

Fundamentos de Espectroscopia Molecular: Hardware

CONSTRUIMOS

UNA CIENCIA MEJOR

ENTRE AGILENT Y USTED

Agilent Technologies es una empresa comprometida con la comunidad educativa y no duda en ofrecer acceso a materiales de su propiedad.

Esta presentación ha sido creada por Agilent Technologies con fines exclusivamente educativos. Si desea utilizar las imágenes, los esquemas o los dibujos para otros fines distintos, póngase en contacto previamente con Agilent Technologies.

Índice

Introducción

- [Clasificación](#)

Espectroscopia molecular

- [General](#)
- [Espectroscopia UV-VIS](#)
 - [Configuración general](#)
 - [Fuente de luz](#)
 - [Dispositivos de dispersión](#)
 - [Detectores](#)
 - [Sistema](#)
 - [Análisis cualitativo y cuantitativo](#)
 - [Aplicaciones](#)
 - [Ejemplos](#)
 - [Capacidades](#)

- [Espectroscopia de fluorescencia](#)
 - [Configuración general](#)
 - [Fuente de luz](#)
 - [Sistema](#)
 - [Aplicaciones](#)
 - [Ejemplos](#)
 - [Capacidades](#)
- [Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier:](#)
 - [Configuración general](#)
 - [Interferograma](#)
 - [Análisis cualitativo y cuantitativo](#)
 - [Sistema](#)
 - [Aplicaciones](#)
 - [Ejemplos](#)
 - [Capacidades](#)
- [Más información](#)



Introducción

Clasificaciones

La espectroscopia es un campo amplio con muchas subdisciplinas, que pueden clasificarse por el tipo de material que se analice. Esta presentación se centrará en la **espectroscopia molecular**.

ÁTOMOS

Espectroscopia atómica

- AAS
- MP-AES
- ICP-OES
- ICP-MS

MOLÉCULAS

Espectroscopia molecular

- UV-VIS
- UV-VIS-NIR
- FTIR
- Fluorescencia

CRISTALES

- Cristalografía por rayos X

NÚCLEOS

- Resonancia magnética nuclear

Espectroscopia molecular

Aspectos generales

La combinación de los átomos en moléculas crea unos estados energéticos únicos y, por lo tanto, se crean espectros únicos de las transiciones entre los estados.

Los espectros moleculares pueden obtenerse debido a:

- Estados de espín de los electrones
- Rotaciones moleculares
- Vibración molecular
- Estados electrónicos

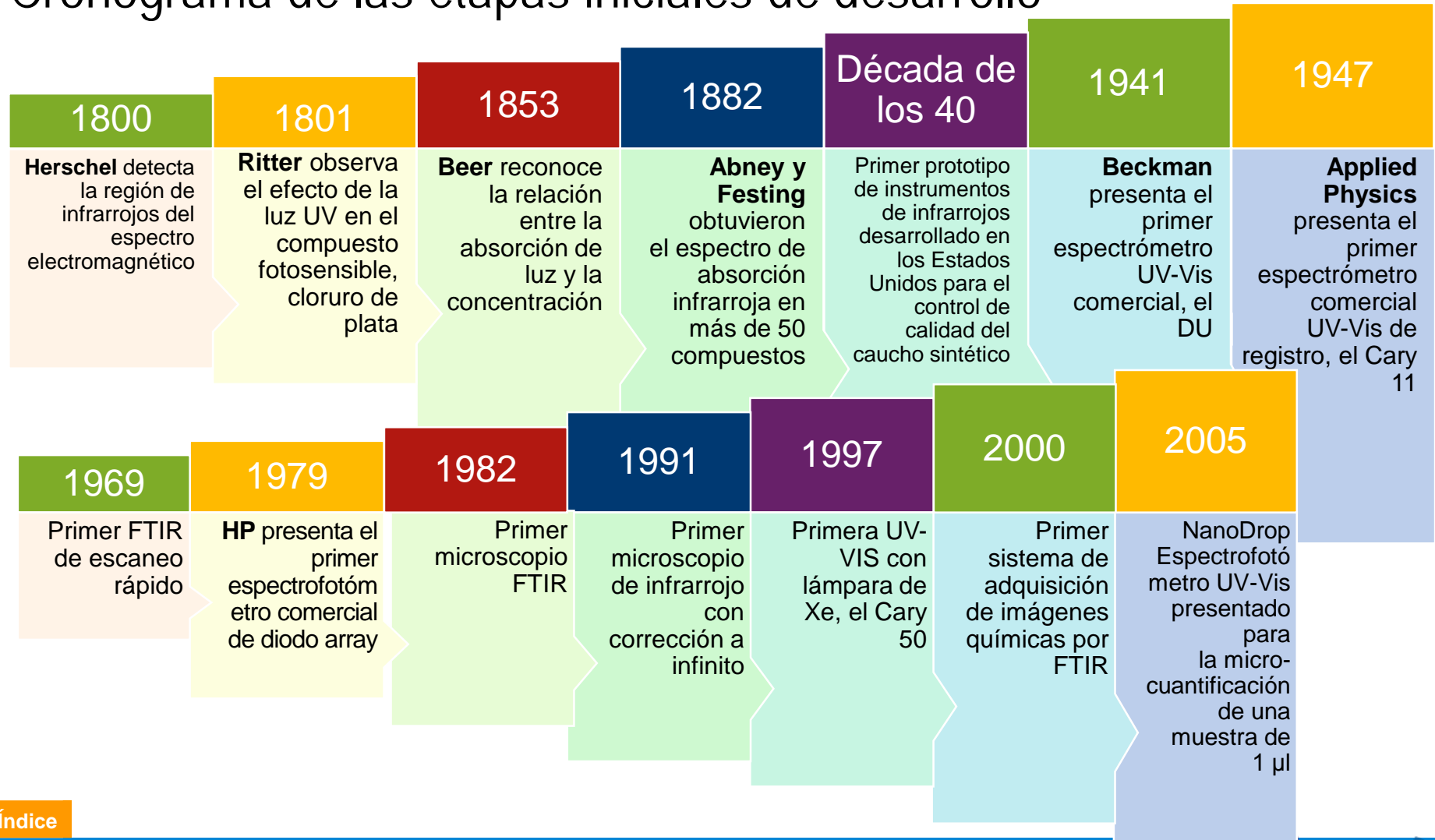
Espectroscopia molecular

Espectroscopia molecular	
	Por aplicación
Sistemas UV-Vis	Estudios sobre las interacciones entre la energía electromagnética ultravioleta, visible e infrarroja cercana y la materia
FTIR	Estudios sobre las interacciones entre la energía electromagnética infrarroja y la materia
Fluorescencia	Estudios sobre la emisión de energía electromagnética, después de la interacción generalmente entre la energía ultravioleta y visible y la materia



Introducción

Cronograma de las etapas iniciales de desarrollo



Espectroscopia UV-Vis

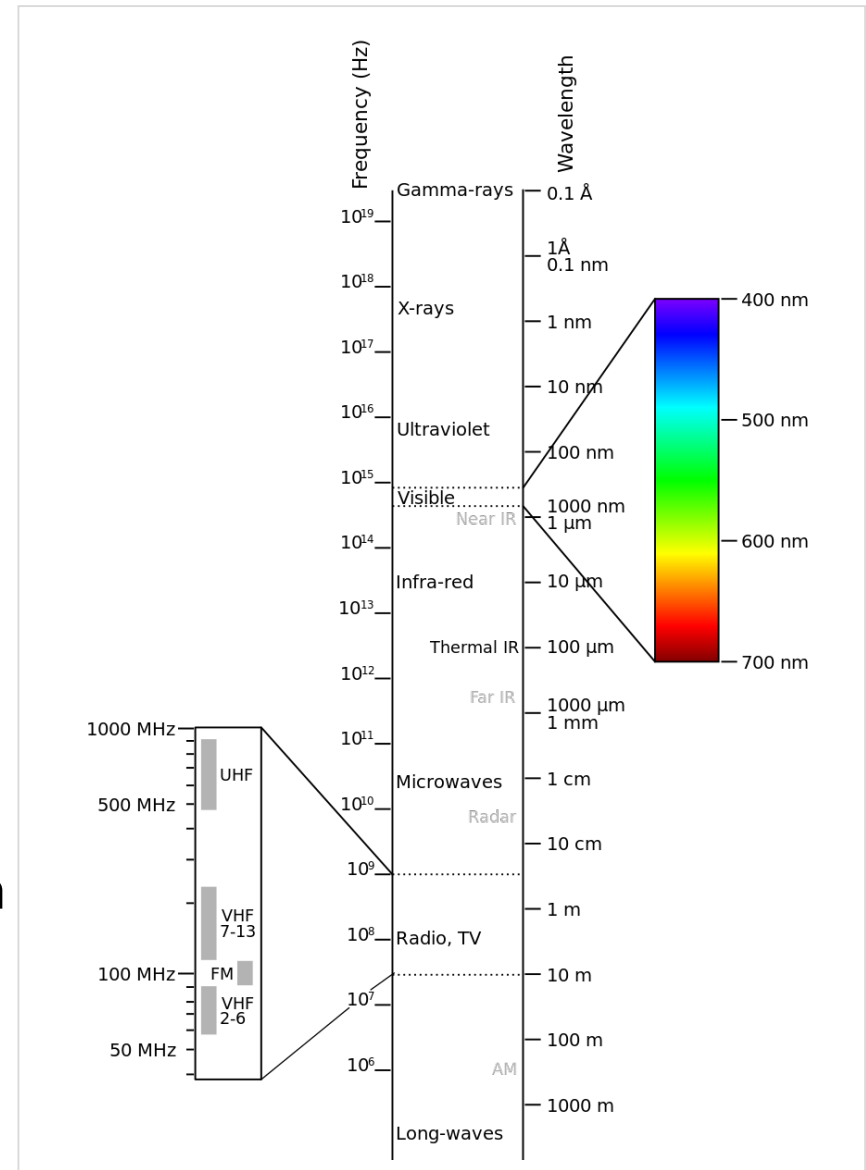
Aspectos generales

El **espectro electromagnético** cubre numerosas órdenes de magnitud en frecuencia y longitud de onda.

La luz visible representa solo una fracción muy pequeña del espectro electromagnético.

- Ultravioleta: De 190 a 400 nm
- Visible: De 400 a 800 nm
- Infrarrojo: De 800 a 100.000 nm

"Espectro electromagnético" por Victor Blacus



Fuente: [Wikipedia](#)

Espectroscopia UV-Vis

Aspectos generales

Un espectrofotómetro mide la cantidad de luz transmitida a través de o reflejada de una muestra.

Todos los espectrofotómetros de investigación auténticos pueden medir el porcentaje de luz transmitida o reflejada en todas las longitudes de onda desde aproximadamente unos 190 nm (ultravioleta media) hasta al menos 900 nm (infrarrojo cercano) con una resolución inferior a 2 nm.

Para trabajos en disolución, el porcentaje de la luz transmitida se expresa como absorbancia, que es directamente proporcional a la concentración.



