



CURSO DE POSGRADO

INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROSCOPIA INFRARROJA CON TRASFORMADA DE FOURIER

INFORMACIÓN AMPLIADA

INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROSCOPIA INFRARROJA CON TRASFORMADA DE FOURIER



Tipo de actividad: Curso de posgrado

Denominación: Introducción a la espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier.

Destinatarios: Egresados de disciplinas con Formación en Ciencias Químicas y carreras afines (Lic. en Química, Ingeniería Química, Ing. en Alimentos, Bioquímica, Ingeniería industrial, Profesorado en química, etc.) interesados en adquirir una formación en técnicas de Espectroscopía Infrarroja con Transformada de Fourier así como una visión teórica y práctica de los modos de trabajo. Profesionales, técnicos y analistas de laboratorios que estén trabajando con FT-IR y quieran ampliar sus conocimientos en el área.

Carga horaria: 32 horas.

Dictado del curso: Del 17 al 21 de febrero de 2025.

Inscripción: Abierta hasta el 17 de febrero por SIU GUARANI.

Modalidad: Presencial.

Arancel:

- Profesionales y público en general: \$80.000
- Docentes y alumnos de posgrado de FaCENA \$36.000
- Alumnos de posgrado otras universidades \$45.000

Fundamentación

La Espectroscopía Infrarroja con Transformada de Fourier (FTIR) es una técnica analítica clave utilizada en la identificación y caracterización de compuestos químicos, tanto orgánicos como inorgánicos. Su versatilidad y precisión la ha convertido en una herramienta esencial en diversas disciplinas como la ciencia de materiales, química analítica, ingenierías químicas y ambientales, biología molecular, alimentos, entre otras. Con el aumento de la complejidad en las investigaciones científicas y las aplicaciones tecnológicas, ha crecido significativamente la demanda de profesionales con conocimientos avanzados en esta técnica. En respuesta a esta necesidad, el presente curso de posgrado se propone brindar formación especializada en técnicas avanzadas

INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROSCOPIA INFRARROJA CON TRASFORMADA DE FOURIER

de espectroscopía que puedan ser aplicadas a la investigación y desarrollo en diversos sectores académicos e industriales, como el análisis de compuestos complejos, resolución de problemas analíticos, y el desarrollo de nuevas metodologías.

Contenidos

Módulo 1. Fundamentos de la espectroscopia vibracional. Tratamiento cuántico de las vibraciones. Radiación electromagnética. Absorciones infrarrojas. Modos normales de vibración. Sobretonos y modos de Combinación. Acoplamiento. Banda de vibración-rotación.

Módulo 2. Instrumentación. Espectrómetros infrarrojos dispersivos. Espectrómetros infrarrojos por transformada de Fourier. Interferómetros de Michelson. Fuentes y detectores. Transformación de Fourier. Espejos móviles.

Módulo 3. Tipos y modos de trabajo en IR. Modos de transmisión: Modos de reflectancia: Reflectancia difusa (DRIFT) y Reflexión total atenuada (ATR). Tipos de muestras: líquidos, gases, sólidos. Celdas. Fundamentos básicos de Química Cuántica. El Hamiltoniano. Teoría del Funcional Densidad (DFT). Quimisorción. Cálculos de frecuencia. Camino de mínima energía.

Módulo 4. Interpretación Espectral. Análisis Cualitativo. Grupos funcionales como huella digital. Regiones espectrales. Softwares de identificación. Bases de datos. Análisis Cuantitativo. Ley de Beer. Líneas de bases. Corrección. Área y altura de pico. Artefactos.

Módulo 5. Caracterización de superficies utilizando FTIR. Consideraciones de compuestos Inorgánicos. Simetría y modos de vibración característicos de moléculas inorgánicas. Empleo de moléculas sonda: monóxido de carbono (CO), Piridina (Py), Lutidina (Lu), H₂O y D₂O. Espectroscopia infrarrojo In situ y operando en modo de Transmisión. Otros usos de interés de espectroscopía infrarroja: aplicaciones industriales: petroquímica, polímeros, pintura, alimentos, agroquímica; aplicaciones biológicas, farmacéuticas, etc.

Objetivos

El objetivo del curso es formar a investigadores y profesionales en los fundamentos y aplicaciones de la espectroscopía infrarroja con transformada de fourier, proporcionando los conocimientos

INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROSCOPIA INFRARROJA CON TRASFORMADA DE FOURIER



esenciales para que se familiaricen con las generalidades y principios fundamentales de esta técnica.

Objetivos específicos:

- Conocer los fundamentos de las técnicas de espectroscopía FTIR convencionales y adquirir la capacidad de identificar y abordar los aspectos clave necesarios para aplicar de manera efectiva la técnica a problemas reales en su campo de estudio.
- Introducir al usuario al campo de la interpretación de espectros
- Conocer los diferentes modos de análisis y manejo de muestras aplicables en la espectroscopia infrarroja.
- Desarrollar habilidades en la adquisición y procesamiento de datos espectroscópicos para la recolección y análisis de datos experimentales.
- Explorar las aplicaciones de FTIR en diversas áreas relacionadas con la química demostrando como utilizar esta técnica para resolver problemas específicos en investigación y desarrollo. Al final del curso, los estudiantes tendrán los conocimientos y herramientas para utilizar técnicas de FTIR de en sus investigaciones, interpretar espectros IR de manera competente, y planificar la aplicación de la técnica a problemas reales en su campo de estudio.

