

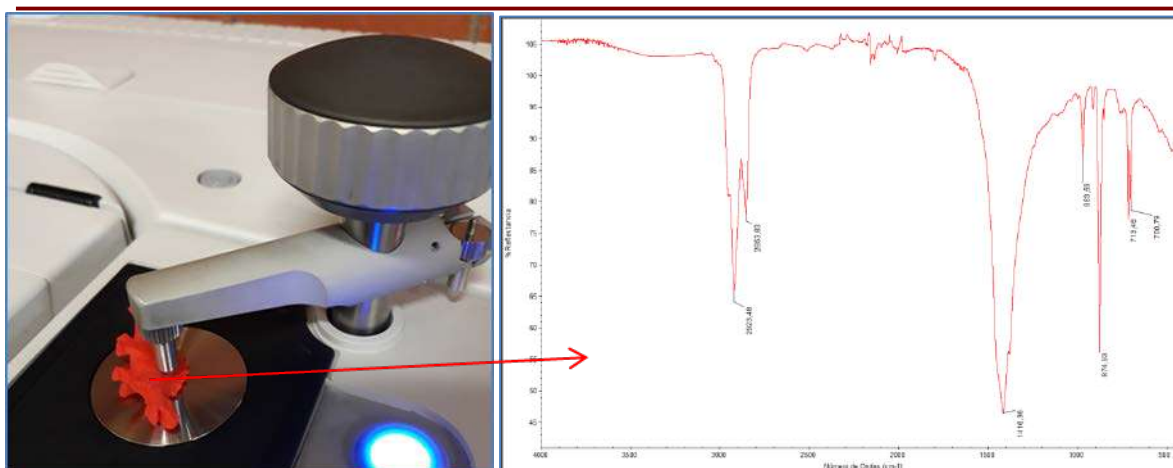
Departamento de Química Orgánica

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires

ESPECTROSCOPIA INFRARROJA. FUNDAMENTOS Y APLICACIONES

Curso de verano postgrado/doctorado

7, 9, 11, 14 y 16 de marzo de 2022



Puntaje para doctorado: 2 puntos

Duración: 40 horas (1 semana)

Clases teóricas y prácticas

Modalidad: curso a distancia (eventualmente con una clase práctica presencial)

Horario: 9:00 a 18:00 h

Evaluación: Seminario y examen final

Cupo: 20 alumnos

Docente responsable: Dra. Marta S. Maier

Consultas: maier@qo.fcen.uba.ar

PROGRAMA

INTRODUCCION.

El espectro electromagnético. Interacción de la luz con la materia. Absorción infrarroja de moléculas diatómicas. Modelo del oscilador armónico. Anarmonicidad Oscilador armónico. Vibración molecular. Modos normales. Reglas de selección. Espectro infrarrojo. Introducción a la espectroscopia Raman. Comparación entre las espectroscopias Raman e infrarroja.

INSTRUMENTACION Y METODOS EXPERIMENTALES

Espectrofotómetro infrarrojo de transformada de Fourier. Interferómetro. Transformada de Fourier. Fuentes, detectores y otros componentes ópticos. Preparación de muestras sólidas, líquidas y gaseosas. Método por transmisión. Métodos por reflexión: Reflexión especular, Reflectancia difusa, Reflectancia total atenuada (ATR). Microscopía infrarroja. Instrumentos portátiles. Mapping e imaging.

ANALISIS CUALITATIVO Y CUANTITATIVO.

Análisis espectral. Infrarrojo cercano, medio y lejano. Interpretación y análisis cualitativo de compuestos orgánicos e inorgánicos. Vibraciones características. Procesamiento de espectros: corrección, sustracción, derivada segunda y deconvolución. Análisis cuantitativo. Ley de Beer-Lambert. Análisis de muestras líquidas, sólidas y de multicomponentes. Métodos de calibración.

APLICACIONES.

Análisis de polímeros: cuantificación de contaminantes y aditivos. Aplicaciones biológicas. Aplicaciones en patrimonio cultural: identificación de pigmentos y aglutinantes. Productos de degradación. Aplicaciones industriales: formulaciones de pinturas, análisis de fármacos y alimentos. Análisis de minerales y arcillas.

BIBLIOGRAFIA.

M. Reichenbaecher, J. Popp. Vibrational spectroscopy in Challenges in molecular structure determination. Springer, 2012.
B. Stuart. Infrared spectroscopy: fundamentals and applications. Elsevier, 2004.
M. R. Derrick, D. Stulik, J.M. Laundry. Infrared Spectroscopy in Conservation Science. The Getty Conservation Institute, 1999.
Infrared and Raman Spectroscopy in Forensic Sciences. J.M. Chalmers, H.G.M. Edwards, M.D. Hargreaves (Editors). Wiley, 2012.
Referencias de publicaciones periódicas.