

Espectroscopía FT-IR para todos: desarrollo de una plataforma gratuita de apoyo académico y científico

FT-IR spectroscopy for everyone: development of a free platform for academic and scientific support

J. Mendoza Jiménez ^{a,*}, L. Chávez Gerónimo ^a, A. Hernández Reyes ^b, A. Garrido Hernández ^c

^a Área Académica de Computación y Electrónica, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Pachuca, Hidalgo, México.

^b Centro de Investigación e Innovación Tecnológica – IPN, Cda. de Cecati s/n, Santa Catarina, Azcapotzalco, 02250 Ciudad de México, CDMX

^c Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Departamento de Materiales, Av. San Pablo No. 420 Col. Nueva el Rosario C.P. 02128, Alcaldía Azcapotzalco, CDMX

Resumen

La espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FT-IR) es una técnica esencial para la caracterización de materiales, ya que permite identificar grupos funcionales y estructuras moleculares en compuestos orgánicos e inorgánicos. El aprovechamiento de esta técnica requiere no solo conocimientos teóricos sobre las regiones espectrales y el funcionamiento del espectrofotómetro, sino también una adecuada preparación de muestras y un correcto procesamiento de datos. Con el objetivo de fortalecer la formación académica y científica, este artículo presenta por primera vez una plataforma de acceso libre diseñada para instruir al usuario en los fundamentos de la espectroscopía infrarroja, el funcionamiento del espectrofotómetro, el uso del software Spectrum Two y la representación gráfica de resultados. Asimismo, se propone un espacio colaborativo para la construcción de una base de datos comunitaria orientada a la caracterización de materiales mediante esta técnica, complementado con estrategias prácticas para la interpretación de espectros.

Palabras Clave: Espectroscopía Infrarroja, Plataforma Web, Soporte Académico.

Abstract

Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) is an essential technique for the characterization of materials, as it enables the identification of functional groups and molecular structures in both organic and inorganic compounds. The effective use of this technique requires not only theoretical knowledge of spectral regions and the operation of the spectrophotometer, but also proper sample preparation and accurate data processing. With the aim of strengthening academic and scientific training, this article introduces for the first time an open-access platform designed to guide users through the fundamentals of infrared spectroscopy, the operation of the spectrophotometer, the use of Spectrum Two software, and the graphical representation of results. Furthermore, it proposes a collaborative space for the development of a community-based spectral database focused on material characterization using this technique, complemented with practical strategies for spectrum interpretation.

Keywords: Infrared Spectroscopy, Web Platform, Academic Support.

1. Introducción

La espectroscopía infrarroja (IR) constituye una de las técnicas más relevantes en la caracterización de materiales, ya que permite identificar grupos funcionales, enlaces químicos y estructuras moleculares en compuestos tanto orgánicos como inorgánicos (Hadjiivanov et al., 2020a). Su versatilidad ha permitido obtener información fundamental en el estudio de minerales, cerámicos, polímeros y materiales biológicos,

convirtiéndose en una herramienta indispensable en el desarrollo e innovación en ciencia de materiales.

Sin embargo, el aprovechamiento pleno de esta técnica no depende únicamente del acceso al equipo, sino también de la comprensión teórica de los principios de absorción en las diferentes regiones del espectro (NIR, MIR y FIR), el conocimiento de los elementos que conforman un espectrofotómetro y el manejo adecuado de los protocolos de preparación de muestras. Igualmente, el procesamiento de los

*Autor para la correspondencia: agh@azc.uam.mx

Correo electrónico: jessica.mendoza.j0610@gmail.com (Jessica Mendoza Jiménez), lidia.cgg261990@gmail.com (Lidia Chávez Gerónimo), alberto.hernandez.r011@gmail.com (Alberto Hernández Reyes), agh@azc.uam.mx (Aristeo Garrido Hernández).

