOGRAMA DEL AVANCE PROGRAMÁTICA

Objetos de Estudio	Semanas															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Espectroscopia vibracional	x	x	x	x												
Espectrometría de Resonancia magnética nuclear					x	x	x	x	x	x						
Espectrometría de masas											x	x	x	x		
Interpretación conjunta															x	X