

UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO  
División de Ciencias Naturales y Exactas  
Departamento de Química

**Nombre:** Química Analítica IV.

**Clave:** NELI04052

**Prerrequisitos:** NELI04049 (1)

**Horas a la semana:** 4

**Créditos:** 8

**OBJETIVO:** Al finalizar el curso, el alumno será capaz de elucidar estructuras de compuestos orgánicos en base a los espectros obtenidos en las Técnicas de Espectroscopía Ultravioleta-Visible (UV-VIS), Infrarroja por Transformada de Fourier (FTIR), Resonancia Magnético Nuclear de Hidrógeno (RMN) y Espectrometría de Masas.

**PROGRAMA:**

**0.0** Introducción a la Espectroscopía.

**1.0.0 ESPECTROSCOPIA ULTRAVIOLETA.**

1.0.1 Introducción.

1.1.0 Clasificación de cromóforos.

1.2.0 Reglas de Woodward-Fieser para sistemas de Dienos.

1.2.1 Cálculo de  $\lambda_{\text{max}}$  ( $\lambda_{\text{max}}$ ) de absorción en dienos y polienos.

1.3.0 Reglas para el cálculo de  $\lambda_{\text{max}}$  de absorción en enonas alfa-beta insaturadas.

1.4.0 Reglas para el cálculo de  $\lambda_{\text{max}}$  de absorción en ésteres, anhídridos y ácidos carboxílicos alfa-beta insaturados.

1.5.0 Estudio de sistemas aromáticos.

1.5.1 (a) Monosustituidos.

1.5.2 (b) Disustituidos.

1.5.3 (c) Sistema R-Ar-CO-Z

CADA SECCION SE COMPLEMENTA CON EJERCICIOS.

**2.00 ESPECTROSCOPIA INFRARROJA.**

2.1.0 División del espectro infrarrojo.

2.1.1 Clasificación en regiones de absorción por funciones.

2.2.0 Enlace O-H, en alcoholes, fenoles, ácidos carboxílicos, etc.

2.2.1 OH libre, OH asociado.

2.2.2 Enlace C-O en alcoholes, éteres, ésteres, etc.

2.3.0 Enlace N-H libre y asociado en aminas, amidas, lactamas, etc.

2.4.0 Enlace C-H, región 3 300  $\text{cm}^{-1}$  – 2 720  $\text{cm}^{-1}$

2.4.1 Grupos funcionales, en compuestos insaturados, presentes en la región de 2 260  $\text{cm}^{-1}$  – 2 100  $\text{cm}^{-1}$

2.5.0 Estudio del grupo carbonilo, en amidas, aldehídos, cetonas, ácidos carboxílicos, ésteres, anhídridos, etc.

2.5.1 Diagrama de flujo para la identificación del grupo.

2.6.0 Región de alargamiento para el doble enlace C=C, C=N, N=N.

2.7.0 Región de deformación del enlace C-H, en alifáticos y aromáticos.

CADA SECCION SE COMPLEMENTA CON EJERCICIOS.

**3.00 RESONANCIA MAGNETICO NUCLEAR DE HIDRÓGENO.**

3.0.1 Introducción. Transiciones energéticas. Relación entre energía, frecuencia de precesión, campo magnético y frecuencia de oscilador. Condiciones necesarias para producir la resonancia, procesos de relajación.

3.1.0 Factores que determinan la protección nuclear y su efecto sobre el desplazamiento químico.

3.2.0 Acoplamiento espín - espín.

3.3.0 Patrones de fraccionamiento producidos por interacciones espín - espín.

3.4.0 Anisotropía magnética.

3.5.0 Efectos de la anisotropía.

3.6.0 Asociación de protones y su efecto.

3.7.0 Reacciones de intercambio de protones y el cálculo del desplazamiento químico.

3.8.0 Uso del desplazamiento químico y la constante de acoplamiento en la determinación de características estructurales de moléculas.

3.9.0 Clasificación de sistemas de acoplamiento.

3.9.1 Sistemas de dos protones.

3.9.1.1 Diferenciación de sistemas AX y AB.

3.9.1.2 Estimación de valores de desplazamiento químico y constantes de acoplamiento para sistemas AB.

3.9.2 Sistemas de tres protones.

3.9.3 Sistemas de cuatro protones.

3.9.4 Sistemas de mas de cuatro protones.

CADA SECCION SE COMPLEMENTA CON EJERCICIOS.

#### 4.00 ESPECTROSCOPIA DE MASAS (EM).

- 4.1.0 Introducción, operación de un Espectrómetro de masas.
  - 4.2.0 Clasificación de las señales que se obtienen en Espectrómetro de masas.
  - 4.3.0 Procesos de fisión que se observan en Espectrometría de masas.
  - 4.4.0 Reglas de formación de fragmentos y transposiciones en cetonas, aminas, ácidos carboxílicos, derivados halogenados, sistemas aromáticos y sus señales más importantes.
- CADA SECCION SE COMPLEMENTA CON EJERCICIOS.

#### 5.0.0 APLICACIÓN DE LAS CUATRO TÉCNICAS PARA LA ELUCIDACIÓN DE ESTRUCTURAS DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS.

##### METODOLOGIA:

- a) Exposición magistral.
- b) Exposición por alumnos.

