



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA



**OBTENCIÓN E INTERPRETACIÓN DE ESPECTROS EN
INFRARROJO MEDIO DE COMPUESTOS CON INTERÉS
FARMACÉUTICO Y SU ORGANIZACIÓN EN UNA BIBLIOTECA
DIGITAL**

T E S I S

PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

QUÍMICO FARMACÉUTICO BIÓLOGO

PRESENTAN:

**RÍOS CALDERÓN ÓSCAR SAÚL
SOTO PÁEZ RODRIGO**

DIRECTORA: DRA. A. LOURDES CASTILLO GRANADA

ASESORA: M. EN A. TERESA BENÍTEZ ESCAMILLA

**PROYECTO PAPIME PE206115
CIUDAD DE MÉXICO SEPTIEMBRE, 2018**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

El presente trabajo se realizó en el laboratorio de espectroscopia L-324 Campus II de la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza. UNAM., con apoyo del proyecto DGAPA-UNAM; PAPIIME PE206115.

Los derechos de este trabajo corresponden a la Universidad Nacional Autónoma de México, para su difusión con fines académicos y de investigación.

Este trabajo fue presentado en el 5° Encuentro con Egresados de QFB celebrado en la FES Zaragoza, el 28 de abril del 2017.

Este trabajo fue presentado en el 13° Congreso de investigación, organizado por la División de Estudios de Posgrado e Investigación de la FES Zaragoza celebrado del 16 al 20 de octubre del 2017.

Agradecimientos Institucionales

A la DGAPA-UNAM, que a través del proyecto PAPIME PE 206115 se contó con la instrumentación y equipamiento moderno para la obtención de los espectros en el infrarrojo que se presentan en este trabajo.

Al Centro de Tecnologías para el Aprendizaje “CETA”, por el apoyo brindado desde el inicio del presente trabajo.

Al Ing. Alexis Raúl Joffre Torres, Asesor en Tecnología y Estadística del CETA, por la asesoría en la integración de la plataforma digital y base de datos.

A la Dra. A. Lourdes Castillo Granada responsable del Laboratorio de Espectroscopia de la FES Zaragoza por el apoyo académico para la obtención e interpretación de los espectros que se presentan.

A la Maestra Teresa Benítez Escamilla, profesora de la Planta de Tecnología Farmacéutica de la FES Zaragoza, por el apoyo brindado al proporcionar algunas de las materias primas.

Al Comité de Sinodales por el apoyo brindado, su disponibilidad de tiempo y sus acertadas opiniones en la revisión y conclusión de esta tesis.

Dedicatorias

A la Universidad Nacional Autónoma de México por el apoyo otorgado para mis estudios de nivel medio y superior.

A la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza y en general a todos sus académicos por el apoyo otorgado desde el inicio de mi formación profesional.

A mis padres Luz María Páez Ramírez y Alejandro Ramon Soto Noriega por todo el inmenso amor y apoyo que me han dado desde el inicio de este largo camino, por todas esas palabras de aliento y por motivarme para seguir trabajando por todo aquello que siempre he anhelado, me faltan las palabras para expresar lo agradecido que estoy con ustedes. Los amo.

A mis hermanos Yair y Alejandro por siempre ser un ejemplo de trabajo, dedicación y constancia. Por todo el apoyo y amor que siempre me han demostrado en especial por ese empuje que necesitaba cuando decidí reiniciar el camino. Gracias, los amo hermanos.

A mi abuelita Gloria¹ y mi tío Rubén¹, ¿a ustedes que les puedo decir?, que expresé todo el amor y el ejemplo que me dieron, por todo el apoyo y cariño que recibí de ustedes.

A todos mis amigos que estuvieron a mi lado e hicieron de cada día de esta travesía momentos únicos y de inigualables recuerdos que atesorare toda la vida.

Atte. Rodrigo Soto Páez

Dedicatorias

A la Universidad Nacional Autónoma de México por abrirme sus puertas desde mis estudios de nivel medio hasta superior.

A la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza y a cada uno de sus docentes por su paciencia, apoyo, consejos otorgado en cada momento de mi formación.

A mis amados padres Claudia Calderón Flores y Óscar Ríos Millán por todo el inmenso amor y apoyo que me han dado desde mis primeros pasos por este largo camino, por todas esas palabras de aliento y por motivarme para seguir trabajando por todo aquello que siempre he anhelado, por hacerme ver siempre lo positivo en lo adverso y buscar ser mejor cada día.

A mis hermanos Erick, Lisset e Ivonne por aguantar mis noches de desvelo, mi mal humor y falta de tiempo para estar con ellos. Por todo el apoyo y amor que siempre me han demostrado. Gracias, los amo hermanos.

A mis abuelos Enrique Calderón[†] y Ofelia Flores, quienes me apoyaron incondicionalmente, tanto afectiva como económicamente y a quienes estaré eternamente agradecido.

A Dulce Madeleine por ser mi apoyo emocional y sentimental prácticamente toda la carrera, por permanecer conmigo en los malos y en los peores momentos y cuando aún al conocerme decidiera seguir a mi lado.

Y a todos mis amigos y compañeros que me acompañaron semestre tras semestre y de quienes aprendí puntos de vista diferentes.

Atte. Óscar Saúl Ríos Calderón

Índice

I.	Introducción.....	10
II.	Marco teórico.....	12
1.	Antecedentes.....	12
2.	Espectroscopia en el infrarrojo (IR).....	14
2.1.	Vibraciones de los enlaces.....	16
2.2.	Ventajas y limitaciones en el análisis de espectroscopia infrarroja.....	17
2.2.1.	Ventajas.....	17
2.2.2.	Limitaciones.....	18
3.	Tipos de muestras y sus principales métodos para su análisis en el IR	19
3.1.	Muestras que se analizan en IR.....	19
3.2.	Métodos de transmisión.....	19
3.2.1.	Gases.....	19
3.2.2.	Líquidos.....	20
3.2.3.	Líquidos y Sólidos.....	20
3.3.	Método de Reflectancia.....	21
3.3.1.	Reflectancia Total Atenuada (ATR).....	21
4.	Tecnología de la información y Biblioteca digital.....	21
4.1.	Tecnologías de la información.....	21
4.2.	Biblioteca digital.....	24
4.3.	Ciclo de vida y etapas de diseño de una biblioteca digital.....	26
4.4.	Etapas de diseño de una biblioteca digital.....	26
4.4.1.	Etapas de diseño conceptual.....	26
4.4.2.	Etapas de diseño lógico.....	27
4.4.3.	Etapas de diseño físico.....	27
4.5.	Características de una biblioteca digital.....	27
4.5.1.	Usuarios.....	27
4.5.2.	Administrador.....	27
4.5.3.	Seguridad.....	28
4.5.4.	Opciones de búsqueda.....	29
5.	Bibliotecas digitales y el espectro IR.....	29
5.1.	Comienzo de la relación biblioteca – espectro.....	29
5.2.	Características de una biblioteca digital en el espectro IR.....	31
III.	Planteamiento del problema.....	34
IV.	Hipótesis.....	36
V.	Objetivos.....	37
VI.	Material	38
1.	Equipos, Instrumentos y materiales.....	38
2.	Herramientas digitales.....	38
3.	Compuestos orgánicos analizados.....	38
VII.	Método.....	41
1.	Obtención del espectro IR.....	41
2.	Interpretación de espectros IR.....	47
2.1.	Indicaciones generales de la interpretación de un espectro en el infrarrojo.....	48

3.	Análisis y diseño de la biblioteca digital.....	49
3.1.	Modelo de relación.....	49
3.2.	Diccionario de datos.....	50
VIII.	Resultados.....	52
IX.	Discusión.....	59
X.	Conclusiones.....	64
XI.	Perspectivas.....	65
XII.	Referencias.....	66
	ANEXO A Tablas de correlación.....	72
	ANEXO B Catálogo de espectros.....	78
	ANEXO C. Glosario.....	80

Índice de Figuras.

Figura 1.	Instrumento “Espectrómetro FT-IR Spectrum two Perkin Elmer”.....	43
Figura 2.	Pantalla inicial de configuración instrumental.....	43
Figura 3.	Limpieza del cristal de ATR con mezcla agua : etanol (70:30). ..	44
Figura 4.	Lectura de espectro de absorción de fondo.....	44
Figura 5.	Colocación de muestra (aproximadamente 10mg) sobre el cristal del dispositivo ATR.....	45
Figura 6.	Aplicación de presión sobre la muestra.....	45
Figura 7.	Adquisición del espectro de la muestra con una resolución de 0.5 cm^{-1} y lectura de 4 escanes.....	46
Figura 8.	Ampliación de la región de huellas digitales ($2000 \text{ a } 450 \text{ cm}^{-1}$).....	46
Figura 9.	Corrección de línea de base.....	47
Figura 10.	Portada de inicio de la biblioteca digital.....	52
Figura 11.	Cuadro de búsqueda con sugerencias de la biblioteca digital ..	53
Figura 12.	Pantalla de resultados de búsqueda de la biblioteca digital... ..	53
Figura 13.	Visualización de espectro con interpretación en biblioteca digital.....	54
Figura 14.	Frecuencia de consultas de (diciembre 2017 a mayo 2018)... ..	55
Figura 15.	Países de origen de consultores.....	56
Figura 16.	Espectro de ácido acetil salicílico con señales.....	62

Índice de Cuadros.

Cuadro 1. División de la región infrarroja del espectro electromagnético.....	14
Cuadro 2. Número de consultas por mes.....	56
Cuadro 3. Hipotesis nulas y alternas para desviación estandar y medias.....	57
Cuadro 4. Número de visitas por periodos, periodo 1 (Diciembre, Enero, Febrero) y periodo 2 (Marzo,Abril,Mayo).....	57
Cuadro 5. Tratamiento de datos estadísticos.....	58
Cuadro 6. Calculo de f de fisher en para desviacion estandar.....	58
Cuadro 7. Calculo de Z para medias.....	58

ABREVIATURAS.

ATR: Reflectancia Total Atenuada.

CAS: Chemical Abstracts Service.

EM: Espectrometría de Masas.

EPA: Environmental Protection Agency (Agencia de Protección Ambiental)

FEUM: Farmacopea de los Estados Unidos Mexicanos.

FT-IR: Fourier Transform Infrared Spectroscopy.

IR: Infrarrojo.

IUPAC: International Union of Pure and Applied Chemistry (Unión Internacional de Química Pura y Aplicada).

NIST: National Institute of Standards and Technology (Instituto Nacional de Estándares y Tecnología).

RMN: Resonancia Magnética Nuclear.

SDBS: Spectral Database for Organic Compounds.

TIC: Tecnologías de la Información y la Comunicación.

I. INTRODUCCIÓN.

El término espectroscopia hace referencia a la observación y al estudio del espectro, y se basa en la interacción de la energía radiante con la materia. Esta interacción es tan específica que nos permite identificar el tipo de radiación y los cambios que origina en la materia ¹.

La espectroscopia en el infrarrojo (IR) es una técnica de análisis instrumental la cual, a pesar de ser descubierta hace más de 136 años, continúa siendo vigente debido a la disponibilidad de instrumentos modernos que permiten una gran variedad de aplicaciones en el análisis cualitativo y cuantitativo principalmente de compuestos orgánicos. Esta técnica analítica se basa en el estudio vibracional de los enlaces que conforman los grupos funcionales que constituyen las moléculas orgánicas y su aplicación en diversas áreas, entre la que se encuentra la industria farmacéutica para el estudio de los insumos utilizados como son los fármacos y los aditivos.

La instrumentación moderna para la adquisición de datos espectrales en el infrarrojo medio consiste en gran medida en instrumentos infrarrojos de transformada de Fourier (FTIR). La mejora en la relación señal-ruido y la velocidad mejorada en la adquisición de datos de estos dispositivos ha resultado en la sustitución de instrumentos dispersivos de longitud de onda con instrumentos FTIR. Esta mejora en la relación señal-ruido ha permitido la introducción de accesorios de muestreo y dispositivos acoplados que amplían aún más la capacidad analítica de esta técnica. Los accesorios de reflectancia han mejorado la capacidad de analizar superficies a varias profundidades de penetración. El microscopio IR permite la recolección rutinaria de espectros IR de muestras tan pequeñas como diez micrómetros. Los

accesorios de reflectancia para el microscopio extienden esta capacidad al análisis de la superficie también. El acoplamiento de los sistemas de cromatografía de gases y líquidos a espectrofotómetros IR ha ampliado el rango de tipos de muestras disponibles para el análisis ².

Antes de que se desarrollaran bases de datos IR en computadora, hasta principios de 1950 se habían creado colecciones de espectros IR de sustancias químicas puras en forma de catálogos impresos. La primera colección fue publicada por Abneyand y Festing en 1881, esta colección contenía 48 espectros. En 1905-1908, Coblentz publicó su colección de espectros IR que contenía 135 compuestos orgánicos. El desarrollo de la instrumentación indicó la gran importancia de la espectroscopia IR en la investigación de estructuras moleculares en consecuencia, el número de espectros de IR registrados por diferentes laboratorios aumentó drásticamente, pasando de los catálogos impresos a los catálogos digitales que registran un mosaico de varios miles de espectros. Las colecciones de IR digitales son amplias sin embargo no consideran la interpretación de sus espectros.

Considerando como siguiente gran paso la creación de bibliotecas digitales que incluyan la interpretación de los espectros, en el presente trabajo se creó y evaluó una plataforma con espectros en el IR con interpretación permitiendo ampliar su capacidad y uso, esperando un aumento de consultas debido al interés por esta nueva característica que la distingue de otras plataformas ^{3,4}.

II. MARCO TEÓRICO.

1. Antecedentes.

En 1881, William de Wiveleslie Abney y Edward Robert Festing fueron los pioneros en el tema al obtener espectros originados por las vibraciones moleculares y presentar una colección de 48 espectros de líquidos orgánicos. En 1892, Julius obtuvo el espectro IR de más de 20 compuestos identificando señales que son características en compuestos que contienen grupos metilo, presentando una señal de absorción a $3.45 \mu\text{m}$, llegó a la conclusión que la estructura interna de la molécula determina el tipo de absorción; analizando los datos observó que la absorción de ondas IR generaba un espectro diferente dependiendo de la sustancia analizada, Coblenz en 1905-1908, publicó su colección de espectros IR que contenía 135 compuestos analizados, y así iniciaron ².

Es así como esta técnica analítica se convirtió en una indispensable fuente de datos estructurales de sustancias orgánicas para obtener información sobre los grupos funcionales que las constituyen ⁵.

El empleo de esta técnica de análisis instrumental fue importante durante la segunda guerra mundial, donde la compañía estadounidense Dow Chemical and American Cyanamid generó sus propios instrumentos, debido a las necesidades relacionadas con la producción de caucho insumo necesario para la guerra; pero al ver el gran potencial en sus aplicaciones contactó a una empresa de nombre Perkin Elmer, especializada en tecnología óptica para el desarrollo de instrumentos comerciales entre los años 1954 -1957 ^{6,7}.

Con la comercialización de estos instrumentos empezó el análisis sistemático de las señales asignadas a los grupos funcionales presentes en los compuestos orgánicos que dio como resultado lo que hoy conocemos como “Tablas de Correlación”, las cuales reúnen la información experimental que permite identificar a los grupos funcionales y emplear la información, principalmente en la elucidación y comprobación estructural ^{8,9,10}.

En las décadas de 1950 y 1960 se construyeron instrumentos dispersivos de doble haz y en conjunto con las tablas de correlación se dieron las bases para considerarla como una técnica de análisis estructural de moléculas orgánicas. Para los años de 1975 a 1984 los avances tecnológicos hicieron posible obtener los espectros en menor tiempo y con mayor reproducibilidad con la aplicación de las Transformadas de Fourier, junto con el desarrollo de computadoras y sistemas de almacenamiento de datos que permitieron almacenar una gran cantidad de información ⁶.

2. Espectroscopia en el infrarrojo (IR).

La radiación infrarroja es una fracción del espectro electromagnético comprendido de 500 a 0.70 μm o de 14286 a 20 cm^{-1} , ubicándose entre la región visible y las microondas, donde a su vez se divide en tres regiones¹¹, (Cuadro 1).

Cuadro 1. División de la región infrarroja del espectro electromagnético¹².

División	Longitud de onda (λ: μm)	Número de onda (ν; cm^{-1})
IR Cercano	0.70 a 2.5	14,286 a 4 000
IR Medio	2.5 a 25	4 000 a 400
IR Lejano	25 a 500	400 a 20

Las unidades para expresar la posición de las señales son en longitud de onda en μm , o en número de onda en cm^{-1} , este último es el inverso de la longitud de onda expresada en cm de acuerdo a la siguiente fórmula:

$$\nu = 1/\lambda \quad (1.1)$$

dónde: ν = no. de onda
 λ = longitud de onda en cm

La unidad más empleada es el número de onda va de 4000 a 400 cm^{-1} .

De esta manera, el número de onda representa el número de ondas de la radiación contenidas en un centímetro^{13,14}.

