

**FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO****CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01**VERSION:**  
2**FECHA:**  
2010-14-04**PAGINA:**  
1 de 2**1. IDENTIFICACIÓN**

Nombre de la Asignatura <b>Espectroscopía</b>		Código <b>7806031</b>		Área <b>Profesionalización</b>	
Naturaleza <b>Teórica</b>	No de Créditos <b>3</b>	TP Trabajo Presencial <b>5</b>	TD Trabajo Dirigido	TI Trabajo Independiente <b>4</b>	
Semestre <b>VI</b>	Duración <b>144</b>	Habilitable <b>Si</b>	Homologable <b>Si</b>	Validable <b>Si</b>	

**PRE-REQUISITO:** No aplica**2. JUSTIFICACIÓN**

El avance extraordinario de la electrónica y de la computación, ha permitido el desarrollo y perfeccionamiento de técnicas analíticas que han hecho posible tanto la identificación de las sustancias, su cuantificación en algunos casos y la distribución espacial de los átomos en moléculas muy complejas en tan solo unos pocos días. Estas técnicas son: espectroscopias en la región del ultravioleta y visible, en el infrarrojo, espectrometría de masas, resonancia magnética nuclear de  $^1\text{H}$  y  $^{13}\text{C}$  y cristalografía de Rayos X.

Si bien, el análisis espectroscópico de sustancias es un campo muy propio de la química, muchas tópicos de las ciencias naturales, algunas disciplinas, ingenierías e incluso la medicina tanto humana como animal requieren o hacen uso de la espectroscopia generalmente para cuantificar e identificar metabolitos provenientes de animales y plantas, enzimas, medicamentos entre otros; el personal que trabaja en laboratorios de control de calidad relacionados con alimentos o productos químicos y de investigación necesariamente tienen que usar estos conceptos como herramienta para obtener resultados confiables y verificables. Con el manejo de conceptos espectroscópicos básicos, se formarán profesionales más idóneos con un mayor poder de toma de decisiones y de crítica.

De otro lado, la espectroscopía es la forma como se pueden emplear los instrumentos modernos para ayudar a identificar los compuestos orgánicos. Las medidas se toman en los instrumentos denominados espectrómetros o espectrofotómetros que registran ciertos fenómenos en el papel o medios magnéticos llamados espectrogramas o espectros. El estudio de estos espectros constituye el arma más poderosa en estudios de fitoquímica, síntesis y química analítica entre otras.

**3. COMPETENCIAS****COMPETENCIA GLOBAL**

Caracterizar analíticamente la composición elemental y/o molecular de un analito o muestra mediante métodos químicos e instrumentales.

**3.1 Competencias Generales**

- Expresar ideas y conceptos mediante representaciones lingüísticas, matemáticas o gráficas.
- Capacidad de análisis y síntesis.
- Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- Habilidades y/o destrezas relacionadas con la capacidad de comprensión y aplicación práctica de conocimientos o ideas.
- Capacidad de gestión de la información.



## FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO

**CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01

**VERSION:**  
2

**FECHA:**  
2010-14-04

**PAGINA:**  
2 de 2

- Trabajo en equipo.

### 3.2 Competencias Especificas

- Distinguir la información estructural específica que pueden aportar las técnicas espectroscópicas en el estudio de diferentes matrices.
- Diseñar el procedimiento de análisis estructural que requiere una muestra problema determinada.
- Correlacionar el espectro UV-Vis con la estructura y reconocer los diferentes cromóforos. Aprender y conocer el manejo de las tablas.
- Identificar las señales en un espectro de Infrarrojo. Establecer que grupos funcionales se encuentran presentes en una molécula y deducir el tipo de compuesto que se tiene.
- A partir de espectros de masas determinar el peso molecular del compuesto y reconocer los patrones de fragmentación.
- Interpretar apropiadamente espectros de Resonancia Magnética Nuclear de  $^1\text{H}$  y  $^{13}\text{C}$ . Definir la estructura química de un compuesto a través de las señales observadas en el espectro.

## 4. OBJETIVOS

### General

Introducir al estudiante en el estudio de la correlación espectro-estructura y en las diferentes aplicaciones de las técnicas espectroscópicas.

