

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Presentación de curso de posgrado

Año	2023	Semestre	Primero		
Indique la denominación del curso (actividad curricular)					
Fundamentos y aplicaciones de espectroscopias vibracionales (IR y Raman)					
Especificación clara si se lo considera válido para cubrir exigencias del Doctorado					
El curso propuesto se considera válido para cubrir las exigencias del Doctorado					
Indique el/las área/s de Doctorado para las que el curso es dirigido					
Cs. Biológicas	✓	Física	✓	Ciencias Ambientales	✓
Química	✓	Matemática			
Indique si el curso es o forma parte de una materia de grado. Especifique.					
No					
Profesor responsable (indicando cargo docente y/o investigación y las horas que participa del dictado de clases)					
Rosana Mariel Romano, Profesora Titular de Química Analítica, Investigadora Principal del CONICET, Directora del Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR). 15 horas					
Docentes participantes (indicando cargo docente y/o investigación y las horas que participa del dictado de clases)					
Andrea Lorena Picone, Profesora Adjunta de Introducción a la Química y Química General, Investigadora Adjunta del CONICET, 9 horas					
Evelina Ferrer, Profesora Adjunta Dedicación Exclusiva, Investigadora Principal del CONICET, 4 horas					
Carlos Omar Della Védova, Profesor Titular de Química Inorgánica, Investigador Superior del CONICET, 4 horas					
Carlos Alberto Franca, Profesor Adjunto de Química Inorgánica, 4 horas					
Lucas Sebastián Rodríguez Pirani, Jefe de Trabajos Prácticos en Química Inorgánica, Investigador Asistente del CONICET, 4 horas.					
Carlos Gustavo Pozzi, Ayudante Diplomado UNLP, Profesional Adjunto de CONICET, 6 horas, Trabajo Práctico					
Matías Francisco Calderón Segovia, Profesional Adjunto de CONICET, 6 horas, Trabajo Práctico					
Luciana Mariel Tamone, Profesional Adjunta de CONICET, 6 horas, Trabajo Práctico					

Gino Pietrodángelo, Técnico Auxiliar de CONICET, 6 horas, Trabajo Práctico			
Melina Gisela Peluas, Ayudante Diplomada UNLP, Becaria Doctoral de CONICET, 6 horas, Trabajo Práctico			
Característica del curso (Teórico, práctico, teórico-práctico, etc)	Teórico, Práctico y Seminarios		
Modalidad del curso (presencial, a distancia, combinada). Indicar en porcentaje el dictado a distancia.	Modalidad presencial		
Carga horaria semanal	25 horas, 2 semanas (50 horas totales)		
Duración total en horas (distinguir horas de teoría, práctica, teoría/práctica, presencial y a distancia)	40 horas de teorías y seminarios 10 horas de trabajos experimentales (los trabajos experimentales se realizarán en grupos reducidos, y se repetirán para los diferentes grupos)		
Tipo de evaluación y requisitos de aprobación (máx. 2000 caracteres). Si la evaluación no es presencial indicar los instrumentos y soportes que se emplearán para evaluar los aprendizajes y competencias de los/as alumnos/as.			
Evaluación escrita sobre los contenidos abordados en el curso. Puntaje mínimo de aprobación: 6/10.			
Ámbito o lugar de desarrollo (Instituto, Centro, Laboratorio, cátedra, aula, etc). Si hay más de uno indicar cuántas horas en c/u y qué actividades se desarrollarán en cada lugar			
Centro de Química Inorgánica "Dr. Pedro J. Aymonino" CEQUINOR			
Comienzo del dictado	17 de abril de 2023	Cupo de alumnos/as	30
Breve descripción de los contenidos y su vinculación con los objetivos de la carrera (máx. 1000 caracteres)			
Las espectroscopias vibracionales, IR y Raman, son ampliamente empleadas para la identificación, caracterización y estudio de diferentes sistemas en Química, Ciencias Biológicas, Ciencias de los Materiales, Ciencias Ambientales, entre otras. En particular estas técnicas se utilizan en diferentes trabajos de Tesis Doctorales, como queda demostrado en las colaboraciones y servicios que brinda el CEQUINOR en estas técnicas, además de los trabajos de Tesis con lugar de trabajo en el Centro. Uno de los objetivos del curso es brindar herramientas para profundizar los estudios realizados por las y los estudiantes de doctorado con técnicas de espectroscopía vibracional, así como también presentar las múltiples potencialidades de estas metodologías, tanto para quienes las conozcan y hayan utilizado, como para potenciales nuevos usuarios.			