El intervalo más común para el análisis estructural de moléculas orgánicas es el infrarrojo medio, en esta región se observan las señales debidas a la absorción de

energía como consecuencia de cambios vibracionales de los enlaces que forman los grupos funcionales presentes en las moléculas orgánicas ¹⁵.

Un espectro infrarrojo se obtiene haciendo incidir radiación infrarroja a través de una muestra y determinando la fracción de radiación absorbida, transmitida o reflejada a una determinada longitud de onda. La energía de cualquier señal corresponde a la frecuencia de la vibración de los enlaces en la molécula analizada.

Estas señales son originadas considerando la posición de absorción de cada una de ellas, las cuales dependen de la diferencia de masa entre átomos de cada enlace, la fuerza de unión entre estos y la cantidad de enlaces entre átomos (enlaces sencillos, dobles o triples). Considerando lo anterior la frecuencia de deformación de los enlaces es determinada con la siguiente ecuación que es aproximada por la aplicación de la ley de Hooke's:

$$\nu = \frac{1}{2\pi C} \sqrt{\frac{f}{(M_x M_y)/(M_x + M_y)}} \quad (1.2)$$

Donde

ν = Frecuencia vibracional (cm^{-1})

C = Velocidad de la luz (cm/s)

f = constante de la fuerza de enlace (dinas/cm)

M_x y M_y = masas reducidas de los átomos que forman el enlace.

Se puede determinar que cuanto más fuerte sean los enlaces y más pequeñas las masas se necesitará más energía para poder hacer vibrar el enlace.

Las señales que conforman el espectro infrarrojo de un compuesto orgánico se presentan en un gráfico que tienen unidades de número de onda (cm^{-1}) o longitud de onda (μm) en el eje de las abscisas y unidades de transmitancia (análisis cualitativo) o absorbancia (análisis cuantitativo) en el eje de las ordenadas donde la

relación entre las intensidades de la radiación IR incidente y transmitida junto con la concentración del analito para estudios cuantitativos se rige por la ley Lambert-Beer¹⁶.

2.1. Vibraciones de los enlaces.

Se puede representar a las moléculas como un conjunto de átomos en forma de esferas de diferente tamaño, unidas por enlaces químicos, donde cada enlace presenta vibraciones con valores de energía que coinciden con los valores de la energía de la región infrarroja del espectro electromagnético.

Existen dos tipos de vibraciones que ocurren simultáneamente, los cuales dan origen a un espectro de absorción que depende de las características de los grupos funcionales que constituyen a la molécula. Para que esto se lleve a cabo la molécula debe poseer una frecuencia vibracional idéntica a la de la radiación infrarroja incidente, que debe ir acompañada de un cambio en la magnitud del momento dipolar eléctrico que tendrá una consecuencia directa en la intensidad de la señal.

Las vibraciones de los enlaces de las moléculas y que originan un espectro en el infrarrojo, son de dos tipos: vibraciones "*Stretching*" (ν , estiramiento, alargamiento y tensión) y vibraciones "*Bending*" (δ , flexión o deformación). Las primeras se presentan cuando los enlaces vibran originando un cambio en la distancia del enlace sin la modificación del ángulo de enlace, pueden ser simétricas y asimétricas, las vibraciones Bending se presentan cuando en la vibración del enlace hay un cambio en el ángulo de enlace, se consideran cuatro tipos de movimiento: oscilación, tijeras, sacudida y torsión.

Estos dos tipos de vibraciones en el enlace se consideran para dividir al espectro IR en dos regiones, la región fundamental de rango de los 4000 a \approx 1500 y la región de las huellas digitales de 1500 a 450 cm^{-1} ^{13,17,18,19}.

2.2. Ventajas y limitaciones en el análisis de espectroscopia IR.

Como cualquier otra técnica de análisis instrumental, además de conocer las características moleculares, también es importante conocer las ventajas y limitaciones las cuales se enlistan a continuación ¹².

2.2.1. Ventajas.

- Es aplicable al análisis cualitativo y cuantitativo ya que es posible determinar la concentración de una sustancia debido a que la intensidad en las señales en el espectro es proporcional a las concentraciones de los componentes individuales en una mezcla.
- Actualmente en los instrumentos con Transformadas de Fourier, los espectros se generan en tiempos cortos.
- Puede ser empleada para la identificación de sustancias mediante su espectro, sólo sustancias iguales producirán el mismo espectro, donde se hace la comparación con el espectro obtenido a partir de una muestra de referencia.
- Las señales presentes en los espectros son generadas por grupos funcionales particulares los cuales tienen una posición e intensidad definidas.
- Es una técnica de análisis no destructiva.
- Usualmente no se requieren reactivos adicionales para obtener un espectro.
- Puede ser considerada una técnica verde.

- Permite la cuantificación de múltiples analitos presentes en la muestra.
- La resistencia de los materiales utilizados y la ausencia de partes móviles en el sistema de detección hacen que sea una técnica idónea para procesos de control en planta.
- El Cristal ATR facilita el análisis de muestras sólidas opacas, gracias a la posibilidad de aumentar el contacto-presión, muestra-cristal, haciéndolo más efectivo y reproducible ^{20,21,22,23}.

2.2.2. Limitaciones.

- No es posible analizar muestras que presentan una variabilidad física o química no contemplada en la calibración.
- No es posible trabajar con mezclas si no se cuenta con una referencia.
- El espectro se ve afectado por la presencia de humedad en la muestra.
- Los cambios de temperatura pueden aumentar o disminuir la intensidad de manera considerable en las señales.
- En los casos que lo requieren se emplean disolventes orgánicos que son tóxicos tanto para el analista y nocivo para el medio ambiente, estos son cloroformo, diclorometano.
- El análisis de cada muestra debe ser tratado de manera particular a lo indicado en su monografía de acuerdo a la farmacopea utilizada, sin embargo, hay métodos utilizados para el tratamiento de muestras que son dependientes de sus características físicas²⁴.

3. Tipos de muestras y sus principales métodos para su análisis en el IR.

3.1. Muestras que se analizan en IR.

El análisis de muestras puede realizarse en sólidos, líquidos y gases, donde cada muestra debe manipularse de forma adecuada a sus características. Para muestras que son líquidos transparentes o muestras líquidas y sólidas o gaseosas en solución que emplean medidas de transmisión. Para muestras sólidas no transparentes se emplea el método de reflexión, en este método, el haz que proviene de la fuente IR se hace pasar a través de un cristal de 50 mm construido con un material apropiado que puede ser bromuro de talio-ioduro de talio o placa de seleniuro de germanio y zinc debido a que tienen un alto índice de refracción de la radiación IR. Este se basa en la reflexión que experimenta la luz infrarroja cuando se encuentra con la unión de dos medios de diferente densidad, la reflectancia se describe como la capacidad de reflejar una fracción de radiación que incide sobre la muestra con la única condición de que la muestra este en contacto íntimo con el cristal con lo cual favorece el aumento de la señal. Es empleado para el estudio de muestras altamente absorbentes como muestras opacas, fibras sólidas, pastas, soluciones acuosas, sólidos de solubilidad limitada.

3.2. Métodos de transmisión.

3.2.1. Gases.

El espectro es obtenido para líquidos con punto de ebullición bajo o gas, se permite la dispersión de la muestra en una celda para gases, donde el haz recorre varias veces una determinada longitud hasta hacer mayor el paso de la radiación.

3.2.2. Líquidos.

- **Película.** Se emplea para líquidos puros, se coloca una gota de la muestra entre dos ventanas de NaCl o de otro material transparente a la radiación infrarroja formando una película delgada entre éstas.

3.2.3. Líquidos y Sólidos.

- **Solución.** Disolver la muestra sólida o líquida en un disolvente adecuado, libre de humedad y no higroscópico, usualmente se emplea cloroformo o tetracloruro de carbono (entre 0.5-10 %).
- **Nujol.** Mezclar y homogenizar la muestra sólida o líquida con nujol (20 %) en un mortero de ágata hasta obtener una dispersión fina y colocarla entre dos placas de cloruro de sodio o bromuro de potasio.
- **Pastilla de bromuro de potasio.** La muestra sólida (10 mg aprox.) se dispersa en una fina molienda con KBr (seco, 100 mg aprox.) en un mortero de ágata, la mezcla se coloca en un embolo adecuado y se lleva a una prensa hidráulica, se aplica presión y se obtiene un disco transparente.
- **Celda sellada.** Para muestras líquidas o sólidas en solución se hace una dilución en un disolvente adecuado libre de humedad a una concentración aproximada al 10 % y se coloca en una celda sellada. Una condición importante para emplear este método es que el disolvente no debe afectar el material del que está hecha la celda, por lo que no debe contener agua. Este método es el adecuado para el análisis cuantitativo.

3.3. Método de Reflectancia.

3.3.1. Reflectancia Total Atenuada (ATR). Se emplea principalmente para muestras sólidas no transparentes. La muestra sólida o líquida se coloca directamente sobre el cristal de reflectancia y se procede de acuerdo al procedimiento para obtener el espectro correspondiente.

Es importante cuando se obtiene un espectro en el IR indicar el método que se realizó para obtener el espectro correspondiente^{16,25,26,27}.

4. Tecnología de la información y biblioteca digital.

4.1. Tecnologías de la información.

Las tecnologías de la información se definen como la rama de la tecnología que se dedica a estudiar, aplicar y procesar un gran número de datos, pasando por diversas fases como son la obtención, creación, almacenamiento, administración, modificación, manejo, movimiento, control, visualización, transmisión o recepción de información y todos los procesos asociados a este ²⁸.

Estas tecnologías permiten el acceso con gran facilidad a información actual y detallada, en constante cambio ²⁹.

La información está constituida por datos que se acumulan, se transmiten y utilizan cuando intervienen agentes intencionales que valoran esa información y la incorporan a su acervo de conocimiento ³⁰.

Para mejorar los sistemas de ciencia, tecnología e innovación en México ha sido necesario el desarrollo de estrategias como lo es la sociedad RED el cual consolida los esfuerzos realizados por la ley y en el sistema de ciencia y tecnología,

organizadas desde el estado más con financiamiento público que privado, marca la integración nacional de grupos y centros de investigación, como lo es el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) que ha venido impulsando desde hace una década la conformación de redes integrando líneas temáticas a las que denominó redes temáticas CONACYT de investigación donde se encuentran incluidas las tecnologías de la información.

El propósito explícito de estas redes consiste en conectar grupos de investigación con intereses compartidos que pongan en común recursos y resultados para avanzar, mediante la cooperación, en la resolución de ciertos problemas. Hoy día, sin embargo, las redes de investigación no se limitan a conectar y a fortalecer los vínculos entre las instituciones y los investigadores interesados en una misma problemática ³¹.

Las redes de investigación se han convertido en una política del Estado Mexicano y forman parte del Plan Nacional de Desarrollo. El Programa Especial de Ciencia y Tecnología 2008-2012 de CONACYT concibe las redes como parte de una estrategia para “Mejorar la articulación del Sistema Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación fortaleciendo los vínculos entre todos los actores: academia, empresarios y sector público en sus niveles federal, estatal y municipal” ^{32,33}.

Para este propósito la revolución de las computadoras, la diversidad de fenómenos informativos y las TIC (Tecnologías de la Información y la Comunicación) han generado recientemente una multiplicidad de nuevas ideas y temas inéditos, además de varias y nuevas formas de visitar viejas teorías y temas demeritados.

Al tener como prioridad la información y la comunicación en el uso de estas tecnologías se genera el término TIC, el cual cuenta con diversas características:

- **Inmaterialidad.** Creación, proceso y comunicación de datos, donde puede ser llevada a cabo desde grandes distancias.
- **Interactividad.** Intercambio de información entre usuario y ordenador adaptando recursos enfocado a diversas necesidades.
- **Interconexión.** Capacidad del intercambio de información y la creación de nuevas posibilidades de conexión, por ejemplo, correos electrónicos y Messenger.
- **Instantaneidad.** Transmisión de la información con gran facilidad y en menor tiempo.
- **Calidad de imagen.** Al abarcar información textual y de imagen se ha alcanzado la capacidad de procesamiento y digitalización de esta forma de comunicación.
- **Digitalización.** Conversión de distintos tipos de información física en intangible o digital como lo es el sonido, imagen, texto, animaciones y demás, para poder ser transmitida en un formato.
- **Accesibilidad.** Capacidad de ser consultado y empleado para diversos fines, como lo son culturales, económicos, educativos e industriales, proceso que da origen al término de globalización ³⁴.
- **Innovación.** Cambio y adaptación en la forma de comunicación.
- **Diversidad.** Formas diferentes de la manera de comunicación entre personas y proceso ³⁵.

Debido a la creciente demanda de información influenciada por el desarrollo de nuevas tecnologías que ha llevado de la mano a la evolución de bibliotecas digitales a implicado la necesidad de mejorar los métodos de almacenamiento, recuperación, procesamiento y consulta de información ³⁶.

4.2. Biblioteca digital.

Una biblioteca digital se puede definir como un sistema computarizado y almacenado en memoria externa que contiene una colección ordenada de elementos, con la finalidad de almacenar, relacionar y recuperar la información para satisfacer la necesidad de múltiples usuarios. Cada biblioteca digital se diseña para satisfacer los requisitos de información de una organización ^{37,38,39,40}.

Una biblioteca digital en línea puede ser consultada desde cualquier ordenador conectado a través un servidor a Internet ⁴¹.

Entre las características que favorecen el uso de bibliotecas digitales podemos encontrar las siguientes:

- **Compactación.** No hay necesidad de archivos en papel voluminosos.
- **Velocidad.** La máquina puede recuperar y actualizar datos más de forma rápida.
- **Actualidad.** En el momento que se quiere se tendrá a disposición información precisa y actualizada.

Un sistema de biblioteca digital se compone por lo menos de cuatro componentes: Datos (información), Hardware, Software y el Usuario. Siendo los datos el componente más importante.

Existen dos tipos de sistemas, monousuario y multiusuario, los monousuario se refieren a un sistema de un solo usuario donde solo él puede tener acceso, y los multiusuarios, los requisitos principales de una plataforma multiusuario es que deben ser integradas (unificación de varios archivos) y compartida (entre usuarios y visualizarla al mismo tiempo) ³⁷.

Para habilitar una biblioteca digital multiusuario se requiere:

- **Grupo común de datos.** Referente a una biblioteca digital centralizada, teniendo todos los datos en un solo lugar y proporcionar un acceso común.
- **Datos integrados.** La información presentada no debe ser redundante ni duplicada, evitando así inconsistencias.
- **Acceso uniforme.** Estandarizar los métodos de acceso de datos generales.
- **Almacenamiento de datos.** Una biblioteca digital, que es el principal repositorio de información en una organización ³⁹.

Entre las bibliotecas digitales multiusuario encontramos las bibliotecas científico-tecnológicas, Integradas por información destinada a investigadores de cualquier ámbito científico o técnico.

Se divide en:

- **Bases de datos multidisciplinarias.** Contempla varias disciplinas científicas o técnicas.
- **Bases de datos especializadas.** Recopilan y analizan documentos pertinentes para una disciplina o subdisciplina concreta: investigación biomédica, farmacéutica, química, agroalimentaria, social y humanística ⁴¹.

4.3. Ciclo de vida y etapas de diseño de una biblioteca digital.

El ciclo de vida de una biblioteca digital empieza por un informe de iniciación que contempla los siguientes aspectos:

- **Informe de iniciación.** Empleado para definir el alcance y desarrollo de la biblioteca digital y cronograma del proyecto.
- **Diseño y desarrollo.** diseño en el sistema de biblioteca digital, debe reunir los requisitos de información para que el proceso empiece.
- **Planificación.** Revisar el plan a largo plazo de la organización; plan específico para el sistema de biblioteca digital.
- **Estudio de factibilidad.** Estudiar el estado de preparación; establecer los costos y beneficios.
- **Definición de requisitos.** Definir los objetos o entidades.
- **Diseño:** Diseño lógico completo; transformarlo en diseño físico.
- **Implementación.** Subir información a la biblioteca digital; entrenar a los usuarios.
- **Mantenimiento y crecimiento.** Realizar mantenimiento continuo; plan para el crecimiento del sistema de bases de datos.

Este último punto contempla proporcionar un servicio ininterrumpido sin tiempo de inactividad no programado y la ampliación del sistema para mantener la información de la biblioteca digital actualizada ³⁹.

4.4. Etapas de diseño de una biblioteca digital.

4.4.1. Etapa de diseño conceptual. Se obtiene una estructura de la información de la futura biblioteca, independiente de la tecnología a emplear ya sean blogs

comerciales o la creación de una plataforma por medio de programación con lenguaje informático.

4.4.2. Etapa del diseño lógico. El resultado del diseño conceptual se transforma a manera de adaptarse a la tecnología que se debe emplear.

4.4.3. Etapa del diseño físico. Se transforma la estructura obtenida en las etapas anteriores teniendo como resultado la visualización de una plataforma interactiva capaz de responder a solicitud del usuario, con el objetivo de conseguir una mayor eficiencia; además, se completa con aspectos de implementación física ³⁸.