Se pretende además que el alumno:

- Adquiera los conocimientos adecuados y necesarios que le permitan identificar sustancias orgánicas a partir de una serie de espectros o datos espectroscópicos dados.
- Adquiera 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.
- Conozca las aplicaciones y limitaciones de las diferentes técnicas espectroscópicas

### Específicos

- Correlacionar el espectro UV-Vis con la estructura y reconocer los diferentes cromóforos. Aprender y conocer el manejo de las tablas.
- Correlacionar los espectros de RMN de núcleos de interés orgánico:  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{19}\text{F}$  y  $^{31}\text{P}$  con la estructura. Interpretar espectros mono y bidimensionales. Aprender el manejo de las tablas.
- Correlacionar espectros de masas y sistemas de ionización. Reconocer el ion molecular y los satélites isotópicos. Conocer las principales fragmentaciones.
- Conocer y usar las bases de datos espectroscópicas, su manejo, aplicaciones y limitaciones. Usar programas para el cálculo teórico de espectros.
- Consultar y utilizar la bibliografía propuesta para el desarrollo del curso.

**FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO****CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01**VERSION:**  
2**FECHA:**  
2010-14-04**PAGINA:**  
3 de 2**5. CONTENIDO TEMÁTICO Y ANÁLISIS DE CRÉDITOS****Tema 1. Espectroscopía Infrarroja (IR).**

- 1.1 Energías vibracionales, modos de vibración.
- 1.2 Tablas de frecuencias características.
- 1.3 Reglas de selección, intensidad y forma de las bandas.
- 1.4 Consideraciones de simetría. Ley de Hooke.
- 1.5 Absorciones características de enlaces sencillos y múltiples. Región de las vibraciones de tensión X-H. Región de las vibraciones de tensión del triple enlace. Región de las vibraciones de tensión del doble enlace. Región de la huella dactilar.
- 1.6 Influencia del entorno químico y de los sustituyentes sobre las frecuencias de absorción.
- 1.7 Absorciones de grupos funcionales (Alcanos, alquenos, aromáticos, alcoholes, etc.)
- 1.8 Interpretación de espectros de moléculas orgánicas
- 1.9 Aplicación de Espectroscopia infrarroja a mezclas

**Tema 2. Espectrometría de masas (EM).**

- 2.1 Ionización y registro del espectro.
- 2.2 Métodos de ionización
- 2.3 Ion molecular y satélites isotópicos. Información. Manejo de tablas. Masa exacta.
- 2.4 Tipos de fragmentaciones principales. Fragmentaciones en distintos grupos funcionales.
- 2.5 Información general. Análisis del espectro de masas
- 2.6 Masas de alta resolución
- 2.7 Masas-Masas
- 2.8 Espectrometría de masas de los distintos tipos de compuestos: Hidrocarburos alifáticos y aromáticos, alcoholes, Olefinas, compuestos carbonílicos, aminas. Heterociclos
- 2.9 Problemas de identificación de moléculas orgánicas
- 2.10 Aplicación de Espectrometría de masas a mezclas

**Tema 3. Resonancia Magnética Nuclear Protónica y de carbono trece (<sup>1</sup>H y <sup>13</sup>C).**

- 3.1 Introducción. Propiedades magnéticas de los núcleos. Momento magnético y espín nuclear. Interacción de los núcleos con campos magnéticos. Fenómeno de resonancia. Conceptos básicos de RMN.
- 3.2 Grupos funcionales y desplazamientos químicos. Factores que afectan al desplazamiento: Efecto inductivo. Sustitución e hibridación. Enlaces por puentes de hidrógeno. Manejo de tablas y programas de simulación.
- 3.3 Multiplicidad de las señales. Interacciones spin-spin. Núcleos equivalentes. Acoplamiento de primer orden. Sistemas de spines: Sistemas de dos spines. A<sub>2</sub>, AX y AB. Sistemas de tres spines. AB<sub>2</sub> y AX<sub>2</sub>, AMX, ABX y ABC. Sistemas de cuatro spines.
- 3.4 Constante de acoplamiento. Acoplamiento a corta y larga distancia. Magnitud y signo de la constante de acoplamiento. Constante de acoplamiento geminal y vecinal.
- 3.5 Interpretación de espectros.
- 3.6 Introducción a la Espectroscopia de RMN de carbono 13. Técnicas de registro. Técnicas de desacoplamiento. Correlaciones Desplazamiento-Estructura. Desplazamiento químico, cálculo de desplazamientos químicos mediante las tablas correspondientes. Experimento APT y DEPT, espectros desacoplados.
- 3.7 Espectroscopia bidimensional homo y heteronuclear. HMQC, HMBC, COSY, NOESY.
- 3.8 Problemas de identificación de moléculas orgánicas
- 3.9 RMN de imágenes

**Tema 4. Espectroscopía Ultravioleta visible (UV-Vis).**

- 4.1 Cromóforos, auxocromos y sus interacciones.

**FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO****CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01**VERSION:**  
2**FECHA:**  
2010-14-04**PAGINA:**  
4 de 2

4.2 Olefinas, polienos, benceno y sistemas aromáticos, compuestos carbonílicos insaturados.  
4.3 Ejemplos de espectros y manejo de Tablas de Fieser y Woodward. Problemas.  
4.4 Oligómeros, aplicaciones de la espectroscopía UV-Vis, espectroscopía de derivada y métodos quirópticos.

**Análisis de Créditos**

TEMAS	TRABAJO PRESENCIAL	TRABAJO DIRIGIDO	TRABAJO INDEPENDIENTE
Espectroscopía Infrarroja (IR)	20	4	12
Espectrometría de masas (EM)	20	4	12
Resonancia Magnética Nuclear Protónica y de carbono trece	20	4	12
Espectroscopía Ultravioleta visible (UV-Vis),	20	4	12
<b>TOTAL DE HORAS DEL CURSO</b>	<b>80</b>	<b>16</b>	<b>48</b>
<b>TOTAL CRÉDITOS:</b>	<b>144</b>		

**6. Estrategias Metodológicas**

Se seguirá una metodología mixta basada en el aprendizaje cooperativo, el aprendizaje colaborativo y el autoaprendizaje.

**Trabajo presencial:**

Las actividades presenciales de la asignatura se estructuran en clases expositivas o magistrales de teoría, clases de seminario y tutorías.

Clases teóricas presenciales: estas clases serán expositivas y en ellas se desarrollarán de forma oral los epígrafes que se indican en el programa de la asignatura como clases presenciales, lo que permitirá al alumno obtener una visión global y comprensiva de la misma. Se hará uso del tablero y de presentaciones PowerPoint. Al final del tema se podrán plantear nuevas propuestas que permitan interrelacionar contenidos ya estudiados con los del resto de la asignatura o con otras asignaturas.

Clases de seminario: tendrán como objetivo aplicar los conocimientos adquiridos a un conjunto de cuestiones/ejercicios. Para ello, se proporcionará a los estudiantes una colección de ejercicios. El profesor explicará algunos ejercicios tipo (que se indicarán como tal en el enunciado) y el resto lo resolverán los estudiantes como trabajo personal.

En esta asignatura es fundamental la parte dedicada a los problemas. Una vez que el alumno haya adquirido los conocimientos necesarios, los problemas serán resueltos y expuestos por los alumnos. Para problemas de especial dificultad se formarán grupos de dos o tres alumnos encargados de la resolución de los mismos

**Trabajo dirigido:**

Tutorías presenciales/Actividades dirigidas: se programarán sesiones presenciales de tutorías sobre ejercicios relacionados con el temario de la asignatura. En las primeras sesiones de tutoría el profesor revisará y corregirá, si es el caso, las soluciones propuestas por los alumnos, resolverá las dudas y dificultades que se hayan presentado en la resolución de los ejercicios propuestos y orientará a los



## FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO

**CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01

**VERSION:**  
2

**FECHA:**  
2010-14-04

**PAGINA:**  
5 de 2

alumnos para la solución correcta de los ejercicios que estuvieran mal planteados o resueltos.

### **Trabajo independiente:**

Para que el alumno pueda asimilar los conocimientos expuestos en las clases teóricas debe realizar de manera paralela una labor de estudio personal de la materia, utilizando, cuando sea necesario, el material recomendado de consulta.

El alumno podrá aplicar los conocimientos que va adquiriendo realizando estos trabajos de manera individual. El resultado de este trabajo será entregado al profesor y discutido, comentado y desarrollado en una exposición pública.

