

ASIGNATURA DE ESPECTROSCOPIA INFRARROJA

PROPÓSITO DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA	El alumno será capaz de resolver problemas de espectroscopia infrarroja al alcanzar una visión general de esta disciplina, sus fundamentos teóricos y la instrumentación específica utilizada. Aprenderá detalladamente las técnicas para el manejo y preparación de las muestras a estudiar mediante espectroscopia infrarroja, así como los métodos de análisis cualitativo y cuantitativo. Además, comprenderá los fundamentos de la espectroscopia Raman y sus aplicaciones prácticas. Dominará el uso de plataformas computacionales para el procesamiento y análisis de los espectros medidos experimentalmente, así como programas que le permitan modelar la interacción de la radiación infrarroja con las muestras de interés.				
CUATRIMESTRE	QUINTO				
TOTAL DE HORAS	PRESENCIALES	NO PRESENCIALES	HORAS POR SEMANA	PRESENCIALES	NO PRESENCIALES
	75	15		5	1

UNIDADES DE APRENDIZAJE	HORAS DEL SABER		HORAS DEL SABER HACER		HORAS TOTALES	
	P	NP	P	NP	P	NP
I. Visión general, fundamentos teóricos e instrumentación de la espectroscopia infrarroja.	10	0	15	5	25	5
II. Manejo de muestras y análisis de espectros (cualitativo y cuantitativo).	10	0	15	5	25	5
III. Fundamentos de la espectroscopia raman y sus aplicaciones.	10	0	15	5	25	5
TOTALES	30	0	45	15	75	15

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

COMPETENCIA A LA QUE CONTRIBUYE LA ASIGNATURA

De acuerdo con la metodología de diseño curricular de la DGUTyP, las competencias se desagregan en dos niveles de desempeño: Unidades de Competencias y Capacidades.

La presente asignatura contribuye al logro de la competencia y los niveles de desagregación descritos a continuación:

COMPETENCIA: Plantear, diseñar y resolver situaciones teórico-experimentales y de aplicación práctica de la espectroscopia infrarroja usando los fundamentos de esta disciplina.

UNIDADES DE COMPETENCIA	CAPACIDADES	CRITERIOS DE DESEMPEÑO
Aprender los fundamentos de la espectroscopia infrarroja a través del conocimiento de 1) la instrumentación y principios teóricos de la esta disciplina y una visión general de la misma, 2) del manejo de muestras y el análisis cualitativo y cuantitativo de espectros, y 3) de los fundamentos de la espectroscopia Raman y sus aplicaciones para resolver problemas novedosos de investigación mediante con la ayuda de plataformas computacionales adecuadas para el análisis de espectros infrarrojos.	Adquirir la visión general, los fundamentos teóricos y conocimiento detallado de la instrumentación propia de la espectroscopia Infrarroja.	Confecciona reportes sintéticos sobre la panorámica general, los fundamentos teóricos e instrumentación de la espectroscopia infrarroja. Que incluyan los conceptos: <ul style="list-style-type: none"> - Aspectos históricos del desarrollo de la espectroscopía infrarroja. - Principios básicos de la espectroscopía vibracional. - Tipos de fuentes de radiación, detectores y componentes ópticos usadas en la espectroscopía IR. - Espectrómetros infrarrojos modernos.
	Dominar el manejo de muestras y el análisis cualitativo y cuantitativo de espectros IR para solucionar problemáticas de interés práctico.	Confecciona reportes sintéticos del manejo de muestras y el análisis cualitativo y cuantitativo de espectros que incluyan los conceptos: <ul style="list-style-type: none"> - Manejo de muestras líquidas, sólidas, gaseosas y para su estudio por transmisión y reflexión. - Análisis cualitativo y cuantitativo de espectros.
	Dominar los fundamentos de la espectroscopia Raman y sus aplicaciones para solucionar problemáticas de interés práctico con esta herramienta excepcional.	Confecciona reportes sintéticos sobre los fundamentos de la espectroscopia Raman y sus aplicaciones que incluyan las técnicas: <ul style="list-style-type: none"> - Interpretación clásica y cuántica del esparcimiento Raman. - Retos de la espectroscopia Raman. Resuelve un cuestionario sobre la instrumentación y accesorios utilizados en la espectroscopia Raman basados en óptica dispersiva en la óptica interferométrica (espectrómetro de transformada de Fourier).

