

Técnicas espectroscópicas en química analítica

Volumen I. Aspectos básicos
y espectrometría molecular

PROYECTO EDITORIAL
BIBLIOTECA DE QUÍMICAS

Director:

Carlos Seoane Prado

Catedrático de Química Orgánica
Universidad Complutense de Madrid



Queda prohibida, salvo excepción prevista en la ley, cualquier forma de reproducción, distribución, comunicación pública y transformación de esta obra sin contar con autorización de los titulares de la propiedad intelectual. La infracción de los

derechos mencionados puede ser constitutiva de delito contra la propiedad intelectual (arts. 270 y sigs. Código Penal). El Centro Español de Derechos Reprográficos (www.cedro.org) vela por el respeto de los citados derechos.

Técnicas espectroscópicas en química analítica

Volumen I. Aspectos básicos y espectrometría molecular

Coordinadores:

Ángel Ríos Castro

Catedrático de Química Analítica
Departamento de Química Analítica y Tecnología de Alimentos
Universidad de Castilla-La Mancha (Ciudad Real)

María Cruz Moreno Bondi

Catedrática de Química Analítica
Departamento de Química Analítica
Universidad Complutense de Madrid

Bartolomé M. Simonet Suau

Profesor Titular de Química Analítica
Departamento de Química Analítica
Universidad de Córdoba



EDITORIAL
SÍNTESIS

© Ángel Ríos Castro
María Cruz Moreno Bondi
Bartolomé M. Simonet Suau (coords.)

© EDITORIAL SÍNTESIS, S. A.
Vallehermoso, 34. 28015 Madrid
Teléfono: 91 593 20 98
<http://www.sintesis.com>

Depósito legal: M. 34.815-2012
ISBN: 978-84-995893-0-5
ISBN obra completa: 978-84-995893-2-9

Impreso en España - Printed in Spain

Reservados todos los derechos. Está prohibido, bajo las sanciones penales y el resarcimiento civil previstos en las leyes, reproducir, registrar o transmitir esta publicación, íntegra o parcialmente, por cualquier sistema de recuperación y por cualquier medio, sea mecánico, electrónico, magnético, electroóptico, por fotocopia o cualquier otro, sin la autorización previa por escrito de Editorial Síntesis, S. A.

Índice

RELACIÓN DE AUTORES	11
PRÓLOGO.....	13

BLOQUE I. ASPECTOS BÁSICOS DE LA ESPECTROSCOPIA ANALÍTICA

1. INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROSCOPIA ANALÍTICA.....	17
<i>Ángel Ríos Castro, María Cruz Moreno Bondi y Bartolomé M. Simonet Suau</i>	
Objetivos.....	17
Glosario de términos.....	
1.1. Contexto general.....	17
1.2. Terminología y definiciones básicas.....	21
1.3. Visión general de la espectroscopia/espectrometría	22
1.4. Características metrológicas de la espectroscopia analítica	28
1.5. Validación de métodos analíticos espectroscópicos	36
Resumen de los conocimientos que se deben adquirir	47
Cuestiones y ejercicios	48
Seminarios	48
Trabajos prácticos sugeridos.....	49
Bibliografía recomendada.....	50
2. INTERACCIONES DE LA RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA CON LA MATERIA.....	51
<i>Alfredo Sanz Medel y María Rosario Pereiro García</i>	
Objetivos.....	51
Glosario de términos.....	51
2.1. Propiedades de la radiación electromagnética.....	52
2.2. Interacciones de la radiación electromagnética con la materia	58

2.3. Diferencias entre las técnicas ópticas espectroscópicas y las no espectroscópicas	87
2.4. Visión general de las técnicas espectroscópicas	88
Resumen de los conocimientos que se deben adquirir	94
Cuestiones y ejercicios	94
Seminarios	96
Trabajos prácticos sugeridos.....	97
Bibliografía recomendada.....	100
3. EL PROCESADO DE LA SEÑAL ESPECTROSCÓPICA.....	103
<i>Santiago MasPOCH Andrés</i>	
Objetivos.....	103
Glosario de términos.....	103
3.1. La señal analítica espectroscópica	104
3.2. Relación señal/ruido	105
3.3. Espectroscopia de derivadas	113
3.4. Aplicaciones al análisis cualitativo.....	117
3.5. Aplicaciones al análisis cuantitativo.....	125
3.6. Introducción a sistemas dinámicos	141
3.7. Sistemas multidimensionales.....	143
3.8. Imágenes hiperespectrales	144
Resumen de los conocimientos que se deben adquirir	146
Cuestiones y ejercicios	147
Seminarios	148
Trabajos prácticos sugeridos.....	148
Bibliografía recomendada.....	151
4. ESPECTROSCOPIA DE FOTONES: TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS.....	153
<i>Ángel Ríos Castro, María Cruz Moreno Bondi y Bartolomé M. Simonet Suau</i>	
Objetivos.....	153
Glosario de términos.....	153
4.1. Características de las técnicas analíticas espectroscópicas.....	154
4.2. Clasificación de las técnicas espectroscópicas	158
4.3. Instrumentación general	159
4.4. Medición de la interacción de los fotones con la materia.....	163
4.5. Aspectos cualitativos y cuantitativos de las técnicas espectroscópicas	164
Resumen de los conocimientos que se deben adquirir	166
Cuestiones y ejercicios	166
Seminarios	167
Bibliografía recomendada	167