El trabajo estará supervisado por el profesor y consistirá en la determinación estructural de compuestos desconocidos por la interpretación de manera conjunta de los datos espectrales proporcionados por las distintas técnicas estudiadas en el curso.

Cada alumno realizará un informe de los resultados que será entregado al profesor y se expondrá oralmente.

### **7. RECURSOS.**

Se hará uso del material normal del aula de clase, sala de informática con disponibilidad de internet, revistas especializadas, libros y guías de trabajo dirigido, medios audiovisuales disponibles en la universidad tales como video beam, modelos moleculares y simulación de espectros de resonancia magnética nuclear.

### **8. EVALUACIÓN**

La evaluación se realiza a través de quices, talleres, seminarios y exámenes acumulativos.

### **9. BIBLIOGRAFÍA ACTUALIZAR**

- Spectrometric identification of organic compounds, Seventh Edition, Robert M. Silverstein., Francis X. Webster., David J. Kiemle. JOHN WILEY &- SONS, LTD. 2005.
- Introduction to spectroscopy. Fourth Edition. Donald L. Pavia., Gary M. Lampman., George S. Kriz., James R. Vyvyan. Brooks/Cole. Cengage Learning. 2009.
- Practical Spectroscopy: The rapid interpretation of spectral data. Fifth Edition **Paul R. Young.** Brooks/Cole. Cengage Learning. 2009.
- Understanding Mass Spectra: A Basic Approach. Second Edition. R. Martin Smith. JOHN WILEY &- SONS, LTD. 2004.
- Structure Elucidation By NMR In Organic Chemistry. **A Practical Guide. Third Edition. Eberhard Breitmaier.** JOHN WILEY &- SONS, LTD. 2002.
- Ultrafast Infrared and Raman Spectroscopy. M. D. Fayer. Marcel Dekker, Inc. 2001.
- Interpretation of Mass Spectra. Fred W. McLafferty., Frantisek Turesek. Fourth Edition. Reverté, 1969.
- Fundamentos de la espectroscopía UV-visible moderna. *Conceptos básicos.* Tony Owen. Agilent Technologies 2000.
- Evolución de los métodos para la determinación estructural de compuestos orgánicos, Juan C.

**FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO****CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01**VERSION:**  
2**FECHA:**  
2010-14-04**PAGINA:**  
6 de 2

Martinez Valderrama, Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ciencias, Departamento de Química sede Bogotá, Junio de 1986.

- Química Analítica Skoog Douglas and West Donald, Cuarta edición, Editorial McGraw- Hill. 1990.
- Química Orgánica, Morrison Robert T. and Boyd Robert N. Addison-Wesley Iberoamericana, 1987.
- Aspectos Fundamentales de la Resonancia Magnética Nuclear, Juan C. Martinez Valderrama, Facultad de Ciencias, Departamento de Química sede-Bogotá, 1976.

**Fuentes Electrónicas**

- [http://wps.prenhall.com/esm\\_bruice\\_organic\\_4/0,7842,742742-,00.html](http://wps.prenhall.com/esm_bruice_organic_4/0,7842,742742-,00.html)
- [http://wps.prenhall.com/esm\\_bruice\\_organic\\_4/0,7842,742742-,00.html](http://wps.prenhall.com/esm_bruice_organic_4/0,7842,742742-,00.html)
- [http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre\\_index.cgi?lang=eng](http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi?lang=eng)

[http://books.google.es/books?id=9DiWLAwNyaUC&printsec=frontcover&dq=structure+determination+of+organic+compounds&source=bl&ots=gamn3k7oHn&sig=3bluPd322FiLTCOU34HGTZBvEaQ&hl=es&ei=kzDoSqCNpTsmwPt8MHMBA&sa=X&oi=book\\_result&ct=result&resnum=2&ved=0CCAQ6AEwAQ#v=onepage&q&f=false](http://books.google.es/books?id=9DiWLAwNyaUC&printsec=frontcover&dq=structure+determination+of+organic+compounds&source=bl&ots=gamn3k7oHn&sig=3bluPd322FiLTCOU34HGTZBvEaQ&hl=es&ei=kzDoSqCNpTsmwPt8MHMBA&sa=X&oi=book_result&ct=result&resnum=2&ved=0CCAQ6AEwAQ#v=onepage&q&f=false)