



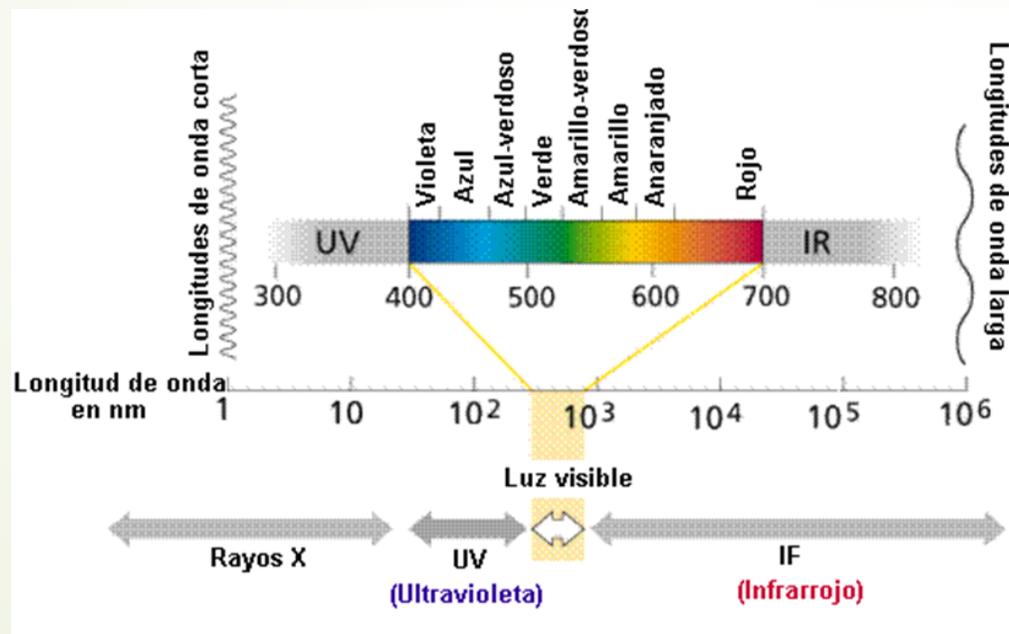
Espectroscopia Infrarroja

Jornadas IRICA 2019

Mariacarmen.carrion@uclm.es

Fundamentos

- Espectrometría de absorción.
- Radiación infrarroja ($\lambda = 800\text{-}1.000.000\text{ nm}$), normalmente Infrarrojo medio ($\lambda = 2.500\text{-}50.000\text{ nm}$, $4000\text{-}400\text{ cm}^{-1}$).

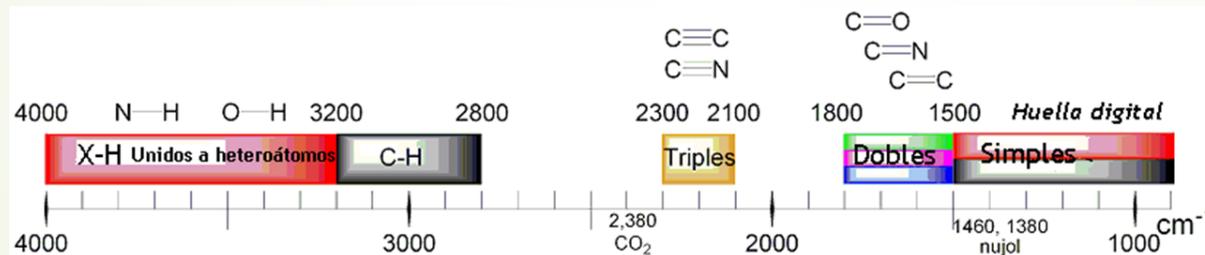


Fundamentos

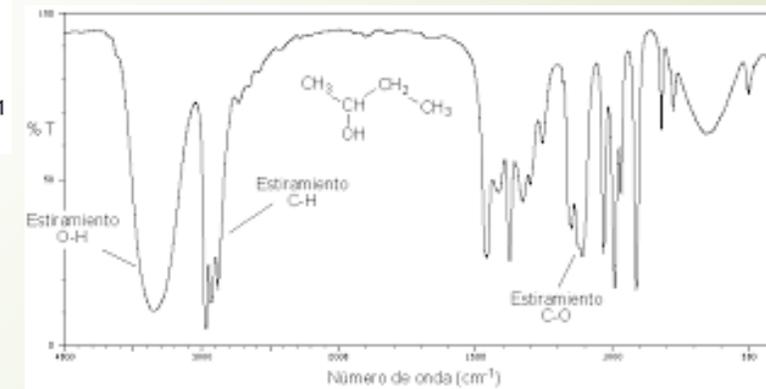
- Cambios en estados vibracionales.
- Frecuencia característica de vibración del enlace relacionada con elementos enlazados y orden de enlace. Ecuación de Hooke.

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Donde k es la constante de fuerza y μ la masa reducida del sistema.
 $\mu = (m1 \cdot m2) / (m1 + m2)$

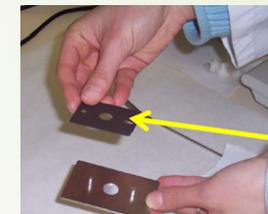


- Representación en transmitancia habitualmente.



