



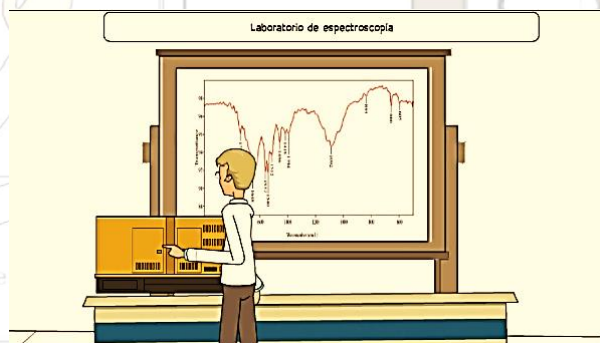
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Estudios Superiores Zaragoza



CÓMICS COMO MEDIO DE APRENDIZAJE DE LA ESPECTROSCOPIA EN EL INFRARROJO

PROYECTO PAPIME PE 206115

Laboratorio de Espectroscopia, L-324, CII.
Carrera de Q.F.B.



Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Estudios Superiores Zaragoza

Responsable del Proyecto:

Dra. A. Lourdes Castillo Granada

Alumnos de Servicio Social, Carrera de QFB:

Óscar Saúl Ríos Calderón

Rodrigo Soto Páez

Profesores Colaboradores:

Carrera de Q.F.B.

Dra. Patricia Parra Cervantes

Q.F.B. Teresa Benítez Escamilla

M. en DIIE. Francisca Robles López

Dr. Ramón Soto Vázquez

Carrera de Biología:

Bióloga Maricela Arteaga Mejía

M. en C. Dora Alicia Longares Méndez

Bióloga Irene Castillo Chaires

Carrera de I.Q.

I.Q. Arturo E. Méndez Gutiérrez

UNAM, FES Zaragoza, noviembre de 2017

Derechos reservados, Proyecto PAPIME PE206115. UNAM.

Queda prohibido la reproducción total o parcial de la información e ilustraciones de la presente obra ya sea en formato digital, mecánico y fotocopiado sin el consentimiento previo y por escrito de los autores.

Contenido

Introducción

Capítulo I

¿Qué es la espectroscopia infrarroja?.....1

Capítulo II

La radiación infrarroja y las moléculas orgánicas.....4

Capítulo III

Interpretación de espectros en el
infrarrojo.....8

Referencias.....12

CÓMICS COMO MEDIO DE APRENDIZAJE DE LA ESPECTROSCOPIA EN EL INFRARROJO. PAPIME PE206115.

La espectroscopia en el infrarrojo medio, en los tiempos actuales adquiere una importancia relevante en los procesos que involucren la identificación de los grupos funcionales que constituyen las moléculas orgánicas. Sus áreas de aplicación son diversas entre las que destacan, la identificación de materias primas y principios activos en la industria farmacéutica, síntesis orgánica, productos naturales, gases, estudio de formas cristalinas (polimorfos y coocristales), estudios de estabilidad y liberación de fármacos, materia orgánica en suelo, drogas de abuso, identificación de microorganismos, educación en espectroscopia entre otras.

Este material didáctico tiene como objetivo apoyar el aprendizaje de la espectroscopia en el infrarrojo de una forma agradable y divertida para que de manera accesible los estudiantes y profesores del área apliquen esta técnica analítica en su trabajo académico.