Arancelamiento					
NO	<input checked="" type="checkbox"/>	SÍ		Monto	–
Destino de los fondos				–	
Mecanismo de pago y administrador de fondos				–	
Describir los objetivos del curso (máx. 2000 caracteres)					
<p>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.</p> <p>Para cumplir con los objetivos, además de clases teóricas y de seminarios, se realizará la toma de espectros FTIR y Raman de diferentes muestras seleccionadas y se analizarán los mismos. También se realizarán ejercicios de aplicación donde se analicen fundamentalmente espectros y se apliquen los conceptos descritos en las clases teóricas.</p>					
Indicar los contenidos del curso (máx. 2000 caracteres)					
<p>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.</p> <p>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.</p> <p>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. Nociones de cálculos de espectros</p>					

vibracionales, IR y Raman, en el marco de la Teoría de los Funcionales de la Densidad. 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 FTIR y Raman en sistemas biológicos. Espectroscopia Raman resonante y prerresonante. Espectroscopias SERS y SERRS. Ejemplos. Caracterización de superficies utilizando FTIR: empleo de moléculas sonda. Ejemplos.

Si corresponde, describir las actividades prácticas previstas, indicando lugar donde se desarrollarán, modalidad de supervisión y modalidades de evaluación (máx. 2000 caracteres).

Toma y análisis de espectros IR y Raman en diferentes fases. Se llevarán a cabo en los laboratorios del CEQUINOR, que dispone de diferentes instrumentos FTIR y Raman.

Si el curso incluye horas a distancia indicar las previsiones metodológicas y pedagógicas, las actividades que se realizarán en las horas presenciales y en las virtuales y el modo en que se articularán, las interacciones docente-estudiantes y estudiantes-estudiantes previstas, y los mecanismos de seguimiento, supervisión y evaluación de esas actividades.

No corresponde

Contacto con el responsable

Lugar de Trabajo	Centro de Química Inorgánica "Dr. Pedro J. Aymonino" CEQUINOR, Boulevard 120 N 1465
------------------	---

Teléfono	445-4393
----------	----------

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. Nociones de cálculos de espectros vibracionales, IR y Raman, en el marco de la Teoría de los Funcionales de la Densidad.

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 FTTIR y Raman en sistemas biológicos. Espectroscopia Raman resonante y prerresonante. Espectroscopias SERS y SERRS. Ejemplos. Caracterización de superficies utilizando FTIR: empleo de moléculas sonda. Ejemplos. Usos de las técnicas de espectroscopia IR y Raman para la determinación de la composición polimérica de plásticos y micro/nano plásticos como contaminantes emergentes del medio ambiente.

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

Bibliografía

R. Chang, *Principios básicos de espectroscopia*, AC 1977.

J.M. Hollas, *Modern spectroscopy*, 3 ed., John Wiley & Sons 1996.

P. Gans, *Vibrating molecules*, Chapman and Hall 1975.

F. A. Cotton, *La teoría de grupos aplicada a la química*, Limusa 1991.

I. R. Dunking, *Matrix-isolation technique. A practical approach*, Oxford University Press 1998.

Ira. N. Levine, *Espectroscopia molecular*, AC 1980.

E. Smith y G. Dent, *Modern Raman Spectroscopy. A practical Approach*, John Wiley & Sons, Ltd. 2005.