Espectroscopia UV-Vis

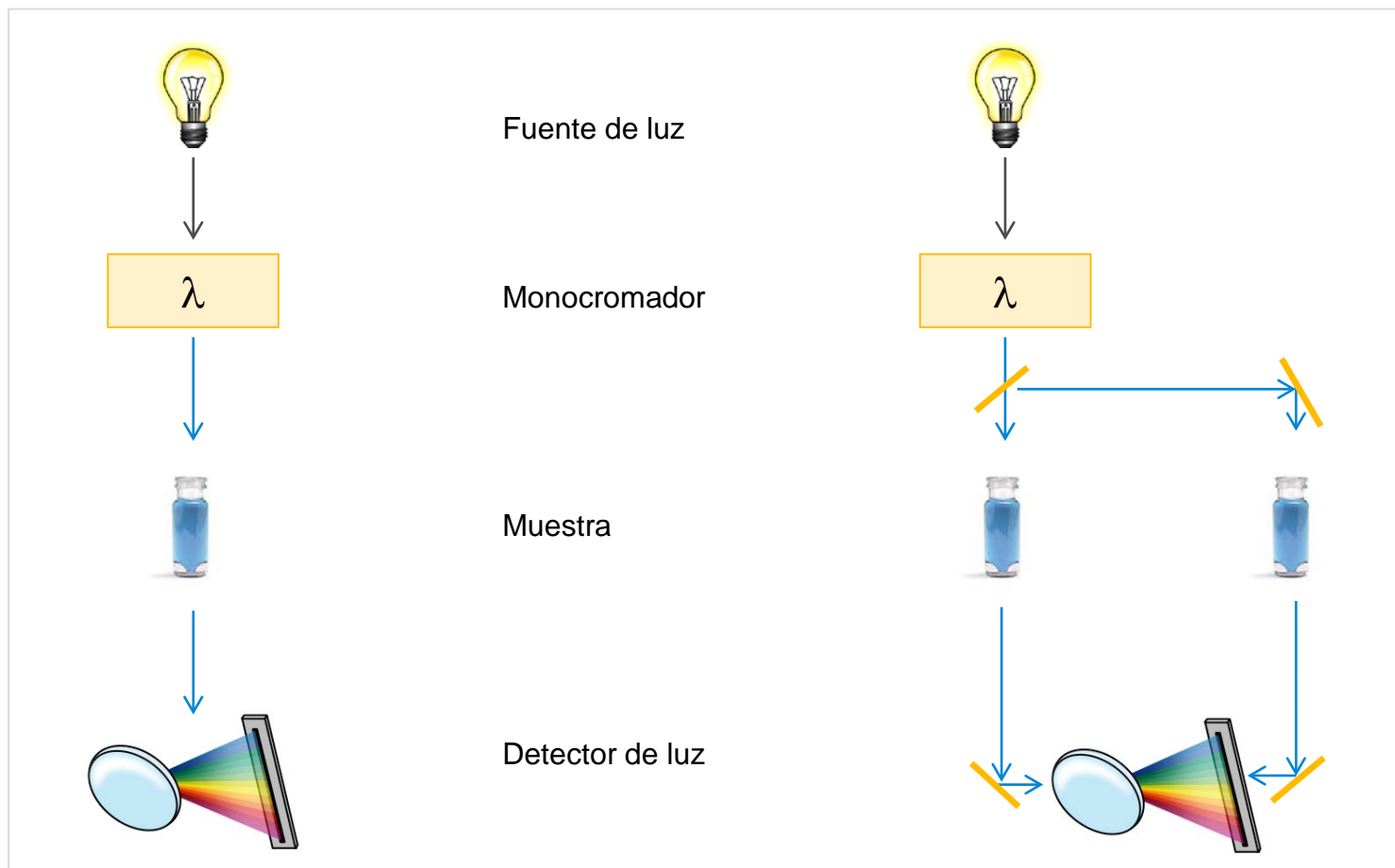
Aspectos generales



- La lámpara (fuente) emite luz en un rango de longitudes de onda
- El monocromador (dispositivo de dispersión) selecciona una longitud de onda
- El analito absorbe luz (superficie de la muestra)
- Se mide la luz transmitida (detector)
- La concentración se determina contrastándola con patrones

Espectroscopia UV-Vis

Aspectos generales: Espectrómetro de haz simple frente a doble haz



El diseño de doble haz permite corregir las variaciones en la intensidad de la luz.

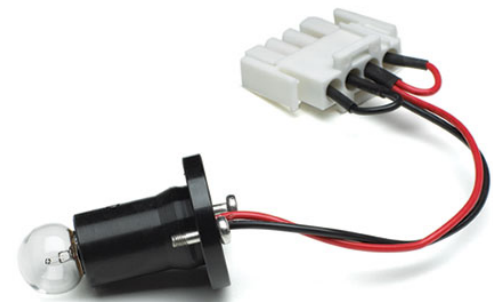
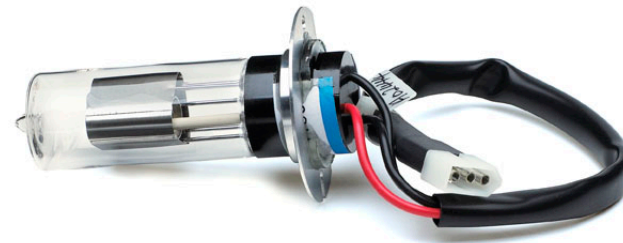
Espectroscopia UV-Vis

Fuente de luz

La fuente de luz ideal generaría una intensidad constante en todas las longitudes de onda con un ruido bajo y una estabilidad a largo plazo.

Las fuentes generalmente utilizadas en los espectrofotómetros UV-Vis son:

- **Lámpara de arco de deuterio** → intensidad útil en la región ultravioleta
- **Lámpara de halógeno de wolframio** → buena intensidad en parte del espectro ultravioleta y todo el rango visible
- **Lámpara de xenón** → buena continuidad a lo largo de toda la región ultravioleta y visible



La fuente de deuterio (arriba) y la lámpara de wolframio-halógeno (abajo) utilizada con sistemas ultravioletas

Espectroscopia UV-Vis

Dispositivos de dispersión

Los dispositivos de dispersión dispersan las longitudes de onda de la luz en ángulos diferentes. Si se combinan con una rendija de salida adecuada, estos dispositivos pueden utilizarse para seleccionar una longitud de onda particular (o, más precisamente, una banda de onda estrecha) de luz de una fuente continua.

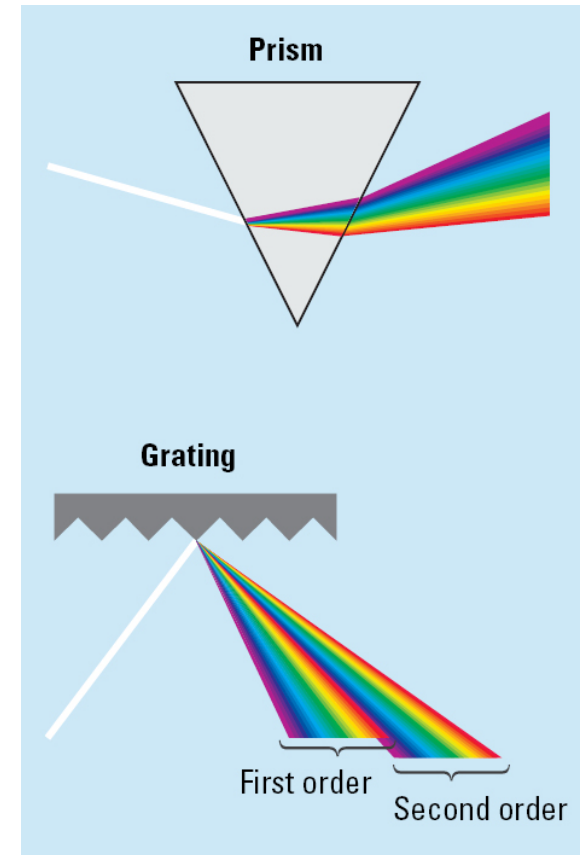
Hay dos tipos de dispositivos:

- **Prismas**

Generan un arco iris de luz solar; la desventaja es que el ángulo de dispersión es sensible a la temperatura

- **Lentes de difracción holográfica**

Estas no son sensibles a la temperatura; la luz que llega a la lente de difracción se refleja en ángulos diferentes, dependiendo de la longitud de onda.



Esquema de los dispositivos de dispersión. Los espectrómetros más modernos utilizan la dispersión por lente de difracción.

Fuente: [Fundamentals of UV-visible spectroscopy](#)

Espectroscopia UV-Vis

Detectores

Un detector convierte una señal de luz en una señal eléctrica. En condiciones ideales, generaría una respuesta lineal en un amplio rango con ruido bajo y alta sensibilidad.

Detector de tubo fotomultiplicador

Combina la conversión de señal con varias etapas de amplificación dentro del tubo; se escanea el rango completo de longitud de onda.

Detector de fotodiodo

La luz que llega al material semiconductor permite a los electrones fluir a través de él, y por lo tanto se descarga el condensador conectado a lo largo del material. La cantidad de carga necesaria para recargar el condensador es proporcional a la intensidad de luz; se mide todo el rango de longitudes de onda en una lectura.

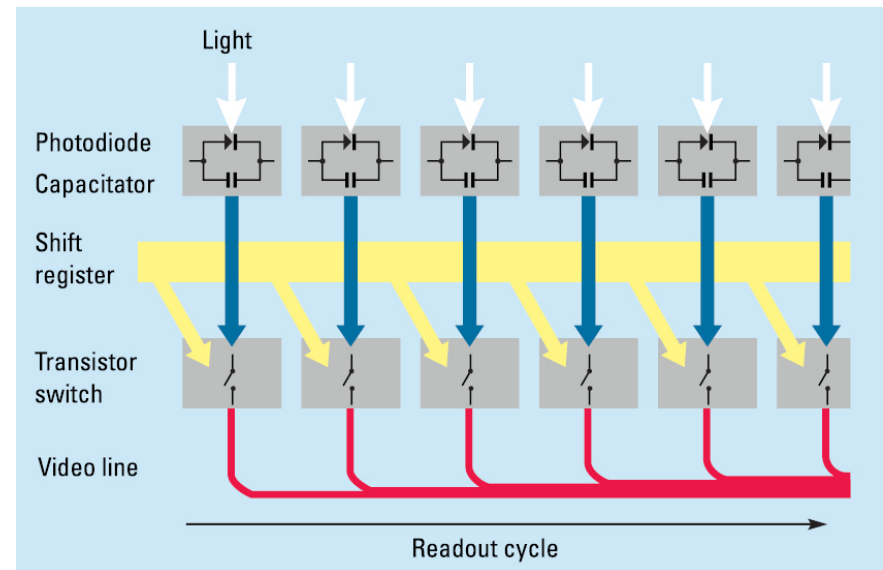
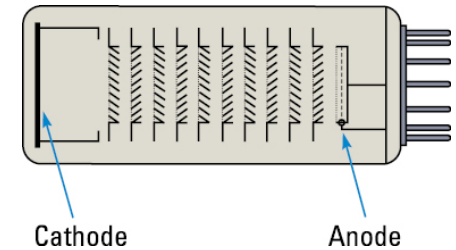
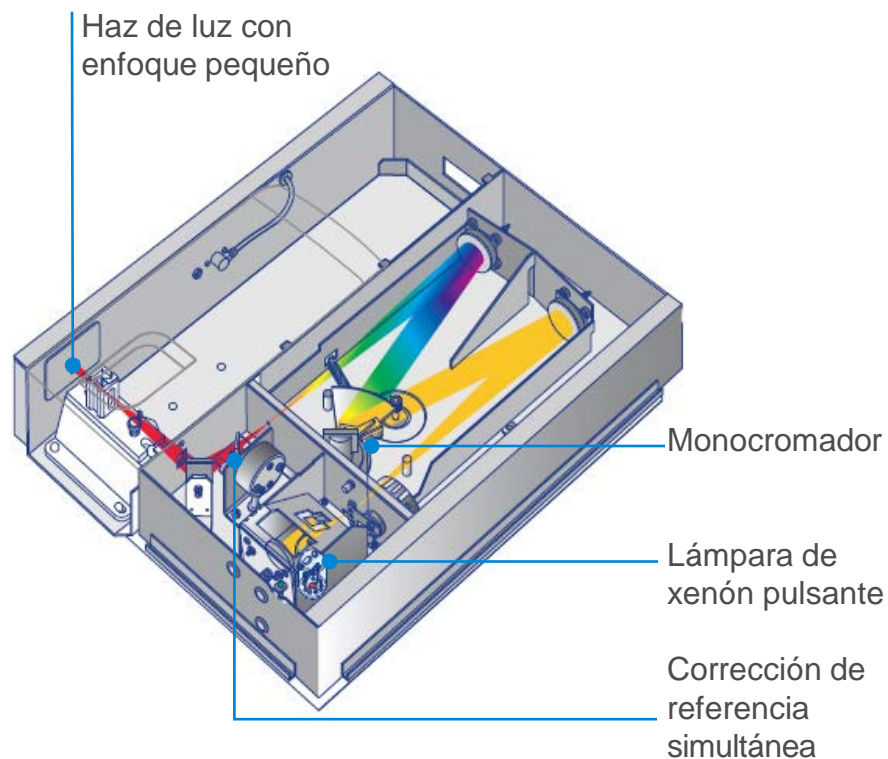


Diagrama esquemático del detector de tubo fotomultiplicador (arriba) y el haz de fotodiodos (abajo).

Espectroscopia UV-Vis Sistema

Aplicaciones clave

- Monitorización de cinéticas
- Caracterización de compuestos sintetizados nuevos o desconocidos
- Evaluación de la pureza del ADN
- Cuantificación del ADN y las proteínas
- Análisis de nutrientes en agua, alimentos y muestras agrícolas



Espectroscopia UV-Vis

Análisis cualitativo y cuantitativo

El espectro de UV visible generalmente muestra solamente unas pocas bandas de absorbancia amplias. La mayoría de la absorción por los compuestos orgánicos procede de la presencia de enlaces π (es decir, no saturados).

Un cromóforo es un grupo molecular que generalmente contiene un enlace π . Cuando se inserta en un hidrocarburo saturado (que no muestra un espectro de absorbancia de UV visible), se produce un compuesto con una absorción entre 185 y 1000 nm.