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

		Resuelve un cuestionario sobre la interpretación de espectros Raman y las aplicaciones clásicas y modernas de esta técnica.
--	--	---

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

UNIDADES DE APRENDIZAJE

UNIDAD DE APRENDIZAJE	I. Visión general, fundamentos teóricos e instrumentación de la espectroscopia infrarroja.							
PROPÓSITO ESPERADO	El alumno será capaz de comprender los fundamentos teóricos y la instrumentación de la espectroscopia infrarroja, así como una visión general de esta disciplina para abordar la solución a problemas prácticos con esta herramienta.							
HORAS TOTALES	P	NP	HORAS DEL SABER	P	NP	HORAS DEL SABER HACER	P	NP
	25	5		10	0		15	5

TEMAS	SABER DIMENSIÓN CONCEPTUAL	SABER HACER DIMENSIÓN ACTUACIONAL	SER DIMENSIÓN SOCIOAFECTIVA
Introducción a la espectroscopia visible, infrarroja y Raman	<p>Explicar los aspectos históricos del desarrollo de la espectroscopia infrarroja</p> <p>Describir el las zonas espectrales ultravioleta, visible e Infrarroja del espectro electromagnético.</p> <p>Explicar de forma básica efecto Raman y su rango espectral típico.</p>	<p>Comprender los elementos históricos básicos que ilustran el desarrollo de la espectroscopia infrarroja hasta la actualidad.</p> <p>Ilustrar mediante esquemas y nomogramas en las regiones espectrales de la radiación UV, VIS, e IR.</p> <p>Conocer en qué consiste el efecto Raman y dominar ejemplos de zonas Raman específicas.</p>	<p>Analítico</p> <p>Proactivo</p> <p>Autónomo</p> <p>Responsable</p> <p>Ordenado</p> <p>Observador</p> <p>Disciplinado</p> <p>Ético</p> <p>Colaborador</p>
Fundamentos teóricos de la espectroscopia infrarroja	<p>Describir los principios básicos de la espectroscopia vibracional.</p> <p>Explicar los fundamentos teóricos modernos de la espectroscopia IR mediante artículos de investigación.</p> <p>Explicar los fundamentos teóricos modernos de la espectroscopia Raman mediante artículos de investigación.</p>	<p>Comprender los principios básicos de la espectroscopia vibracional.</p> <p>Conocer los fundamentos teóricos modernos de la espectroscopia IR mediante la identificación de ellos en referencias modernas.</p> <p>Dominar los principios teóricos modernos de la espectroscopia Raman mediante la identificación de ellos en referencias modernas.</p>	<p>Analítico</p> <p>Proactivo</p> <p>Autónomo</p> <p>Responsable</p> <p>Ordenado</p> <p>Observador</p> <p>Disciplinado</p> <p>Ético</p> <p>Colaborador</p>
Instrumentación y accesorios	Explicar los tipos de fuentes de radiación usadas en la espectroscopia IR.	Comprender las diferencias y semejanzas entre las diferentes fuentes de radiación IR.	<p>Analítico</p> <p>Proactivo</p>

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

	<p>Describir los tipos de detectores de radiación usados en la espectroscopía IR. Explicar los tipos de componentes ópticos para radiación infrarroja: lentes, espejos y elementos dispersores IR y sus datos espectrales característicos.</p> <p>Describir los espectrómetros infrarrojos modernos.</p>	<p>Conocer las diferencias y semejanzas de los principales detectores usados en la espectroscopía IR.</p> <p>Identificar los tipos de materiales usados para los diferentes componentes ópticos usados en la región IR y compararlos mediante programas gráficos de espectros.</p> <p>Comprender la estructura y principio de funcionamiento de los espectrómetros IR modernos. Ejemplo: de fibras ópticas.</p>	<p>Autónomo Responsable Ordenado Observador Disciplinado Ético Colaborador</p>
--	--	---	--