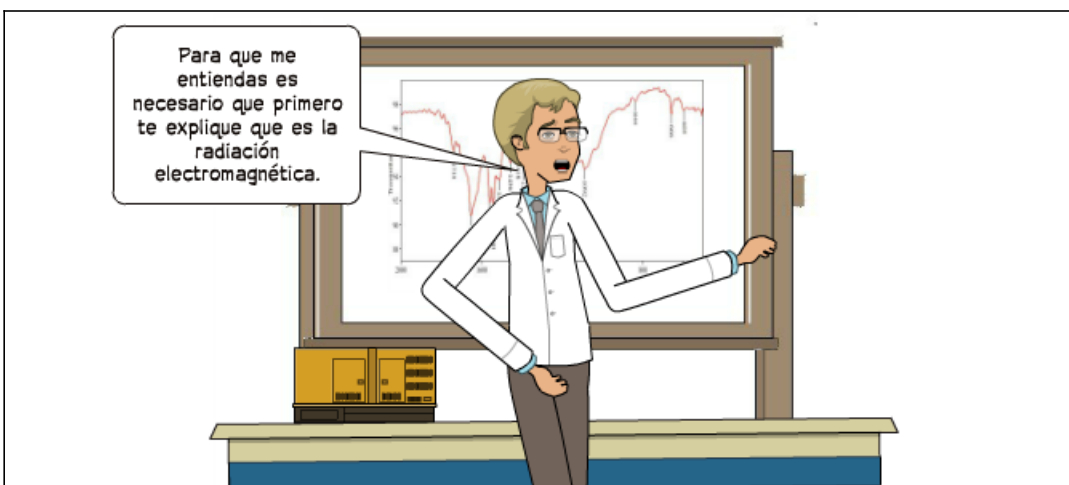
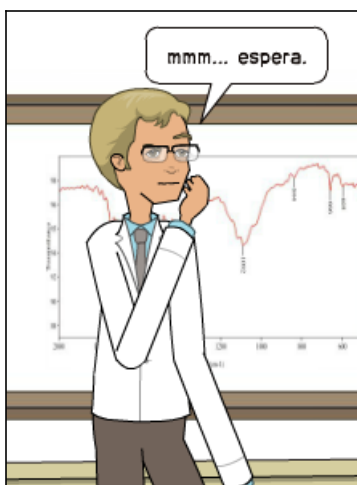
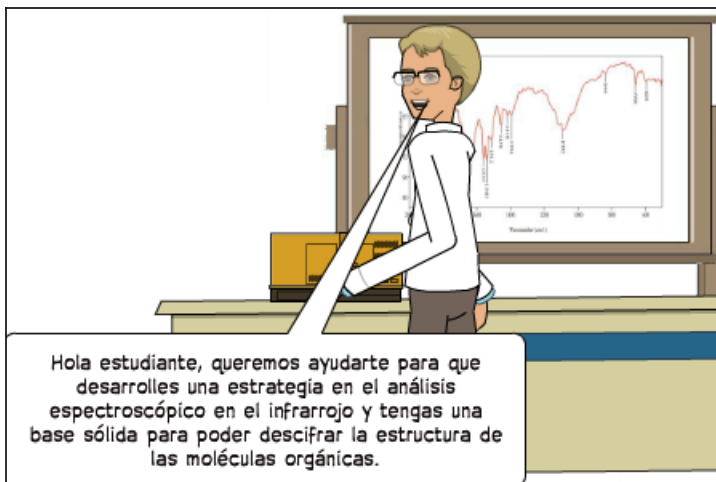
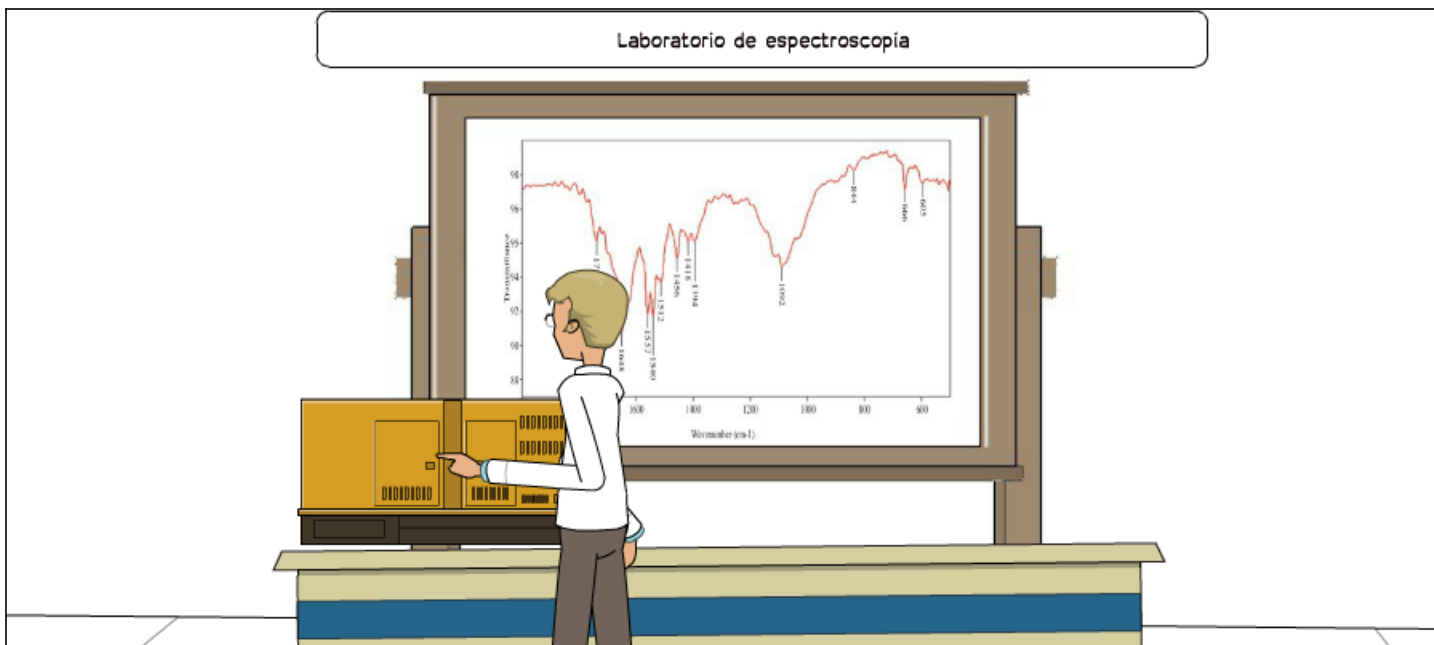
Se incluye de forma concreta el fundamento teórico sobre ¿Qué es la espectroscopia?, la radiación infrarroja y las moléculas orgánicas y los principios básicos que permitan iniciar con la interpretación de un espectro en el infrarrojo.