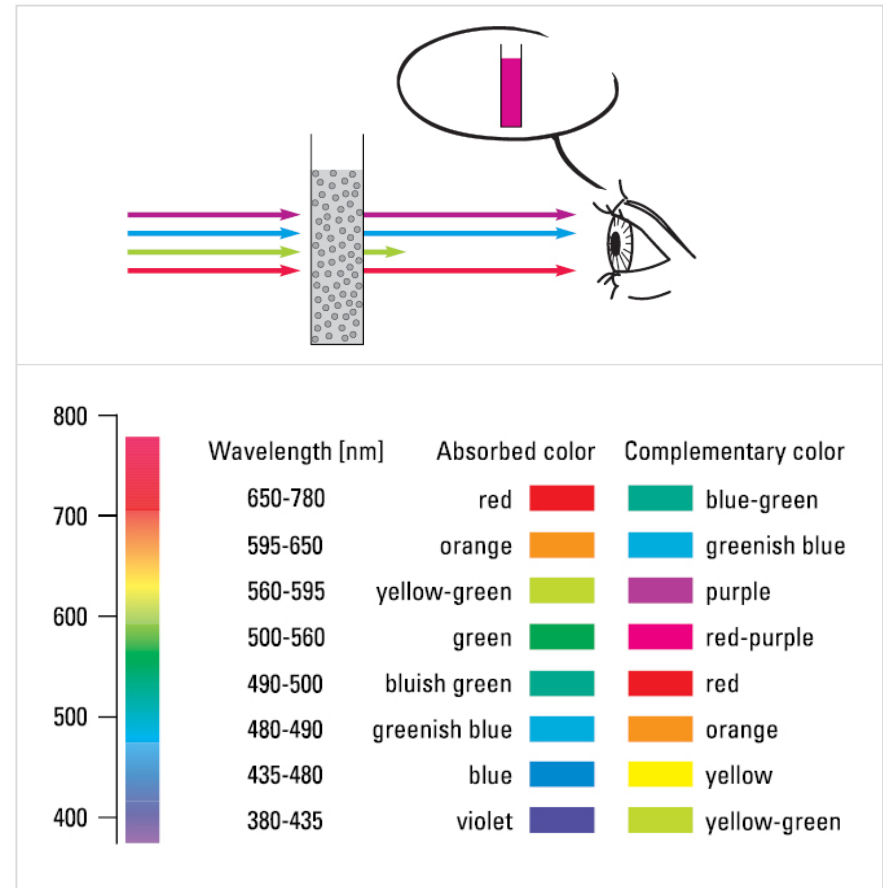
Cromóforos seleccionados y sus valores máximos de absorbancia

Cromóforo	Fórmula	Ejemplo	$\lambda_{\text{máx}}$ (nm)
Carbonilo (cetona)	RR'C=O	Acetona	271
Carbonilo (aldehído)	RHC=O	Acetaldehído	293
Carboxílico	RCOOH	Ácido acético	204
Amida	RCONH ₂	Acetamida	208
Nitro	RNO ₂	Nitrometano	271

Espectroscopia UV-Vis

Análisis cualitativo y cuantitativo

El color es una propiedad importante de una sustancia. El color de la materia está relacionado con su absorbencia o reflexividad. El ojo humano ve el color complementario del color que se ha absorbido.



*Transmisión y color (arriba)
Absorbancia y colores complementarios (abajo)*

Fuente: [Fundamentals of UV-visible spectroscopy](#)

Espectroscopia UV-Vis

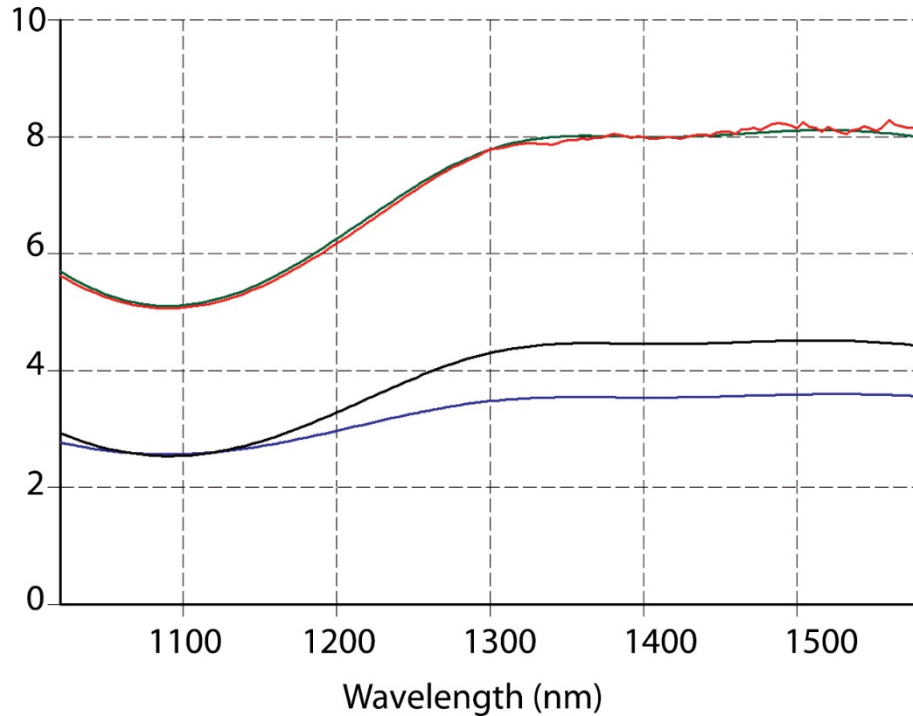
Aplicaciones

MERCADO	APLICACIONES
Material	<ul style="list-style-type: none">• Materiales a granel• Componentes ópticos: filtros, lentes, espejos, divisores de haz, polarizadores, cristales• Películas finas, revestimientos ópticos y antirreflectantes, materiales nano-compuestos, pinturas, células solares• Gafas de seguridad• Pulpa y papel• Material de camuflaje• Gafas de sol• Telas/tejidos
Productos químicos	<ul style="list-style-type: none">• Control/garantía de calidad para materias primas y productos finales en el proceso de fabricación• Identificación química o estudio de procesos químicos: laboratorios de químicos sintéticos, investigación fotoquímica, caracterización de nano-partículas, investigación de sustancias químicas de superficie• Química analítica• Medidas de color: pinturas y tejidos (correspondencia de color, control/garantía de calidad en tejidos, medidas de SPF)
Biología e industria farmacéutica	<ul style="list-style-type: none">• Ensayos de vinculantes de fármacos• Reacciones enzimáticas• Análisis de muestras biológicas turbias, tejidos, homogenados celulares• Medidas de iones intracelulares• Determinación de ácido nucleico (ARN/ADN) y proteínas• ADN y medidas de desnaturalización/renaturalización de proteínas



Espectroscopia UV-Vis

Medida de absorbancia del filtro de cristal Schott



Espectro de filtro 1 UG11 (azul), filtro 2 UG11 (negro) y el espectro del filtro 1 UG11 y el filtro 2 UG 11 juntos (rojo). El espectro verde es el resultado predicho basado en la suma del espectro azul y negro.

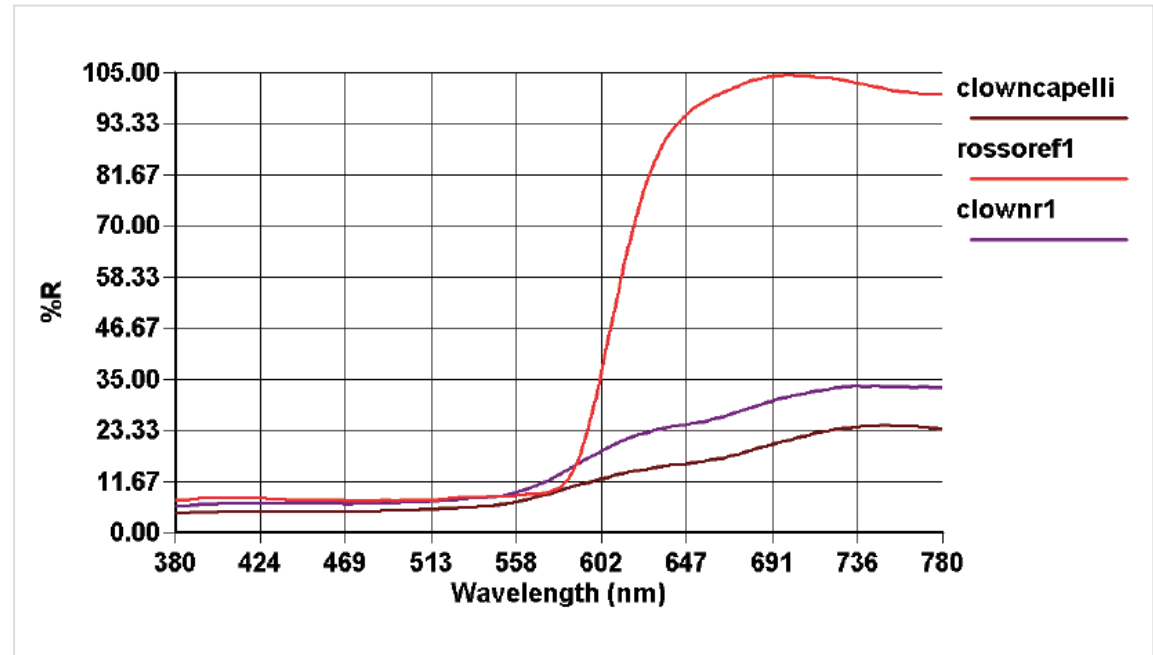
Se midieron dos filtros por separado y se sumaron numéricamente (predicción). Estos resultados son idénticos a los dos filtros medidos juntos (medida).

Espectroscopia UV-Vis

Medida del color de una pintura sobre un lienzo



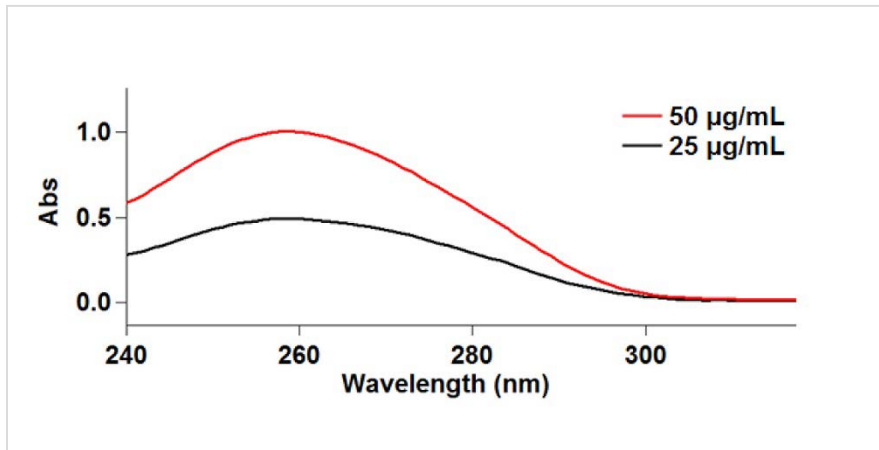
Los espectros muestran que las muestras clownnr1 y clowncapelli están hechas con materiales similares.



Fuente: [Measuring the color of a paint on canvas directly with external diffuse reflectance using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer](#)

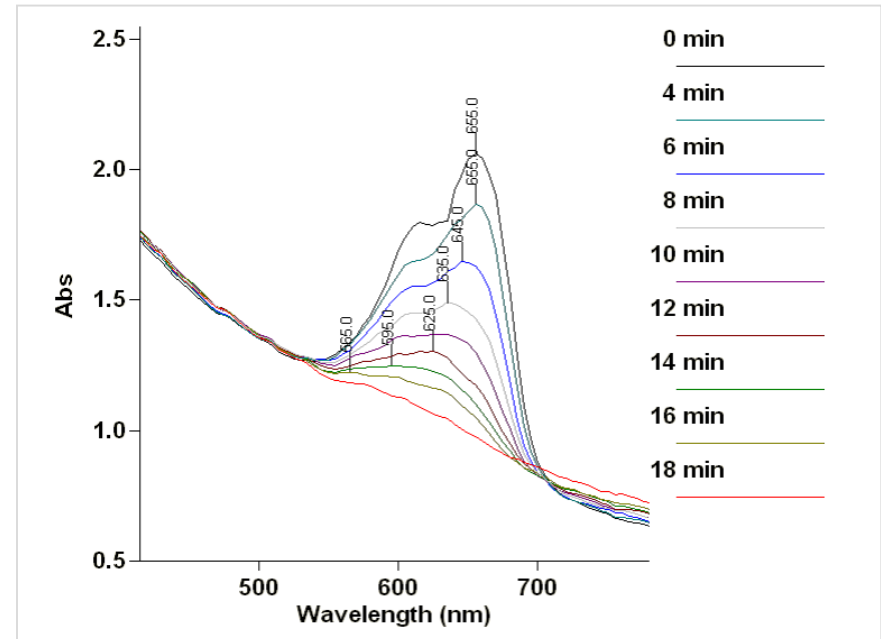
Espectroscopia UV-Vis

Análisis de pureza y análisis de cinéticas



Barridos de muestras de 150 µl de ADN a 4°C en dos concentraciones que muestran el máximo de absorbancia característico a 260 nm. Cabe destacar la diferencia entre el máximo de 1,0 unidades de absorbancia por 50 µg/ml de ADN en y el máximo de 0,5 unidades de absorbancia por 25 µg/ml de ADN, lo cual demuestra la validez de la ley de Beer-Lambert.