Historial del manuscrito: recibido el 21/10/2025, última versión-revisada recibida el 24/09/2025, aceptado el 11/06/2026, en línea (postprint) desde el 09/09/2026, publicado el 05/01/2027. DOI: <https://doi.org/10.29057/icbi.v14i28.16079>



datos espectrales juega un papel esencial, ya que permite transformar las señales obtenidas en información útil para correlacionar propiedades estructurales y funcionales de los materiales. En este sentido, el acceso a recursos educativos y herramientas de apoyo es fundamental para la formación de estudiantes e investigadores. La disponibilidad de software accesible y plataformas que faciliten la representación gráfica y el análisis de espectros contribuye al aprendizaje autónomo y a la práctica guiada en el uso del espectrofotómetro. De esta forma, se fortalecen las competencias necesarias para el análisis experimental, al tiempo que se promueve una mayor independencia en la investigación y la docencia en ciencia de materiales (Santabábara y Lasheras, 2020).

En este trabajo se presenta la explicación de un programa de software libre para el análisis por espectroscopía infrarroja, diseñado especialmente para que pueda ser utilizado tanto por personas con experiencia como por quienes se inician en esta técnica. El objetivo es facilitar su uso como herramienta en la caracterización de materiales. A lo largo del documento, encontrarás una introducción a los principios fundamentales de la espectroscopía infrarroja, así como la forma correcta de preparar las muestras, las precauciones más importantes que deben tomarse y el uso práctico de un espectrofotómetro, específicamente el modelo Spectrum Two. Se ofrece una guía paso a paso para su configuración, acompañada de un ejemplo de interpretación espectroscópica aplicada a nanopartículas, destacando los pasos clave para garantizar un funcionamiento adecuado del equipo. Finalmente, se incluye una sección dedicada a la configuración del software, junto con un ejemplo práctico que compara tres métodos de síntesis en medios acuosos. También se presentan estrategias para el análisis de resultados y recomendaciones para el crecimiento y organización de una base de datos espectroscópica.

2. Principios básicos de la espectroscopia.

Hoy en día existen técnicas espectroscópicas altamente avanzadas que se han convertido en pilares fundamentales para la caracterización de nuevos materiales. Para comprender su relevancia en el área de ciencia de materiales, es necesario conocer algunos principios básicos sobre las ondas y su interacción con la materia.

Las ondas son perturbaciones que se propagan en el espacio transportando energía, sin que haya un desplazamiento de materia. Estas pueden ser mecánicas, como el sonido o las olas del agua, que requieren un medio para propagarse; o electromagnéticas, como la luz y las ondas de radio, que no necesitan un medio material. La luz, por ejemplo, es una onda electromagnética capaz de viajar incluso en el vacío. Durante el siglo XIX, se pensaba que existía una sustancia invisible llamada "éter" que permitía la propagación de estas ondas, pero esta idea fue descartada con el desarrollo de la física moderna. (Michelson-Morley, 1887). Desde la antigüedad, la naturaleza de la luz ha despertado gran interés. Filósofos griegos como Demócrito pensaban que la luz era un flujo de partículas, mientras que Pitágoras creía que emanaba de los ojos. En el siglo XVII, Isaac Newton apoyó la idea de que la luz estaba compuesta por corpúsculos, pero Christian Huygens propuso que se comportaba como una onda. A inicios del siglo XIX, Thomas Young demostró con su

experimento de interferencia que la luz tenía un comportamiento ondulatorio. Más tarde, Michael Faraday y James Clerk Maxwell profundizaron esta visión al describir la luz como una onda electromagnética compuesta por campos eléctricos y magnéticos oscilantes.

Sin embargo, a principios del siglo XX surgieron fenómenos que no podían explicarse solo con el modelo ondulatorio, como el efecto fotoeléctrico, que llevó a Einstein a proponer que la luz también está formada por partículas llamadas fotones. (Milonni, 1984). Así nació el concepto de dualidad onda-partícula, que establece que la luz puede comportarse tanto como una onda electromagnética como un conjunto de partículas, dependiendo del fenómeno que se observe. La radiación electromagnética comprende una amplia gama de longitudes de onda, desde las ondas de radio hasta los rayos gamma. Esta radiación es una combinación de campos eléctricos y magnéticos oscilantes que se propagan a través del espacio transportando energía. Cuando esta radiación interactúa con la materia, puede producir espectros únicos que permiten identificar las propiedades químicas y estructurales de los materiales, dando origen a una disciplina conocida como espectroscopia.