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

PROCESO DE EVALUACIÓN		TÉCNICAS SUGERIDAS DE ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE	ESPACIO DE FORMACIÓN			MATERIALES Y EQUIPOS
EVIDENCIA DE DESEMPEÑO	INSTRUMENTO EVALUACIÓN		AU LA	TAL LER	OT RO	
<p>Tablas y gráficos de propiedades espectrales de materiales usados en la región IR.</p> <p>Ilustración de los tipos de materiales usados en el IR, mediante OpticStudio y otros softwares,</p> <p>Simulación de arreglos ópticos típicos de la espectroscopia IR mediante códigos de OpticStudio.</p>	<p>Reportes.</p> <p>Proyectos.</p> <p>Presentación.</p>	<p>Responder cuestionarios de los temas de clase.</p> <p>Tareas de investigación.</p> <p>Resolver problemas de simulación de conceptos vistos en clases usando software especializado.</p> <p>Exposición de temas en seminarios.</p>	X	X		<p>Pizarrón y plumón.</p> <p>Libros digitales e impresos.</p> <p>Notas de clases del profesor.</p> <p>Equipo de Cómputo con acceso internet.</p> <p>OpticStudio y otros softwares especializados.</p>

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

UNIDAD DE APRENDIZAJE	II. Manejo de muestras y análisis de espectros (cualitativo y cuantitativo).							
PROPÓSITO ESPERADO	El alumno será capaz comprender el manejo de muestras y el análisis cualitativo y cuantitativo de espectros infrarrojo y aplicarlo a distintas situaciones teórico-prácticas.							
HORAS TOTALES	P	NP	HORAS DEL SABER	P	NP	HORAS DEL SABER HACER	P	NP
	25	5		10	0		15	5

TEMAS	SABER DIMENSIÓN CONCEPTUAL	SABER HACER DIMENSIÓN ACTUACIONAL	SER DIMENSIÓN SOCIOAFECTIVA
Manejo de muestras sólidas, líquidas, polímeros.	<p>Explicar el amplio rango de muestras que pueden estudiarse mediante espectroscopía IR.</p> <p>Describir el manejo de muestras líquidas y soluciones en E-IR para su estudio por transmisión y reflexión.</p> <p>Describir el manejo de muestras sólidas y gaseosas en E-IR para su estudio por transmisión y reflexión.</p> <p>Explicar el manejo de muestras de polímeros mediante E-IR para su estudio por transmisión y reflexión.</p>	<p>Listar el amplio rango de tipos de muestras que se estudiar mediante espectroscopia IR.</p> <p>Comprender los métodos y procedimientos requeridos para manejar muestras líquidas y soluciones en la E-IR por transmisión y reflexión.</p> <p>Comprender los métodos y procedimientos requeridos para manejar muestras sólidas y gaseosas en E-IR por transmisión y reflexión.</p> <p>Dominar el los métodos y procedimientos para el manejo de polimeros durante su estudio mediante E-IR.</p>	<p>Analítico</p> <p>Proactivo</p> <p>Autónomo</p> <p>Responsable</p> <p>Ordenado</p> <p>Observador</p> <p>Disciplinado</p> <p>Ético</p> <p>Colaborador.</p>
Análisis cualitativo mediante comparación de espectros y software.	<p>Explicar en qué consiste el análisis cualitativo de sustancias con E-IR mediante comparación de espectros y softwares</p> <p>Describir mediante una comparación básica la diferencia entre el análisis cualitativo y cuantitativo en la E-IR.</p>	<p>Dominar los detalles del método cualitativo de sustancias con E-IR mediante comparación de espectros y softwares. Manejar los softwares que permiten este análisis.</p> <p>Reconocer las diferencias principales entre el análisis cualitativo y el cuantitativo.</p>	<p>Analítico</p> <p>Proactivo</p> <p>Autónomo</p> <p>Responsable</p> <p>Ordenado</p> <p>Observador</p> <p>Disciplinado</p> <p>Ético</p> <p>Colaborador.</p>

