

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Presentación curso de postgrado

Año	2017	Semestre	Primero		
Nombre del Curso					
Fundamentos y aplicaciones de espectroscopias vibracionales (IR y Raman)					
Profesor Responsable (indicando las horas que participa en el dictado de clases)					
Romano, Rosana Mariel (35 h)					
Docentes Participantes (indicando las horas que participa en el dictado de clases)					
Picone, Andrea Lorena (15 h)					
Duración Total (en horas)	50				
Modalidad (Teórico, teórico-práctico, seminario, etc)	Teórico, Práctico y Seminarios				
Tipo de evaluación prevista	Escrita				
Especificación clara si se lo considera válido para cubrir exigencias del Doctorado.					
Válido para Doctorados					
Fecha de dictado	del 6 al 17 de marzo	Cupo de alumnos	30		
Inscripción desde	1 de febrero	Hasta el día	23 de febrero		
Exigencias y requisitos de inscripción					
Egresado de las licenciaturas en Química, Bioquímica, Farmacia, Biotecnología, Física, y carreras afines.					
Arancelamiento					
NO	<input checked="" type="checkbox"/>	SÍ	<input type="checkbox"/>	Montos	
Destino de los fondos					
Mecanismo de pago					

Breve resumen de los objetivos y contenidos

En este curso de postgrado se abordarán los fundamentos y principales aplicaciones de las espectroscopias vibracionales (IR y Raman). El objetivo principal es el desarrollo de los fundamentos de la espectroscopia vibracional desde un punto de vista teórico y al mismo tiempo la descripción de los aspectos instrumentales y de aplicación que reflejen lo descrito en la teoría.

Para cumplir con los objetivos los alumnos, además de participar de las clases teóricas, realizarán la toma de espectros FTIR y Raman de diferentes muestras seleccionadas y analizarán los mismos. También se realizarán ejercicios de aplicación donde se analicen fundamentalmente espectros y se apliquen los conceptos descritos en las clases teóricas.

Contacto con el responsable

Dirección	Bv. 120 1460, La Plata, Buenos Aires		
Teléfono	0221 644-3210 ext. 7103	Fax	-
Correo electrónico	romano@quimica.unlp.edu.ar		

Curso de posgrado

Fundamentos y aplicaciones de espectroscopias vibracionales (IR y Raman)

Programa

Unidad 1: Fundamentos de la espectroscopia vibracional.

Introducción a la espectroscopia vibracional. Aproximación de Born-Oppenheimer. Grados de libertad vibracionales. Moléculas diatómicas. Aproximación del oscilador armónico. Anarmonicidad. Espectros vibrorotacionales de moléculas diatómicas. Modelo del rotor rígido. Distorsión centrífuga. Efectos isotópicos. Espectroscopia infrarroja y Raman. Reglas de selección. Discusión de ejemplos y análisis de espectros vibracionales.

Unidad 2: Aspectos instrumentales de las espectroscopias IR y Raman.

Espectrofotómetros IR y Raman. Equipos dispersivos y por transformada de Fourier. Descripción de los componentes. Fuentes de excitación. Detectores. Técnicas de medida y Aplicaciones. Metodologías por transmisión y por reflexión. Reflectancia especular, reflectancia difusa (DRIFTS), Reflectancia total atenuada (ATR). Celdas de medida. Preparación de muestras. Microscopios acoplados a equipos FTIR y Raman. FTIR utilizando radiación sincrotrón, ventajas y aplicaciones.

Unidad 3: Espectroscopia vibracional de moléculas poliatómicas.

Espectros vibracionales de moléculas poliatómicas. Nociones de simetría molecular. Grupos de simetría. Modos normales de vibración. Modos de combinación y sobretonos. Formas de bandas. Resonancia de Fermi. Ejemplos. Discusión de espectros vibracionales de moléculas poliatómicas en términos de simetría molecular.

Unidad 4: Algunas aplicaciones de las espectroscopias IR y Raman

Análisis cuali y cuantitativo de la composición de muestras. Estudios estructurales y de equilibrio conformacional. Seguimiento de reacciones químicas y procesos. Aislamiento de compuestos moleculares en matrices de gases inertes a bajas temperaturas. Espectroscopia Raman resonante y prerresonante. Espectroscopias SERS y SERRS. Ejemplos. Caracterización de superficies utilizando FTIR: empleo de moléculas sonda. Ejemplos.

Trabajos Experimentales. Toma y análisis de espectros IR y Raman en diferentes fases.

TP1: Espectros IR de sólidos

TP2: Espectros IR de líquidos

TP3: Espectros IR de gases

TP4: Espectros Raman