Introducción a las espectroscopias vibracionales

Número de créditos: 10

Horas a la semana: 10

Teoría: 6

Practica: 4

Requisitos: AFB-1, AFB-2, AFB-3

Clave: **AFE-10**

Asignatura: Especifica

Descripción de la materia: Este curso está destinado a que el alumno aprenda los fundamentos teóricos de las espectroscopias vibracionales, así como los arreglos experimentales de algunas de estas.

Contenidos:

- Fundamentos teóricos de la espectroscopía Raman e infrarrojo.
- Instrumentación Raman y FTIR.
- Análisis e interpretación de espectros Raman y FTIR.
- Simetría molecular y tablas de carácter.
- Aplicaciones de la espectroscopía Raman y FTIR.

Índice Temático:

1. Fundamentos teóricos de la espectroscopía Raman e infrarrojo: Historia. El espectro electromagnético- símbolos y unidades. Modos normales de vibración. Reglas de selección. Origen de los espectros Raman e infrarrojo. Raman versus Infrarrojo.
2. Instrumentación Raman y FTIR: Instrumentación Raman: Elementos principales. Calibración instrumental. Técnicas de medición. Problemas de fluorescencia. Técnicas experimentales en espectroscopia Raman. Microscopía Raman. Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS). Espectroscopia Raman por imagen. Instrumentación FTIR. El

- espectrómetro FTIR. Resolución espectral. Elementos principales. Métodos de medición de muestras. Técnicas experimentales en espectroscopia IR. Técnicas de transmisión. Técnicas de reflectancia
3. Análisis e interpretación de espectros Raman y FTIR: Pre-procesamiento de espectros. Métodos y criterios para el análisis de espectros. Frecuencias características de grupos funcionales.
 4. Simetría molecular y tablas de carácter: Operaciones y elementos de simetría. Grupos puntuales. Representación de grupos. Tablas de carácter y modos normales.
 5. Aplicaciones de la espectroscopía Raman y FTIR: Aplicaciones en microbiología. Aplicaciones en medicina. Aplicaciones en el área de alimentos.

Bibliografía Básica:

- Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy, Daniel C. Harris Daniel C. Harris and Michael D. Bertolucci.
- Modern Spectroscopy, J. Michael Hollas, John Wiley and Sons, Ltd.
- Molecular Vibrations: The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra by Edgar Bright Wilson, J. C. Decius, and Paul C. Cross.