Es importante aclarar que la información contenida en estos cómics no sustituye la asesoría del profesor o la información adquirida de un libro o una revista científica, sin embargo, es considerada como un apoyo para el fortalecimiento de la búsqueda de información y la adquisición de conocimiento, demostrando que esta puede ser agradable y divertida.

Alumnos de las Carreras de Q.F.B., Biología e I.Q., te invitamos a que nos visites y hagas uso del servicio instrumental en el IR medio, así como de la asesoría para la interpretación de espectros. Te esperamos en el Laboratorio de espectroscopia ubicado en el L-324, Campo II de la FES Zaragoza.

Los autores

I.-¿Qué es la espectroscopia infrarroja?



Es un conjunto de ondas que se transmite a través del espacio y se caracterizan por dos cosas, la longitud de onda y la energía.

Esta energía va desde los rayos gamma hasta las ondas de radio pasando por la región visible cercana a la región infrarroja.

Ahora que ya me has entendido y que puedes visualizarlo...

Tengo que decirte algo mas.

La región infrarroja está dividida en tres.

Estas tres son el infrarrojo cercano, medio y lejano.

Región	Longitud de onda (λ : μm)	Número de onda (ν : cm^{-1})
IR Cercano	0.75- 2.5	14,286-4000
IR Medio	2.5 - 25	4 000 - 400
IR Lejano	25 - 500	400 a 20

Nos enfocaremos especialmente en la región media ya que las partes que constutuyen a las moléculas conocidas como "grupos funcionales" se caracterizan en esta región.

Ahora sí, retomando el tema.

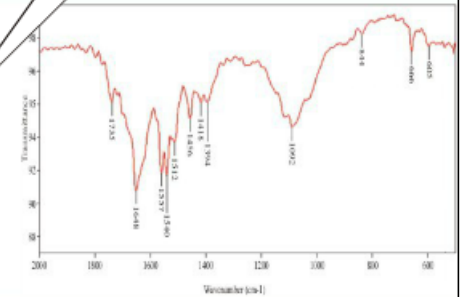
La espectroscopia es una técnica de análisis instrumental que se basa en la radiación tanto absorbida, emitida o reflejada por los constituyentes de la molécula.

Esto se logra al hacer incidir energía del IR medio en muestras líquidas, sólidas y gaseosas.

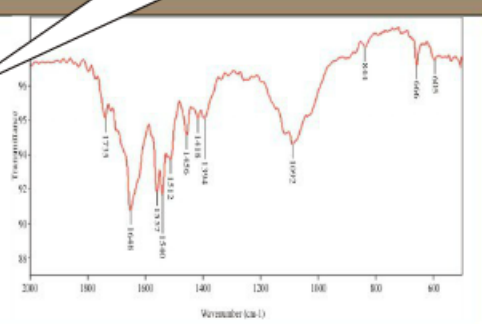


La mayor ventaja de este método es que no destruye la muestra.

La información obtenida genera un espectro.



Este grafico conocido como espectro puede ser utilizado en diversas áreas como agrícola y industria farmacéutica.



Unidades para expresar la posición de las señales

☆ longitud de onda; λ en μm

☆ número de onda; $\tilde{\nu}$ en cm^{-1}

$$\tilde{\nu} = 1/\lambda$$

$\tilde{\nu}$ = inverso de la longitud de onda en cm^{-1} (más empleada)