4.5. Características de una biblioteca digital.

4.5.1. Usuarios.

Los usuarios que interactúan con el sistema desde terminales en línea son aquellos que pueden acceder a la biblioteca digital a través de las aplicaciones en línea, o bien puede usar una interfaz proporcionada como parte integral del software del sistema de biblioteca digital. Dichos usuarios deben guiarse mediante indicaciones de menús o cuadros de búsqueda para facilitar su uso para personas que no cuentan con una capacitación formal en las tecnologías de la información.

4.5.2. Administrador.

- Es la persona que proporciona el apoyo técnico y estratégico, donde algunas de sus funciones son:
- Definir el esquema conceptual: seleccionar exactamente la información que contendrá la biblioteca digital por un diseño lógico.
- Definir el esquema interno: Establecer la forma en que serán representados los datos, almacenamiento (Diseño físico).

- Establecer un enlace con los usuarios: Garantizar la disponibilidad de los datos necesarios y manejo intuitivo de la biblioteca digital.
- Definir las restricciones de seguridad y de integridad.
- Definir la política de cambio y respaldo: Contar con un método que permita restablecer la información en caso de alguna situación imprevista en el menor tiempo posible.
- Supervisar el rendimiento y responder a los requerimientos cambiantes: Organización que responda a un rendimiento ideal ³⁷.

Además de sus funciones un administrador debe asegurarse de lo siguiente:

- Los datos se organizan independientemente de las aplicaciones que los vayan a usar y de los ficheros en los que vayan a almacenarse.
- Solo el administrador puede acceder al cambio y manipulación a los datos.
- Los datos se gestionan de forma primordial e independiente de su forma de consulta.
- Consistencia e integridad de los datos.
- Fiabilidad (protección frente a fallos) y seguridad (control de acceso a los datos) ⁴².

4.5.3. Seguridad.

La seguridad de los datos se asocia frecuentemente con la de la integridad de los mismos (al menos en contextos informales), pero ambos conceptos son bastante diferentes. La seguridad se refiere a la protección de los datos contra su revelación, su alteración o su destrucción no autorizadas, mientras que la integridad se refiere a la precisión o validez de esos datos.

- Seguridad significa proteger los datos ante usuarios no autorizados.
- Integridad significa protegerlos de usuarios autorizados.

La seguridad garantiza que los usuarios tengan permiso de hacer las cosas que están tratando de hacer y la integridad involucra asegurar que las cosas que están tratando de hacer sean correctas ³⁷.

4.5.4. Opciones de búsqueda.

En general todos los sistemas de recuperación de información permiten realizar diferentes modalidades de búsqueda:

- **Búsqueda directa.** Se teclea directamente una o varias palabras en el espacio reservado para ello por el sistema de interrogación en la biblioteca digital. Esta puede ser de interrogación en texto libre, en donde el usuario realiza su consulta sin tener en cuenta la estructura de campos de los registros de la biblioteca digital.
- **Búsqueda a través de listado.** En determinados campos de algunas bases de datos la interrogación no se realiza a través de un texto sino a través de códigos numéricos o alfanuméricos ⁴¹.

5. Bibliotecas digitales y el espectro IR.

5.1. Comienzo de la relación biblioteca – espectro.

Los analistas han tratado de mejorar las técnicas de comparación visual desde los primeros días de la espectroscopia infrarroja. El inicio de la búsqueda espectral infrarroja computarizada se dio en la creación de la biblioteca de fase de vapor de EPA por el Dr. L. V. Azanraga, siendo esta la primera gran biblioteca digital de

espectros infrarrojos digitales de origen experimental disponibles para la comunidad científica ⁴³.

Existe una metodología, para la elucidación de la estructura de un compuesto desconocido y puede ser identificada por comparación con la información contenida en una biblioteca integrada al sistema como una biblioteca digital computarizada. Otra metodología para la identificación del compuesto consiste en la comparación de las señales espectrales con las señales de absorción de un espectro proveniente de una muestra de referencia.

Una biblioteca digital contiene un conjunto de elementos generalizados de información sobre estructuras y rangos de valores con características particulares, por ejemplo, ubicación e intensidad de la señal, conectadas con a un grupo funcional ²⁴.

El uso principal de las bibliotecas espectrales hoy en día es la búsqueda espectral, a medida que las bibliotecas crecen y el software de la computadora se vuelve más sofisticado, los usos principales de las bibliotecas espectrales en el futuro pueden ser completamente diferente a las aplicaciones.

La importancia en la creación de una biblioteca digital de espectros en el infrarrojo medio es la posibilidad de identificar con una mayor rapidez la estructura química del compuesto que generó dicho espectro, así como detectar similitud entre compuestos.

Las aplicaciones de la espectrometría de infrarrojo abarcan desde la biotecnología, farmacia, química forense, así como en la industria farmacéutica, pasando por campos de la química no solo en el laboratorio sino también en un tribunal ^{43,44}.

Un ejemplo del alcance de la implementación de una biblioteca digital fue la identificación de muestras de pintura para la autenticación de una obra de arte en el año de 1930, los resultados se compararon con una extensa biblioteca digital de esmaltes de referencia y pinturas de tubos de artistas de la misma época junto con pinturas reales dejadas por el artista en su estudio. Estas pruebas llaman la atención sobre el uso complejo del artista de técnicas mixtas que bien podrían haber incluido mezclas de esmalte oleo-resinosos en las pinturas ⁴⁵.

Otro ejemplo se da en los métodos de identificación bacteriana, marcha bacteriológica convencional y espectroscopia infrarroja con transformadas de Fourier (TF-IR), así como determinar si la biblioteca digital construida a partir de bacterias aisladas de úteros de vaca lecheras de Europa podía ser utilizada para identificar bacterias uterinas de vacas lecheras de Argentina ⁴⁶.

5.2. Características de una biblioteca digital en el espectro IR.

Las bibliotecas digitales cumplen con ciertas características y las bibliotecas digitales de espectros IR no son la excepción, las principales características con las que debe contar son ^{47,48}:

Método de obtención del espectro.

- Propósito y necesidad
- Listado de compuestos

Delimitación de formato

- Autoría
- Garantizar la rastreabilidad
- Capacidad de aumento de número de espectros
- Instrumentos calibrados
- Tipo de software
- Procesamiento de datos (correcciones)
- Accesibilidad

La adquisición de conocimiento es una de las partes más difíciles al construir un sistema; mediante la extracción de la colección de espectros infrarrojos almacenados en una biblioteca digital, donde es preferible que los espectros cuenten con una interpretación previa para así tener una ventaja sobre otras ya existentes ²⁴.

Este tipo de recursos pueden ser muy útiles para quien desee usarlos, ya que este tipo de programa puede hacer un excelente uso de la computadora y dispositivos para ayudar a los profesionistas y personas relacionadas con la química a comprender mejor la química ^{49,50}.

Una biblioteca digital puede clasificarse por su calidad la cual a su vez se basa en la precisión y la cantidad de información que la conforman como en el caso del espectro IR, donde siempre se debe indicar la preparación de la muestra.

La jerarquía general de la calidad de la biblioteca espectral es:

- Espectro incorrectamente identificado con una estructura incorrecta.
(Este es el peor de los casos).
- Un espectro IR falso con nombre comercial solamente (inútil).
- Un espectro IR fotométricamente preciso con nombre comercial solamente (casi inútil).
- Un espectro IR fotométricamente preciso con estructura (mejor escenario de bibliotecas comerciales).
- Un espectro de IR completamente interpretado fotométricamente preciso con estructura (mejor escenario de bibliotecas internas) ³.

III. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.

Para la consulta en línea de espectros en el infrarrojo existen plataformas digitales como son: NIST Chemistry WebBook, NIST - Structure Based Search, SDBS Spectral Data Base System for Organic Compounds, The Chemexper Chemicals Directory, Scifinder, algunas de ellas complementan su información con otras técnicas como lo son RMN ^1H , ^{13}C y EM. Una limitación en su uso es la accesibilidad, como es el caso de Scifinder, el acceso es restringido debido a que es una plataforma donde se requiere pago.

A pesar de la existencia de las bibliotecas digitales mencionadas anteriormente ninguna cuenta con la característica de tener interpretación de los espectros, en muchos casos resulta importante identificar los compuestos.

En los insumos de la industria farmacéutica se maneja una gran cantidad de compuestos orgánicos. Tanto en la industria como en la investigación se requieren técnicas analíticas confiables para la elucidación y comprobación de las estructuras de estos compuestos, esta información es importante cuando sea el caso el conocer si los grupos funcionales presentes en la molécula han sufrido alguna transformación química en el proceso de almacenamiento o procesado; aunado a que en diversas Farmacopeas como la Europea⁵¹ y algunas Americanas (entre ellas la FEUM¹⁶ y la USP), establecen como primera prueba de identificación comparar el espectro en el infrarrojo de una materia prima o aditivo con una muestra de referencia para asegurar su identidad, aunque no requieran de la interpretación.

La Farmacopea Japonesa y la Farmacopea Europea contienen un catálogo de espectros de referencia de fármacos sin interpretación, esto ha generado la oportunidad de mejora iniciando la construcción de una biblioteca digital mexicana de libre acceso de espectros en el infrarrojo que cuente con el espectro, su estructura química y datos adicionales, que integre sobre todo la interpretación, asignando las señales correspondientes a los grupos funcionales de la molécula.

Debido a la falta de existencia de plataformas con características como lo es la interpretación del espectro IR, en el presente trabajo se creó y analizó una plataforma con espectros con interpretación que permita ampliar la capacidad de uso de esta información ^{51,52}.

IV. HIPÓTESIS.

Si los espectros obtenidos e interpretados en el infrarrojo medio de muestras de interés farmacéutico se organizan en una biblioteca digital ubicada en una plataforma accesible, se facilitará su consulta por parte de los usuarios interesados en el tema.

V. OBJETIVOS.

1. Objetivo general.

Obtener e interpretar los espectros en el infrarrojo medio de compuestos orgánicos de interés farmacéutico y organizar la información en una biblioteca digital, ubicada en la plataforma WordPress.

2. Objetivos particulares.

2.1 Selección de materias primas de interés en la industria farmacéutica.

2.2. Recopilar información disponible en la literatura del nombre IUPAC, nombre común, números registro CAS y las propiedades farmacológicas o usos de las muestras disponibles en la literatura.

2.3 Obtener de forma experimental los espectros en el infrarrojo medio de las moléculas orgánicas seleccionadas.

2.4 Interpretar los espectros obtenidos tomando como apoyo la información contenida en las Tablas de Correlación.

2.5. Elaborar la biblioteca digital con los espectros interpretados en la plataforma WordPress para su consulta incluyendo la información adicional para cada compuesto.

VI. Material.

1. Equipos, Instrumentos y materiales.

Espátula

Mortero de ágata

Papel seda

Espectrómetro FT-IR Spectrum Two Perkin Elmer:

- Accesorio ATR

Ventanas de cloruro de sodio (NaCl)

Ventana de bromuro de potasio (KBr)

Equipo y Software de computo integrado del equipo

Software Spectrum versión 10.4.4

Balanza analítica OHAUS

Reactivos:

Mezcla agua:etanol (70:30)

Bromuro de potasio (KBr)

FT-IR spectroscopy polystyrene reference film no. L120 2057

2. Herramientas digitales.

Plataforma Wordpress (Internet)

3. Compuestos orgánicos analizados.

Sustancia	Procedencia y clasificación
Acetaminofén	COSUFAR SR-70 A1
Acetofenona	LFZ STD 1
Ácido acetilsalicílico	LFZ SR-1
Ácido ascórbico	LFZ SR-5

Ácido salicílico	COSUFAR SR-87C7 SR-72
Albendazol	LFZ SR-75
Alcanfor	LFZ STD 2
Alcohol bencílico	LFZ STD 3
Amantadina	LFZ SR-90
Ambroxol, clorhidrato de	LFZ SR-74
Amikacina	USP REFERENCIA STANDARD 01950H
Amoxicilina	USP REFERENCIA STANDARD J0C43
Benzoato de bencilo	LFZ SR-6
Benzoil metronidazol	LFZ SR-7
Bromhexina, clorhidrato de	LFZ STD 4
Cafeína anhidra	LFZ SR-9
Carbamazepina	LFZ STD 5
Cloranfenicol	LFZ SR-11
Clofibrato	LFZ STD 6
Clorhidrato de fenilefrina	LFZ SR-24
Clorobutanol	LFZ STD 7
Clorotiazida	LFZ STD 8
Clorpropamida	LFZ SR-13
Diclofenaco sódico	LFZ SR-85
Dicloxacilina	LFZ SR-30
Diltiazem, clorhidrato de	LFZ R-83
Eritromicina	LFZ SR-20
Fenazopiridina	Moléculas finas de México PP00210717 LFZ SR-86
Fenilbutazona	LFZ STD 9
Fenilefrina	LFZ SR-24
Ftalilsufatiazol	LFZ STD 10
Furosemida	Moléculas Finas de México 17040142R1 LFZ SR-28
Guayacol	LFZ SR-87
Hidroquinona	LFZ STD 11
Ibuprofeno	LFZ SR-34

Indometacina	LFZ SR-88
Ketoconazol	COSUFAR 89B3 LFZ SR-67
Lactosa anhidra	LFZ STD 12
Lidocaina base	LFZ SR-35
Lidocaina, clorhidrato de	LFZ SR-77
Maleato de trimebutina	LFZ SR-59
Manitol	LFZ STD 13
Mebendazol	LFZ SR-64
Meloxicam	LFZ STD 14
Metamizol sódico	LFZ SR-16
Metilparabeno	LFZ STD 15
Metocarbamol	LFZ STD 16
Metronidazol	COSUFAR 93B3 LFZ SR-40
Naproxeno	COSUFAR LFZ SR-42
Naproxeno sódico	LFZ SR-76
Neomicina	LFZ SR-8
Nifedipino	LFZ SR-4
Nimesulida	LFZ SR-71
Nistatina	LFZ SR-18
Nitrofurazona	LFZ SR-43
Nitrofurfural	LFZ SR-21
Oxeladina, citrato de	LFZ STD 17
p-aminofenol	LFZ SR-68
Pentoxifilina	USP REFERENCIA STANDARD F1D 350
Poliestireno	LFZ SR
Polietileno	LFZ SR
Propilparabeno	LFZ STD 18
Quercetina	Sigma-Aldrich
Ranitidina	USP REFERENCIA STANDARD F-2 59850
Sulfatiazol	LFZ STD 19
Tetraciclina	FEUM THCL-1
Tolbutamida	LFZ STD 20

1. LFZ SR: Laboratorios Farmacéuticos Zaragoza Sustancia de Referencia.
2. LFZ STD: Laboratorios Farmacéuticos Zaragoza Estándar Secundario.
3. COSUFAR: Comité mexicano de sustancias de referencia.

VII. MÉTODO.

1. Obtención del espectro IR.

Los espectros se obtuvieron en un Espectrómetro FT-IR Spectrum two Perkin Elmer con cuatro barridos (escans) y un accesorio de reflectancia total atenuada (ATR) con cristal de diamante, (Figura 1). Los espectros infrarrojos se digitalizaron con el software Spectrum 10.4.4 entre 4000 y 400 cm^{-1} , en la Figura 2 se muestra la pantalla inicial.

Se realizó la limpieza previa del accesorio ATR con una mezcla de etanol:agua (30:70) (Figura 3).

Para la lectura de las muestras se inicia con la lectura de la absorción de fondo “background absorption” del medio ambiente bajo las mismas condiciones de instrumentación y de laboratorio (Figura 4).

Entre cada lectura se debe realizar la limpieza de la superficie del cristal ATR con la mezcla etanol:agua (30:70) seguido con papel seda (Figura 3).

- **Parámetros de escaneo:**

Rango de número de onda de 4000 - 450 cm^{-1} .

Velocidad de escaner (10kHz).

Escanes para fondo y muestras: 4

Control instrumental (software): OPUS v 7.0 para Microsoft, Bruker Optics, Ettlingen, Alemania.

Para cada lectura se tomó una porción de muestra aproximada de 10-20 mg que cubriera adecuadamente el cristal (Figura 5).

Para cada muestra se aplicó presión controlada de acuerdo a las instrucciones con el brazo de presión (Figura 6).

La muestra se escaneó en el Espectrómetro FT-IR Spectrum two Perkin Elmer, equipado con un solo soporte placa de muestra de cristal de diamante (área 50 mm). Después de cada medición, el material escaneado fue retirado, la placa de muestra se limpió y una nueva muestra fue escaneada.

Durante la lectura de la muestra fue necesario realizar una absorción de fondo como blanco en el equipo, y posteriormente una corrección de la línea base empleando algoritmos de corrección integrado en el programa del equipo para reducir los efectos de la dispersión que pueden influir en gran medida con los espectros reduciendo los efectos negativos generados algún factor en el momento de la lectura de la muestra (Figura 9).