Fuente: [Measuring the purity of low volumes of DNA at 4 °C using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer with fiber optics microprobe](#)



Lectura cinética utilizando fibra óptica de azul de metileno expuesto a una lámpara de UV de alta intensidad (lámpara Oriell 500 W Hg(Xe)) durante 20 minutos dentro de un rango de 400 nm a 800 nm. Las etiquetas muestran las longitudes de onda de máxima absorbancia.

Fuente: [Simple, automated measurements of the photocatalytic properties of colorimetric species using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer with fiber optics.](#)

Espectroscopia UV-Vis

Capacidades

La sencilla relación lineal entre la absorbancia y la concentración de la medida de la espectroscopia UV-visible han hecho a la espectroscopia UV-visible la base de miles de métodos analíticos cuantitativos.

Espectroscopia UV-Vis

Ventajas

- Gran aplicación para análisis cualitativos y cuantitativos
- Puede utilizarse para numerosos tipos de moléculas e iones orgánicos e inorgánicos
- Facilidad de uso
- Rápido
- Mantenimiento bajo
- Medida no destructiva

Limitaciones

- Límites de detección más elevados (peores) que la fluorescencia
- Las bandas de absorción solapantes pueden crear interferencias
- Puede ser difícil para los compuestos fotosensibles si se utiliza la fuente D2 y QI (no aplicable si se utiliza una fuente de xenón)



Espectroscopia de fluorescencia

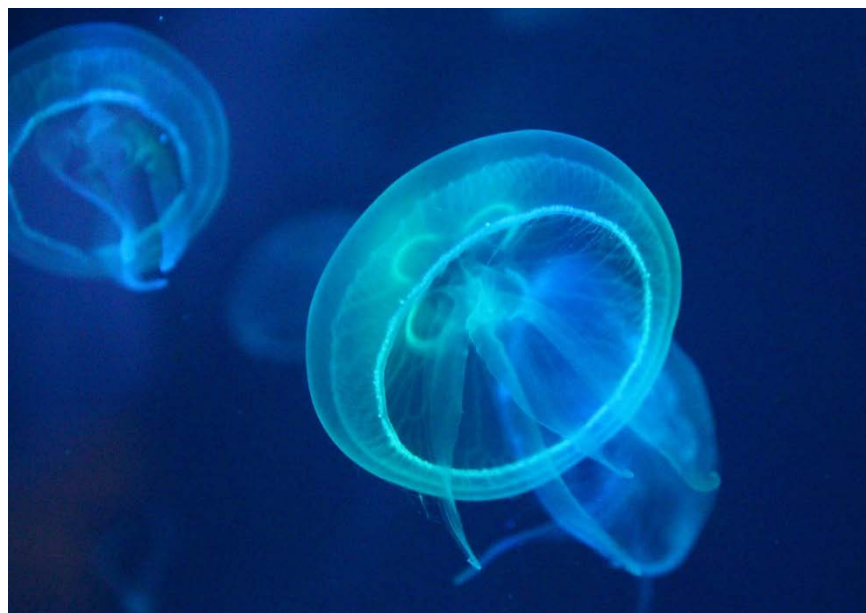
Aspectos generales

La fluorescencia es la emisión de fotones posterior a la excitación por fotones de una energía superior.

Los espectrómetros de fluorescencia ofrecen una sensibilidad (picomolar) alta, ya que detectan una señal contra un fondo oscuro, a diferencia de los espectrofotómetros.

Los instrumentos a nivel de investigación utilizan monocromadores de escaneo tanto para la excitación como la emisión.

Numerosos sistemas de fluorescencia pueden también medir la fosforescencia y luminiscencia.



Espectroscopia de fluorescencia

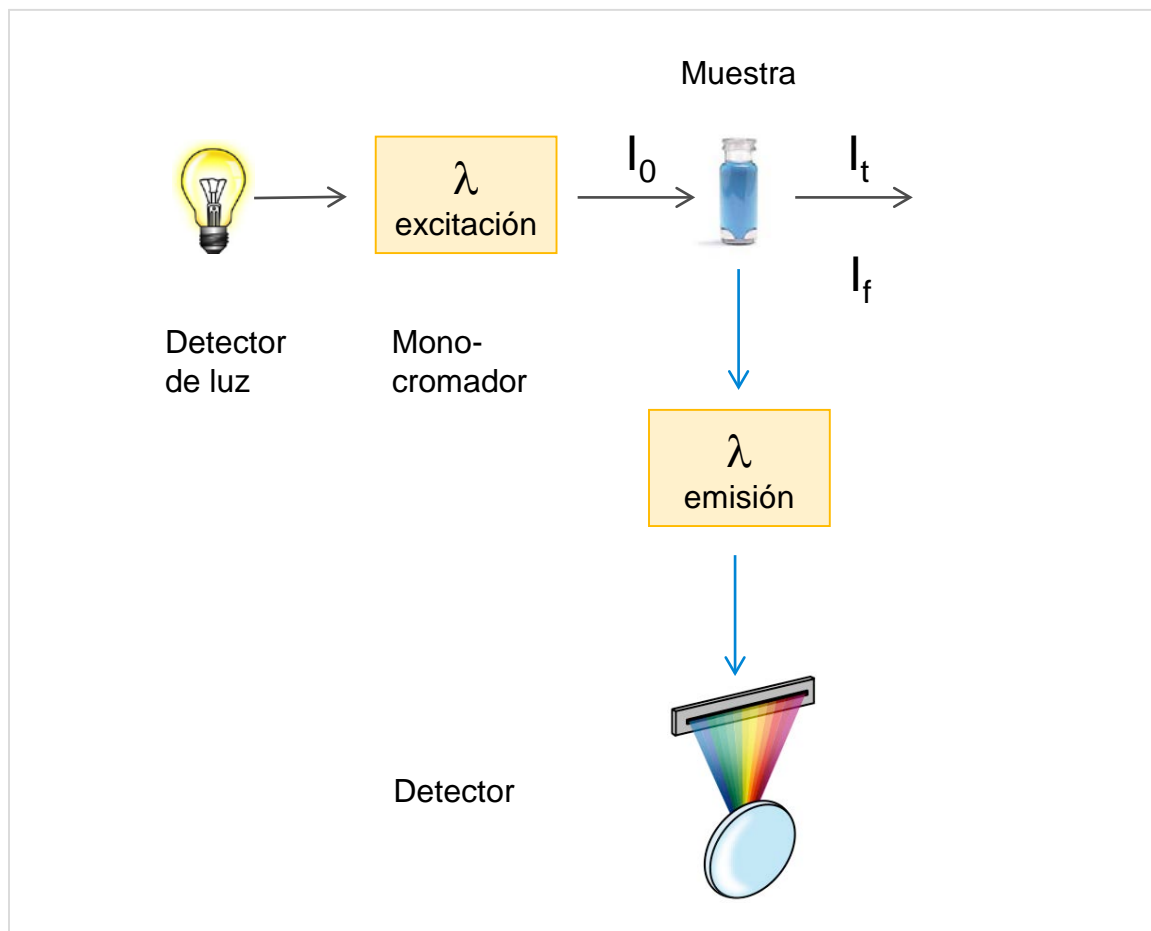
Aspectos generales



- La lámpara (fuente) emite luz en un rango de longitudes de onda
- El monocromador selecciona la longitud de onda de excitación
- La superficie de la muestra retiene la muestra y el analito absorbe la luz
- Luz emitida con una mayor longitud de onda
- El monocromador selecciona la longitud de onda de excitación
- Se mide la luz transmitida (detector)

Espectroscopia de fluorescencia

Aspectos generales



Nota: El detector no está en línea directa con la fuente de luz para minimizar el riesgo de que la luz transmitida o reflejada alcance el detector.

Espectroscopia de fluorescencia

Fuente de luz

Se utilizan distintas fuentes de luz en los espectrofotómetros de fluorescencia:

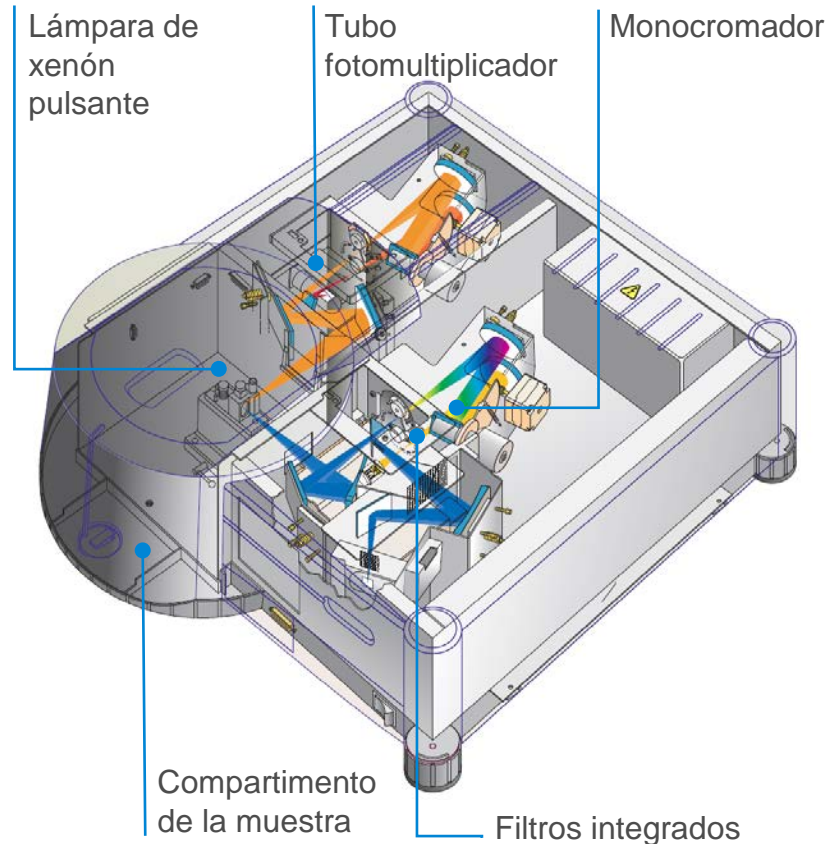
- **Lámpara de xenón:** el espectro de emisión continua con una intensidad casi constante entre 300 y 800 nm
- **Lámpara de vapor de mercurio:** una lámpara de línea, lo que significa que emite luz cerca de las longitudes de onda
- **Láseres:** limitados en la selección de longitud de onda; realmente no puede cambiarse

Espectroscopia de fluorescencia

Sistema

Aplicaciones clave

- Estabilidad térmica de biocatalizadores
- Caracterización de biomarcadores para la adquisición de imágenes de células vivas
- Mezclas de hidrocarburos en petróleo
- Caracterización de la oligomerización GPCR



