FACULTAD: Ciencias Básicas	
PROGRAMA: Química	
DEPARTAMENTO DE: Química	
CURSO: Espectroscopía IR	**CÓDIGO:** 156293
ÁREA: Formación profesional — Banco de Electivas Profesionales	
REQUISITOS: Química Orgánica II y Química Analítica Instrumental [propuesto — confirmar con el plan de estudios]	**CORREQUISITO:** Ninguno
CRÉDITOS: 2 (96 h semestrales: 48 h de contacto directo y 48 h de trabajo independiente)	**TIPO DE CURSO:** Teórico-práctico
FECHA ÚLTIMA ACTUALIZACIÓN: Octubre de 2026	

JUSTIFICACIÓN

La espectroscopía infrarroja es una de las técnicas más versátiles y accesibles del laboratorio químico: permite identificar grupos funcionales, confirmar estructuras, cuantificar componentes, controlar la calidad de materias primas y estudiar superficies, polímeros, materiales y muestras biológicas. Las técnicas de muestreo modernas (ATR, reflectancia difusa) y la instrumentación FTIR la han convertido en herramienta de rutina en la industria y la investigación.

La asignatura profundiza en el fundamento físico de las vibraciones moleculares, la instrumentación FTIR y la interpretación sistemática de espectros, e incorpora el análisis cuantitativo y el uso de bases de datos espectrales y de cálculo computacional de frecuencias, de modo que el egresado pueda aplicar la técnica con rigor en contextos analíticos, de síntesis y de materiales.

OBJETIVO GENERAL

Comprender los fundamentos teóricos e instrumentales de la espectroscopía infrarroja y aplicarlos a la identificación estructural, el análisis cuantitativo y la caracterización de compuestos y materiales.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Explicar el origen de la absorción IR a partir del modelo del oscilador armónico y anarmónico y de las reglas de selección.
2. Describir la instrumentación FTIR y las técnicas de muestreo (transmisión, ATR, reflectancia difusa, especular).
3. Interpretar espectros IR de compuestos orgánicos e inorgánicos con base en frecuencias características de grupos funcionales.
4. Aplicar la espectroscopía IR al análisis cuantitativo y a la caracterización de polímeros, superficies y materiales.
5. Relacionar espectros experimentales con frecuencias calculadas y con la espectroscopía Raman complementaria.

COMPETENCIAS
• Interpreta espectros IR para proponer o confirmar estructuras químicas. • Selecciona la técnica de muestreo adecuada según el tipo de muestra. • Desarrolla análisis cuantitativos por IR con criterios de calidad analítica. • Utiliza bases de datos espectrales y software de procesamiento y cálculo, y lee literatura técnica en inglés.

UNIDAD 1. Fundamentos de la espectroscopía vibracional		
TEMA	**HORAS DE CONTACTO DIRECTO**	**HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE**
1.1 Radiación electromagnética y región IR; número de onda; niveles vibracionales	3	3
1.2 Oscilador armónico y anarmónico; constante de fuerza; sobretonos y bandas de combinación	3	3
1.3 Modos normales de vibración; 3N−6 / 3N−5; reglas de selección y momento dipolar	3	3
1.4 Simetría molecular y actividad IR/Raman (introducción a teoría de grupos)	3	3
Subtotal unidad	**12**	**12**

UNIDAD 2. Instrumentación FTIR y técnicas de muestreo		
TEMA	**HORAS DE CONTACTO DIRECTO**	**HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE**
2.1 Espectrómetros dispersivos y de transformada de Fourier; interferómetro de Michelson	3	3
2.2 Interferograma, resolución, apodización, relación señal/ruido	3	3
2.3 Técnicas de muestreo: pastillas de KBr, películas, celdas de líquidos, ATR, DRIFTS	3	3
2.4 Práctica: adquisición de espectros por transmisión y ATR	3	3
Subtotal unidad	**12**	**12**

UNIDAD 3. Interpretación de espectros IR		
TEMA	**HORAS DE CONTACTO DIRECTO**	**HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE**
3.1 Frecuencias características: región de grupos funcionales y región de huella dactilar	3	3

3.2 Hidrocarburos, alcoholes, fenoles, éteres y aminas	3	3
3.3 Compuestos carbonílicos y efectos de conjugación, tensión de anillo y puentes de hidrógeno	3	3
3.4 Compuestos inorgánicos y de coordinación; minerales	3	3
Subtotal unidad	**12**	**12**

UNIDAD 4. Análisis cuantitativo y aplicaciones avanzadas		
TEMA	**HORAS DE CONTACTO DIRECTO**	**HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE**
4.1 Ley de Beer–Lambert en IR; calibración, línea base y área de bandas	3	3
4.2 Práctica: determinación cuantitativa por FTIR-ATR	3	3
4.3 Aplicaciones: polímeros, superficies y catalizadores, alimentos y fármacos; introducción a NIR y quimiometría	3	3
4.4 Espectroscopía Raman complementaria y cálculo de frecuencias vibracionales	3	3
Subtotal unidad	**12**	**12**

TOTAL DEL CURSO	**48**	**48**

METODOLOGÍA (Debe evidenciarse el empleo de nuevas tecnologías de apoyo a la enseñanza y al aprendizaje)

El curso se desarrolla con clases magistrales participativas, aprendizaje basado en problemas (ABP) y trabajo práctico (laboratorio, simulación o cómputo, según el tema). El trabajo independiente se orienta con guías por unidad y se acompaña en horario de asesoría y a través del aula virtual institucional.