Los espectros obtenidos en la región del infrarrojo medio muestran en el eje Y la información de % de Transmitancia, en el eje X se muestra la posición de las señales en Número de Onda de 4000 a 450 cm^{-1} . La información integrada en cada espectro son la interpretación, nombre de la muestra, nombre de los autores ³⁶.

Obtención de los espectros IR de las muestras a analizar: Manejo de software y de muestra ^{53,54,55}.

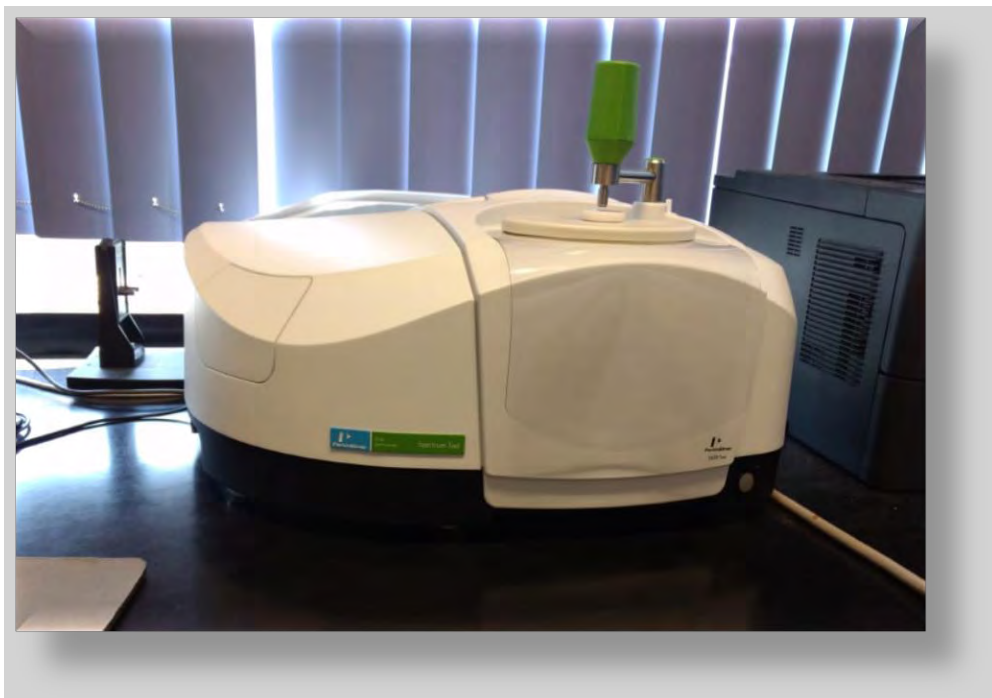


Figura 1. Instrumento "Espectrómetro FT-IR Spectrum two Perkin Elmer "

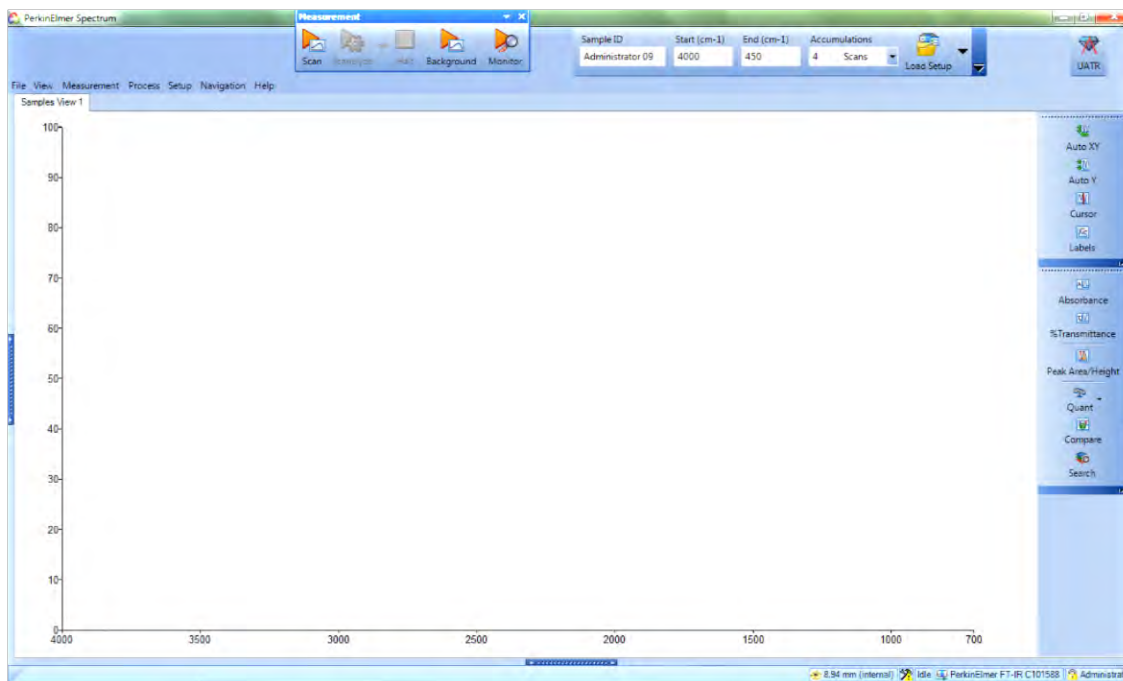


Figura 2. Pantalla inicial de configuración instrumental.



Figura 3. Limpieza del cristal de ATR con mezcla agua:etanol (70:30)

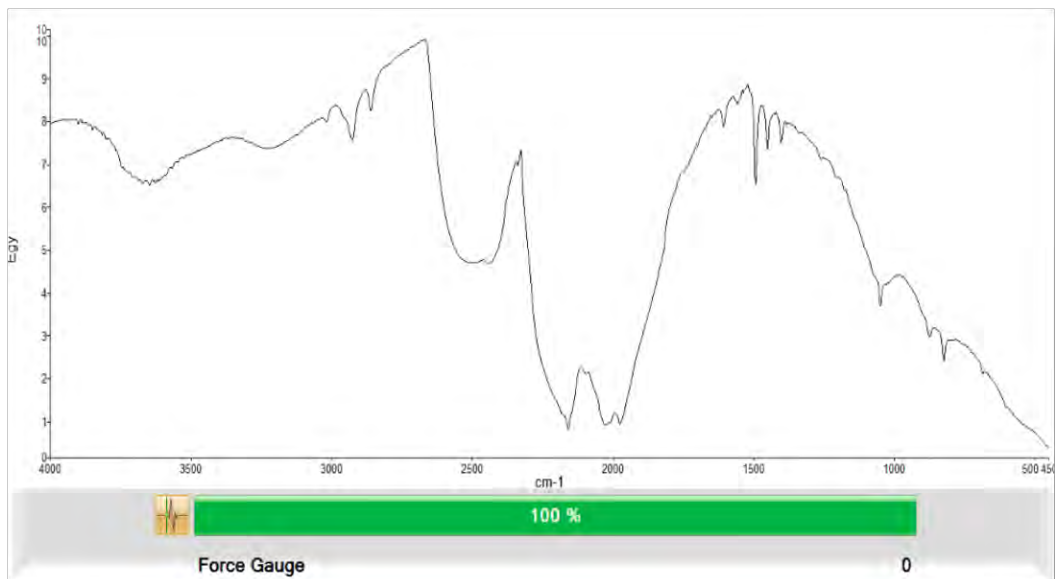


Figura 4. Lectura de espectro de absorción de fondo.

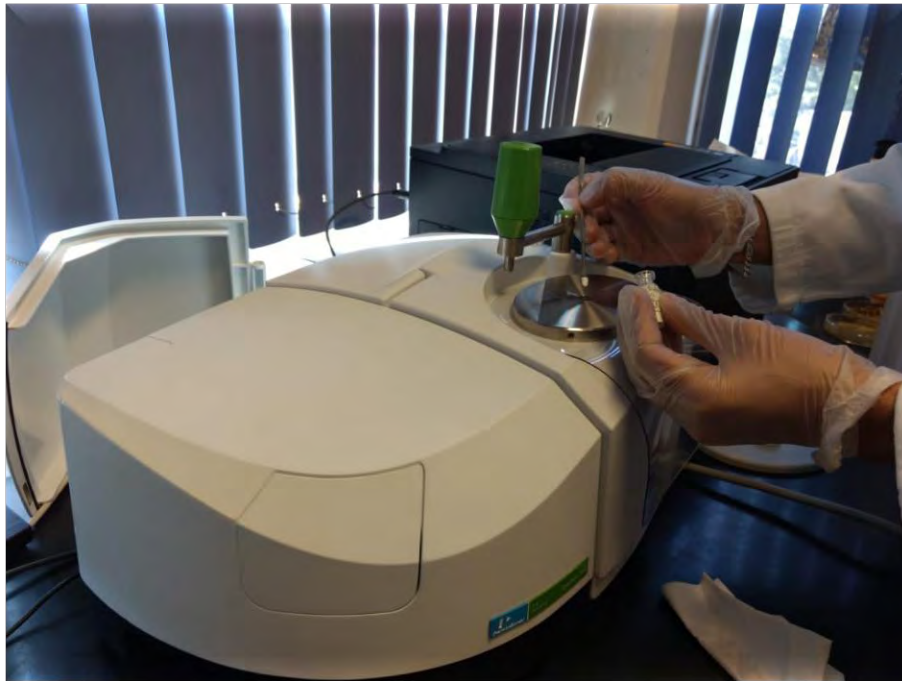


Figura 5. Colocación de muestra (aproximadamente 10 mg) sobre el cristal del dispositivo ATR.

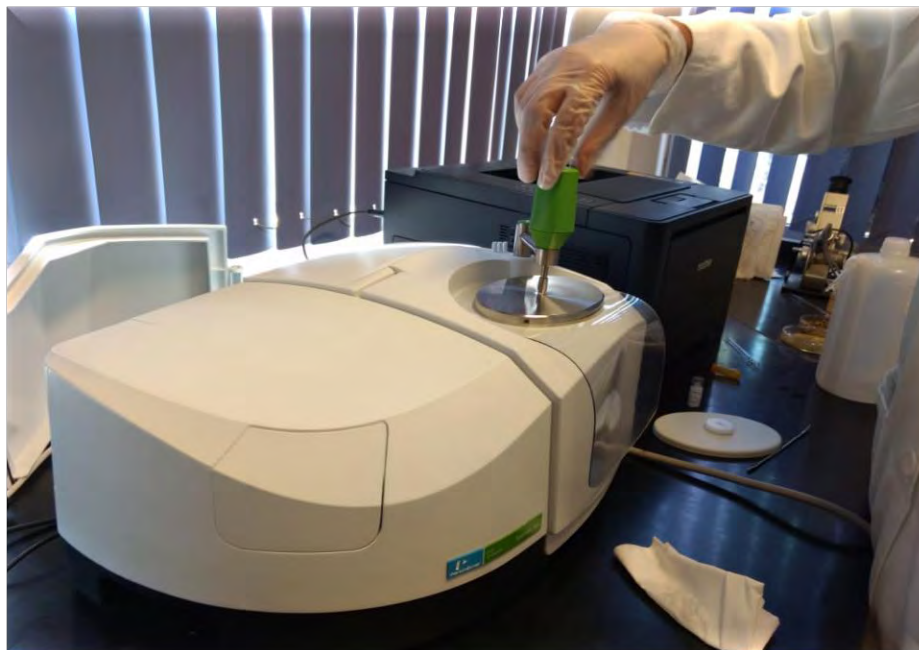


Figura 6. Aplicación de presión sobre la muestra.

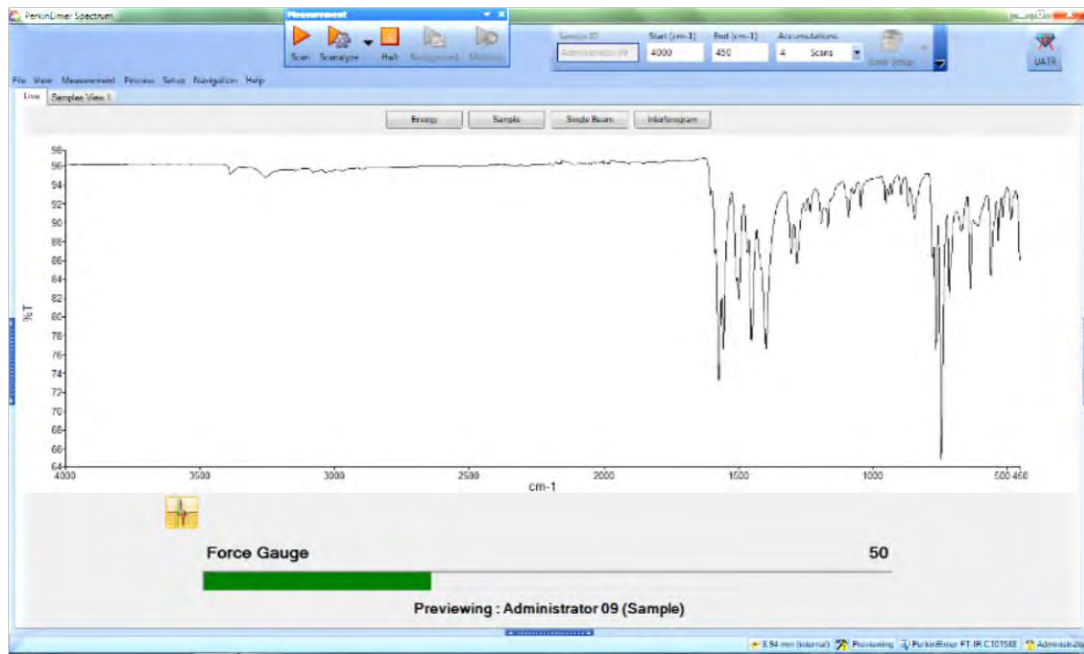


Figura 7. Adquisición del espectro de la muestra con una resolución de 0.5 cm^{-1} y lectura de 4 escanes.

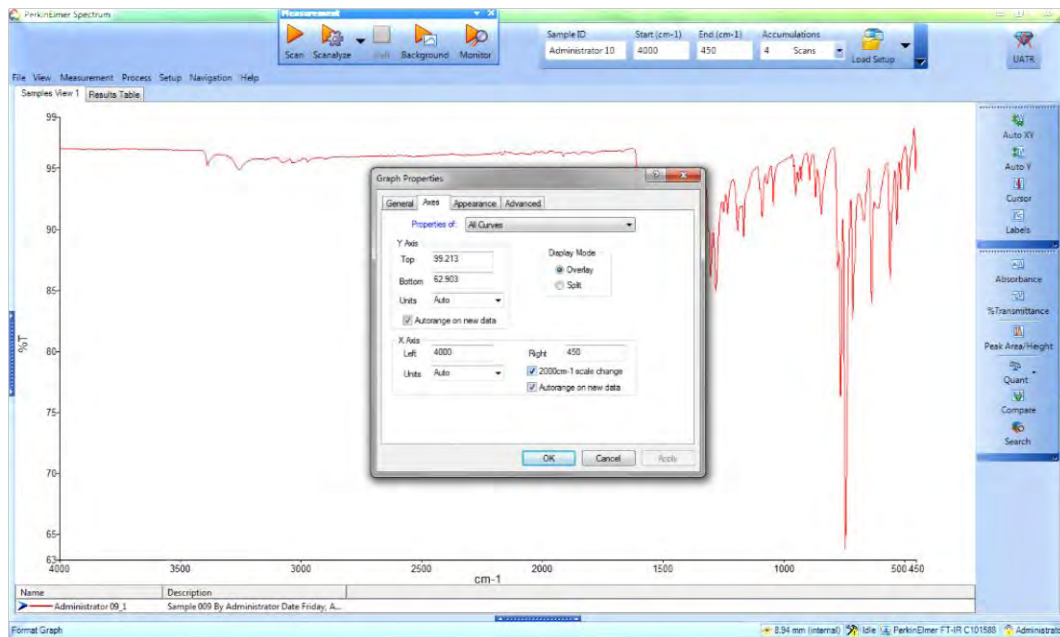


Figura 8. Ampliación de la región de huellas digitales ($2000\text{ a }450\text{ cm}^{-1}$).

