

## Introducción a las espectroscopias vibracionales

**Requisitos de la materia:** Física General III, Óptica, y sus respectivos laboratorios.

**Descripción de la asignatura:** En este curso se presentaran al alumno los fundamentos teóricos, experimentales y de instrumentación de las espectroscopias Raman y FTIR los principales métodos para el pre-procesamiento, análisis e interpretación de espectros, así como alguna de sus aplicaciones en el estudio de materiales biológicos.

### Índice Temático:

1. **Fundamentos teóricos de la espectroscopia de infrarrojo:** Historia, El espectro electromagnético- símbolos y unidades, Modos normales de vibración, Reglas de selección, Origen de los espectros infrarrojo, Condiciones de absorción IR por una molécula, Intensidad, posición y anchura de una banda IR, Grupos funcionales, Regiones del espectro MIR, Ejemplos.
2. **Fundamentos teóricos de la espectroscopia Raman:** Reglas de selección, Origen de los espectros Raman, Naturaleza de la dispersión Raman, Actividad Raman, Intensidad de bandas en un espectro Raman, Regla de mutua exclusión, Frecuencias de grupos funcionales, Raman versus Infrarrojo, Ejemplos.
3. **Instrumentación espectroscopia de infrarrojo:** Instrumentación IR (*El espectrómetro dispersivo, Elementos principales, El espectrómetro infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR), Resolución espectral, Elementos principales, El interferómetro, Colección de espectros FTIR, Espectrómetro IR dispersivo versus FTIR, Métodos de medición de muestras*), Técnicas experimentales en espectroscopia IR (*Técnicas de transmisión, Técnicas de reflectancia, Técnica de ATR y microscopía, Espectroscopia IR de matrices criogénicas aisladas (Matrix isolation)*).
4. **Instrumentación espectroscopia de cercano infrarrojo:** Espectroscopia en el cercano infrarrojo (NIR), Bandas de absorción NIR, Principio de Franck-Condon, Frecuencias de vibración NIR, Instrumentación NIR, Aplicaciones.
5. **Instrumentación Raman:** Instrumentación Raman (*Elementos principales, Calibración instrumental, Técnicas de medición, Problemas de fluorescencia*), *Técnicas experimentales en espectroscopia Raman (Microscopía Raman, Espectroscopia Raman por imagen, Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS), Resonance Raman Spectroscopy.*
6. **Análisis e interpretación de espectros Raman y FTIR:** Pre-procesamiento de espectros (Corrección de línea base, Suavizado y normalizado, Autoescalado, Resta de espectros, Derivadas, Curve-fitting), Métodos y criterios para el análisis de espectros, Frecuencias características de grupos funcionales.
7. **Análisis multivariante de espectros:** Quimiometría, Principal Component Analysis, Partial Least Squares, Partial Least Squares-Linear Discriminant Analysis, Cluster analysis.

- 
- 8. **Simetría molecular y tablas de carácter:** Operaciones y elementos de simetría, Grupos puntuales, Representación de grupos, Tablas de carácter y modos normales, Ejemplos y ejercicios.
  - 9. **Aplicaciones de la espectroscopia Raman y FTIR:** Espectroscopia Raman en cristales, Aplicaciones en microbiología, Aplicaciones en medicina, Aplicaciones en el área de alimentos.

#### **Bibliografía:**

- 1. **Introductory Raman Spectroscopy**, Second edition, John R. Ferraro, Kazuo Nakamoto, Chris W. Brown. Academic Press.
- 2. **Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy**, Brian C. Smith, CRC Press; 1 edition.
- 3. **Course notes on the interpretation of infrared and Raman spectra**, Dana W. Mayo, Foil A. Miller, Robert W. Hannah, Wiley-Interscience (2004).
- 4. **Infrared spectral interpretation: a systematic approach**, Brian Smith, CRC Press, (1999).

#### **Planeación Educativa**

##### **Competencias a desarrollar:**

###### **Generales:**

- 1. Conocimiento sobre el área de estudio y la profesión.
- 2. Capacidad de investigación.
- 3. Capacidad de aprender y actualizarse permanentemente.
- 4. Habilidades para buscar, procesar y analizar información procedente de fuentes diversas.
- 5. Capacidad para identificar, plantear y resolver problemas.
- 6. Capacidad de abstracción, análisis y síntesis.

###### **Específicas:**

- 1. Plantear, analizar y resolver problemas físicos tanto teóricos como experimentales mediante la utilización de métodos numéricos, analíticos o experimentales.
- 2. Construir y desarrollar argumentaciones validas, identificando hipótesis y conclusiones.
- 3. Utilizar o elaborar programas o sistemas de computación para el procesamiento de información, cálculo numérico, simulación de procesos físicos o control de experimentos.
- 4. Describir y explicar fenómenos naturales y procesos tecnológicos en términos de conceptos, teorías y principios físicos.
- 5. Demostrar disposición para enfrentar nuevos problemas en otros campos, utilizando sus habilidades específicas.
- 6. Buscar, interpretar y utilizar literatura científica.
- 7. Aplicar el conocimiento teórico de la física a la realización e interpretación de experimentos.

Resultados de aprendizaje	Actividades educacionales	TETEh	Evaluación
Fundamentos teóricos de la espectroscopia de infrarrojo	Teóricas, Practicas (9T + 3P= 12 hrs.) Autoestudio	12 5	Tareas y Tarea Examen.
Fundamentos teóricos de la espectroscopia de Raman	Teóricas, Practicas (9T + 3P= 12 hrs.) Autoestudio	12 5	Tareas y Tarea Examen.
Instrumentación Raman	Teóricas, Practicas (6T+3P= 9 hrs.) Autoestudio	9 5	Tareas y Tarea Examen.
Instrumentación Infrarrojo	Teóricas, Practicas (6T+3P= 9 hrs.) Autoestudio	9 5	Tareas y Tarea Examen.
Instrumentación de cercano infrarrojo	Teóricas, Practicas (3T+2P= 5 hrs.) Autoestudio	5 2	Tareas y Tarea Examen.
Análisis e interpretación de espectros Raman y FTIR	Teóricas, Practicas (6T+4P= 10 hrs.) Autoestudio	10 3	Tareas y Tarea Examen.
Análisis multivariante de espectros	Teóricas, Practicas (6T+3P= 9 hrs.) Autoestudio	9 3	Tareas y Tarea Examen.
Simetría molecular y tablas de carácter	Teóricas, Practicas (6T+6P= 12 hrs.) Autoestudio	12 5	Tareas y Tarea Examen.
Aplicaciones de la Espectroscopia Raman y FTIR.	Teóricas, Practicas (9T+3P=12 hrs.) Autoestudio	12 5	Tarea Examen y Presentación Oral.

Tiempo total de trabajo del estudiante: (60+30) horas presenciales + (38) horas de autoestudio = 118 hrs.

Número de Créditos: 8