Uso de nuevas tecnologías de apoyo a la enseñanza y al aprendizaje:

- Aula virtual institucional (plataforma de la Universidad de Pamplona) para publicación de guías, entrega de productos, foros de discusión y cuestionarios automatizados.
- Bases de datos bibliográficas suscritas por la Universidad y repositorios de acceso abierto para la búsqueda y lectura de artículos científicos en inglés.
- Software del espectrómetro FTIR del laboratorio y software libre de procesamiento de espectros.
- Bases de datos espectrales en línea (SDBS, NIST Chemistry WebBook) y visualización de modos normales y cálculo de frecuencias (Avogadro, Psi4/ORCA).
- Herramientas colaborativas en línea para la elaboración de informes y presentaciones, y videoconferencia para asesorías del trabajo independiente.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

La evaluación es continua, formativa y sumativa. Se combina la valoración del trabajo en el aula (contacto directo) con la del trabajo independiente, el cual se evalúa mediante los productos indicados en cada unidad (informes, talleres, cuestionarios de lectura en inglés y proyecto).

Componente	Peso
Primer corte (Unidades 1–2): examen escrito, talleres y control de lectura en inglés	35 %
Segundo corte (Unidades 3–4): examen escrito, informes de práctica y control de lectura en inglés	35 %
Examen final: proyecto integrador con informe escrito y sustentación oral	30 %

Distribución propuesta según la estructura habitual de cortes (35 % – 35 % – 30 %); ajustar a lo dispuesto en el Reglamento Académico Estudiantil de Pregrado vigente.

BIBLIOGRAFÍA DISPONIBLE EN UNIDAD DE RECURSOS BIBLIOGRÁFICOS DE LA UNIVERSIDAD DE PAMPLONA

[1] Silverstein, R. M., Webster, F. X., Kiemle, D. J. y Bryce, D. L. (2015). *Spectrometric Identification of Organic Compounds* (8.ª ed.). Wiley.

[2] Pavia, D. L., Lampman, G. M., Kriz, G. S. y Vyvyan, J. R. (2015). *Introduction to Spectroscopy* (5.ª ed.). Cengage Learning.

[3] Skoog, D. A., Holler, F. J. y Crouch, S. R. (2018). *Principles of Instrumental Analysis* (7.ª ed.). Cengage Learning.

Existencia y ejemplares por confirmar en el catálogo institucional (https://aplicaciones.unipamplona.edu.co/prestamo/) y en las bases de datos suscritas (https://login.unipamplona.basesdedatosezproxy.com/login).

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

[4] Griffiths, P. R. y de Haseth, J. A. (2007). *Fourier Transform Infrared Spectrometry* (2.ª ed.). Wiley.

[5] Larkin, P. J. (2018). *Infrared and Raman Spectroscopy: Principles and Spectral Interpretation* (2.ª ed.). Elsevier.

[6] Smith, B. C. (2011). *Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy* (2.ª ed.). CRC Press.

[7] Socrates, G. (2001). *Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies: Tables and Charts* (3.ª ed.). Wiley.

[8] Stuart, B. H. (2004). *Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications*. Wiley.

DIRECCIONES ELECTRÓNICAS DE APOYO AL CURSO

- Spectral Database for Organic Compounds (SDBS, AIST): https://sdbs.db.aist.go.jp
- NIST Chemistry WebBook (espectros IR): https://webbook.nist.gov
- Avogadro: https://avogadro.cc
- Psi4 (química cuántica de código abierto): https://psicode.org

NOTA: EN CADA UNA DE LAS UNIDADES EL DOCENTE DEBERÁ PROPONER MÍNIMO UNA LECTURA EN LENGUA INGLESA Y SU MECANISMO DE CONTROL (ver tablas de unidad).