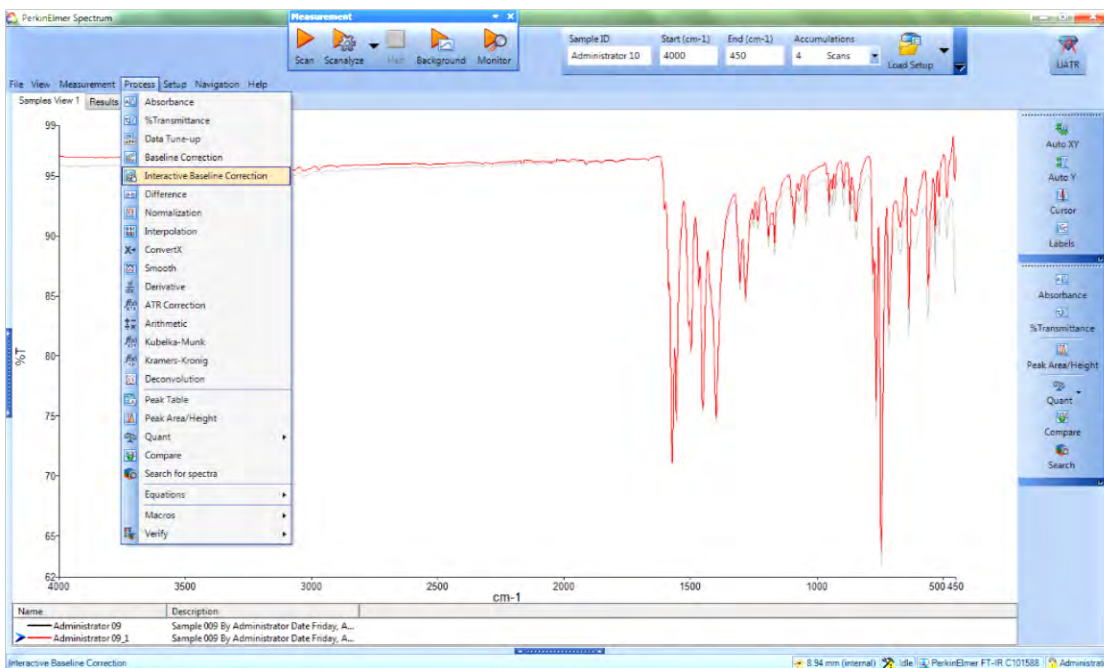


Figura 9. Corrección de línea de base.

2. Interpretación de espectros IR.

La interpretación se realizó con base a la información contenida en las tablas de correlación (Anexo A). La literatura expresa que no existen reglas estrictas para realizar la interpretación de un espectro IR, pero se consideran los siguientes aspectos:

- El espectro debe contar con resolución e intensidad de las señales adecuada.
- El espectro debe ser el de un compuesto lo más puro posible.
- El espectrofotómetro debe demostrar señales que se observen a sus frecuencias o longitudes de onda apropiadas, la calibración se comprueba obteniendo el espectro de una película de referencia de poliestireno.
- El tratamiento de la muestra, así como los reactivos, concentración, disolventes deben ser especificados^{8,12}.

Un espectro en el infrarrojo se representa en % de Transmitancia Vs Número de onda en cm^{-1} para estudios de análisis cualitativo y Absorbancia Vs Número de onda para análisis cuantitativo. En la región fundamental ($4000\text{-}1500\text{ cm}^{-1}$), se presentan señales de intensidad fuerte, debidas a vibraciones de alargamiento o stretching de los principales grupos funcionales. La región de las huellas digitales ($1500\text{-}400\text{ cm}^{-1}$) usualmente son señales de intensidad de media a débil y que tienen su origen en las vibraciones de deformación o bending, en esta región se encuentran las señales complementarias a las observadas en la región fundamental.

2.1 Indicaciones generales de la interpretación de un espectro IR.

- Se inicia la interpretación en la región fundamental y se buscan las señales complementarias en la región de las huellas digitales, la asignación se hace de acuerdo a las Tablas de Correlación, Anexo A.
- Se recomienda analizar la región de 4000 a 2250 cm^{-1} , en donde se presenta la absorción longitudinal del hidrógeno unido a C-H, N-H y O-H.
- Los enlaces más polares como el carbonilo o el nitro presentaran señales intensas debido a la diferencia en la electronegatividad de los átomos. Cuando estén presentes señales intensas de 1800 a 1600 cm^{-1} , iniciar la interpretación con estas señales, buscando las complementarias en la región de las huellas digitales para asignar la estructura del grupo funcional.
- Las señales complementarias para identificar un grupo funcional carbonilo en diferentes grupos funcionales dependen de la estructura particular de éste.

- Las señales que no tengan una asignación de acuerdo a las Tablas de Correlación, no forman parte de la interpretación, pero son características del compuesto en particular.
- Solo compuestos iguales presentan espectros iguales, sobre todo en la región de las huellas digitales.

3. Análisis y diseño de la biblioteca digital.

En la realización de una biblioteca digital se establecieron cuatro ejes para su diseño:

- Modelo de relación
- Diccionario de datos (Listado general de contenido)
- Esquema lógico de relación
- Diseño físico

3.1. Modelo de relación.

Para poder caracterizar y categorizar cada sección de la base es importante ver su forma de interacción.

Información ←-----> Compuesto----->Gráficos

Donde este modelo nos sirvió para establecer cómo se relacionarían los tres campos y en qué sentido.

- Compuesto: Representando a la unidad del conjunto de datos que se quiere catalogar. Listado de compuestos que contiene la biblioteca digital.
- Información: Determinada por la información característica de cada compuesto, que abarcan sus características de aplicación o uso.

- Gráficos: Espectros de cada compuesto con su correspondiente interpretación.

La información básica con la que se cuenta para cada compuesto es su información característica, número CAS, Fórmula condensada, Fórmula desarrollada, Nombre común.

3.2. Diccionario de datos.

Sección donde se estableció el formato de contenido para establecer su importancia y su forma de almacenamiento y recuperación de la información.

- Compuesto = número CAS + fórmula condensada + espectro IR con interpretación

Número CAS = número

Fórmula condensada = alfanumérico

Espectro IR = gráfico

Interpretación = alfanumérico

- Gráficos = espectros IR + interpretación + fórmula desarrollada.

espectros IR = gráficos

interpretación = alfanumérico

fórmula desarrollada = imagen

- Información: número CAS + hoja de seguridad + fórmula condensada + fórmula desarrollada + nombre común

*Número CAS = número

Fórmula Condensada = alfanumérico

Fórmula desarrollada = imagen

*Nombre común = texto

Nombre IUPAC= alfanumérico

Donde los datos señalados (*) son empleados como factor de búsqueda y así garantizar la información en la biblioteca digital.

VIII. RESULTADOS.

En el presente trabajo se obtuvieron e interpretaron los espectros en el infrarrojo medio de 67 compuestos de interés farmacéutico. Con la información obtenida y empleando la plataforma Wordpress se obtuvo como resultado la creación de una biblioteca digital a la que se puede acceder en la siguiente dirección electrónica:

<https://papimepe206115feszunam.wordpress.com>



Figura 10. Portada de inicio de la biblioteca digital.

La búsqueda de la sustancia de interés contenida en esta biblioteca digital se realiza siguiendo la ayuda del recuadro de búsqueda. La búsqueda puede ser a través de los indicadores que se muestran en la Figura 11. Para obtener un resultado más certero se recomienda utilizar el número CAS de la sustancia de interés.

Búsqueda

-Escriba un Nombre.
 -Número de Registro CAS.
 -Fórmula Molecular (Escribir coma ** en lugar de punto **Ejemplo: 86.16)
 Encierre Fórmula Molecular en (por ejemplo, [C₃H₆O]).

Figura 11. Cuadro de búsqueda con sugerencias de la biblioteca digital.

Al realizar la solicitud de búsqueda nos muestra una pantalla que indica la presencia de la información que deseamos consultar.

Resultados de búsqueda por: 849061-97-8

Quercetina
 POSTED ON 12 ABRIL, 2017 ACTUALIZADO ENN g ABRIL, 2018

Actividad terapéutica: Es un flavonoide que se encuentra presente como O-glicósidos, sus aplicaciones terapéuticas son diversas, siendo especialmente efectivo en el tratamiento y prevención de las enfermedades cerebrovasculares, la obesidad y el cáncer. Debido a su actividad antihistaminica hace que sea útil para la prevención de ataques alérgicos y asma. Numero CAS: 849061-97-8 Peso molecular: 302.236 [.]

Base de datos
 POSTED ON 11 ABRIL, 2017 ACTUALIZADO ENN 13 ABRIL, 2018

Nombre común Nombre IUPAC Fórmula desarrollada CAS 4-metil- aminoantipirina 4-metilaminoantipirina 83-07-8 Acetato de Etilo Metanoato de etilo 141-78-6 Acetofenona Fenilmetilcetona g8-86-2 Acetona 2-propanona 67-64-1 Acetonitrilo Acetonitrilo 75-05-8 Ácido acetilsalicílico Ácido 2-(acetoxil)benzoico 50-78-2 Ácido ascorbico Ácido L-ascórbico (R)-5-(S)-1,2-dihidroxi-etil-3,4-dihidroxi-5H-furan-2-ona 50-81-7 Ácido nalidixico Ácido [.]

Búsqueda

-Escriba un Nombre.
 -Número de Registro CAS.
 -Fórmula Molecular (Escribir coma ** en lugar de punto **Ejemplo: 86.16)
 Encierre Fórmula Molecular en (por ejemplo, [C₃H₆O]).

Figura 12. Pantalla de resultados de búsqueda en la biblioteca digital.

Seguido el usuario hace la solicitud sobre el nombre del compuesto y obtiene la página con la información que desea consultar.

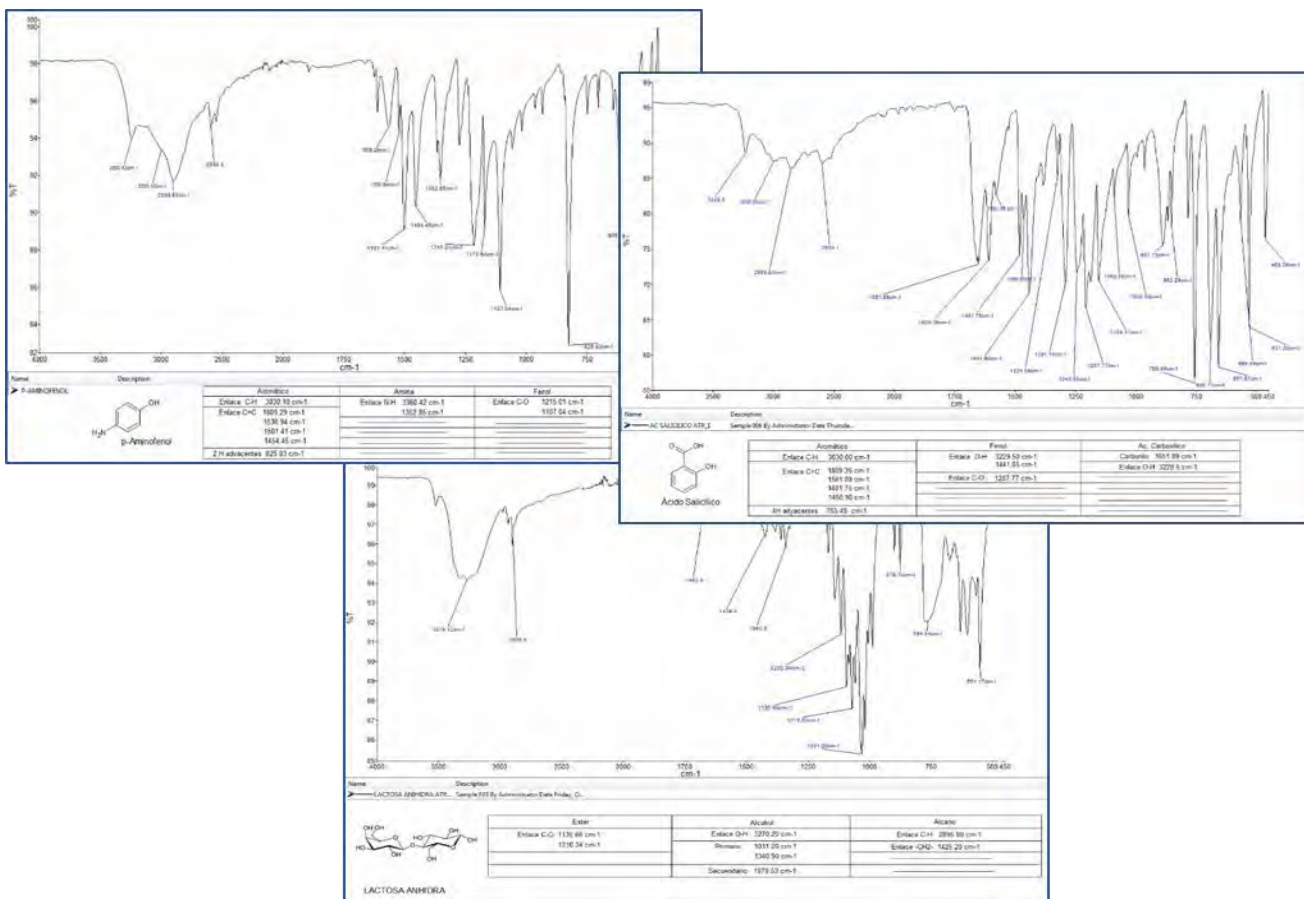


Figura 13. Visualización de espectros con interpretación en la biblioteca digital.

Aquí el usuario podrá consultar la información que desea de la sustancia si se encuentra disponible junto con su espectro infrarrojo con interpretación ya sea de algún principio activo, materia prima o sustancias relacionadas entre otras.

La inclusión de la información en esta base de datos se realizó en un periodo de 6 meses, los primeros 3 meses de diciembre de 2017, enero y febrero de 2018, donde se ingresó dentro de la biblioteca espectros sin interpretación, el segundo periodo comprendido los meses de marzo, abril y mayo de 2018, se incluyó la interpretación de los espectros, lo que permitió observar un aumento en el número de consultas.

En la Figura 14 se muestran las consultas en una grafica de frecuencia para ambos periodos; posterior a esto empleando las herramientas de consulta de la plataforma

fue posible visualizar los países de donde procedían las consultas con un total de 29 países de los cuales destacan los de habla hispana con el 62.06% y el 37.93% restante países como Estados Unidos, Japón y Suiza entre otros. Figura 15.

A los datos del Cuadro 2 se les realizó un tratamiento estadístico que consistió en una comparación de hipótesis a los dos periodos, comparando las desviaciones estandar y las medias para comprobar si existía o no una diferencia significativa que mostrara la influencia de los espectros con interpretación respecto a los que no cuentan con ella. El número de consultas se presenta en el cuadro 3, al realizar el estudio estadístico con una $n=3$ por periodo y con significancia de 0.05, se vio como resultado para la desviación estandar que el comportamiento interno de cada periodo es similar en el número de las consultas, el cual fue determinado por F de Fisher; sin embargo al momento de comparar las medias se encontró que si existe una diferencia significativa entre periodos empleando el valor de Z para su determinación como se muestra en el cuadro 6 y 7.

Frecuencia de consultas

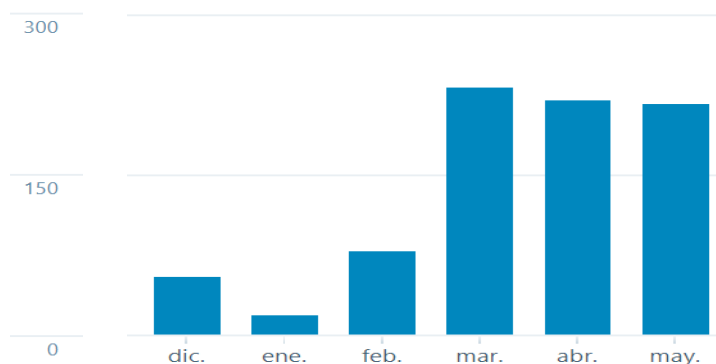


Figura 14. Frecuencia de consultas de (diciembre 2017 a mayo 2018).

Cuadro 2. Número de consultas por mes.

Meses	Número de visitas
Diciembre	51
Enero	18
Febrero	78
Marzo	231
Abril	217
Mayo	214

Países visitantes

País

-  México
-  Colombia
-  Chile
-  España
-  Perú
-  Venezuela
-  Ecuador
-  Brasil
-  Argentina
-  Guatemala
-  Puerto Rico
-  Bolivia
-  Costa Rica
-  Estados Unidos
-  Cuba
-  Nicaragua
-  El Salvador
-  Reino Unido
-  Alemania
-  Uruguay
-  Japón
-  Panamá
-  Paraguay
-  Canadá
-  Rumanía
-  Polonia
-  Francia
-  Turquía
-  Suiza

Figura 15. Países de origen de consultores.

Cuadro 3. Hipotesis nulas y alternas para desviación estándar y medias.

Hipótesis			
Desviación estándar	Medias		
Ho	$\sigma_B^2 \leq \sigma_A^2 : \frac{\sigma_B^2}{\sigma_A^2} \leq 1$	Ho	$\mu_1 - \mu_2 = 0$
Ha	$\sigma_B^2 > \sigma_A^2 : \frac{\sigma_B^2}{\sigma_A^2} > 1$	Ha	$\mu_1 - \mu_2 \neq 0$

Cuadro 4. Número de visitas por periodos, periodo 1 (Diciembre, Enero, Febrero) y periodo 2 (Marzo, Abril, Mayo).