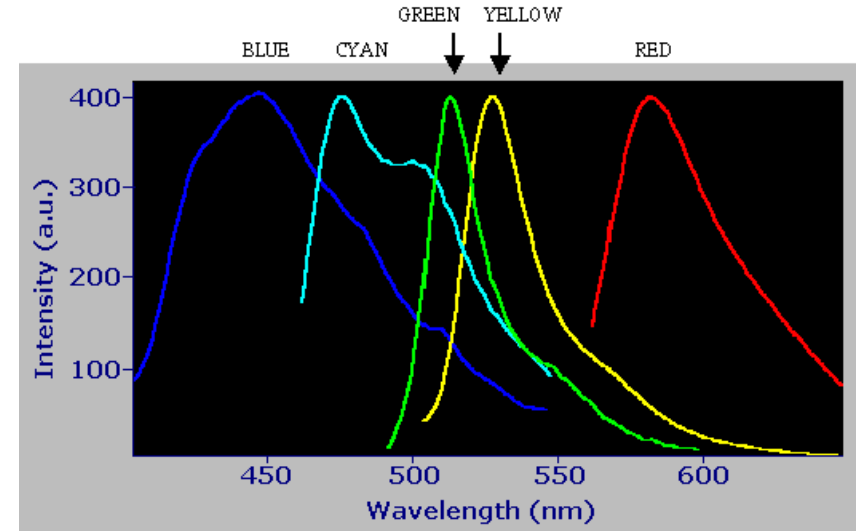
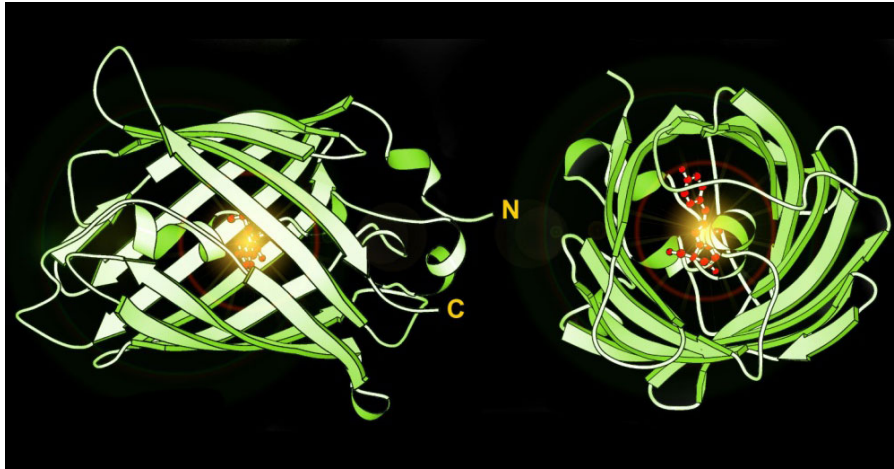
Espectroscopia de fluorescencia

Aplicaciones

MERCADO	APLICACIONES
Productos químicos	<ul style="list-style-type: none">• Investigación de fotoquímica• Caracterización de nano-partículas• Investigación de sustancias químicas en superficie• Química analítica
Farmacéutica y biotecnología	<ul style="list-style-type: none">• Investigación bioquímica y biofísica• Estudios de estructuras y cuantificación de proteínas: Estudios de las interacciones de proteína-a-proteína y membrana• Enzimología: Cinética de las enzimas mediante sustrato fluorescente• Biología molecular: Cuantificación de ADN y ARN

Espectroscopia de fluorescencia

Expresión citosólica de la proteína verde fluorescente

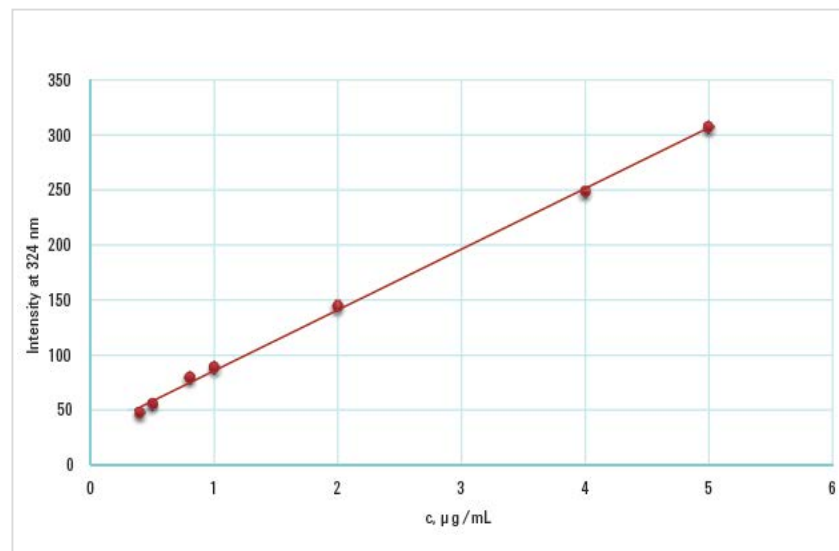
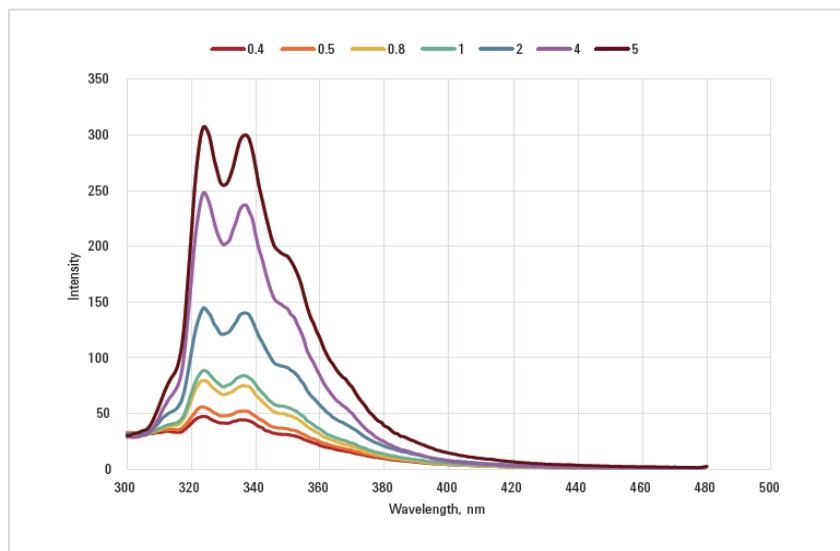


Representación esquemática de la proteína verde fluorescente Izquierda: Tripéptido fluoróforo en rojo. Derecha: Intensidad frente a emisión para el espectro completo de proteínas fluorescentes.

Fuente: [Cytosolic expression of Green Fluorescent Protein \(GFP\) and its derivatives in the yeast *Saccharomyces cerevisiae*: Detection in vivo using the Agilent Cary Eclipse](#) (Expresión citosólica de Proteína verde fluorescente (GFP) y sus derivados en la levadura *Saccharomyces cerevisiae*: Detección in vivo mediante Agilent Cary Eclipse)

Espectroscopia de fluorescencia

Cuantificación de hidrocarburos aromáticos policíclicos o petróleos



Espectros de fluorescencia del naftaleno, longitud de onda de Ex. 250 nm, rendija de Ex. de 10 nm, rendija de Em. de 5 nm (izquierda); gráfico de calibración (los puntos para la misma concentración están promediados) para la determinación fluorométrica de naftaleno a 324 nm, longitud de onda de Ex. 250 nm, rendija de Ex. de 10 nm, rendija de Em. de 5 nm.

Fuente: [Quantification of complex polycyclic aromatic hydrocarbons or petroleum oils in water with Cary eclipse fluorescence spectrophotometer According to astm d 5412-93 \(2000\)](#)

Espectroscopia de fluorescencia

Capacidades

En concentraciones bajas, la intensidad de la fluorescencia será generalmente proporcional a la concentración del fluoróforo.

Los efectos de supresión de la señal (quenching) pueden influir en el resultado. El efecto "quenching" describe la disminución de la intensidad de fluorescencia de una sustancia determinada y puede ser el resultado de distintos procesos, como las reacciones de estado excitado o quenching de colisión.

Espectroscopia de fluorescencia

Ventajas

- Extremadamente sensible para los compuestos aromáticos e insaturados
- Puede aplicarse a otros compuestos con derivatización o marcado
- Facilidad de uso
- Mantenimiento bajo

Limitaciones

- Limitado a determinados tipos de compuestos
- Las mezclas pueden requerir limpieza
- Posibilidad de efecto "quenching"

Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

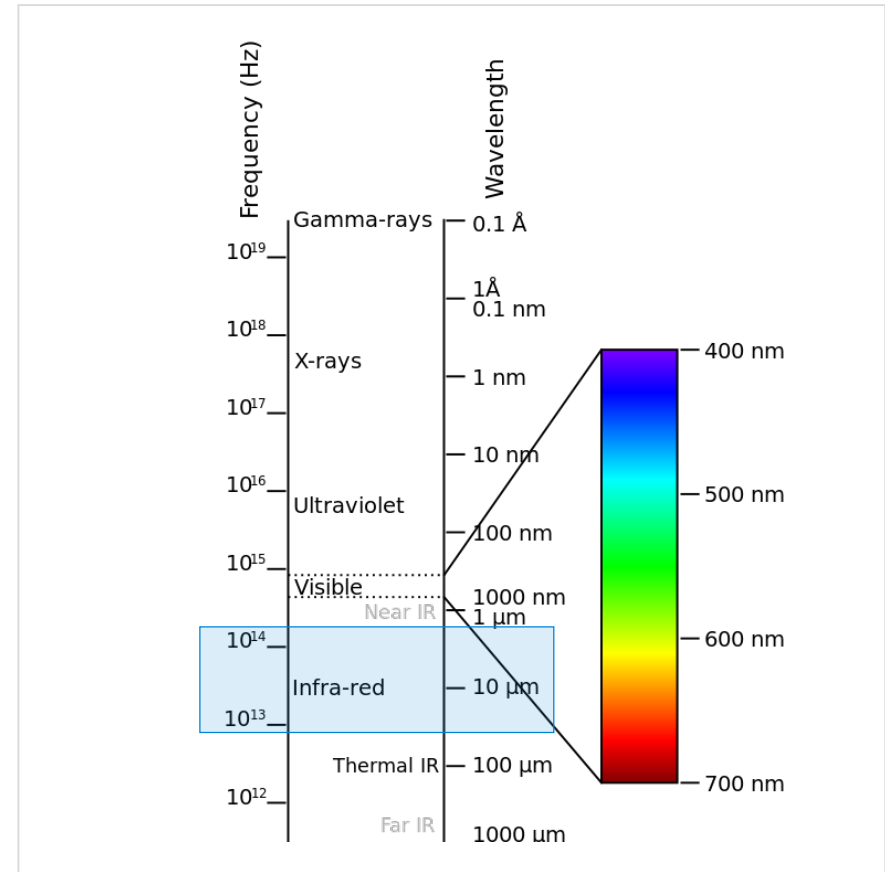
Aspectos generales

La luz infrarroja tiene una longitud de onda mayor o una frecuencia menor que la luz visible.

El espectro infrarrojo se divide en radiación de infrarrojo cercano, medio y lejano. La región de uso más común es el infrarrojo medio (frecuencia: 4.000 y 400 cm^{-1}).

La espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) es una técnica que obtiene un espectro infrarrojo de absorción, emisión, fotoconductividad o dispersión Raman de un sólido, líquido o gas.

Un espectrómetro FTIR recopila simultáneamente los datos de resolución espectral alta en un amplio rango espectral.



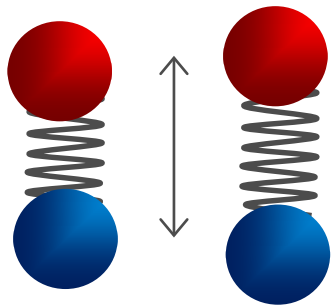
"Espectro electromagnético" por Victor Blacus

Fuente: [Wikipedia](#)

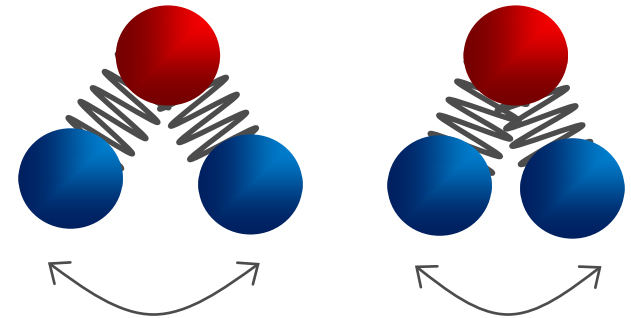
Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

Aspectos generales

La luz infrarroja absorbida puede causar vibraciones moleculares.
La espectroscopia infrarroja mide el cambio de la amplitud.