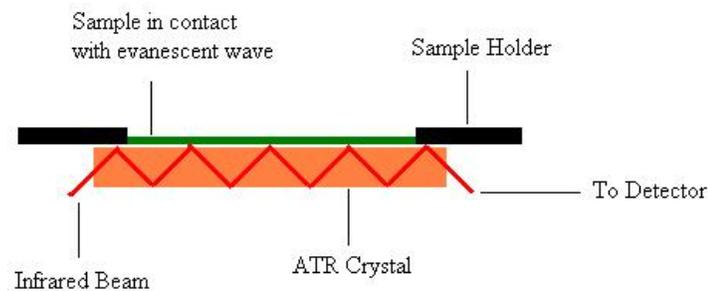
Tipos de medidas

- **Medidas en transmisión.** La radiación IR atraviesa la muestra. Preparación en pastillas de KBr.



- **Modo ATR** (Attenuated Total Reflectance): el haz IR se proyecta en un cristal de alto índice de refracción. El haz se refleja en la cara interna del cristal.

Contacto íntimo con la muestra. No preparación. Muestras opacas.

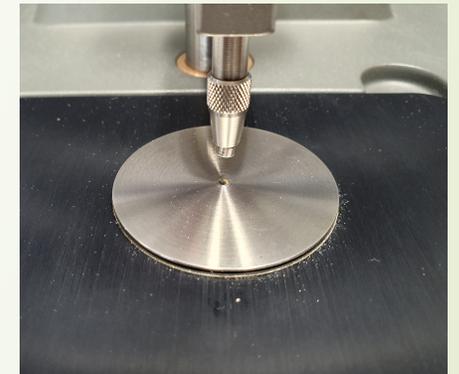
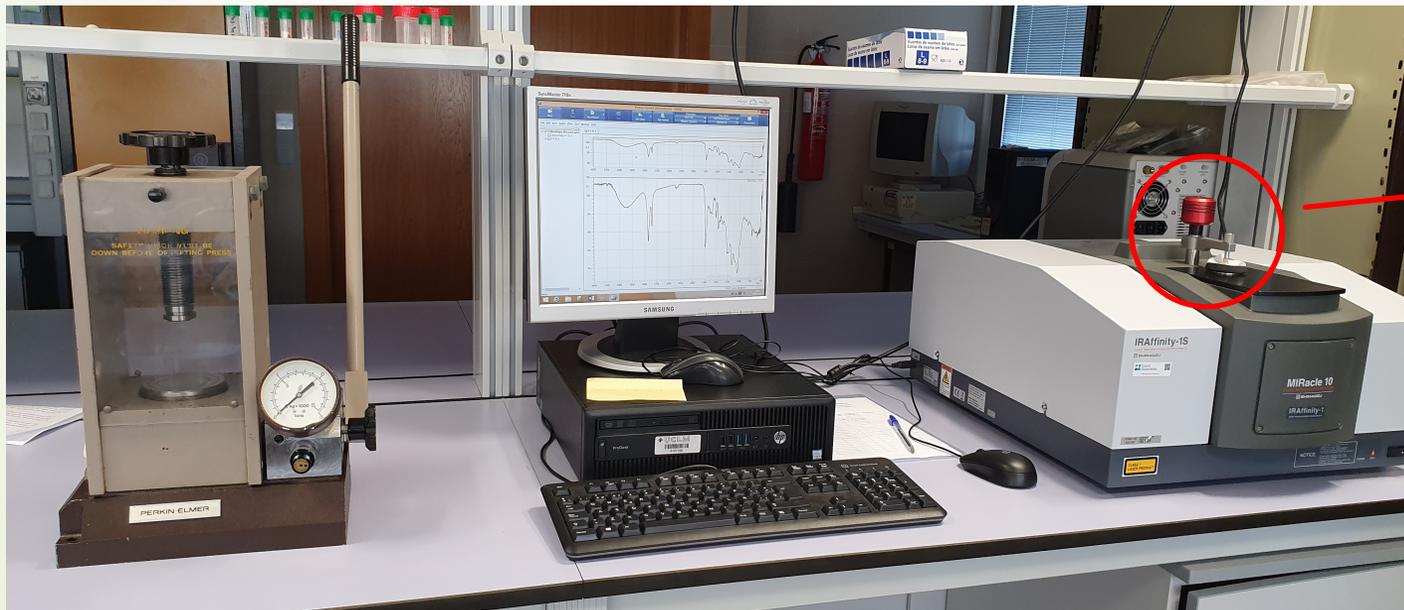


Schematic of a multiple reflection ATR system



Equipo

- Marca Shimadzu modelo IRAffinity-1S, con lámpara de infrarrojos de banda de trabajo media, detector DTGS Standard. Cristal ATR: ZnSe.
- Rango de trabajo: 4000-500 cm^{-1} .
- Parámetros estándar: 45 adquisiciones, resolución 4 cm^{-1} (0.5-16 cm^{-1}).



Tipos de muestra (ATR)

- Sólidos en polvo.



- Film, polímeros orgánicos.



- Muestras laminares.



- **Líquidos.** Disoluciones preferentemente acuosas. $5 < \text{pH} < 9$



Aplicaciones

- Caracterización e identificación de materiales
 - Polímeros y plásticos
 - Sólidos inorgánicos (minerales, catalizadores, materiales compuestos...)
- Análisis de productos farmacéuticos y de síntesis.
- Análisis de contaminantes (suelos)
- Ciencia Forense (identificación de drogas y productos tóxicos)
- Biomedicina (análisis de tejidos)
- Conservación artística (análisis de pigmentos, materiales utilizados...)
- Industria del reciclaje (identificación de materiales poliméricos)
- Agricultura y alimentación (ácidos grasos trans, aditivos...)
- Seguimiento de procesos químicos
 - Polimerizaciones, curado, reticulaciones...
 - Reacciones catalíticas.