	MES	CONSULTAS
PERIODO CON ESPECTROS SIN INTERPRETACIÓN	1	51
	2	18
	3	78
PERIODO CON ESPECTROS CON INTERPRETACIÓN	4	231
	5	217
	6	214

Cuadro 5. Tratamiento de datos estadísticos

α 0.05	A	B
	SIN INTERPRETACIÓN	CON INTERPRETACIÓN
N	3	3
Promedio	49	220.6666667
DESVES	30.0499584	9.073771726
Gl	2	2

Cuadro 6. Calculo de f de fisher en para desviacion estandar.

Desviación estándar

Calcular F de Fisher		F de Fisher de tablas	
F	0.0915	$F_{0.95, 2, 2}$	19.000

Conclusión: con el 95 % de confianza se puede afirmar que la varianza Inter periodo correspondiente A y B son estadísticamente iguales

Cuadro 7. Calculo de Z para medias

Medias

Calculo de Z		Z de tablas	
Z	-47.5429	$Z_{0.975}$	0.166

Conclusión: con el 95 % de confianza se puede afirmar que las medias del periodo A (1,2 y 3), son diferentes que las del periodo B (4,5 y 6).

IX. DISCUSIÓN.

En la interpretación de un espectro puede que se encuentren diferentes casos durante su interpretación:

1. El espectro obtenido proviene de un compuesto que es completamente desconocido y se requiere una identificación: los ejemplos incluyen muestras forenses, muestras de desechos ambientales o compuestos donde se ha sintetizado o descubierto un nuevo material, en donde se recomienda completarse con espectros de RMN de ^1H , ^{13}C y EM.

2. La muestra (o espectro) es desconocida y debe caracterizarse o clasificarse; los ejemplos incluyen aplicaciones comerciales donde se incluyen nuevos aditivos o componentes en un material para proporcionar una propiedad específica; en tales casos, esto podría considerarse la base del análisis competitivo de productos.

3. La muestra generalmente es conocida, pero se debe determinar la existencia de una clase química específica: los ejemplos incluyen análisis de contaminantes, análisis por razones toxicológicas o ambientales y aditivos.

4. La muestra es completamente conocida y se requiere la interpretación para confirmar la composición y / o calidad del material. Los ejemplos incluyen el control de calidad del producto y la confirmación de una estructura o funcionalidad de una nueva síntesis.

Partiendo desde la generación de un espectro o el tratamiento de una muestra debe estar disponible ya que este puede proporcionar información importante sobre su naturaleza y así ayudar a la interpretación.

El término desconocido se usa porque así es como las personas a menudo ven el proceso de interpretación; sin embargo, en rara vez hay verdaderas incógnitas, la razón de la interpretación es proporcionar información implícita de la muestra. Esto como mínimo debe incluir un conocimiento de cómo se preparó la muestra, si es un sólido, líquido o gas, o algún estado mixto y las características físicas ^{56,57,58}.

La variación de las señales de grupos funcionales en un amplio rango es debida a las complejas vibraciones internas de la molécula, aunque, existen señales de absorción que representan el predominio de un solo modo vibracional. Tal es el caso de las formas de estiramiento del enlace C-H, O-H y C=O.

La ausencia de absorción en los intervalos asignados para los diversos grupos funcionales implica la ausencia de tales grupos en la molécula. Se debe tener cuidado con las señales que sean extremadamente anchas para que pueda ocultar otra señal.

La región del espectro comprendida entre 1500-450 cm^{-1} , es frecuente que las señales se muestren con un patrón complejo, a pesar de ello esta parte del espectro es extremadamente valiosa cuando se examina como complemento en referencia a la región fundamental.

Para tener una buena conclusión, se debe analizar en combinación las señales particulares en la región fundamental y confirmarse siempre que sea posible mediante la región de huellas digitales del espectro.

Compuestos con estructuras moleculares similares pueden dar espectros prácticamente idénticos, pero las diferencias en la región de las huellas digitales se pueden detectar con una escala vertical expandida.

Para iniciar la interpretación Robert M. Silverstein recomienda no intentar una vista literal y sistemática en un espectro infrarrojo, si no buscar evidencia de la presencia o ausencia de los grupos funcionales comunes con absorciones muy características, comenzando por C=O y NO₂ ya que su presencia es fácilmente detectable debido a la diferencia de electronegatividad de los átomos se presentan como señales intensas entre 1800-1600 cm⁻¹ ^{12,54}.

En el proceso de interpretación esta puede ser considerada como difícil, en especial cuando no se cuenta con la habilidad o experiencia para realizarlo ⁵⁹.

Las señales del espectro IR fueron identificados e interpretados en conjunto a la identificación de grupos funcionales en las moléculas seleccionadas con la ayuda de las tablas de correlación de estructura-gráfico.

Las alturas de picos de transmitancia de cada muestra se tomaron en la región de 4000 cm⁻¹ a 450 cm⁻¹ donde existe una fuerte absorción de los grupos funcionales.

Se puede observar un ejemplo de espectro de una muestra de ácido acetilsalicílico en la Figura 9 y la tabla con las señales asignadas a su interpretación.

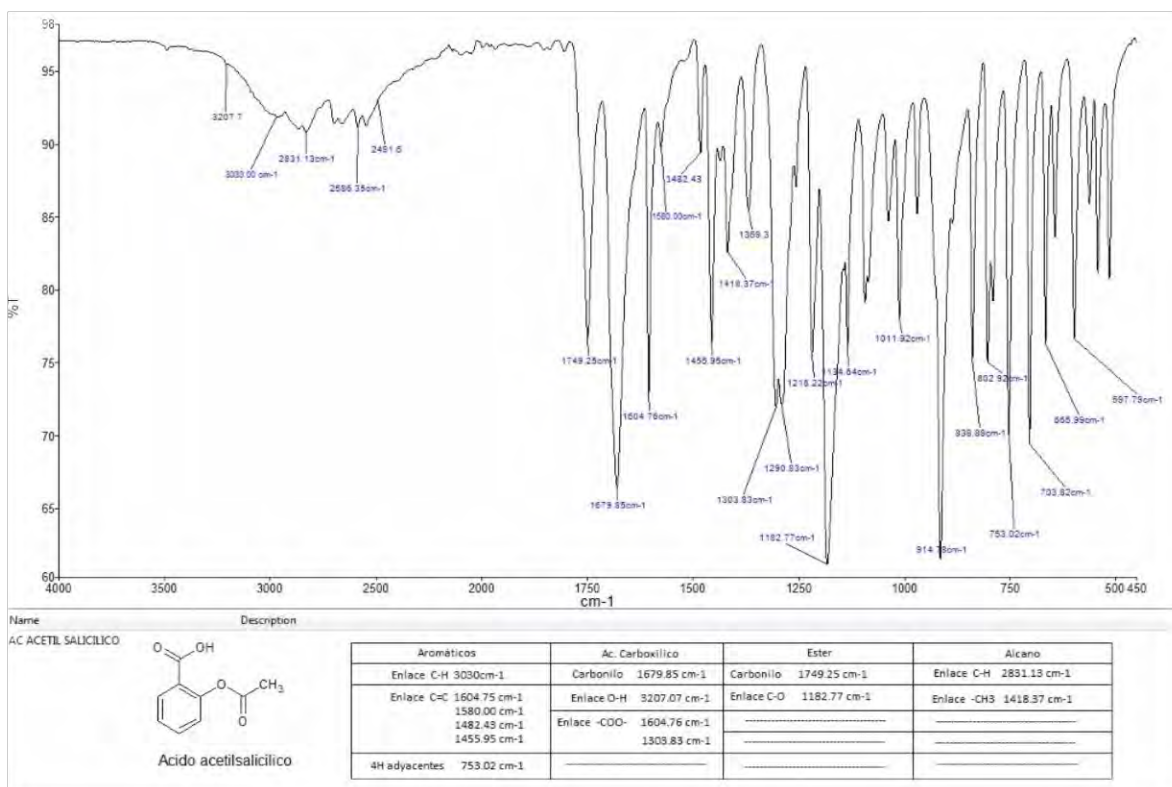


Figura 16. Espectro de ácido acetil salicílico con señales.

En la figura 16 se muestra el espectro IR del ácido acetil salicílico, se observa una señal fuerte a 1679.85 cm^{-1} que se asigna a la vibración de alargamiento del grupo C=O, la señal ancha desde 3207.7 a 2491.6 cm^{-1} corresponde a la vibración de alargamiento -O-H presentes en el grupo -COOH. El anillo aromático se identifica con las señales de 1604.76 a 1500 cm^{-1} que corresponden a la vibración de alargamiento del enlace C=C del anillo, se puede observar que el espectro presenta vibraciones derivadas de la presencia de anillo aromático, la señal a 753.02 cm^{-1} corresponde a las señales de vibración de deformación C-H en el anillo aromático y corresponde a un anillo con cuatro H adyacentes que son propios de las vibraciones de deformación, para el grupo éster se observa la señal de alargamiento para el

C=O a 1749.25 cm^{-1} y la señal 1182.77 cm^{-1} corresponde a la vibración de deformación C-O-H. El grupo CH₃ se identifica por la señal a 1369.3 cm^{-1} ^{60,61,62,63}.

X. CONCLUSIONES.

- Se desarrolló una biblioteca digital en línea que almacena de manera organizada 67 espectros en el infrarrojo obtenidos de compuestos con interés farmacéutico de forma experimental.
- Para cada compuesto se incluyó el espectro IR con su interpretación mediante el uso de tablas de correlación (Anexo A) y se adicionó información disponible en la literatura, aplicación o uso, nomenclatura IUPAC, nombre común y número CAS.
- La consulta en línea en dos periodos de tiempo iguales, el primero sin interpretación y segundo con interpretación mostro un aumento en las consultas lo cual fue estadísticamente significativo.
- Los resultados del presente trabajo muestran una oportunidad de mejora que logro captar el interés del público usuario.

XI. PERSPECTIVAS.

Al ser una plataforma en línea con capacidad multiusuario se sugiere que ésta sea introducida dentro de las plataformas de la UNAM para lograr una mayor difusión y alcance en el público usuario, así como el aumento de información de la biblioteca en su contenido tomando como punto de referencia la inclusión de todos los fármacos y aditivos que contiene la Farmacopea de los Estados Unidos Mexicanos en su versión más reciente.

XII. REFERENCIAS.

1. Antonio M, Cantellano G, Manuel L, Zetina M. La espectroscopia y su tecnología : Un repaso histórico y su importancia para el siglo XXI. 2015.
2. Barbara J. Debska and Barbara Guzowska-´Swider. Spectral Databases, Infrared Encyclopedia of Analytical Chemistry, 2006 John Wiley & Sons, Ltd.
3. Stuart BH. Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications. Vol. 8, Methods. 2004. 224 p.
4. W.J. Price, A Course in the principles and practice of infrared spectroscopy, Pye Unicam Ltd 3er edición, York Street Cambrige, England 1973.
5. Schrader B. Infrared and Raman Spectroscopy-Methods and Applications. Infrared and Raman Spectroscopy - Methods and Applications. 1994. 640 p.
6. Larkin PJ. "IR and Raman Spectroscopy - Principles and Spectral Interpretation". Vasa. 2011. 1-239 p.
7. H. Stephen L. *A World History of Rubber: Empire, Industry, and the Everyday*. Chichester, UK ; Malden, MA : John Wiley & Sons 2016.
8. Bellamy L.J. The Infrared Spectra Of Complex Molecules. Vol I, Vol. II. New York, 1975.
9. Nakanishi K. Infrared Absortin Spectroscopy. 2a ed. Holden Day Inc. San Francisco, 1977
10. 8-inch floppy disk (1971 – early 1980s) – Museum Of Obsolete Media [Internet]. [citado el 26 de marzo de 2018]. Disponible en: <http://www.obsoletemedia.org/8-inch-floppy-disk/>
11. Fontal B. El Espectro Electromagnético y sus Aplicaciones. Escuela de la Ingenieria. 2005;1:24.
12. Silvertain R.M., Webster F.X., Kiemie D., Spectroscopy. 6a. Ed., 1998.
13. Skoog A. D., West D. M. Análisis instrumental. 2a. edición, México: Nueva Editorial Interamericana; 1987.

14. Cano J. Zavalza D. Introducción a la espectroscopia de infrarrojo. México, Perkin Elmer de México, 1985.
15. Van Eerdenbrugh B, Taylor LS. Application of mod-IR spectroscopy for the characterization of pharmaceutical systems. *Int J Pharm.* 2011;(1-2):3-16
16. Comisión permanente de la Farmacopea de los Estados Unidos Mexicanos. Farmacopea de los Estados Unidos Mexicanos (FEUM) 11 ed. México; 2015.
17. Notas para el curso básico de espectroscopia infrarroja, México, Perkin Elmer de México, 1995
18. Remington's; Farmacia, Tomos I y II, 17a. edición, Argentina, Editorial Médica Panamericana, pp. 846-848, 851-859, 1521, 1990
19. H.H. Willard, L.L. Merritt, J.A. Dean, F.A. Settle, Métodos Instrumentales de Análisis, 7a Edición, Grupo Editorial Iberoamérica, México, 1992
20. De Fuentes NM, Bosch OC, Sánchez RF. Aplicación de la Espectroscopia del Infrarrojo Medio en Química Analítica de Procesos. *Bol Sociedad Química de México.* 2009; 57:567-588.
21. Bernal-Pérez, Taxonomía de onicóforos de Santander, Colombia y termogravimetría, calorimetría de barrido diferencial y espectroscopía infrarroja de la secreción adhesiva Javier Revista de biología tropical. Vol. 57, Revista de Biología Tropical. Universidad de Costa Rica; 2009. 567-588 p.
22. Lenhardt L, Zeković I, Dramićanin T, Tešić, Milojković-Opsenica D, Dramićanin MD. Authentication of the botanical origin of unifloral honey by infrared spectroscopy coupled with support vector machine algorithm. *Phys Scr.* 2014;T162.
23. Dégardin K, Guillemain A, Guerreiro NV, Roggo Y. Near infrared spectroscopy for counterfeit detection using a large database of pharmaceutical tablets. *J Pharm Biomed Anal.* 2016;128:89–97.
24. Dębska BJ, Guzowska-Świder B. Knowledge discovery in an infrared database. *Comput Chem.* 1997;21(1):51–9.
25. Convention TUSP. 2007 Usp 30 Nf 25. Farm los Estados Unidos América Formulario Nacional. 2007;2:1464.

26. Técnicas de muestreo de FTIR: Reflectancia total atenuada (ATR); Disponible en:

<https://www.thermofisher.com/es/es/home/industrial/spectroscopy-elemental-isotope-analysis/spectroscopy-elemental-isotope-analysis-learning-center/molecular-spectroscopy-information/ftir-information/ftir-sample-handling-techniques/ftir-sample-handling-techniques-attenuated-total-reflection-atr.html>

27. Soler Aranza, Construcción de una biblioteca digital de aceites de oliva virgen extra andaluces basada en técnicas de IR, RMN, DAMAN e IRMS. (2014); Disponible en: OAlster.

28. Bash E. Ley Especial contra los Delitos Informáticos. PhD Propos. 2015;1:1–7. Gaceta Republica Bolivariana de Venezuela.

29.- Rojano Ramos S, López Guerrero M del M, López Guerrero G, Rojano Ramos S, López Guerrero M del M, López Guerrero G. Desarrollo de tecnologías de la información y la comunicación para reforzar los procesos de enseñanza y aprendizaje en ciencias en el grado de maestro/a en educación infantil de la Universidad de Málaga. Educ Química. 2016;27(3):226–32.

30.- Morán A, Nacional U, México A De. El derecho a la información como elemento integrador para la conformación de un Estado plural The right to information as an integrating element for the formation of a plural State. 2017;15(1):15–24

31. Villareal O, Landeta J. El estudio de casos como metodología de investigación científica en dirección y economía de la empresa. Una aplicación a la internacionalización. Investig Eur Dir y Econ la Empres. 2010;16(3):31–52.

32. Acuerdo número 450 por el que se establecen los Lineamientos que regulan los servicios que los particulares brindan en las distintas opciones educativas en el tipo medio superior. Diario Oficial de la Federación, 16 de diciembre de 2008

33. Gascón Muro P. El sentido de las redes, Fuga de cerebros, movilidad académica, redes científicas. Perspectivas latinoamericanas. 2009. 221-232 p.

34. Beck U. La Sociedad del Riesgo Hacia una nueva modernidad, PAIDÓS, Ed 1er, Barcelomna España. 1998.

35. Belloch Orti C. Las tecnologías de la información y comunicación (t.i.c.). Universidad de Valencia, Unidad Tecnología Educativa . 1998;1–7.