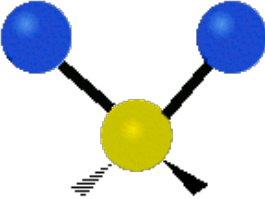
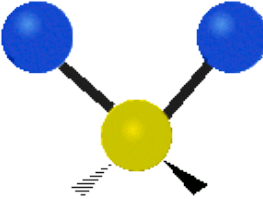
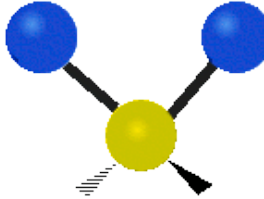
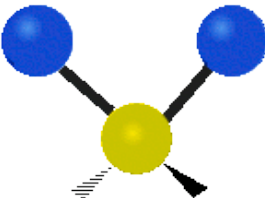
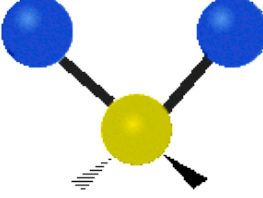
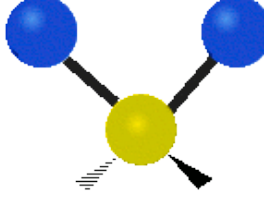
$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$



$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

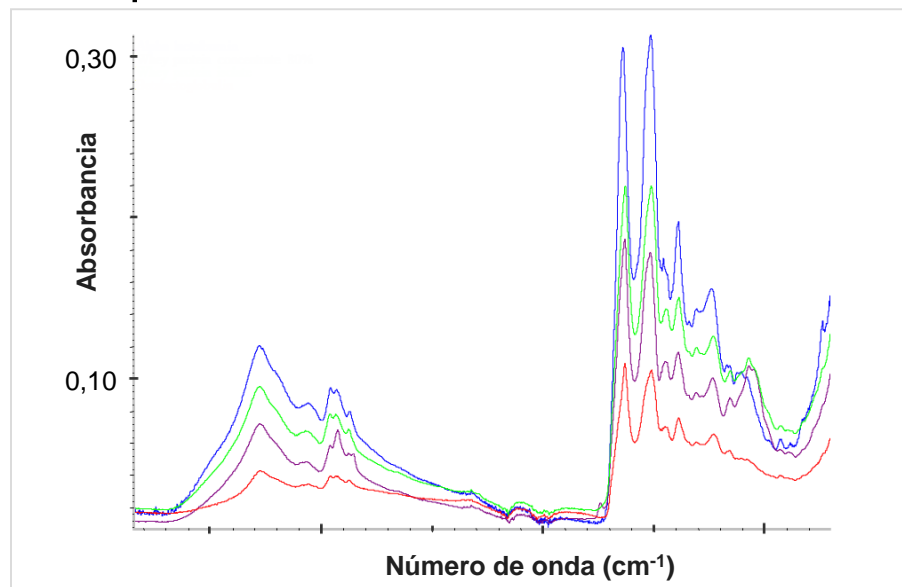
Aspectos generales

Pico simétrico	Pico asimétrico	Tijereteo
		
Balanceo	Aleteo	Torsión
		

Espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier

Aspectos generales

- Los enlaces infrarrojos activos producen picos
- Estos enlaces vibran a frecuencias específicas
- Las pequeñas variaciones en la posición y altura de pico permiten la diferenciación
- El espectro infrarrojo puede servir como la "huella dactilar" química del compuesto



IR

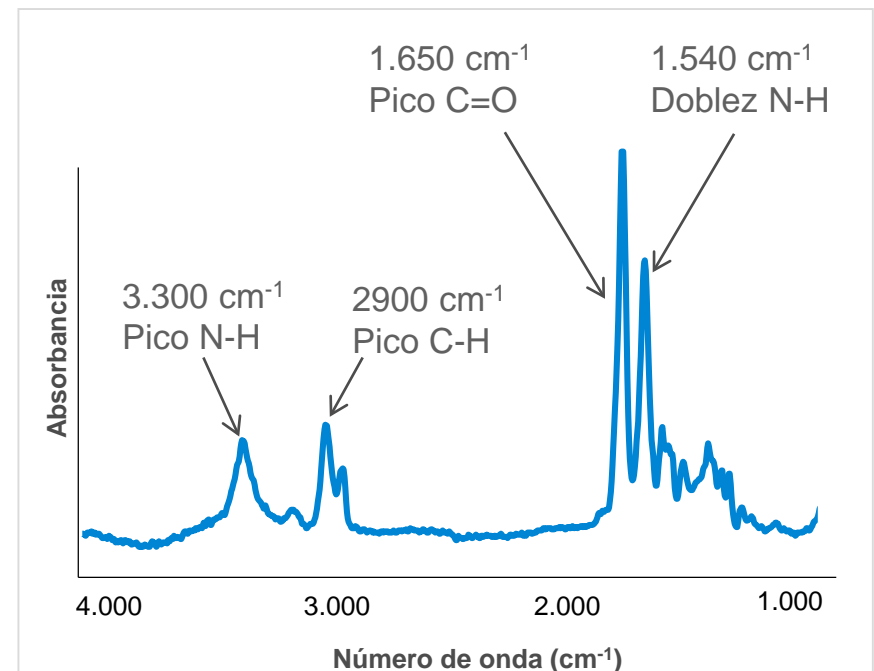
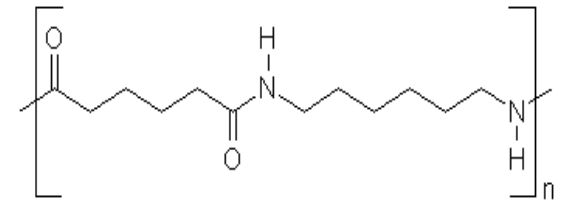


Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

Aspectos generales

El número de onda en la que la absorbancia de los diferentes enlaces (generalmente denominados “grupos funcionales”) indica la resistencia del enlace. Los enlaces más fuertes absorben en números de onda superiores.

Cada grupo funcional absorbe a su propia frecuencia característica, haciendo posible elucidar la estructura química de un material a partir de su espectro infrarrojo.



Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

Aspectos generales

Enlaces moleculares y longitudes de onda

Enlace	Tipo de vibración	Número de onda Rango (cm ⁻¹)
C-H	Alcano (pico)	3.000 – 2.850
	-CH ₃ (curva)	1.450 y 1.375
	-CH ₂ (curva)	1.465
	Alcano Pico	3.100 – 3.000
	(curva fuera de plano)	1.000 – 650
	Aromático (pico)	3.150 – 3.050
Alcino	(curva fuera de plano)	900 – 600
	(pico)	~ 3.300
Aldehído		2.900 – 2.700
C=C	Alcano	1.680 – 1.600
	Aromático	1.600 y 1.475
C≡C	Alcino	2.250 – 2.100
C=O	Aldehído	1.740 – 1.720
	Cetona	1.725 – 1.705
	Ácido carboxílico	1.725 – 1.700
	Éster	1.750 – 1.730
	Amida	1.680 – 1.630
	Anhídrido	1.810 – 1.760

Enlace	Tipo de vibración	Número de onda Rango (cm ⁻¹)
C-O	Alcoholes, ésteres, éteres, ácidos carboxílicos, anhídridos	1.300 – 1.000
O-H	Alcoholes, fenoles Libre	3.650 – 3.600
	Enlace H Ácido carboxílico	3.400 – 3.200 3.400 – 2.400
N-H	Primarios y secundarios aminas y amidas (pico) (curva)	3.500 – 3.100 1.640 – 1.550
C-N	Aminas	1.350 – 1.000
C=N	Iminas y oximas	1.690 – 1.640

Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier por infrarrojos

Aspectos generales



- La fuente de infrarrojos genera un haz infrarrojo (fuente de luz de banda ancha)
- El interferómetro (configuraciones del espejo) crea un patrón de interferencia
- La superficie de la muestra retiene la muestra, el haz infrarrojo atraviesa la muestra
- El detector genera un interferograma
- El ordenador convierte el interferograma en un espectro

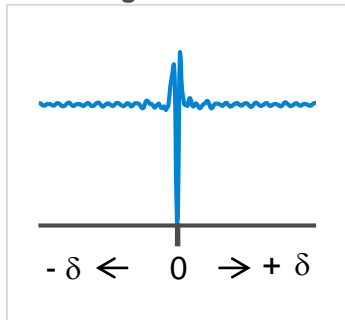
Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

Interferograma

Un interferograma es un gráfico de intensidad infrarroja frente a la posición del espejo en movimiento.

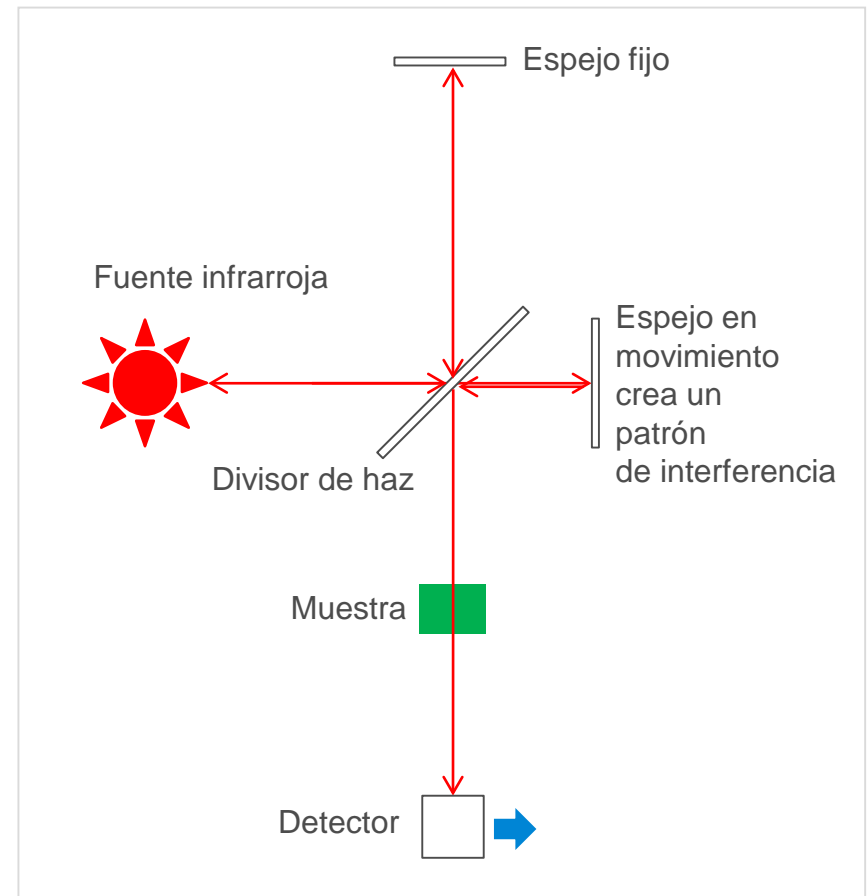
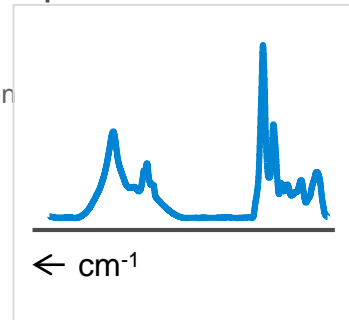
El algoritmo de transformada de Fourier convierte un interferograma en un espectro separando las frecuencias de absorción individuales y creando un gráfico de la intensidad frente al número de onda.

Interferograma



Transformación de Fourier

Espectro

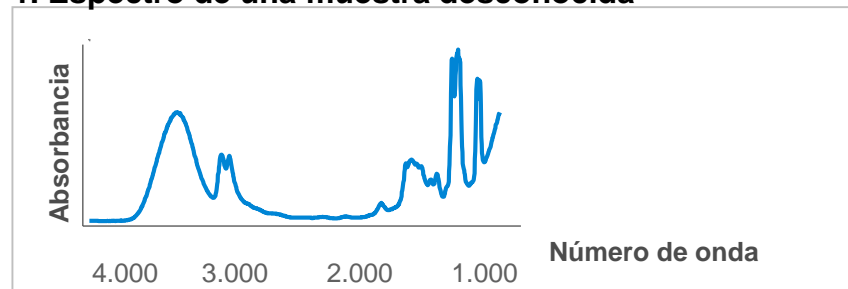


Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

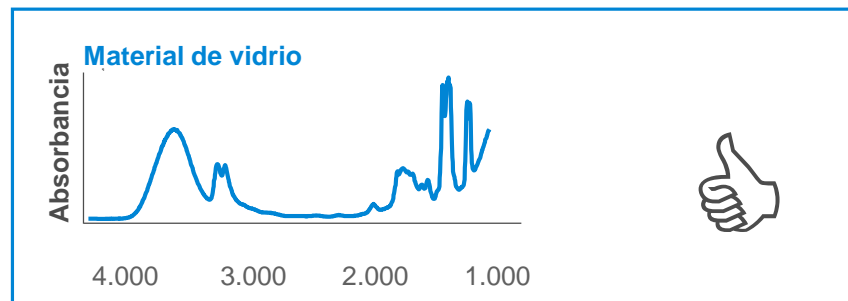
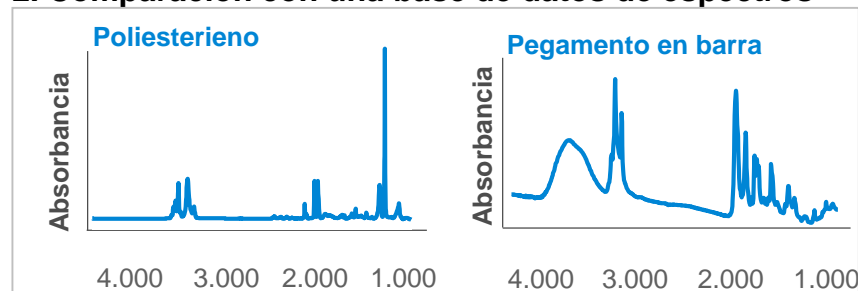
Análisis cualitativo