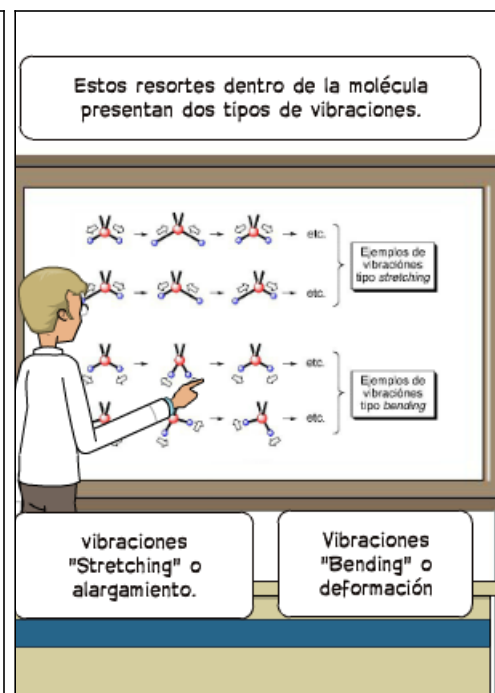
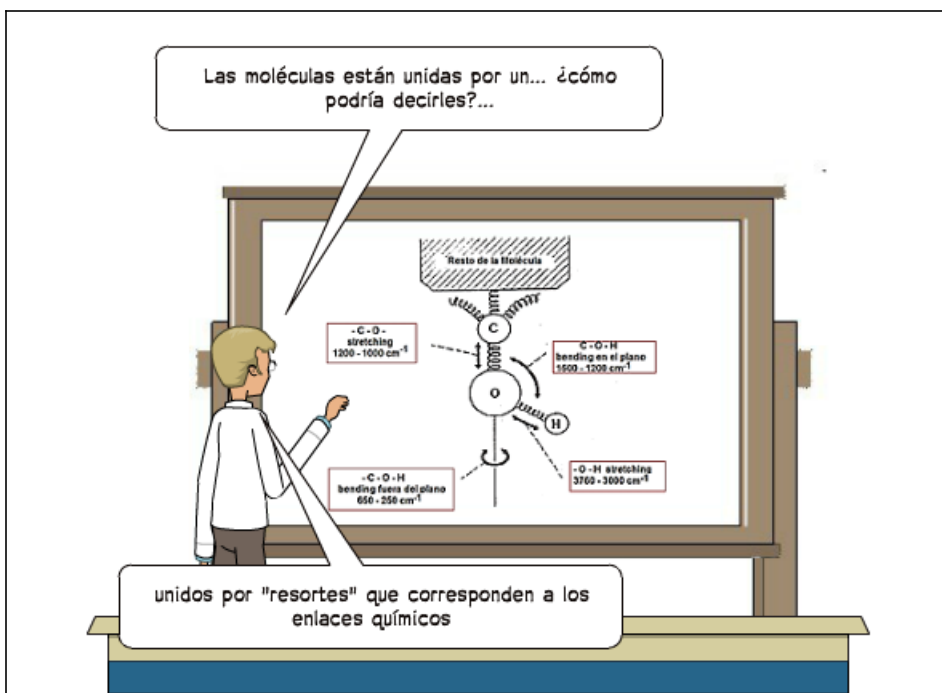
λ = longitud de onda en cm

$$\tilde{\nu} (\text{cm}^{-1}) = \frac{1}{\lambda (\mu\text{m}) \times 10^{-4}}$$

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2.5 \mu\text{m} \times 10^{-4}} = 4000 \text{ cm}^{-1}$$

10^{-4} transformación de μm a cm

II.- La radiación infrarroja y las moléculas orgánicas.



Las vibraciones "Stretching" no alteran el ángulo de enlace.

Las vibraciones "Bending" o de flexión-deformación si alteran el ángulo de enlace.

Los átomos de cualquier molécula tienen enlaces con movimiento vibracional y energía propia.

No se te olvide.

Cuando la energía que se incide alcanza la misma magnitud en los resortes.

Es absorbida.

Además de que debe ir acompañada en un cambio en el momento dipolo de la molécula.

O sea a mayor efecto dipolar su señal será más intensa.

Ahora bien un espectro se ve así.

No. de onda

El cual está construido por dos ejes, el "x" con respecto al número de onda y "y" que es la absorbancia o % de transmitancia según se requiera.

Región fundamental Región de huellas digitales

Para la interpretación se divide el espectro en dos regiones: la fundamental y en las huellas digitales.