36. Said Mm, Gibbons, Moffat Ac, Zloh M. Rapid Detection of Sildenafil Analogue in Eurycoma Longifolia Products Using a new two-tier procedure of the near infrared (NIR) Spectra Database. *Food Chem.* 2014;158:296–301.
37. Date CJ. Introducción a los sistemas de bases de datos [Internet]. 2001. xxii +936.
38. Pérez Mora O, Martín Escofet C, Gibert Ginestà M, Costal Costa D, Casillas Santillán LA, Paré RC. *Bases de datos.* 2005. 460 p.
39. Ponniah P. *Database design and development, an essential guide for it professionals,* Wiley-Interscience a John Wiley and Sons, INC. Publication, United States Of America; 2003
40. Mercedes Marqués. *Bases de Datos.* Univ Jaume I Castelló. 2009;217.
41. Rodríguez Yunta L. *Bases de datos documentales: estructura y principios de uso.* En: Maldonado Ángeles (coord.). *La información especializada en Internet.* Madrid. Cindoc. 2001;1–14.
42. Berzal, Fernando, Departamento de ciencias de la computación e I.A. *Introducción a las bases de datos.* Universidad de Granada. 2013.
43. Lowry SR, Huppler DA, Anderson CR. Database Development and Search Algorithms for Automated Infrared Spectral Identification. *J Chem Inf Comput Sci.* 1985;25(3):235–41.
44. *Espectroscopía Infrarroja (FT-IR)* Universidad de Burgos [Internet].
45. Mcmillan G, Casadio F, Fiedler I, Sorano-Stedman V. and Investigation Into Kandinsky'S Use of Ripolin in His Paintings After 1930. *J Am Inst Conserv.* 2013;52(4):258–77.
46. Jaureguiberry M, Madoz L, Giuliadori M, Drillich M, De la Sota R. *Espectrofotometría infrarroja transformada de Fourier para identificar bacterias uterinas patógenas en vacas lecheras.* *Revista Veterinaria Univ.Vet. Med.Vienna.* (2016, Nov), 27(2): 75.
47. Chu PM, Guenther FR, Rhoderick GC, Lafferty WJ. The NIST Quantitative Infrared Database. *J Res Natl Inst Stand Technol.* 1999;104(1):59–81.

48. Ruprecht M, Clerc J-T. Performance analysis of a simple infrared library search system. *J Chem Inf Comput Sci* . 1985;25(3):241–4.
49. Agnello A, Carré C, Billen R, Leyh B, De Pauw E, Damblon C. ULg Spectra: An Interactive Software Tool to Improve Undergraduate Students' Structural Analysis Skills. *J Chem Educ*. 2018;95(2):276–80.
50. Birk P, Sophia-antipolis UDN, Cedex FN. Computer-assisted learning: IRexpert, an infrared interpretation assistant. :120–5.
51. Farmacopea Europea, 9a. Edición 2017 European Pharmacopeia.
52. Pharmacopoeia J. Japanese Pharmacopoeia. Powder Diffr. 16 ed. Japanese. 20011;20011(285):1–1654.
53. Żarnowiec P., Czerwonka G., Kaca W. (2017) Fourier Transform Infrared Spectroscopy as a Tool in Analysis of *Proteus mirabilis* Endotoxins. In: Holst O. (eds) *Microbial Toxins. Methods in Molecular Biology*, vol 1600. Humana Press, New York, NY
54. Kiefer J, Radzuan M, Winterburn J. Infrared Spectroscopy for Studying Structure and Aging Effects in Rhamnolipid Biosurfactants. *Appl Sci [Internet]*. 2017;7(6):533.
55. Deconinck E, Aouadi C, Bothy JL, Courselle P. Detection and identification of multiple adulterants in plant food supplements using attenuated total reflectance—Infrared spectroscopy. *J Pharm Biomed Anal [Internet]*. 2018;152:111–9.
56. Coates J. Interpretation of Infrared Spectra, A Practical Approach. *Encycl Anal Chem*. 2006;1–23.
57. Lee K, Lankers M, Valet O. Raman, Infrared, and Laser-Induced Breakdown Spectroscopy Identification of Particles in Raw Materials. *Appl Spectrosc*. 2018;72(2):305–15.
58. Strzemeski M, Wójciak-Kosior M, Sowa I, Agacka-Mołdoch M, Drączkowski P, Matosiuk D, et al. Application of Raman spectroscopy for direct analysis of *Carlina acanthifolia* subsp. *utzka* root essential oil. *Talanta*. 2017;174:633–7.
59. Hoskote AU, Tume LN, Trieschmann U, Menzel C, Cogo P, Brown KL, et al. A Cross-Sectional Survey of Near-Infrared Spectroscopy Use in Pediatric Cardiac ICUs in the United Kingdom, Ireland, Italy, and Germany. *Pediatr Crit Care Med*. 2016;17(1):36–44.

60. Oyerinde A, Bello E. Use of Fourier Transformation Infrared (FTIR) Spectroscopy for Analysis of Functional Groups in Peanut Oil Biodiesel and Its Blends. *Br J Appl Sci Technol*. 2016;13(3):1–14.
61. Singh A. Interpretation of Chanaka Yoga by Fourier transform infrared spectroscopy. 2016;2016(1):82–6.
62. Cataldo F, Ursini O, Milani A, Casari CS. One-pot synthesis and characterization of polyynes end-capped by biphenyl groups (α,ω -biphenylpolyynes). *Carbon N Y*. 2018;126:232–40.
63. Zimmerman B, Tafintseva V, Bałcióńlu M, Høegh Berdahl M, Kohler A. Analysis of Allergenic Pollen by FTIR Microspectroscopy. *Anal Chem*. 2016;88(1):803–11.

ANEXO A. Tablas de correlación.

TABLAS DE CORRELACIÓN PARA LA INTERPRETACIÓN DE ESPECTROS IR

A. HIDROCARBURO ALIFÁTICO Y AROMÁTICO.

Buscar en el espectro IR la señal C-H para cada tipo de hidrocarburo indicada en el inciso 1 (región fundamental), dependiendo de esta se busca su complemento en la región de las huellas digitales de acuerdo a los datos indicados en los incisos 2 y 3.

1. C-H: Vibraciones de alargamiento o stretching (ν)			
GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
a. Alcano	3.38-3.51	m-f	2962-2853
b. Alqueno monosustituido (terminal o vinilo)	3.29-3.32 y 3.23-3.25	m	3040-3120 3095-3075
Alqueno disustituido, <i>cis</i>	3.29-3.32	m	3040-3010
Alqueno disustituido, <i>trans</i>	3.29-3.32	m	3040-3010
Alqueno disustituido, <i>gem</i>	3.23-3.25	m	3095-3075
Alqueno trisustituido	3.29-3.32	m	3040-3010
c. Alquino	≈ 3.03	f	≈ 3300
d. Aromático	≈ 3.30	v	≈ 3030
e. Metoxi $\text{CH}_3\text{-O-}$			2850-2815
2. C-H: Vibraciones de deformación o bending (δ)			
a. Alcano, C-H	≈ 7.46	d	≈ 1340
Alcano, $-\text{CH}_2-$	6.74-6.92	m	1485-1445
Alcano, $-\text{CH}_3$	6.80-7.00 y 7.25-7.30	m f	1470-1430 1380-1370
Alcano, <i>gem</i> -dimetil	7.22-7.25 y 7.30-7.33	f f	1385-1380 1370-1365
Alcano, <i>ter</i> -butil	7.17-7.22 ≈ 7.33	m f	1395-1385 ≈ 1365
b. Alqueno monosustituido (vinilo)	10.05-10.15 10.93-11.05 y 7.04-7.09	f f f	995-985 915-905 1420-1410
Alqueno disustituido, <i>cis</i>	≈ 14.5	f	≈ 690
Alqueno disustituido, <i>trans</i>	10.31-10.42 y 7.42-7.72	f m	970-960 1310-1295
Alqueno disustituido, <i>gem</i>	11.17-11.30 y 7.04-7.09	f f	895-885 1420-1410
Alqueno trisustituido	11.90-12.66	f	840-790
c. Alquino	≈ 15.9	f	≈ 630
d. Aromático, tipo de sustitución			
Cinco átomos de H adyacentes	≈ 13.3 y ≈ 14.3	v,f v,f	770-730 710-690
Cuatro átomos de H adyacentes	≈ 13.3	v,f	770-735
Tres átomos de H adyacentes	≈ 12.8	v,m	810-750
Dos átomos de H adyacentes	≈ 12.0	v,m	860-800

Un átomo de H	≈11.3	v,d	900-860
---------------	-------	-----	---------

Hidrocarburos, continuación...

3. ENLACE MÚLTIPLE C-C: Vibraciones de alargamiento o stretching (v).			
GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
a. Alqueno no conjugado	5.95-6.17	v	1680-1620
Alqueno monosustituido (vinilo)	≈6.08	m	≈1645
Alqueno disustituido, <i>cis</i>	≈6.03	m	≈1658
Alqueno disustituido, <i>trans</i>	≈5.97	m	≈1669
Alqueno disustituido, <i>gem</i>	≈6.05	m	≈1653
Alqueno trisustituido	≈5.99	m	≈1669
Alqueno tetraustituido	≈5.99	d	≈1669
Dieno	≈6.06	d	≈1650
	≈6.25	d	≈1600
b. Alquino monosustituido	4.67-4.76	m	2140-2190
Alquino disustituido	4.42-4.57	v, d	2260-2190
c. Aleno	≈5.1	m	≈1960
	y ≈9.4	m	≈1060
d. Aromático	≈6.25	v	≈1600
	≈6.33	v	≈1580
	≈6.67	m	≈1500
	y ≈6.90	m	≈1450

B. CARBONILO C=O

1. C=O CETONAS: Vibraciones de alargamiento o stretching (v)

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
a. Saturada, de cadena abierta	5.80-5.87	f	1725-1705
b. Saturada, cíclica :			
Anillo de 6 carbonos y superior	5.80-5.87	f	1725-1705
Anillo de 5 carbonos	5.71-5.75	f	1750-1740
Anillo de 4 carbonos	≈5.63	f	≈1775
c. α,β -insaturada de cadena abierta	5.94-6.01	f	1685-1665
d. α,β -insaturada cíclica			
Anillo de 6 carbonos y superior	5.94-6.01	f	1685-1665
Anillo de 5 carbonos	5.80-5.85	f	1725-1708
e. $\alpha,\beta,\alpha',\beta'$ -insaturada de cadena abierta	5.99-6.01	f	1670-1663
f. Arilo	5.88-5.95	f	1700-1680
g. Diarilo	5.99-6.02	f	1670-1660
h. α -dicetona	5.78-5.85	f	1730-1710
i. β -dicetona (enólica)	6.10-6.50	f	1640-1540
j. 4-quinonas	5.92-6.02	f	1690-1660
k. Cetonas: $-\text{C}=\text{C}=\text{O}$	≈4.65	f	≈2150

2. ALDEHÍDOS: Vibraciones de alargamiento o stretching (v). Se deben observar las señales indicadas en el inciso a y b, para asegurar la presencia de este grupo funcional.

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
a. C=O Saturado alifático	5.75-5.81	f	1740-1720
α, β -insaturado alifático	5.87-5.95	f	1705-1680
$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ -insaturado alifático	5.95-6.02	f	1680-1660
Arilo	5.83-5.90	f	1715-1695
b. C-H Dos señales	3.45-3.55 y 3.60-3.70	d d	2900-2820 y 2775-2700

3. C=O ÁCIDOS CARBOXÍLICOS: Vibraciones de alargamiento o stretching (ν). Se deben observar las señales indicadas en el inciso a y b o a y c, para asegurar la presencia de este grupo funcional.

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
a. C=O Saturado alifático	5.80-5.88	f	1725-1700
α, β -insaturado alifático	5.83-5.92	f	1715-1690
Arilo	5.88-5.95	f	1700-1680
b. -O-H Asociado, varias señales	3.70-4.00		3500-2500
c. $-\text{COO}^-$ Anión carboxilato	6.21-6.45 y 7.15-7.69	f f	1610-1550 1400-1300

4. C=O DE ÉSTERES: Vibraciones de alargamiento o stretching (ν). Además de las señales del carbonilo se deben observar las señales C-O de acuerdo a los valores indicados para estos átomos en la sección de alcoholes y fenoles.

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
a. Saturado de cadena abierta	5.71-5.76	f	1750-1730
Saturado cíclico :			
δ -lactonas y anillos superiores	5.71-5.76	f	1750-1735
γ -lactonas	5.62-5.68	f	1780-1760
β -lactonas	≈ 5.50	f	1820
Insaturado :			
Éster tipo vinílico	5.56-5.65	f	1800-1770
α, β -insaturado y arilo	5.78-5.82	f	1730-1717
δ -lactona- α, β -insaturada	5.78-5.82	f	1730-1717
γ -lactona- α, β -insaturada	5.68-5.75	f	1760-1740
γ -lactona- β, γ -insaturada	≈ 5.56	f	≈ 1800
d. α -cetoésteres	5.70-5.75	f	1755-1740
e. β -cetoésteres, enólico	≈ 6.06	f	≈ 1650
f. Carbonatos	5.62-5.75	f	1780-1740

5. AMIDAS: Vibraciones de alargamiento o stretching (ν). Se deben observar las señales indicadas en el inciso a, b y c.

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
a. ENLACE C=O: Vibraciones de alargamiento o stretching (ν).			
C=O Primaria, solución concentrada	≈ 6.06	f	≈ 1650
Primaria, solución diluida	5.92	f	≈ 1690
Secundaria, solución concentrada	5.95-6.14	f	1680-1630

Amidas, continuación...

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
Secundaria, solución diluida	5.88-5.99	f	1700-1670
Terciaria, cualquier solución	5.99-6.14	f	1670-1630

Cíclica, δ -lactama	≈ 5.95	f	≈ 1680
Cíclica, γ -lactama	≈ 5.88	f	≈ 1700
Cíclica, γ -lactama, condensada con anillo	5.71-5.88	f	1750-1700
Cíclica, β -lactama	5.68-5.78	f	1760-1730
Cíclica, β -lactama, condensada con anillo	5.62-5.65	f	1780-1770
Ureas acíclicas	≈ 6.02	f	≈ 1660
Uretanos	5.75-5.92	f	1740-1690
Imidas, cadena abierta	≈ 5.85 y	f	≈ 1710
	≈ 5.88	f	≈ 1700
Imidas cíclicas. Anillos de 6	≈ 5.85	f	≈ 1710
	y ≈ 5.88	f	≈ 1700
Imidas cíclicas insaturada, anillo de 6	≈ 5.78	f	≈ 1730
	y ≈ 5.99	f	≈ 1670
Imidas cíclicas, anillo de 5	≈ 5.65	f	≈ 1770
	y ≈ 5.88	f	≈ 1700
Imidas cíclicas α,β -insaturada, anillo de 5	≈ 5.58	f	≈ 1790
	≈ 5.85	f	≈ 1710
b. ENLACE N-H: Vibraciones de alargamiento o stretching (ν).			
N-H Primaria libre, dos señales	≈ 2.86	m	≈ 3500
	y ≈ 2.94	m	≈ 3400
Primaria ligada, dos señal	≈ 2.99	m	≈ 3350
	y ≈ 3.15	m	≈ 3180
Secundaria libre, una señal	≈ 2.92	m	≈ 3430
Secundaria ligada, una señal	3.00-3.20	m	3320-3140
c. ENLACE N-H: Vibraciones de deformación (δ).			
Amida primaria	6.17-6.19	f	1620-1590
Amida secundaria	6.45-6.62	f	1550-1510

6. C=O CARBONILO DE ANHÍDRIDOS. Vibraciones de alargamiento o stretching (ν)

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
Saturado, cadena abierta	5.41-5.56	f	1850-1800 y
	y 5.59-5.75	f	1790-1740
α,β -insaturado y arilo, cadena abierta	5.47-5.62	f	1830-1780 y
	y 5.65-5.81	f	1770-1720
Saturado, anillo de 5	5.35-5.49	f	1870-1820 y
	y 5.56-5.71	f	1800-1750
α,β -insaturado, anillo de 5	5.41-5.56	f	1850-1800 y
	y 5.47-5.62	f	1830-1780

7. C=O HALOGENUROS DE ACILO: Vibraciones de alargamiento o stretching (ν)

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
Fluoruros de acilo	≈ 5.41	f	≈ 1850
Cloruros de acilo	≈ 5.57	f	≈ 1795

Bromuros de acilo	≈5.53	f	≈1810
α,β-insaturados y arilo	5.61-5.72 y 5.72-5.82	f m	1780-1750 y 1750-1720
COF ₂	5.19	f	1928
COCl ₂	5.47	f	1828
COBr ₂	5.47	f	1828

C. GRUPOS DIVERSOS

1. ALCOHOLES Y FENOLES.

a. ENLACE O-H: Vibraciones de alargamiento o stretching (ν).			
GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm ⁻¹
O-H libre	2.74-2.79	v,a	3650-3590
Compuestos de asociación simple	2.82-2.90	v,a	3550-3450
Compuestos quelatados	3.10-4.00	d,r	3200-2500
b. Vibraciones de deformación O-H y alargamiento o stretching (ν) C-O			
Alcoholes primarios	≈9.5	f	≈1050
	y 7.40-7.90	f	1350-1260
Alcoholes secundarios	≈9.10	f	≈1100
	y 7.40-7.90	f	1350-1260
Alcoholes terciarios	≈8.70	f	≈1150
	y 7.10-7.60	f	1410-1310
Fenoles	≈8.3	f	≈1200
	y 7.10-7.60	f	1410-1310