- Los compuestos pueden identificarse por su espectro infrarrojo único
- Los espectros infrarrojos proporcionan una visión general de la estructura molecular (por ejemplo, la presencia de un grupo ciano)
- Los ordenadores pueden buscar en las bases de datos de infrarrojos para identificar el compuesto

1. Espectro de una muestra desconocida



2. Comparación con una base de datos de espectros

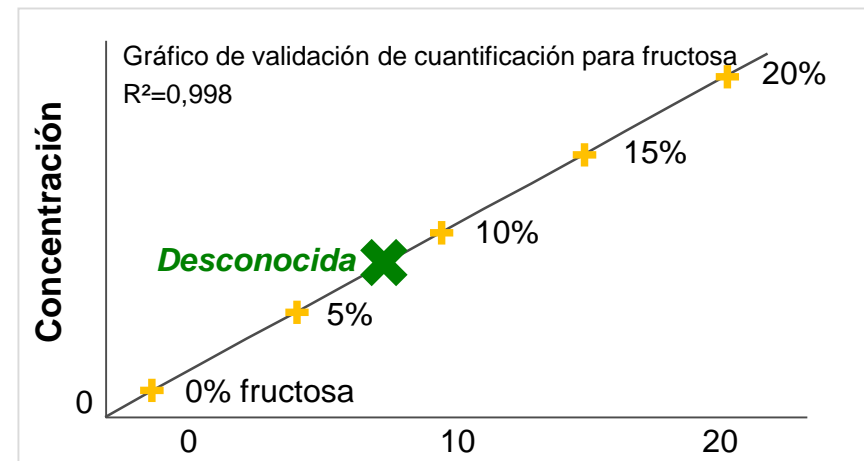
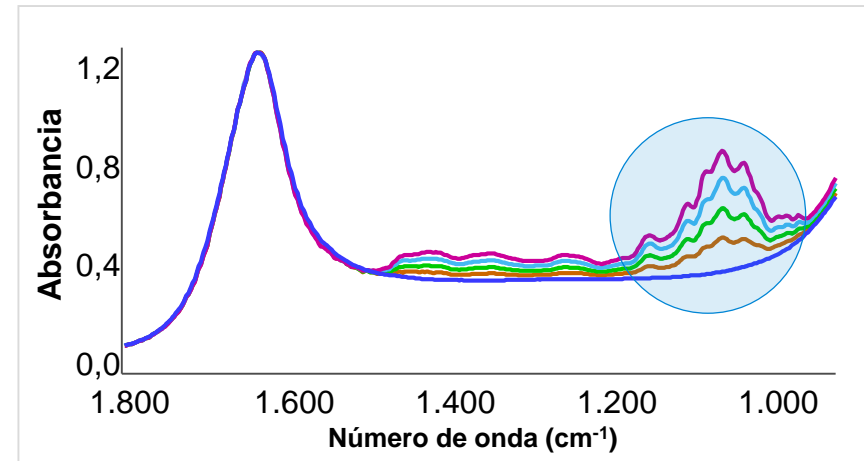


Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

Análisis cuantitativo

Cuantificación

- La ley Beer-Lambert puede aplicarse en la espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier
- Compare la muestra frente a la curva de calibración de absorbancia frente a la concentración de un patrón
- Aplicable a mezclas: cuantificación simultánea



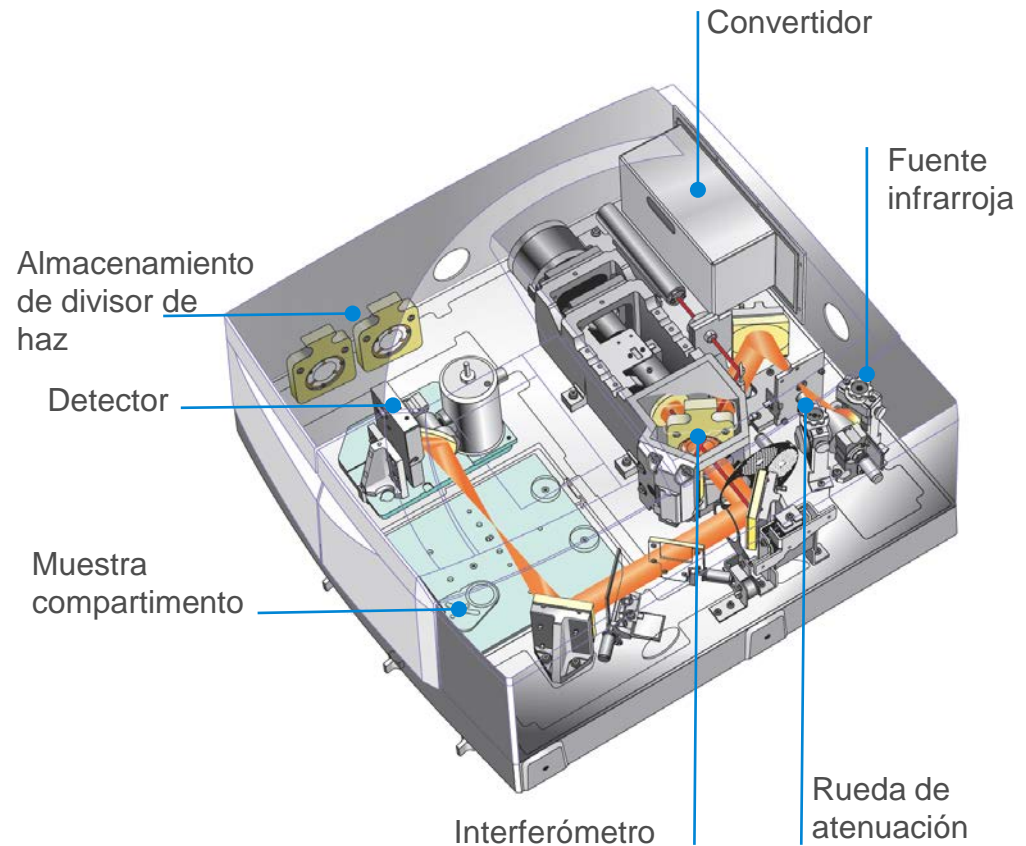
Curva de calibración de fructosa entre 0 y 20%

Fuente: Material de formación interna de Agilent

Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier Sistema

Aplicaciones clave

- Adquisición de imágenes biomédicas (tejido)
- Adquisición de imágenes químicas
- Control de proceso (biodiésel)
- Control/investigación de polímeros /materiales
- Aplicaciones forenses (contenido de alcohol en sangre)



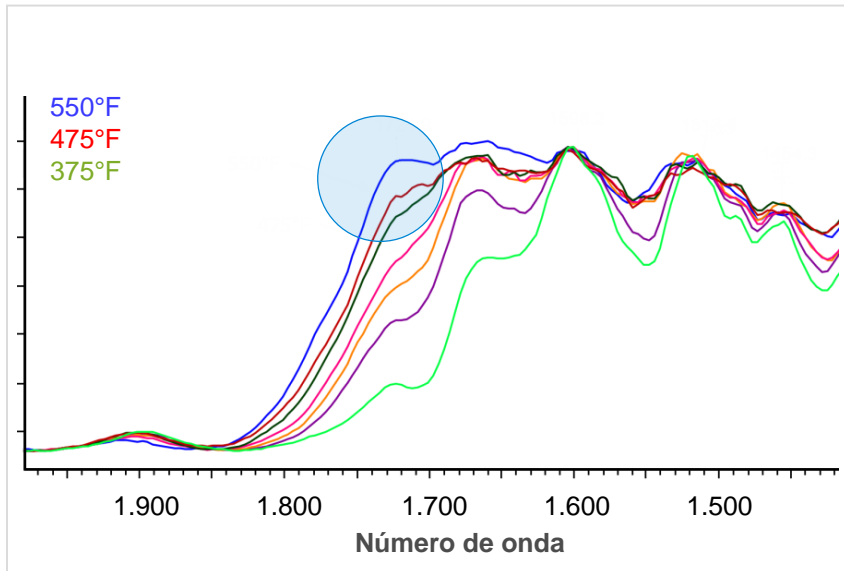
Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

Aplicaciones

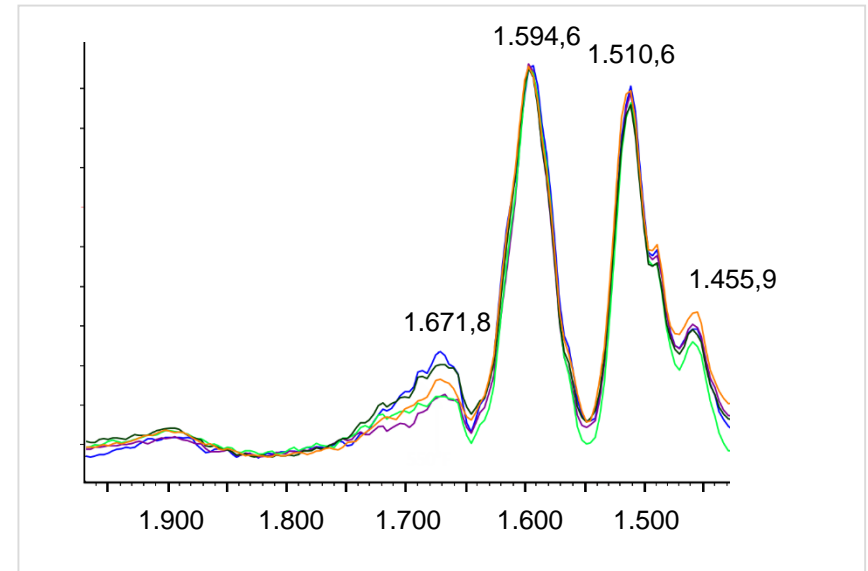
MERCADO	APLICACIONES
Materiales	<ul style="list-style-type: none">• Calor y daño UV en compuestos, curado de compuestos• Identificación de revestimiento de la superficie, limpieza y preparación de la superficie, desgaste y deterioro por agentes meteorológicos del revestimiento• Control de calidad, conservación artística e histórica, investigación de materiales
Energía y productos químicos	<ul style="list-style-type: none">• Control de calidad de materias primas de líquidos entrantes y productos finales, incluyendo productos químicos orgánicos, surfactantes y aceites comestibles
Industria alimentaria	<ul style="list-style-type: none">• Control de calidad de materias primas entrantes y productos finales

Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

Determinación del daño a compuestos



Material compuesto de cinta Epoxy 1 sin lijar con daño térmico. Los cupones compuestos están expuestos a un rango de temperaturas durante 1 hora. La banda de absorbancia a 1.722 cm^{-1} (círculo azul) es debida a la vibración de estiramiento del carbonilo asociada con la oxidación de la resina e indica una sobre-exposición térmica.



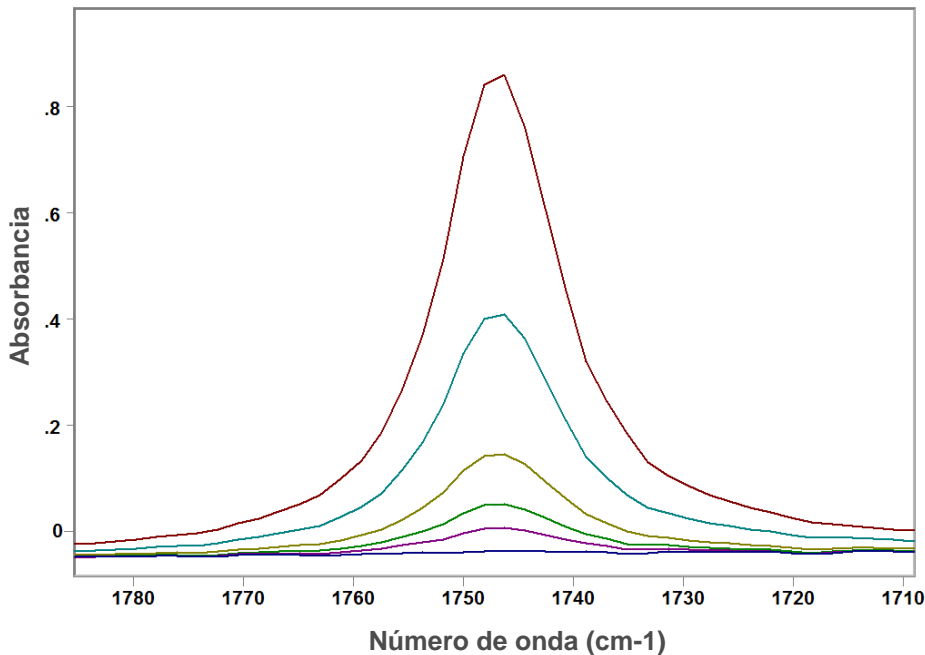
Material compuesto de cinta Epoxy 1 lijada con daño térmico. Los cupones compuestos están expuestos a un rango de temperaturas durante 1 hora. La vibración de 1.722 cm^{-1} está ausente en el entorno anaeróbico.

