

Departamento de Química Orgánica
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires

ESPECTROSCOPIA INFRARROJA. FUNDAMENTOS Y APLICACIONES
PROGRAMA

INTRODUCCION

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

INSTRUMENTACION Y METODOS EXPERIMENTALES

Espectrofotómetro infrarrojo de transformada de Fourier. El 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 naturales y sintéticos. Caracterización de formulaciones de pinturas. Lípidos y sus productos de degradación. Proteínas. Análisis de fármacos y alimentos. Pigmentos inorgánicos y orgánicos sintéticos. Análisis de minerales y arcillas.

BIBLIOGRAFIA.

1. M. Reichenbaecher, J. Popp. Vibrational spectroscopy in Challenges in molecular structure determination. Springer, 2012.
2. B. Stuart. Infrared spectroscopy: fundamentals and applications. Elsevier, 2004.

3. M.R. Derrick, D. Stulik, J.M. Laundry. Infrared Spectroscopy in Conservation Science. The Getty Conservation Institute, 1999.
4. Infrared and Raman Spectroscopy in Forensic Sciences. J.M. Chalmers, H.G.M. Edwards, M.D. Hargreaves (Editors). Wiley, 2012.
5. N.V. Chukanov, M.F. Viggiano. Vibrational (Infrared and Raman) spectra of minerals and related compounds. Springer, 2020.
6. F. Siebert, P. Hildebrandt. Vibrational Spectroscopy in Life Science. Wiley-VCH Verlag, 2008.
7. B.C. Smith. Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy. CRC Press, 2nd Edition, 2011.

Referencias de publicaciones periódicas.