



MATERIA: INTRODUCCIÓN A LAS ESPECTROSCOPIAS VIBRACIONALES.

DATOS GENERALES:

Descripción:	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.
Seriación y Correlación:	Subsecuentes: Física General III, Óptica, y sus respectivos laboratorios.
	Consecuentes:
Objetivo:	
Objetivos específicos:	
Horas totales del curso:	(60+30) horas presenciales + (38) horas de autoestudio = 118 hrs.
Créditos:	8 Créditos

REVISIONES Y ACTUALIZACIONES:

Líneas de investigación:	Átomos y Moléculas, Física aplicada, Física del estado solido
Autores o Revisores:	Dr. José Juan Ortega Sigala, Dr. Javier Alejandro Berumen Torres Dr. Hugo Tototzintle Huitle Dr. José de Jesús Araiza Ibarra Dr. Jorge Alberto Vargas Tellez
Fecha de actualización por academia:	26/01/2023
Sinopsis de la revisión y/o actualización:	No aplica

PERFIL DESEABLE DEL DOCENTE:

Disciplina profesional:	Doctorado en Ciencias
Experiencia docente:	Experiencia profesional docente mínima de dos años



SOMOS
ARTE, CIENCIA Y
DESARROLLO
CULTURAL





ÍNDICE TEMÁTICO:

TEMA:	
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
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.



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).
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.
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.
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.
Análisis multivariante de espectros	Quimiometría, Principal Component Analysis, Partial Least Squares, Partial Least Squares-Linear Discriminant Analysis, Cluster analysis.
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.
Aplicaciones de la espectroscopia Raman y FTIR	Espectroscopia Raman en cristales, Aplicaciones en microbiología, Aplicaciones en medicina, Aplicaciones en el área de alimentos.

BIBLIOGRAFIA



Principal:	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).
Enlaces digitales:	
Complementaria:	

PLANEACIÓN EDUCACIONAL:

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

CONTRIBUCIÓN AL PERFIL DE EGRESO:

CONOCIMIENTO:	HABILIDADES:	VALORES:
Tener una comprensión profunda de los conceptos, métodos y principios	Construir modelos simplificados que describan una situación compleja,	Tener hábitos de trabajo necesarios para el desarrollo de la profesión tales como el



fundamentales de las ondas electromagnéticas y su interacción con la materia Conocer y saber aplicar las técnicas espectroscópicas. Las metodologías básicas para la indagación y el descubrimiento en procesos de investigación.	identificando sus elementos esenciales y efectuando las aproximaciones necesarias. Operar e interpretar espectros vibracionales. Adquirir habilidades sobre los procesos de aprendizaje y autorregularlos para desarrollar la capacidad de aprender por sí mismo.	rigor científico, el autoaprendizaje y la persistencia. Actuar con responsabilidad, honradez y ética profesional, manifestando conciencia social de solidaridad y justicia. Mostrar tolerancia en su entorno social, aceptando la diversidad cultural, étnica y humana. Desarrollar un mayor interés por aquellos problemas cuya solución sea de beneficio social y el medio ambiente
--	--	---

ESTRATEGIAS PEDAGÓGICAS:

Estrategias de enseñanza:	Estrategias de aprendizaje:
● El docente explicará la teoría y presentará ejemplos en las clases presenciales o virtuales. ● El docente presentará los procedimientos y métodos típicos para análisis espectral. ● Motivaré a los estudiantes para trabajar de manera individual y en equipo. ● Sesiones de trabajo experimental individual o grupal ● Discusión de preguntas y problemas en clase.	● El alumno asistirá al menos a un 80% de las clases principales o virtuales impartidas. ● El alumno asistirá al menos a un 80% de las clases prácticas impartidas. ● El estudiante trabajará en forma individual o por equipo en la comprensión de conceptos y la resolución de problemas. ● El estudiante desarrollará mapas conceptuales y mentales de los temas revisados ● El estudiante contestará preguntas o resolverá problemas individualmente



	para exponer en clase y discutir con sus compañeros. Asistirá a asesorías para resolver dudas sobre la teoría o sobre la solución de problemas.
--	--

PROPUESTA DE CRITERIOS DE EVALUACIÓN:

Criterio de evaluación:	Porcentaje:
Exámenes parciales	30 %
Tareas	30%
Exposiciones	20%
Participación en clase	10%
Asistencia	10%