UNIDAD No.	1
NOMBRE DE LA UNIDAD	Fundamentos de la espectroscopía vibracional
COMPETENCIAS A DESARROLLAR	Explica el origen físico de las bandas IR y predice el número de modos activos de una molécula.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGIAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
1.1 Radiación electromagnética y región IR; número de onda; niveles vibracionales	Clase magistral; presentación del curso.	3	Problemas de conversión de unidades y energía.	3	1	Taller evaluado.
1.2 Oscilador armónico y anarmónico; constante de fuerza; sobretonos y bandas de combinación	Deducción del modelo; ejemplos numéricos.	3	Cálculo de frecuencias y constantes de fuerza.	3	1	Quiz escrito.
1.3 Modos normales de vibración; 3N−6 / 3N−5; reglas de selección y momento dipolar	Uso de animaciones de modos normales (software de visualización).	3	Identificación de modos de moléculas pequeñas.	3	1	Producto entregable.
1.4 Simetría molecular y actividad IR/Raman (introducción a teoría de grupos)	Ejemplos con tablas de caracteres.	3	Lectura en inglés; ejercicios de simetría.	3	1	Cuestionario de lectura; ejercicio.
	TOTAL UNIDAD	**12**		**12**	**4**	

LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL	Lectura del capítulo de fundamentos en Stuart (2004), *Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications*. Control: cuestionario en el aula virtual.

NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA

UNIDAD No.	2
NOMBRE DE LA UNIDAD	Instrumentación FTIR y técnicas de muestreo
COMPETENCIAS A DESARROLLAR	Opera un espectrómetro FTIR y selecciona la técnica de muestreo adecuada para cada tipo de muestra.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGIAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
2.1 Espectrómetros dispersivos y de transformada de Fourier; interferómetro de Michelson	Clase magistral y demostración en el equipo.	3	Esquema comentado del instrumento.	3	1	Esquema (rúbrica).
2.2 Interferograma, resolución, apodización, relación señal/ruido	Demostración de procesamiento con software.	3	Simulación de un interferograma y su transformada (Python).	3	1	Producto entregable con gráficas.
2.3 Técnicas de muestreo: pastillas de KBr, películas, celdas de líquidos, ATR, DRIFTS	Práctica demostrativa.	3	Cuadro comparativo de técnicas.	3	1	Cuadro comparativo.
2.4 Práctica: adquisición de espectros por transmisión y ATR	Supervisión de la práctica.	3	Preinforme, adquisición y comparación de espectros.	3	1	Informe de laboratorio; control de lectura.
	TOTAL UNIDAD	**12**		**12**	**4**	
LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL	Lectura del capítulo sobre el interferómetro de Michelson en Smith (2011), *Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy*. Control: esquema explicado del equipo y preguntas en clase.					

NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA

UNIDAD No.	3
NOMBRE DE LA UNIDAD	Interpretación de espectros IR
COMPETENCIAS A DESARROLLAR	Interpreta espectros IR de forma sistemática y propone estructuras compatibles con los datos.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGIAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
3.1 Frecuencias características: región de grupos funcionales y región de huella dactilar	Clase magistral con espectros de referencia.	3	Construcción de una tabla personal de frecuencias.	3	1	Tabla (revisión).

3.2 Hidrocarburos, alcoholes, fenoles, éteres y aminas	Interpretación guiada con espectros de bases de datos (SDBS, NIST).	3	Interpretación de espectros problema.	3	1	Taller evaluado.
3.3 Compuestos carbonílicos y efectos de conjugación, tensión de anillo y puentes de hidrógeno	Discusión de casos.	3	Problemas estructurales combinados.	3	1	Quiz escrito; primer parcial.
3.4 Compuestos inorgánicos y de coordinación; minerales	Clase con ejemplos.	3	Interpretación de espectros de sales y complejos.	3	1	Producto entregable; control de lectura.
	TOTAL UNIDAD	**12**		**12**	**4**	
LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL	Lectura del capítulo de espectroscopía IR en Silverstein, Webster, Kiemle y Bryce (2015). Control: resolución de un problema estructural del capítulo.					

NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA

UNIDAD No.	4
NOMBRE DE LA UNIDAD	Análisis cuantitativo y aplicaciones avanzadas
COMPETENCIAS A DESARROLLAR	Desarrolla análisis cuantitativos por IR y aplica la técnica a materiales, superficies y en conjunto con Raman y cálculo computacional.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGIAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
4.1 Ley de Beer–Lambert en IR; calibración, línea base y área de bandas	Clase con ejemplos de cuantificación.	3	Curva de calibración con datos suministrados.	3	1	Taller evaluado.
4.2 Práctica: determinación cuantitativa por FTIR-ATR	Supervisión de la práctica.	3	Ejecución y tratamiento de datos.	3	1	Informe de laboratorio.
4.3 Aplicaciones: polímeros, superficies y catalizadores, alimentos y fármacos; introducción a NIR y quimiometría	Seminario guiado.	3	Preparación de seminario por grupos.	3	1	Seminario oral.
4.4 Espectroscopía Raman complementaria y cálculo de frecuencias vibracionales	Demostración de cálculo de frecuencias con software libre.	3	Proyecto integrador: comparación de espectro experimental y calculado.	3	1	Informe y sustentación del proyecto; segundo parcial.

TOTAL UNIDAD		**12**		**12**	**4**	
LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL	Lectura del capítulo sobre interpretación conjunta IR/Raman en Larkin (2018), *Infrared and Raman Spectroscopy*. Control: cuestionario y uso en el proyecto.					

NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA

Elaboró: Prof. Eliseo Amado González, Universidad de Pamplona