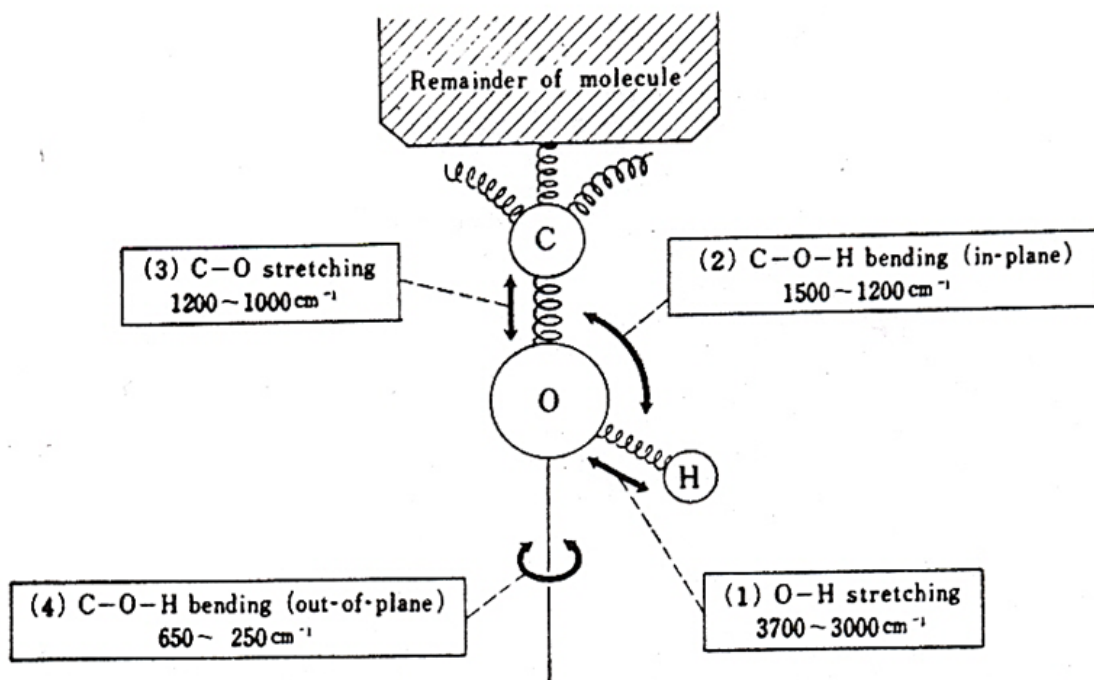
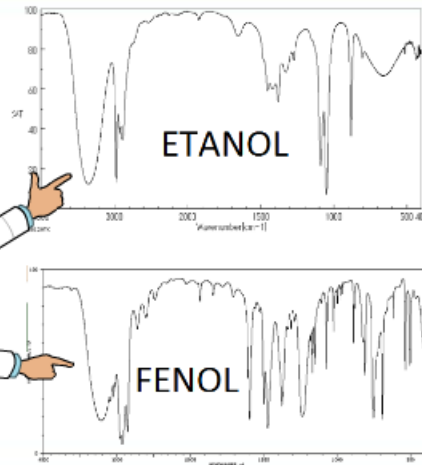
Región fundamental Región de huellas digitales

La interpretación inicia con las señales de la región fundamental y se complementa con las señales de huellas digitales.

Compuestos iguales presentan espectros iguales!!

En otras palabras si analizo ibuprofeno aquí o en china el espectro será el mismo.

Ahora bien, si analizo un fenol o etanol sus espectros no serán los mismos pero sí similares debido a la presencia del grupo "OH".



Vibración para el grupo -O-H

Grupo funcional	Número de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Número de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Número de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Número de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Número de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Número de onda (cm ⁻¹)
δ-Lactonas	1750-1735	S-H	2550-2600	Ciclobutanona	1780-1760	C=N-	1690-1480	-O-H (enlace de H)	3100-3200	-C≡C-	2300-2100
γ-Lactonas	1780-1760	C-F	1400-1000	Ácidos carboxílicos	1725-1700	NO ₂	1650-1500	-O-H (sin enlace de H)	3600	-C≡N	~ 2250
Amidas	1690-1630	C-Cl	780-580	Esteres	1750-1735	S=O	1070-1010	Cetonas	1725-1700	-N=C=O	~ 2270
-COCl	1815-1785	C-Br	800-560	Esteres α,β-insaturados	1750-1715	sulfonas	1350-1300	Aldehídos	1740-1720	-N=C=S	~ 2150
Anhídridos	1850-1740	C-I	600-500					Aldehídos y cetonas α,β-insaturados	1715-1660	C=C=C	~ 1950
Aromáticos	3040-3120; 770-980; 1600-1500	Alcanos	2962-2853					Ciclopentanona	1750-1740	NH	3500-3300
		Alquenos	3040-3120								

Otra forma de verlo es esta.

Esta ordenada de otra forma y con sólo el número de onda y grupo funcional.

Bien ahora dirás, ¿cómo es que se interpreta?

O ¿Cómo se trabaja?

¿Porque no tiene sentido que solo te de los números!

Hagamos algunos ejemplos.

¿Te parece?

Aquí tenemos al 2-pentanol.

CCCC(O)C
 2-Pentanol

Tensión O-H
Banda ancha por puentes de H (3500-3200 cm⁻¹)

Tensión C-O (1100 cm⁻¹)

Recordemos que debemos empezar en la región fundamental.