##### EVALUACION:

En cada sección se realizarán problemas en los que se observará el avance de comprensión del alumno. Al final de cada sección, se evaluará mediante la resolución de un problema. El examen final consistirá de la identificación de dos compuestos sobre la base de los espectros de las cuatro técnicas involucradas en el curso.

##### BIBLIOGRAFIA RECOMENDADA:

1. Silverstein R.M. Webster X. Francis, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 6a. Ed. Wiley, U.S.A. 1998. **547.30858 SIL**
2. Silverstein R.M., Bassler G. Clayton, Morrill Terence C. *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, John 5a. Ed, Wiley & Son, U.S.A. 1991., **547.3085 SIL**
3. Socrates George, *Infrared Characteristic Group Frecuencias*, Second Ed. Wiley, England, 1998. **C 543.08583 SOC 1994**
4. DYER JOHN R., *Aplicaciones de Espectroscopía de Absorción en Compuestos Orgánicos*, Prentice/Hall Internacional, México, 1973. **547.346 DYE**
5. PARIKH V. M., *Absorption Spectroscopy of Organic Molecules*, Addison-Wesley, United States of America, 1974. **547.3085 PAR**
6. PRETSCH E., CLERC T., SEIBL J., SIMON W., *Tablas de Elucidación Estructural de Compuestos Orgánicos por Métodos Espectroscópicos*, Alhambra, España, 1976. **547.34680212**
7. CROSS A. D., ALAN JONE R., *Introduction to Practical Infra-red Spectroscopy*, London Butterworths, Great Britain, 1969. **547.3463 CRO.**
8. Nathan Joseph Pedro, Díaz Torres Eduardo, *Elementos de Resonancia Magnética nuclear de Hidrógeno*, Iberoamericana, México, 1993. **543.0877 JOS**
9. NATHAN PEDRO JOSEPH, *Elementos de Resonancia Magnético Nuclear de Hidrógeno*, 2 ed., E.U.A., OEA, Sria General, 1982. **543.0877 JOS**
10. WILLARD H. HOBART, MERRITT JR. LYNNE L., DEAN JOHN, SETTLE JR. FRANK A., *Métodos Instrumentales de Análisis*, Séptima Edición, Grupo Editorial Iberoamérica, México, 1992. **543.08 WIL.**
11. SKOOG A. DOUGLAS, LEARY J. JAMES, *Análisis Instrumental*, Cuarta Edición, McGraw-Hill, España, 1992. **543.08 SKO.**
12. NAKAMOTO KAZUO, *Infrared Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*, Second Edition, Wiley-Interscience, United States of America, 1970. **543.0858 NAK.**
13. AMEZQUITA L. FERNANDO, *Fundamentos de la Espectroscopía Aplicada a la Instrumentación Química*, Cuarta Edición, Segunda Reimpresión, Universidad De Guanajuato, México, 2007 (ISBN 978-968-864-363-1)
14. SIMON W, CLERC T., *Elucidación Estructural de Compuestos Orgánicos por Métodos Espectroscópicos*, Primera Edición, Ed. Alhambra., Madrid, 1970. **547.3085 SIM.**
15. Jeremy K., Sanders and. Hunter Brian K, *Modern NMR Spectroscopy*, Oxford University Press, New York, 1997, 2a. Ed. **543.0877 SAN**
16. Roeges N. P.G, *A Guide to the Complete Interpretation of Infrared Spectra of Organic Structures*, John Wiley & Sons Ltd., Winchester, England, 1994. **547.308583.**
17. Workman, Jerry, Springsteen Art. W. *Applied Spectroscopy: A compact Reference for Practitioners*, Academic Press, U.S.A., 1997, **621.361 APP.**
18. Lambert B. Joseph, Shurvell Herbert F., Cooks R. Graham, *Introduction to organic Spectroscopy*, Macmillan Publishing, New York, 1987. **547.30858 INT.**
19. Field L.D, Sternhell S. and Kalman J.R., *Organic Structures from Spectra*, 2a. ed. John Wiley & Sons, Great Britain 2000. **547.30858 FIE.**
20. Pretsch E., Bühlmann, Afholter C., *Structure Determination of Organic Compounds Tables of Spectral Data*, Springer Germany 2000. **547.34680212 PRE.**
21. Macomber Roger S., *A complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy*, John Wiley & Sons, U.S.A: 1997. **543.087 MAC**
22. Günzler Helmut, Gremlich Hans- Ulrich, *IR Spectroscopy an Introduction*, Wiley-VCH, Germany, 2002. **543.08583 GUN.**
23. Stuard Barbara, George Bill and M. P., *Modern Infrared Spectroscopy*, John Wiley Sons, New York, 1998. **543.08583 STU.**
24. Mantsch Henry H., Chapman Dennis, *Infrared Spectroscopy of Biomolecules*, John Wiley Ed., **574.1928.**
25. Colthrup N. B, Daly L. H., and Wiberley S. E., *Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy*, Academic Press, U.S.A. 1990. **547.308583 COL.**
26. Harwood Laurence M., Claridge Timothy D., *Introduction to Organic Spectroscopy*, Oxford University, Great Britain, 1999. **547.30858 HAR.**
27. Koenig J. L, *Spectroscopy of Polymers*, American Chemical Society, Washington, D. C, 1992. **547.7046 KOE.**
28. Nakamoto Kazuo, *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Part A and B*, , Wiley-Interscience, fifth Edition, United States of America, 1997. **543.08583.**
29. <http://www.dzne.ugto.mx/index.php/material-didactico>