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

	Explicar dos ejemplos clásicos del uso del método de análisis cualitativo en E-IR.	Comprender el empleo del método cualitativo en dos ejemplos clásicos del uso de la E-IR.	
Análisis cuantitativo.	<p>Explicar los fundamentos del análisis cuantitativo en la E-IR.</p> <p>Describir la aplicación del análisis cuantitativo en la E-IR: concentración y análisis de muestras líquidas y sólidas.</p> <p>Explicar las bases de la Calibración y la teoría de Kubelka-Munk.</p> <p>Explicar el análisis de datos mediante regresión multilínea.</p>	<p>Comprender los fundamentos teóricos del análisis cuantitativo en la E-IR.</p> <p>Dominar la aplicación del análisis cuantitativo a la concentración y análisis de muestras líquidas y sólidas.</p> <p>Conocer los elementos principales del proceso de calibración y el uso de la teoría de transporte de Kubelka-Munk.</p> <p>Comprender cómo se realiza el análisis de datos en la E-IR mediante regresión multilínea.</p>	<p>Analítico</p> <p>Proactivo</p> <p>Autónomo</p> <p>Responsable</p> <p>Ordenado</p> <p>Observador</p> <p>Disciplinado</p> <p>Ético</p> <p>Colaborador.</p>

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

PROCESO DE EVALUACIÓN		TÉCNICAS SUGERIDAS DE ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE	ESPACIO DE FORMACIÓN			MATERIALES Y EQUIPOS
EVIDENCIA DE DESEMPEÑO	INSTRUMENTO EVALUACIÓN		AU LA	TAL LER	OT RO	
<p>Códigos implementados en MATLAB y otros softwares libres que ilustren el análisis de datos espectrales mediante regresión multilineal.</p> <p>Exposición sobre la teoría de Kubelka-Munk y su utilidad en el análisis cuantitativo en la E-IR.</p>	<p>Reportes. Proyectos. Presentación.</p>	<p>Responder cuestionarios de los temas de clase. Tareas de investigación. Resolver problemas de simulación de conceptos vistos en clases usando software especializado. Exposición de temas en seminarios.</p>	X	X		<p>Pizarrón y plumón. Libros digitales e impresos. Notas de clases del profesor. Equipo de Cómputo con acceso internet. OpticStudio y otros softwares especializados.</p>

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

UNIDAD DE APRENDIZAJE	III. Fundamentos de la espectroscopia raman y sus aplicaciones.							
PROPÓSITO ESPERADO	El alumno será capaz comprender los principios de la espectroscopia Raman y sus aplicaciones para abordar distintas situaciones teórico-prácticas.							
HORAS TOTALES	P	NP	HORAS DEL SABER	P	NP	HORAS DEL SABER HACER	P	NP
	25	5		10	0		15	5

TEMAS	SABER DIMENSIÓN CONCEPTUAL	SABER HACER DIMENSIÓN ACTUACIONAL	SER DIMENSIÓN SOCIOAFECTIVA
Principios de la espectroscopia Raman	<p>Explicar la interpretación clásica del esparcimiento Raman.</p> <p>Explicar la interpretación cuántica del esparcimiento Raman.</p>	<p>Comprender el origen del espectro Raman a partir de una interpretación clásica basada en la descomposición espectral de frecuencia de la señal del momento dipolar inducido.</p> <p>Comprender el origen del espectro Raman a partir de una interpretación cuántica basada en la aplicación de la mecánica cuántica (Diagrama energético vs frecuencia con niveles discretos de energía).</p>	<p>Analítico</p> <p>Proactivo</p> <p>Autónomo</p> <p>Responsable</p> <p>Ordenado</p> <p>Observador</p> <p>Disciplinado</p> <p>Ético</p> <p>Colaborador.</p>
Problemas o limitaciones asociadas	<p>Describir los mayores retos de las espectroscopias Raman:</p> <ul style="list-style-type: none"> - La fuerte señal de fluorescencia asociada. - Calentamiento y daño de la muestra debido a la alta densidad de potencia de excitación con láseres. - Fuerte señal del sustrato. <p>Explicar los métodos para evitar las desventajas de aplicación de la técnica.</p>	<p>Dominar los pormenores de las principales desventajas intrínsecas de la espectroscopia Raman.</p> <p>Conocer las posibles soluciones para combatir las problemáticas inherentes a la espectroscopia Raman.</p>	<p>Analítico</p> <p>Proactivo</p> <p>Autónomo</p> <p>Responsable</p> <p>Ordenado</p> <p>Observador</p> <p>Disciplinado</p> <p>Ético</p> <p>Colaborador.</p>