Tensión O-H
Banda ancha por puentes de H (3500-3200 cm⁻¹)

El rango marcado se encuentra en un número de onda a 3300 cm⁻¹.

Regrésate a los cuadros y ve que grupo funcional se encuentra en este valor.

2-Pentanol

Tensión O-H
Banda ancha por puente de H (3200 cm⁻¹)

Te dije que te regresarás a ver.

Tensión

Bueno, como has notado este valor corresponde al grupo OH.

Tensión O-H
Banda ancha por puente de H (3200 cm⁻¹)

Tensión C-H (2800-3000 cm⁻¹)

Tensión C=O (1700 cm⁻¹)

Tensión C-O (1100 cm⁻¹)

Tensión C-O (1100 cm⁻¹)

Tensión C-H (2800-3000 cm⁻¹)

Para terminar este espectro te diré un pequeño secreto... ¿ves las señales que te estoy indicando?

Tensión O-H (3200 cm⁻¹)

Tensión C-O (1100 cm⁻¹)

Tensión C=O (1700 cm⁻¹)

Ahora esta señal que se encuentra en la región de las huellas digitales tiene un valor de 1100 cm⁻¹ que corresponde al enlace carbono oxígeno, y si no me crees puedes volver a revisar el cuadro.

Hagamos otro ejemplo por si te quedo alguna duda, ¿te parece?, te presento al espectro del fenilacetileno.