2. AMINAS

a. ENLACE N-H: Vibraciones de alargamiento (ν)			
GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm ⁻¹
Primaria libre, dos bandas	≈2.86	m	≈3500
	y ≈2.94	m	≈3400
Secundaria libre, una banda	2.86-3.02	m	3500-3310
Iminas (=N-H), una banda	2.94-3.03	m	3400-3300
Sales de aminas	3.20-3.30	m	3130-3030
b. ENLACE N-H: Vibraciones de deformación (δ)			
Primaria	6.06-6.29	f, m	1650-1590
Secundaria	6.06-6.45	d	1650-1550
Sales de amina	≈6.67	f	≈1500
c. C-N Vibraciones de deformación			
Aromática primaria	7.46-8.00	f	1340-1250
Aromática secundaria	7.41-7.81	f	1350-1280
Aromática terciaria	7.36-7.64	f	1360-1310
Alifática	8.20-9.80	d	1220-1020
	y ≈7.10	d	≈1410

3. COMPUESTOS INSATURADOS DE NITRÓGENO: Vibraciones de alargamiento o stretching (ν)

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm ⁻¹
a. Nitrilos C≡N			
Alquil nitrilos	4.42-4.46	m	2260-2240

Alquil nitrilos α,β -insaturados	4.47-4.51	m	2235-2215
Aril nitrilos	4.46-4.50	m	2240-2220
Isocianatos	4.40-4.46	m	2275-2240
Isocianuros	4.50-4.83	m	2220-2070
b. Iminas, oximas C=N-			
Compuestos alquílicos	5.92-6.10	v	1690-1640
Compuestos α,β -insaturados	6.02-6.14	v	1660-1630

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
c. Azo compuestos -N=N-	6.14-6.35	v	1630-1575
d. Diimidias -N=C=N-	4.64-4.70	v	2155-2130
e. Azidas -N ₃	4.63-4.72 y 7.46-8.48	f d	2160-2120 1340-1180
f. Nitrocompuestos C-NO ₂			
Aromáticos	6.37-6.67 y 7.30-7.70	f f	1570-1500 1370- 1300
Alifático	6.37-6.45 y 7.25-7.30	f f	1570-1550 1380- 1370
g. Nitratos O-NO ₂	6.06-6.25 y 7.70-8.00	f f	1650-1600
h. Compuestos nitroso C-NO	6.25-6.67	f	1600-1500
i. Nitritos O-NO	5.95-6.06 y 6.15-6.21	f f	1680-1650 1625- 1610

4. COMPUESTOS HALOGENADOS C-X. Vibraciones de alargamiento o stretching (ν)

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
a. C-F	7.10-10.0	f	1400-1000
b. C-Cl	12.50-16.60	f	800-600
c. C-Br	16.60-20.00	f	600-500
d. C-I	\approx 20.00	f	\approx 500

5. COMPUESTOS DE AZUFRE. Vibraciones de alargamiento o stretching (ν)

GRUPO	λ μm	INTENSIDAD	No. DE ONDA cm^{-1}
a. S-H	3.85-3.92	d	2600-2550
b. C=S	8.33-9.52	f	1200-1050
c. S=O:			
Sulfóxidos	9.35-9.71	f	1070-1030
Sulfonas	8.62-8.77 y 7.41-7.69	f	1160-1140, 1350-1300
Sulfitos	8.13-8.70 y 7.00-7.41	f, f	1230-1150, 1430-1350
Cloruros de sulfonilo	8.44-8.59 y 7.30-7.46	f, f	1185-1165, 1370-1340
Sulfonamidas	8.48-8.77 y 7.41-7.69	f, f	1180-1140, 1350-1300
Acidos sulfónicos	8.27-8.70; 9.43-9.71 y \approx 15.40	f, f, f	1210-1150, 1060-1030, \approx 650

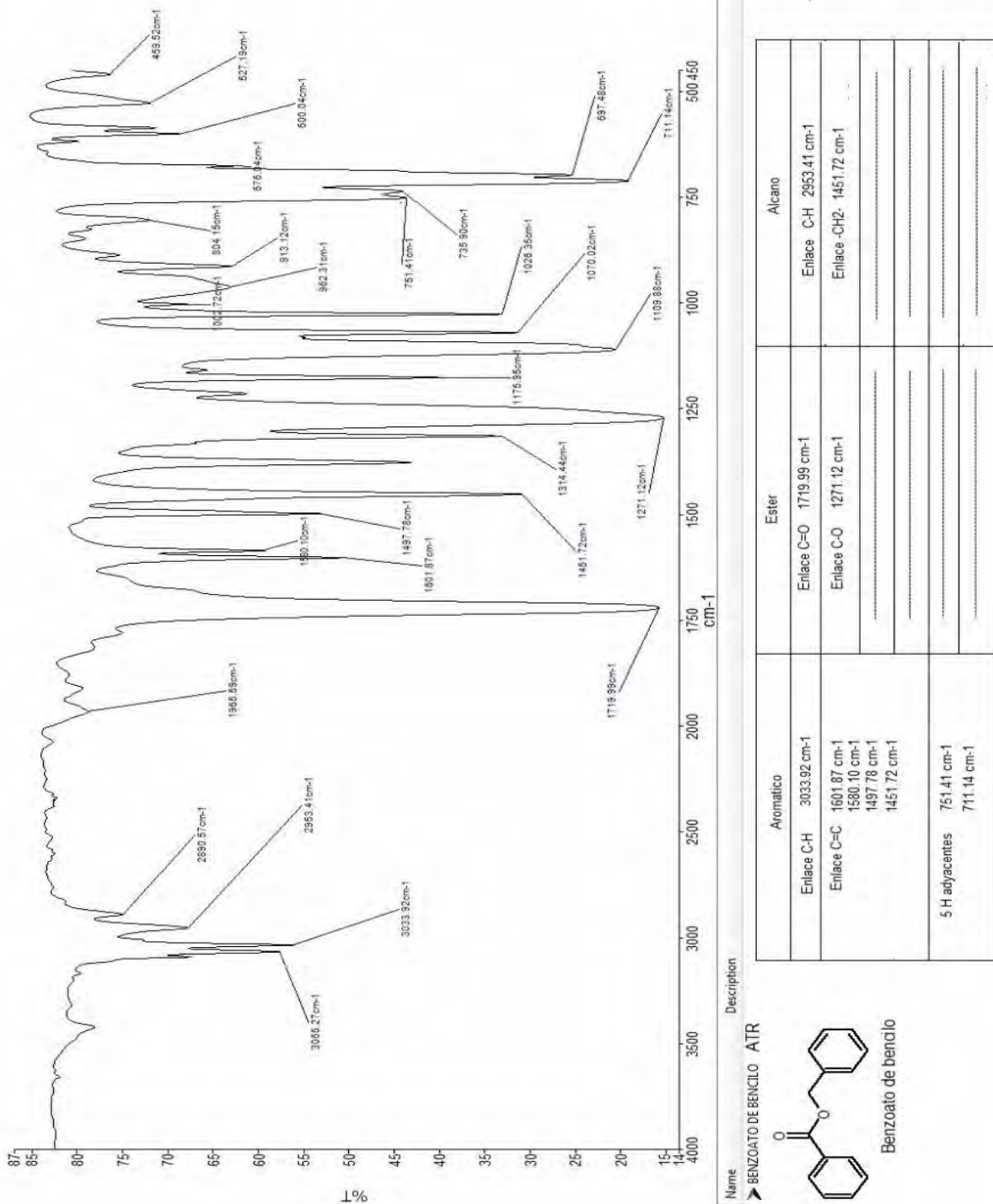
Castillo. A. Lourdes, Espectroscopia en el Infrarrojo Manual Básico, Primera Edición, ISBN 978-607-02-1643-5 , México, 2011.

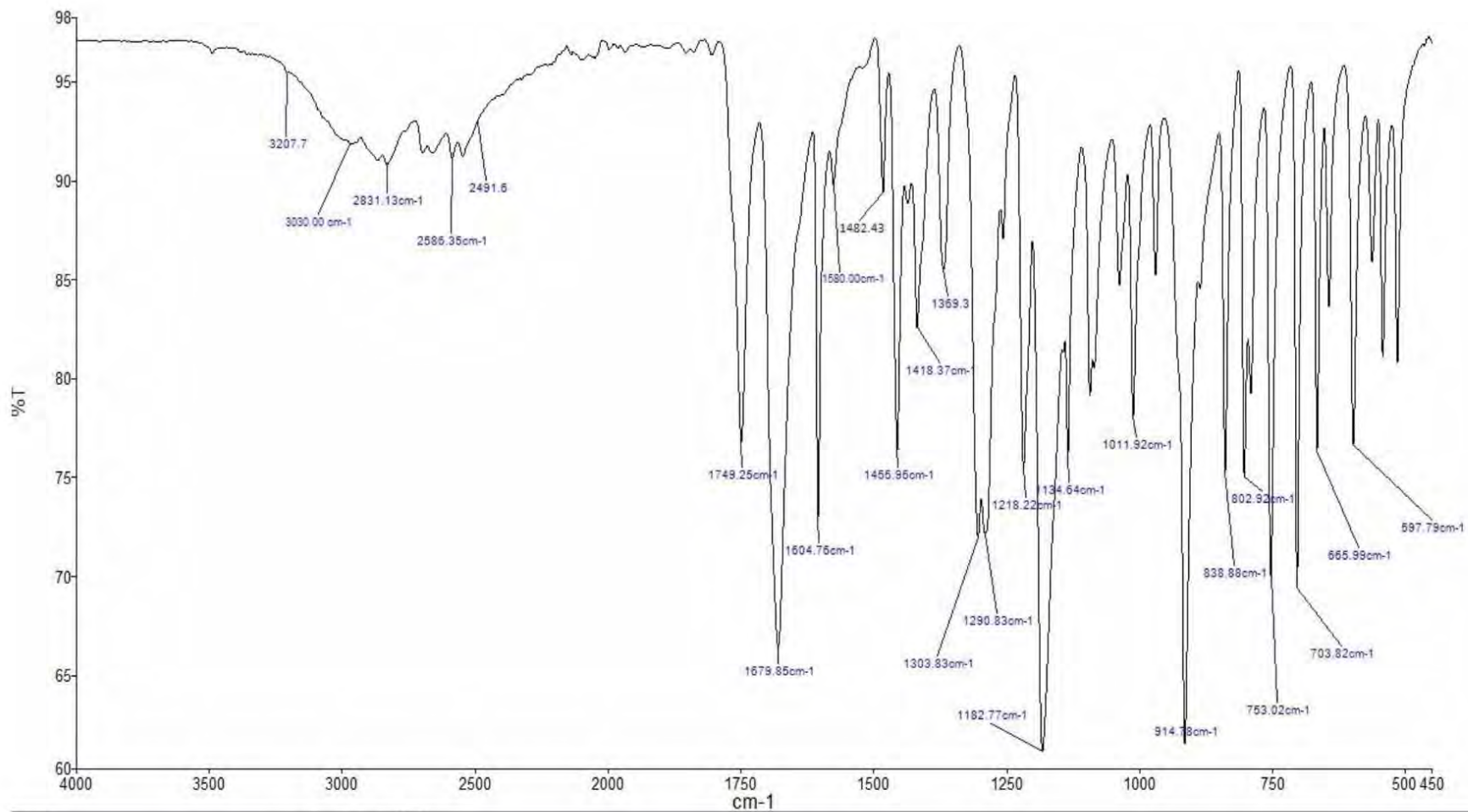
Anexo B catálogo de espectros.

Consultar disponibilidad en línea en la siguiente dirección electrónica:

<https://papimepe206115feszunam.wordpress.com/base-de-datos/>

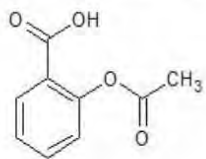
Ejemplos de contenido:





Name Description ATR

AC ACETIL SALICILICO



Acido acetilsalicílico

Aromáticos	Ac. Carboxílico	Ester	Alcano
Enlace C-H 3030cm-1	Carbonilo 1679.85 cm-1	Carbonilo 1749.25 cm-1	Enlace C-H 2831.13 cm-1
Enlace C=C 1604.75 cm-1 1580.00 cm-1 1482.43 cm-1 1455.95 cm-1	Enlace O-H 3207.07 cm-1 2491.60 cm-1	Enlace C-O 1182.77 cm-1	Enlace -CH3 1418.37 cm-1 1369.30 cm-1
4H adyacentes 753.02 cm-1			

ANEXO C. Glosario de términos.

Absorbancia: Medida directa de la intensidad de la luz que es absorbida por un analito.

Absorción: Capacidad de retención ejercido por un cuerpo ante una radiación que lo traspasa, generando como respuesta una señal en un espectro que se produce como resultado de la interacción con la energía.

Banda de combinación: Es la suma de dos frecuencias fundamentales de absorción (ν).

Banda de sobretono: Banda de absorción que se presenta a un múltiplo de la frecuencia fundamental de absorción (2ν , 3ν).

CAS: Chemical Abstracts Service, división de la sociedad americana de química quien es la autoridad mundial para la información química.

Calibración: Ajustar, con la mayor exactitud posible, las indicaciones de un instrumento de medida con respecto a un patrón de referencia.

Compuestos orgánicos: Sustancia química que está compuesta principalmente de H, O, N entre otros y de base estructural al elemento carbono.

Datos: Información concreta sobre hechos, elementos, etc., que permite estudiarlos, analizarlos o conocerlos.

Deformación: Cambio en el tamaño o forma de un cuerpo debido a esfuerzos internos producidos por una o más fuerzas aplicadas sobre el mismo.

Enlace: Unión existente entre dos átomos, sean estos diferentes o iguales.

Elucidación: Aclaración, explicación.

Espectro de infrarrojo: Gráfico de porcentaje de transmisión en función del número de onda (o de la longitud de onda) de la radiación infrarroja.

Espectroscopia de infrarro (IR): Método que utiliza energía infrarroja para proporcionar un conocimiento de los grupos funcionales en un compuesto.

Gráfico: Representación de datos numéricos por medio de una o varias líneas que hacen visible la relación que esos datos guardan entre sí.

Grupos funcionales: Arreglo de átomos que otorgan las propiedades químicas distintivas a una molécula orgánica.

Hardware: Conjunto de elementos físicos o materiales que constituyen una computadora o un sistema informático.

Haz: Conjunto de partículas o rayos luminosos de un mismo origen.

Ley de Hooke: Ecuación que describe el movimiento de un resorte que vibra.

Ley de Lambert-Beer: Relación entre la absorbancia de la luz UV/Visible, la concentración de la muestra, la longitud de la trayectoria de la luz y la absorptividad molar.

Molécula: Unidad mínima de una sustancia que conserva sus propiedades químicas y puede estar formada por átomos iguales o diferentes.

Radiación infrarroja: Es la radiación del espectro electromagnético de mayor longitud de onda que el rojo y de alto poder calorífico.

Rastreabilidad: Posibilidad de identificar el origen.

Reproducibilidad: Capacidad del método para arrojar los mismos resultados cuando hay variaciones de laboratorio a laboratorio.

Señal: Respuesta de la vibración molecular generada a partir de la incidencia una fracción del espectro infrarrojo representado en un gráfico de absorción o transmisión por número de onda.

Sociedad RED: unión de información que se procesa, almacena y transmite sin restricciones de distancia, tiempo ni volumen, compuesta por redes activadas por tecnologías digitales de la comunicación y la información.

Software: conjunto de programas, instrucciones y reglas informáticas que permiten ejecutar distintas tareas en una computadora.

Técnica verde: Técnica enfocada en la química verde, diseñado para realizar procesos químicos en las determinaciones, reduciendo o eliminando el uso y producción de sustancias peligrosas.

Transformadas de Fourier: Transformación matemática empleada para transformar señales entre el dominio del tiempo y el dominio de la frecuencia.

Transmitancia: Fracción de la radiación incidente transmitida a través del analito.

Arenas Sosa I, López Sánchez JL. Instituto de Biotecnología Iván Arenas Sosa José Luis López Sánchez. Espectrofometría de absorción. 2004;1–41.

Bañuelos Saucedo MA. Espectroscopia THz en el dominio del tiempo. 2014;70–186.

Métodos Ópticos de Análisis, E. D. Olsen, Reverté S.A.: Barcelona, 1990

Empowering Innovation & Scientific Discoveries; CAS. Disponible en: <https://www.cas.org>

López Pérez M. Caracterización de residuos industriales. Ed CEP. Madrid. 2017.

Oxford University Press, Spanish Oxford Living Dictionaries. 2018

Ramirez Navas J. Introducción a la Reología de los alimentos. ReCiTeIA. 2006

Real Academia Española, Madrid España. 2018

Guzmán HM, Movimiento C. Movimiento oscilatorio

Espectrometria.com.Espectrometría ultravioleta-visible.2018