La disminución de la absorbancia a 1.672 cm^{-1} proporciona una buena correlación negativa con la exposición a la temperatura.

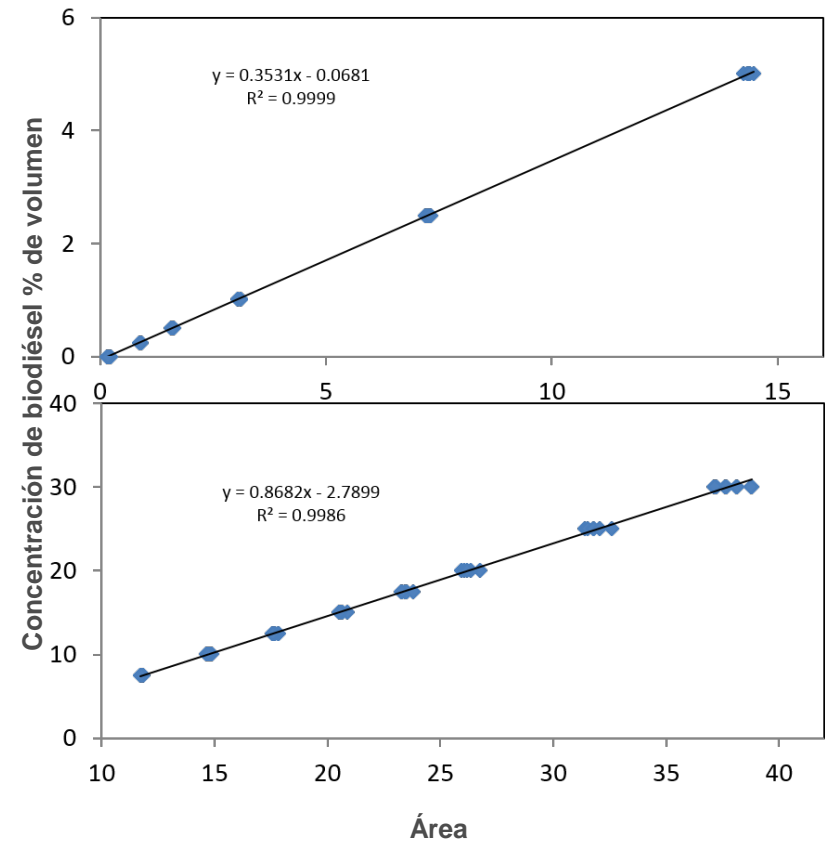
Fuente: [Non-Destructive Evaluation of Composite Thermal Damage with Agilent's New Handheld 4300 FTIR](#)

Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

Medida de concentración de biodiésel en combustible diésel alto en cetano



Espectros infrarrojos superpuestos de los combustibles diésel y la calibración para distintas concentraciones de biodiésel en combustible diésel alto en cetano. Región de absorbancia entre 1.713 y 1.784 cm^{-1} utilizada en la calibración para el rango de concentración entre 0 y 6%.



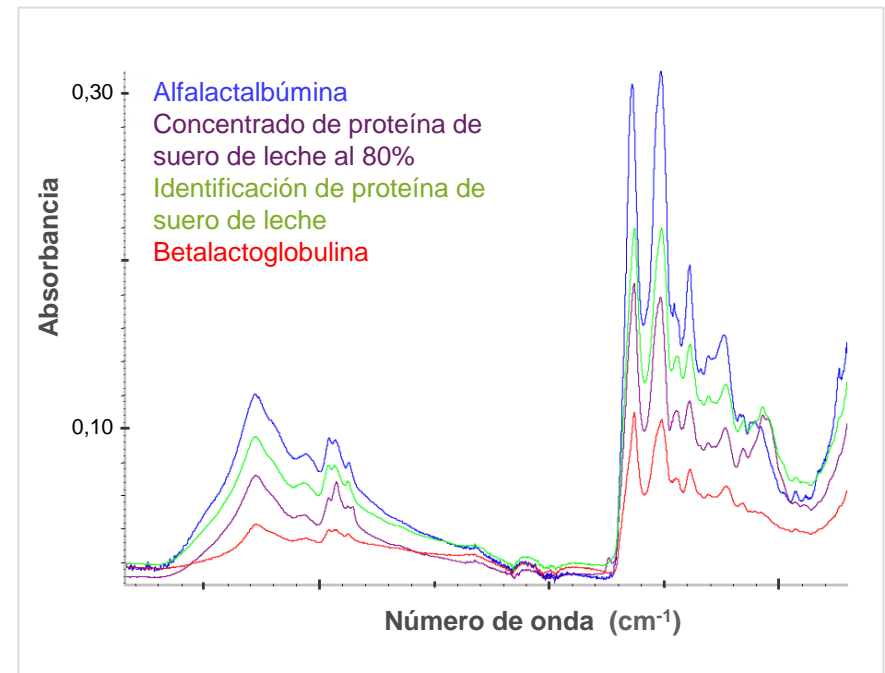
Fuente: [ASTM D7806-12 for Biodiesel in Petroleum-based Diesel Fuel Oil](#)

Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

Control de calidad de polvos lácteos

La adquisición espectral fue realizada de la siguiente manera:

- Colocando una pequeña cantidad de polvo de proteína en la superficie ATR de diamante.
- Presionando las muestras contra el cristal de diamante utilizando la pinza de presión incorporada. (Una mordaza protectora en la pinza evita un apriete excesivo.)
- Recogiendo 64 espectros co-añadidos (tiempo de adquisición de ~30 segundos a una resolución de 4 cm^{-1}) entre 4.000 y 650 cm^{-1} .



Espectros infrarrojos de polvos lácteos seleccionados en el analizador Cary 630 ATR-FTIR

Fuente: [QA/QC of dairy powders using the Agilent Cary 630 ATR-FTIR analyzer](#)

Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

Medida de acrilamida en patatas fritas

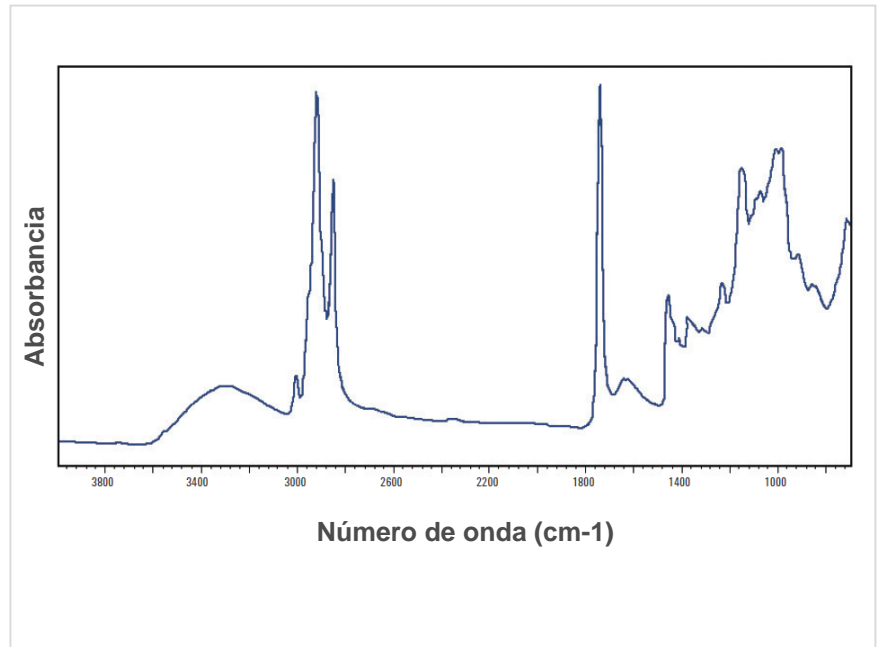
Sensor	Potato Chip Type	Factors	SE ($\mu\text{g/L}$)	r	
Portable Cary 630 MIR	aRegular	Calibration	7	65	0.95
		Cross Val.	7	74	0.93
		Prediction*	7	75	0.90
	bSeasoned	Calibration	7	59	0.96
		Cross Val.	7	75	0.92
	cSweet	Calibration	7	74	0.99
Cross Val.		7	98	0.98	

^a "Regular" refers to potato chips containing only potatoes, vegetable oils and salt.

^b "Seasoned" refers to potato chips containing additional ingredients.

^c "Sweet" refers to sweet-potato chips.

* independent variable predictions made on regular potato chips only



Los resultados y el espectro de la tarta de patatas comercial obtenidos mediante el analizador FTIR portátil equipado con la tecnología de muestras ATR de diamante de reflexión única.

Fuente: [Molecular Spectroscopy Compendium - Ensure food quality, production, and safety](#)

Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier

Capacidades

La espectroscopia infrarroja es una técnica potente y versátil que puede utilizarse para analizar gases, líquidos y sólidos.

A menudo se utiliza para identificar estructuras debido a que los grupos funcionales dan lugar a bandas características tanto en cuestiones de intensidad como posición (frecuencia).

Es una técnica sencilla y fiable muy extendida en la investigación industrial.

Espectroscopia de fluorescencia

Ventajas

- Fácil de utilizar
- Análisis rápido y preciso
- Puede gestionar diferentes tipos y tamaños de muestras
- Puede ser cualitativa y cuantitativa
- Suele requerir una escasa preparación de muestras o ninguna
- No destructiva

Limitaciones

- La molécula debe reaccionar a la luz infrarroja
- Información elemental mínima



Abreviaturas

Abreviatura	Definición
A	absorbancia
b	paso óptico (cm)
c	velocidad de la luz ($3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$)
ϵ	coeficiente de extinción o absorción molar ($\text{l mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$)
E	campo eléctrico oscilante
E	energía
FTIR	Espectroscopia Infrarroja por transformada de Fourier
h	Constante de Planck ($6,62 \times 10^{-34} \text{ Js}$)
I	radiación transmitida
I_0	radiación incidente
λ	longitud de onda
T	transmitancia
UV-VIS	ultravioleta – visible
ν	frecuencia (s^{-1})

Más información

Para obtener más información sobre los productos de Agilent, visite los sitios web www.agilent.com y www.agilent.com/chem/academia.

Tiene alguna consulta o sugerencia en relación con esta presentación? Escriba a academia.team@agilent.com

Early history	“The Early History of Spectroscopy” by Nicholas C. Thomas, <i>J Chem Edu</i>, Vol 68, 6, August 1991	
Primer	Fundamentals of UV-visible spectroscopy	5980-1397EN
Application	Measuring optical densities over 10 Abs on the Agilent Cary 7000 Universal Measurement Spectrophotometer (UMS)	5991-2528EN
Application	Measuring the color of a paint on canvas directly with external diffuse reflectance using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer	5991-3783EN
Application	Simple, automated measurements of the photocatalytic properties of colorimetric species using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer with fiber optics	5990-7864EN
Application	Cytosolic expression of Green Fluorescent Protein (GFP) and its derivatives in the yeast <i>Saccharomyces cerevisiae</i>: Detection in vivo using the Agilent Cary Eclipse	SI-A-1831
Application	Quantification of complex polycyclic aromatic hydrocarbons or petroleum oils in water with Cary eclipse fluorescence spectrophotometer according to astm d 5412-93 (2000)	5991-3166EN
Application	Non-Destructive Evaluation of Composite Thermal Damage with Agilent’s New Handheld 4300 FTIR	5991-4037EN
Application	ASTM D7806-12 for Biodiesel in Petroleum-based Diesel Fuel Oil	5991-5591EN
Application	QA/QC of dairy powders using the Agilent Cary 630 ATR-FTIR analyzer	5991-0784EN
Application	Molecular Spectroscopy Compendium - Ensure food quality, production, and safety	5991-3818EN
Web	CHROMacademy – free access for students and university staff to online courses	
Videos & Images	www.agilent.com/chem/teachingresources	



GRACIAS POR SU ATENCIÓN

Número de publicación 5991-6592ES

Índice

Exclusivamente para fines educativos

March 7, 2016

50



Agilent Technologies

ACADEMIC
& INSTITUTIONAL
RESEARCH