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

Instrumentación Raman	<p>Explicar la instrumentación y accesorios utilizados en la espectroscopia Raman basados en óptica dispersiva.</p> <p>Explicar y comparar la instrumentación y accesorios utilizados en la espectroscopia Raman basados en óptica interferométrica (Espectrómetro de Transformada de Fourier).</p>	<p>Comprender las características distintivas de la espectroscopia Raman dispersiva: separación especial de las longitudes de onda, usualmente el detector es un CCD, eliminación excelente de la línea Rayleigh, optima en la región visible, etc.</p> <p>Comprender las características distintivas de la espectroscopia Raman de transformada de Fourier: el espectro se recupera mediante la transformada de Fourier del interferograma, se utiliza un detector puntual, optima en la región IR cercana, adecuada para muestras altamente fluorescentes, etc.</p>	<p>Analítico Proactivo Autónomo Responsable Ordenado Observador Disciplinado Ético Colaborador.</p>
Interpretación de espectros	Describir cómo se interpretan los espectros Raman.	Dominar los elementos para la interpretación de los espectros Raman: posición, desplazamiento, ancho e intensidad de los picos, así como la polarización del haz.	<p>Analítico Proactivo Autónomo Responsable Ordenado Observador Disciplinado Ético Colaborador.</p>
Aplicaciones	Listar y explicar las aplicaciones clásicas y modernas de la espectroscopia Raman.	Dominar los diferentes campos y la aplicaciones clásicas y modernas que en ellos que tiene la espectroscopía Raman, abarcando aplicaciones: industriales, médicas, farmacéuticas, forenses, agrícolas, de seguridad, etc.	<p>Analítico Proactivo Autónomo Responsable Ordenado Observador Disciplinado Ético Colaborador.</p>

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

PROCESO DE EVALUACIÓN		TÉCNICAS SUGERIDAS DE ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE	ESPACIO DE FORMACIÓN			MATERIALES Y EQUIPOS
EVIDENCIA DE DESEMPEÑO	INSTRUMENTO EVALUACIÓN		AU LA	TAL LER	OT RO	
<p>Códigos implementados en MATLAB y otros softwares libres que ilustren la interpretación de espectros.</p> <p>Exposiciones sobre la teoría de la espectroscopia Raman, su instrumentación y aplicaciones.</p>	Reportes Proyectos	<p>Responder cuestionarios de los temas de clase.</p> <p>Tareas de investigación.</p> <p>Resolver problemas de simulación de conceptos vistos en clases usando software especializado.</p> <p>Exposición de temas en seminarios.</p>	X	X		<p>Pizarrón y plumón.</p> <p>Libros digitales e impresos.</p> <p>Notas de clases del profesor.</p> <p>Equipo de Cómputo con acceso internet.</p> <p>OpticStudio y otros softwares especializados.</p>

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AUTOR	AÑO	TÍTULO DEL DOCUMENTO	LUGAR DE PUBLICACIÓN	EDITORIAL	ISBN
<i>Hecht, Eugene.</i>	2016	<i>“Óptica” 5th, Edición.</i>	<i>México</i>	<i>Pearson Educación</i>	<i>978-8490354926</i>
<i>Stuart, George, McIntyre.</i>	1996	<i>“Modern Infrared Spectroscopy”. Second Edition.</i>	<i>Chichester, United Kingdom</i>	<i>ACOL Wiley & Sons.</i>	<i>978-0471959175</i>
<i>K. Nakamoto,</i>	2009	<i>“Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compound” 6th Edition.</i>	<i>Hoboken, New Jersey</i>	<i>Wiley</i>	<i>978-0-471-74339-2</i>
<i>B. Stuart</i>	2004	<i>“Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications”</i>	<i>Chichester, England</i>	<i>John Wiley & Sons,</i>	<i>978-0-470-85428-0</i>
<i>Colthup, N. B. , Daly, L.H. , and Wiberley, S.E.</i>	1990	<i>“Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy” 3rd ed.</i>	<i>New York and London</i>	<i>Academic Press</i>	<i>978-0-121-82554-6</i>

ELABORÓ:	Comité del Doctorado en Optomecatrónica de la UPT	REVISÓ:	Dirección de Investigación y Posgrado de la UPT
APROBÓ:	DGUTyP	FECHA DE ENTRADA EN VIGOR:	Enero 2022