5. TÉCNICAS ÓPTICAS NO ESPECTROSCÓPICAS	169
<i>Ángel Ríos Castro, María Cruz Moreno Bondi y Bartolomé M. Simonet Suau</i>	
Objetivos	169
Glosario de términos.....	169
5.1. Fundamentos de las técnicas ópticas no espectroscópicas	170
5.2. Clasificación de las técnicas ópticas no espectroscópicas.....	172
5.3. Técnicas basadas en el cambio de la dirección de la radiación	173
5.4. Técnicas basadas en la modificación de la intensidad de la radiación	193
5.5. Técnicas basadas en el cambio de la amplitud de los vectores electromagnéticos de la radiación.....	202
Resumen de los conocimientos que se deben adquirir	216
Cuestiones y ejercicios	216
Seminarios	217
Trabajos prácticos sugeridos.....	217
Bibliografía recomendada.....	222

BLOQUE II. ESPECTROSCOPIA DE FOTONES MOLECULAR

6. ESPECTROSCOPIA DE ABSORCIÓN MOLECULAR UV-VISIBLE	225
<i>Ángel Ríos Castro, María Cruz Moreno Bondi y Bartolomé M. Simonet Suau</i>	
Objetivos	225
Glosario de términos.....	225
6.1. Fundamentos de la absorción molecular.....	226
6.2. Especies absorbentes	231
6.3. Ley de Lambert-Beer.....	238
6.4. Instrumentación y su calibración	247
6.5. Aplicaciones analíticas	257
6.6. Desarrollos recientes.....	272
Resumen de los conocimientos que se deben adquirir	277
Cuestiones y ejercicios	278
Seminarios	282
Trabajos prácticos sugeridos.....	283
Bibliografía recomendada.....	286
7. ESPECTROSCOPIA DE ABSORCIÓN MOLECULAR EN EL INFRARROJO..	287
<i>Miguel de la Guardia Cirugeda y Salvador Garrigues Mateo</i>	
Objetivos.....	287
Glosario de términos.....	287
7.1. Fundamentos.....	288
7.2. Instrumentación	293
7.3. Modos de medida y preparación de muestras.....	301

7.4. Procesamiento de los espectros	310
7.5. Aplicaciones	314
Resumen de los conocimientos que se deben adquirir	316
Cuestiones y ejercicios	317
Seminarios	317
Trabajos prácticos sugeridos.....	322
Bibliografía recomendada.....	327
8. ESPECTROSCOPIA DE ABSORCIÓN MOLECULAR EN RADIOFRECUENCIAS: RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR	329
<i>Ángel Ríos Castro y Mohammed Zougagh</i>	
Objetivos.....	329
Glosario de términos.....	329
8.1. Introducción.....	330
8.2. Aspectos teóricos y fundamentos de las técnicas de resonancia	333
8.3. Componentes básicos de un espectrómetro de RMN	353
8.4. Espectroscopia RMN de otros núcleos distintos del protón	359
8.5. Espectroscopia RMN del carbono-13	360
8.6. Aplicaciones analíticas	361
Resumen de los conocimientos que se deben adquirir	363
Cuestiones y ejercicios	363
Seminarios	364
Trabajos prácticos sugeridos.....	366
Bibliografía recomendada.....	368
9. ESPECTROSCOPIA DE EMISIÓN MOLECULAR	369
<i>Agustina Gómez Hens</i>	
Objetivos.....	369
Glosario de términos.....	369
9.1. Fundamentos de la emisión molecular	370
9.2. Clasificación de las técnicas espectroscópicas de emisión molecular.....	372
9.3. Instrumentación	374
9.4. Técnicas fotoluminiscentes: fluorimetría y fosforimetría.....	380
9.5. Técnicas quimioluminiscentes.....	413
9.6. Aplicaciones generales de la espectroscopia de emisión molecular.....	420
Resumen de los conocimientos que se deben adquirir	425
Cuestiones y ejercicios	425
Seminarios	426
Trabajos prácticos sugeridos.....	427
Bibliografía recomendada.....	434

10. ESPECTROSCOPIA DE DISPERSIÓN RAMAN.....	437
<i>Miguel de la Guardia Cirugeda y Salvador Garrigues Mateo</i>	
Objetivos.....	437
Glosario de términos.....	437
10.1. Fundamentos.....	438
10.2. Instrumentación.....	440
10.3. Modos de medida y preparación de las muestras.....	445
10.4. Aplicaciones.....	453
Resumen de los conocimientos que se deben adquirir.....	456
Cuestiones y ejercicios.....	456
Seminarios.....	457
Trabajos prácticos sugeridos.....	457
Bibliografía recomendada.....	458

RELACIÓN DE AUTORES

Salvador Garrigues Mateo
Universidad de Valencia

Agustina Gómez Hens
Universidad de Córdoba

Miguel de la Guardia Cirugeda
Universidad de Valencia

Santiago Maspoch Andrés
Universidad Autónoma de Barcelona

María Cruz Moreno Bondi
Universidad Complutense de Madrid

M.^a Rosario Pereiro García
Universidad de Oviedo

Ángel Ríos Castro
Universidad de Castilla-La Mancha

Alfredo Sanz Medel
Universidad de Oviedo

Bartolomé M. Simonet Suau
Universidad de Córdoba

Mohammed Zougagh
Parque Científico y Tecnológico
de Albacete