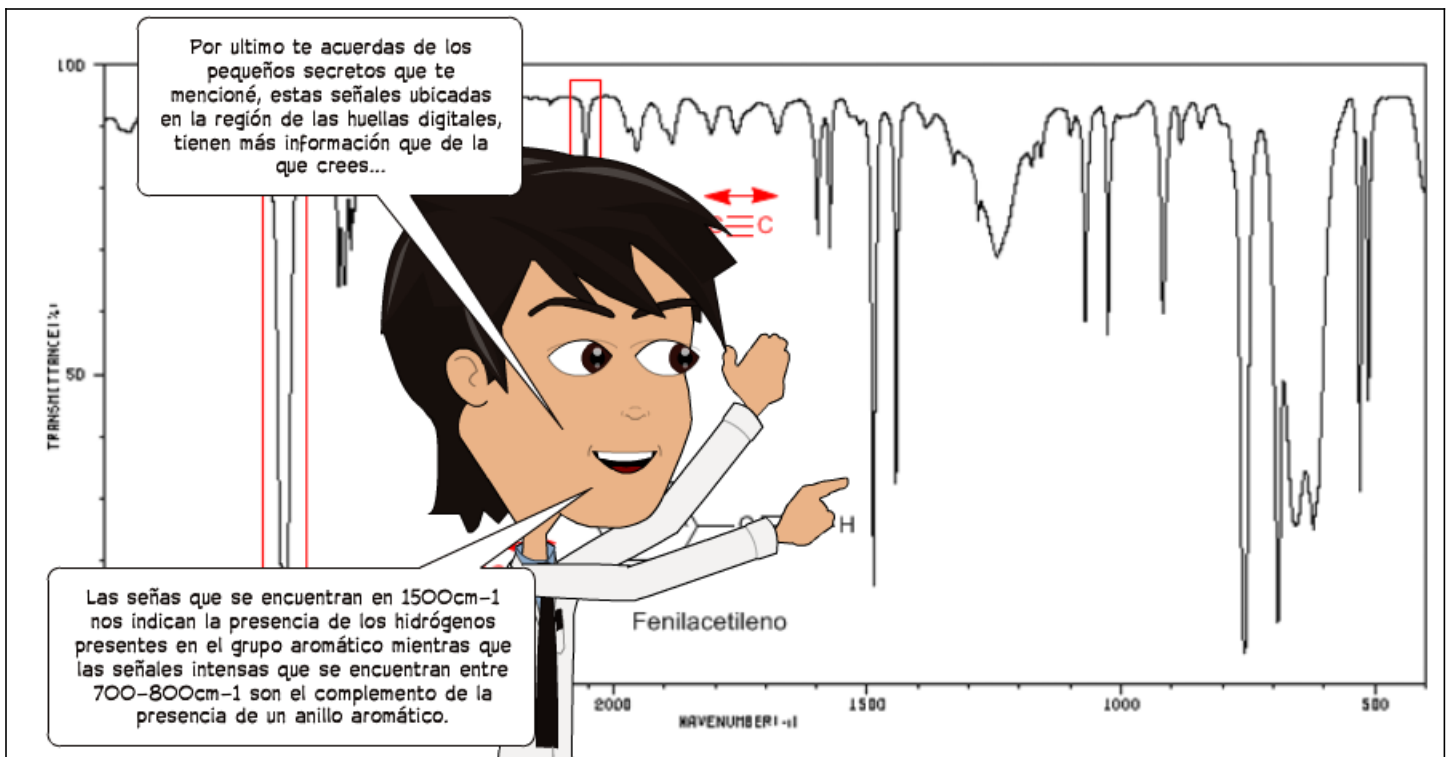
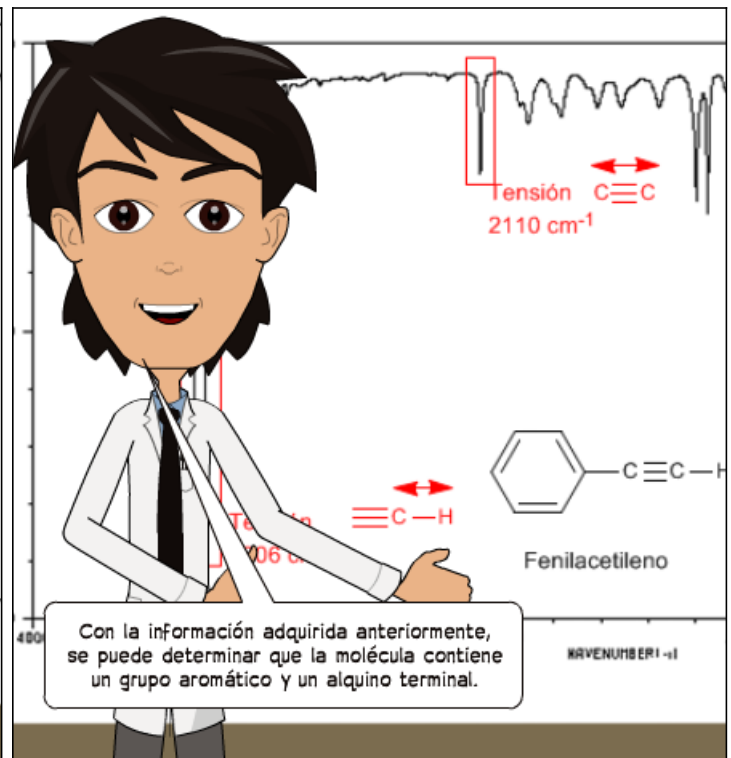
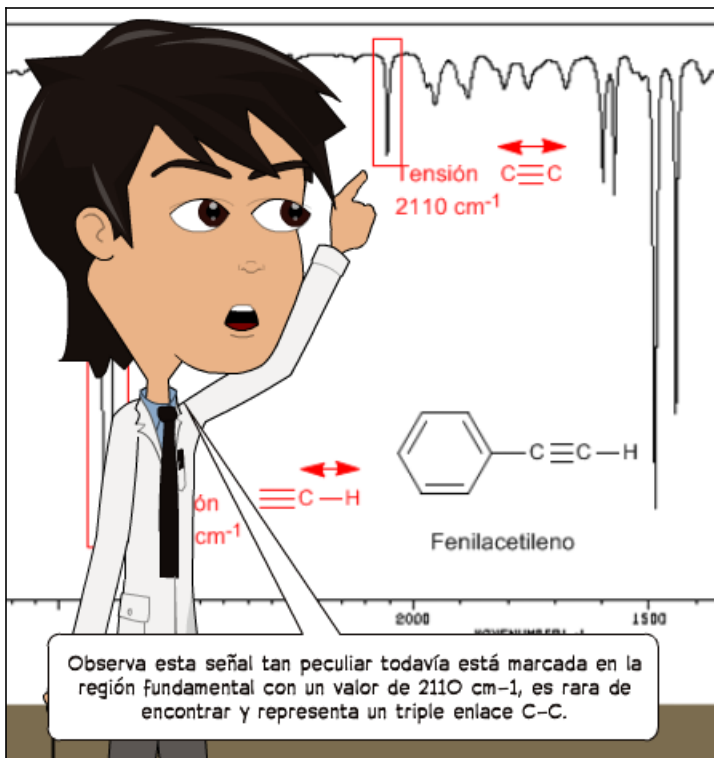
Tensión C≡C (2110 cm⁻¹)

