



<b>Nombre de la asignatura</b>								<b>ELUCIDACIÓN DE ESTRUCTURAS MOLECULARES</b>	<b>Clave de la asignatura</b> C0101062	
<b>Área de formación</b>	<b>Docencia frente a grupo según SATCA</b>				<b>Trabajo de Campo Supervisado según SATCA</b>				<b>Carácter de la asignatura</b>	
	HCS	HP	TH	C	HTCS	TH	C	TC	(X) Obligatoria	() Optativa
Integral Profesional	2	2	4	4					(X) Obligatoria	() Optativa

<b>SERIACIÓN</b>										
<b>Explícita</b> No						<b>Implícita</b> Si				
<b>Asignaturas antecedentes</b>			<b>Asignaturas subsecuentes</b>			<b>Conocimientos previos</b>				
						Reconocimiento de los grupos funcionales orgánicos más importantes, escritura de estructuras moleculares, composición del espectro electromagnético y bases sobre espectroscopía.				



### **PROPÓSITO DE LA ASIGNATURA**

Elucidar la estructura de compuestos químicos a partir de la interpretación de espectros de infrarrojo, de resonancia magnética nuclear y de masas para así lograr la elucidación estructural completa.

### **COMPETENCIAS A DESARROLLAR**

<b>Genéricas</b>	<b>Específicas</b>
Resolución de Problemas	Realizar y comprende análisis químicos cualitativos y cuantitativos de
Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica	productos orgánicos e inorgánicos para determinar la estructura,
Trabajo en equipo	composición y funcionalidad siguiendo las normas nacionales e internacionales vigentes



UNIDAD No. 1	Espectroscopía de Infrarrojo	Horas estimadas para cada unidad
16		
<b>CONTENIDOS</b>		
<b>Conceptuales</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>1.1. El espectro infrarrojo (IR).</li> <li>1.2. Energías vibracionales.</li> <li>1.3. Tablas de frecuencias características.</li> <li>1.4. Reglas de selección, intensidad y forma de las bandas.</li> <li>1.5. Manejo de muestras y técnicas experimentales.</li> <li>1.6. Absorciones en IR de grupos funcionales comunes.</li> <li>1.7. Aplicaciones.</li> <li>1.8. Interpretación de espectros de IR.</li> </ul>	<b>Aprendizaje esperado</b> Comprende el fenómeno de absorción de infrarrojo en moléculas orgánicas y analiza e interpreta espectros de infrarrojo en la elucidación estructural de compuestos orgánicos.	<b>Evidencias de aprendizaje</b> Resolución de ejercicios de espectroscopía de IR. Resolución de casos de espectroscopía de IR. Tabla de absorciones.



UNIDAD No. 2	Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear de Hidrógeno (RMN <sup>1</sup> H)	Horas estimadas para cada unidad
		18
<b>CONTENIDOS</b>		
Conceptuales	Aprendizaje esperado	Evidencias de aprendizaje
2.1. Principios fundamentales. 2.2. Propiedades magnéticas de los núcleos. Momento magnético y espín nuclear. Interacción de los núcleos con campos magnéticos. Fenómeno de resonancia. 2.3. Preparación de muestras, disolventes deuterados, señales de referencia. 2.4. Instrumentación analítica. 2.5. Apantallamiento nuclear. Efecto inductivo, mesómero y anisotrópico. 2.6. Estructura de un espectro de RMN <sup>1</sup> H: desplazamiento químico, multiplicidad, integración y constantes de acoplamiento.	Comprende el fenómeno de resonancia magnética nuclear en moléculas orgánicas. Analiza e interpreta espectros de resonancia magnética nuclear de hidrógeno en la elucidación estructural de compuestos orgánicos.	Resolución de ejercicios de espectroscopía de RMN <sup>1</sup> H.  Resolución de casos de espectroscopía de RMN <sup>1</sup> H.



UNIDAD No. 3	Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear de Carbono 13 (RMN <sup>13</sup> C) y experimentos bidimensionales	Horas estimadas para cada unidad
		18
<b>CONTENIDOS</b>		
Conceptuales	Aprendizaje esperado	Evidencias de aprendizaje
3.1. Introducción. 3.2. Desplazamiento químico, cálculo de desplazamientos químicos mediante las tablas correspondientes. 3.3. Experimentos APT, DEPT, y espectros desacoplados. 3.4. Interpretación de espectros. 3.5. Técnicas bidimensionales (2D): - experimentos COSY, HSQC, HMBC, e INADEQUATE.	Comprende los conceptos asociados a resonancia magnética nuclear de carbono 13 y experimentos bidimensionales. Analiza e interpreta espectros de resonancia magnética nuclear de carbono 13 y experimentos bidimensionales en la elucidación estructural de compuestos orgánicos.	Resolución de ejercicios de espectroscopía de RMN <sup>13</sup> C y 2D.  Resolución de casos de espectroscopía de RMN <sup>13</sup> C y 2D.