Metodología de enseñanza

La modalidad de dictado será teórico-práctica.

Se trabajará en clases expositivas brindando los fundamentos de cada tema y ejemplos de aplicación. Se promueve la discusión e intercambio de ideas según los intereses de los alumnos, en función de los temas abordados ese día. Se asignará material de lectura (papers) de manera que algunas sesiones, los alumnos puedan participar en la discusión de problemas y conceptos clave.

Las actividades prácticas en el laboratorio que impliquen la utilización del instrumento (FTIR) se desarrollarán en grupos reducidos, 3 a 4 participantes o capacidad de las instalaciones. Las actividades experimentales se organizarán con una discusión previa sobre los fundamentos teóricos y el desarrollo del trabajo experimental.

INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROSCOPIA INFRARROJA CON TRASFORMADA DE FOURIER



Se llevará a cabo un relevamiento de datos, actividades relacionadas con la práctica profesional; empleando herramientas de diferentes soportes: como ser Excel, Origin o diferentes software específicos. Seguimiento y tutorías para la elaboración del informe final.

Práctica I: Empleo del espectrofotómetro FTIR. Conocimiento y mantenimiento del equipo. Uso del software de adquisición de datos. Práctica de manipulación, preparación y adquisición de espectros de distintas muestras.

Práctica II: Procesamiento de espectros. Identificación de compuesto empleando base de datos espectroscópica. Manipulación del espectro. Corrección de línea base. Suavizado. Espectros diferenciales. Derivados. Deconvolución. (Se requiere conocimientos mínimos de software procesamiento de datos como Excel, Origin, o similares).

Instancias de evaluación y aprobación

La evaluación consistirá en un trabajo final integrador que consiste en la lectura y análisis de un trabajo de investigación (paper) relacionado con el tema de estudio individual y, a partir de la información recabada, realizar una propuesta de trabajo donde tenga que realizar medidas de infrarrojo describiendo los siguientes parámetros: Modo de trabajo, preparación de las muestras, análisis de datos. Explicar brevemente porque usaría esa propuestas experimental y para qué. La presentación del informe se realizará a las dos-tres semanas de terminado el dictado de los temas incluidos en el curso. La calificación se realizará conforme a la Escala de Calificaciones vigente de la UNNE.

Docentes:

- Coordinador: Dra. María Fernanda Zalazar
- Docentes dictantes: Dra. Marta Verónica Basca; Dra. María Fernanda Zalazar
- Tutores: Dr. Roberto Gerardo Pellerano, Dra. Lucrecia Bogado

Bibliografía General

Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds Part A: Theory and Applications in Inorganic Chemistry, Sixth Edition, Kazuo Nakamoto, Copyright© 2009 by JohnWiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey.

INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROSCOPIA INFRARROJA CON TRASFORMADA DE FOURIER



Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications, Barbara H Stuart (2004) Print ISBN:9780470854273 | Online ISBN:9780470011140DOI:10.1002/0470011149, Copyright© 2004 John Wiley & Sons, Ltd.

Spectroscopic identification of Organic Compounds (7th edition) Robert M Silverstein, Francis X Webster, David J. Kiemle and David L. Bryce, Copyright © 2005 by John Wiley & Sons, Inc.

Interpretation of Iriffrared Spectra, A Practica/ Approach, by John Coates, Encyclopedia of Analytical Chemistry R.A. Meyers (Ed.) pp. 10815-10837, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2000

Vibrational Spectra of Species Adsorbed on Surfaces, Forms of Vibrations and Selection Rules for Regular Arrays of Adsorbed Species; Sheppard, N.; Erkelens, J. (1984). Applied Spectroscopy, vol 38, nro 4, pp. 471-485.

Attenuated Total Rejlection Infrared Spectroscopy of Salid Catalysts Functioning in the presence of Liquid-Phase Reactants, T. Bürgi and A. Baiker, Adv. Cata/. 50 (2006) 227-283

Identification and discrimina/ion of bacteria using Fourier transform iriffrared spectroscopy; Jyoti Prakash Maity, Sandeep Kar, Chao-Ming Lin, Chen-Yen Chen, Young-Fo Chang, Jiin-Shuh Jean, Thomas R Kulp, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 116 (2013) 478-484

Comprehensive IR study on acidlbase properties of metal oxides, Masazumi Tamura, Kenichi Shimizu, Atsushi Satsuma; Applied Catalysis A: General 433-434 (2012) 135-145.

A rapid Fourier-transform iriffrared (FTJR) spectroscopic methodfor direct quantification of paracetamol content in salid pharmaceutical formulations, Muhammad Ali Mal/ah, Syed Tufail Hussain Sherazi, Muhammad Iqbal, Bhangar, Sarfaraz Ahmed Mahesar, Muhammad Ashraf Bajeer, Spectrochimica Acta Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 141(2015) 64-70

Publicaciones científicas actualizadas relacionadas a temáticas específicas