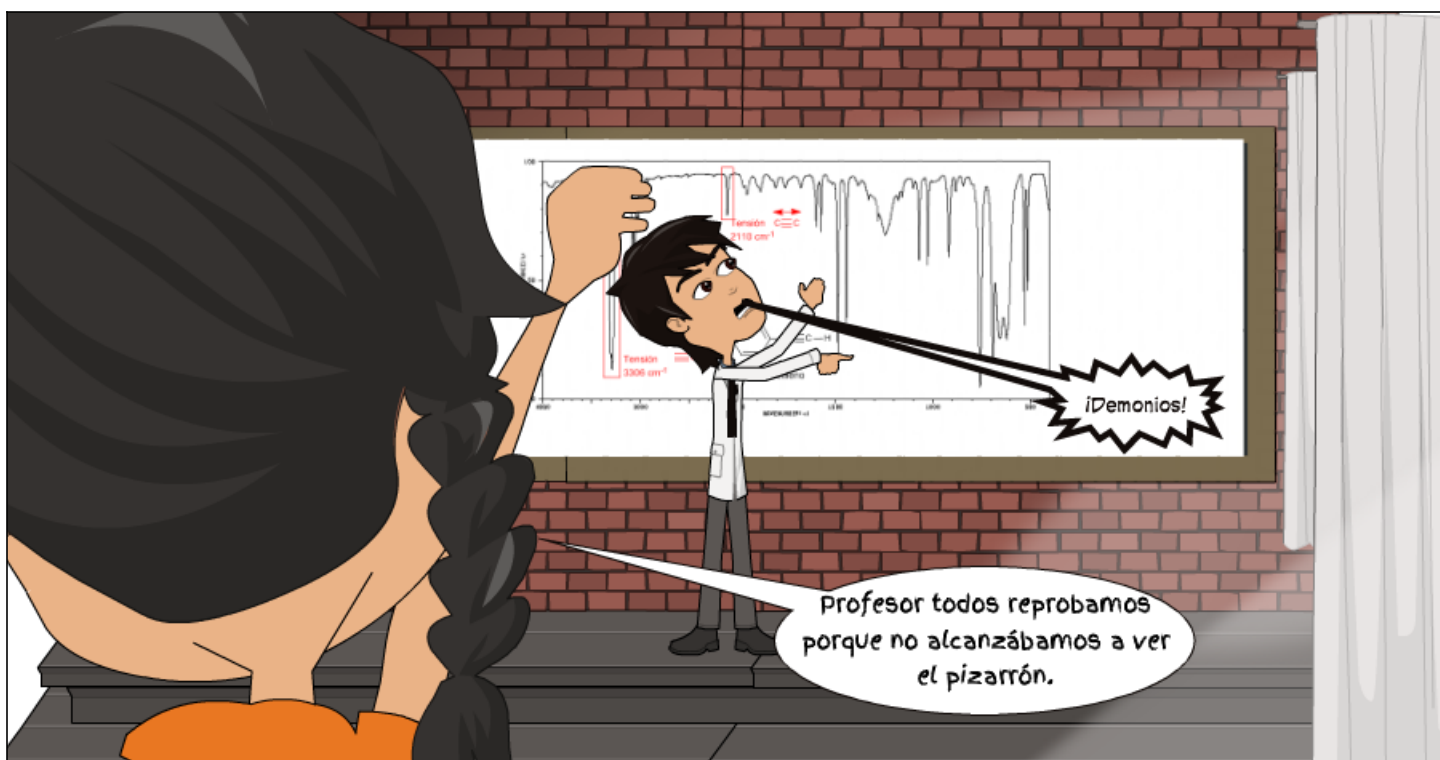
Tensión C≡C-H (3306 cm⁻¹)

Fenilacetileno

c1ccccc1C#C

Empecemos por esta señal bien definida que se encuentra en la región fundamental, su rango está en los 3306 cm⁻¹, vuelve a ver la tabla y encontraras que pertenece al alquino terminal o ¿me equivoco?





Proyecto PAPIME PE206115

Elaborado por:
Estudiantes de Servicio Social de la Carrera de QFB
Óscar Saúl Ríos Calderón
Rodrigo Soto Páez

Asesora

Dra. A. Lourdes Castillo Granada

Propiedad intelectual y derechos reservados por la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, UNAM.
Proyecto PAPIME PE206115. UNAM.

Referencias

1. Melissa A. Kerr and Fei Yan. Incorporating Course-Based Undergraduate Research Experiences into Analytical Chemistry Laboratory Curricula. J. of Chemical Education. 2015.
2. Silverstein R.M., Webster F. X., Kiemle D., Spectroscopy. 6a. Ed., 1998.
3. McMurry J. Química orgánica. ISBN607-978-0-8400-5444-9. Ed. Cengage Learning. 9ª. Ed. 2017.
4. L. G. Wade Jr. Química Orgánica. 7ª. Ed. Pearson. 2014.
5. Winschel GA, Everett RK, Coppola BP, Shultz GV, Lonn S. Using Jigsaw-Style Spectroscopy Problem-Solving To Elucidate Molecular Structure Through Online Cooperative Learning. Journal of Chemical Education. 2015;92(7):1188-93.