<b>UNIDAD No. 4</b>	<b>Espectrometría de Masas</b>	<b>Horas estimadas para cada unidad</b>
		12
<b>CONTENIDOS</b>		
<b>Conceptuales</b>	<b>Aprendizaje esperado</b>	<b>Evidencias de aprendizaje</b>
4.1. Principios básicos de espectrometría de masas. 4.2. Instrumentación analítica. 4.3. Métodos de formación, aceleración y registro de iones, fragmentación. 4.4. Ión molecular, fragmentos iónicos, iones metaestables. 4.5. Analizadores básicos. 4.6. Características de la muestra. 4.7. Patrones de fragmentación. 4.8. Métodos de ionización de compuestos orgánicos. 4.9. Sistemas acoplados a espectrometría de masas. 4.10. Interpretación de los patrones de fragmentación.	Comprende la espectrometría de masas y los conceptos asociados a ella. Analiza e interpreta espectros de masas y los patrones de fragmentación en la elucidación estructural de compuestos orgánicos.	Resolución de ejercicios de espectrometría de masas.  Resolución de casos de espectrometría de masas.



<b>Contenidos procedimentales</b>	<b>Contenidos actitudinales</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Elucidar la estructura de moléculas orgánicas mediante la interpretación de los espectros de infrarrojo, resonancia magnética nuclear y la espectrometría de masas.</li> <li>▪ Predecir señales esperadas en los espectros de moléculas orgánicas analizadas.</li> <li>▪ Sugerir cual es el experimento mas idóneo para la caracterización de compuestos o monitoreo de reacciones químicas.</li> <li>▪ Redactar de manera correcta la información espectroscópica de los espectros, de acuerdo a reglas internacionales establecidas.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Honestidad en la interpretación de información espectroscópica.</li> <li>▪ Trabajo en equipo.</li> <li>▪ Respeto y tolerancia a las ideas de los compañeros.</li> <li>▪ Compromiso con el trabajo asignado.</li> <li>▪ Capacidad critica de análisis.</li> </ul>

<b>Metodología para la construcción del conocimiento</b>	
<b>Actividades de aprendizaje con el docente</b>	<b>Actividades de aprendizaje autónomo</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Exposición audiovisual de los contenidos temáticos de las unidades.</li> <li>▪ Lectura de artículos relacionados con los temas de las unidades.</li> <li>▪ Dirección de foro de discusión en la resolución de casos y ejercicios grupales.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Resolución de casos de elucidación estructural de moléculas orgánicas a partir de información espectroscópica.</li> <li>▪ Búsqueda de información científica del área.</li> <li>▪ Familiarización de términos científicos en el idioma inglés.</li> </ul>



<b>Evidencias de desempeño</b>		
<b>Acreditación</b>	<b>Evaluación</b>	<b>Calificación</b>
Conforme al reglamento escolar vigente	El curso se evaluará al término de cada unidad	15% Colección de ejercicios de IR 15% Colección de ejercicios de RMN <sup>1</sup> H. 15% Colección de ejercicios de RMN <sup>13</sup> C y 2D. 15% Colección de ejercicios de espectrometría de masas 5% Colección de casos de IR 5% Colección de casos de RMN <sup>1</sup> H. 5% Colección de casos de RMN <sup>13</sup> C y 2D. 5% Colección de casos de espectrometría de masas 20% Tabla de absorción de IR



### FUENTES DE APOYO Y CONSULTA

#### BÁSICA

- Field, L. D., Li, H. L., & Magill, A. M. (2015). *Organic Structures from 2D NMR Spectra*. Chichester, UK: Wiley.  
Field, L. D., Sternhell, S., & Kalman, J. R. (2012). *Organic Structures from Spectra* (5 ed.). Chichester, UK: Wiley.  
Hesse, M., Meier, H., Zeeh, B., Fernández, A. H., & Alvarez, R. M. (1997). *Métodos espectroscópicos en química orgánica*. Madrid, España: Síntesis.  
Preisch, E., Bühlmann, P., Affolter, C., Herrera, A., & Martínez, R. (2002). *Determinación estructural de compuestos orgánicos*. Barcelona, España: Masson, S.A.  
Silverstein, R. M., Webster, F. X., & Kiemle, D. J. (2005). *Spectrometric Identification of Organic Compounds* (7 ed.). Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons Inc.  
Simpson, J. H. (2008). *Organic Structure Determination Using 2-D NMR Spectroscopy: A Problem-based Approach*. Canada: Academic Press/Elsevier.

#### COMPLEMENTARIA

- Chang, R. (2014). *Fisicoquímica* (3 ed.). México: McGraw Hill  
de Hoffmann, E., & Stroobant, V. (2013). *Mass Spectrometry: Principles and Applications*. Chichester, UK: Wiley.  
Jacobsen, N. E. (2016). *NMR Data Interpretation Explained: Understanding 1D and 2D NMR Spectra of Organic Compounds and Natural Products*. Wiley.  
McMurry, J. (2012). *Química Orgánica*. México: Cengage Learning.  
Nakanishi, K., & Solomon, P. H. (1977). *Infrared Absorption Spectroscopy*. Emerson-Adams Press.

#### RESPONSABLE DEL DISEÑO

Elaborado por	Luis Fernando Roa de la Fuente, Nancy Romero Ceronio, Carlos Ernesto Lobato García, Cuauhtémoc Alvarado Sánchez, Miguel Angel Vilchis Reyes, Ever Arquímedes Blé González
Fecha actualización	enero de 2017



### Nomenclatura

HCS- Horas Clase a la semana.

HPS- Horas Prácticas a la semana (laboratorio, seminarios o talleres).

HTCS-Hora de Trabajo de Campo Supervisado a la semana (Servicio Social, Práctica Profesional, internado, estancias, ayudantías).

TH- Total de Horas.

C- Créditos.

TC-Total de créditos.