Desde sus inicios en el siglo XIX, cuando se utilizaba para observar líneas espectrales visibles y determinar la composición elemental, la espectroscopia ha evolucionado notablemente. Hoy en día incluye técnicas como la espectroscopia infrarroja (IR), ultravioleta-visible (UV-Vis), Raman, de emisión atómica, de absorción atómica y de fotoelectrones (XPS), todas ellas utilizadas para obtener información detallada sobre la estructura, composición, enlaces químicos y comportamiento electrónico de materiales tanto orgánicos como inorgánicos.

3. Fundamentos básicos de la espectroscopia infrarroja.

Uno de los métodos más versátiles es la espectroscopia infrarroja, la cual se clasifica en diferentes regiones según la longitud de onda utilizada: Infrarrojo cercano (NIR): 14,000–4,000 cm^{-1} , Infrarrojo medio (MIR): 4,000–400 cm^{-1} (la región más común en química), Infrarrojo lejano (FIR): <400 cm^{-1} . Esta técnica destaca por ser no destructiva, rápida y efectiva. Al irradiar una muestra con luz infrarroja, ciertos enlaces químicos absorben energía y vibran de forma característica. Estas vibraciones se registran en un espectro, permitiendo identificar con precisión los grupos funcionales presentes en el material. Gracias a ello, la espectroscopia infrarroja se ha convertido en una herramienta indispensable para analizar desde compuestos simples hasta materiales complejos en minutos y sin necesidad de alterar la muestra. (Wang et al., 2023).

La espectroscopia infrarroja es una técnica que permite identificar los componentes de una sustancia observando cómo absorbe la luz en la región del infrarrojo del espectro electromagnético. Esta luz, que está justo después de la visible, provoca vibraciones en las moléculas al interactuar con ellas, revelando así una especie de "huella digital estructural" única para cada compuesto. Dependiendo de las propiedades de la muestra y de la intensidad de la radiación, pueden producirse diferentes fenómenos como absorción, transmisión o reflexión. Una versión moderna de esta técnica es la espectroscopia por transformada de Fourier (FTIR), que en lugar de analizar cada frecuencia una por una, utiliza un

método matemático para descomponer una señal compleja en sus frecuencias individuales. Esto permite obtener resultados más rápidos y precisos, facilitando el estudio de materiales de manera eficiente y no destructiva. (Workman, 2024). El estudio de las muestras en la región e infrarroja se divide en tres zonas: infrarrojo-cercano de 1.0-2.5 μm (10,000-4,000 cm^{-1}), infrarrojo-medio de 2.5-50 μm (4,000-200 cm^{-1}) e infrarrojo lejano de 50-1000 μm (200-10 cm^{-1}). En el ámbito científico, generalmente se utilizan los números de onda.

Aunque la espectroscopía infrarroja (IR) es una técnica relativamente sencilla de utilizar, no todas las muestras son aptas para su análisis. Para que una molécula pueda absorber radiación infrarroja, sus enlaces atómicos deben experimentar una variación en su momento dipolar durante la vibración. El momento dipolar es una medida de la polaridad de un enlace químico y depende de la diferencia de electronegatividad entre los átomos que lo conforman. Cuando uno de los átomos es más electronegativo, tiende a atraer con mayor fuerza los electrones compartidos, generando una separación parcial de cargas: una zona más negativa y otra más positiva. Esta separación origina un momento dipolar. (Newton and Person, 1978).

En moléculas que contienen varios átomos distintos (por ejemplo, CO_2 , H_2O o CH_3OH), los enlaces presentan distintos momentos dipolares (Figura 1). Estas diferencias permiten que la molécula absorba energía en varias regiones del espectro infrarrojo, ya que distintas vibraciones (estiramientos, flexiones) afectan los dipolos de formas específicas. Desde el punto de vista físico, el momento dipolar (μ) se define como el producto entre la magnitud de la carga (q) y la distancia que las separa (d), es decir, la longitud del enlace: $\mu = q \times d$

Por tanto, solo las vibraciones moleculares que implican un cambio en el momento dipolar son activas en el infrarrojo. Esta es la razón por la cual algunas moléculas simétricas, como el N_2 o el O_2 , no muestran señales en espectros IR: no poseen momento dipolar y, por tanto, no interactúan con esta radiación.

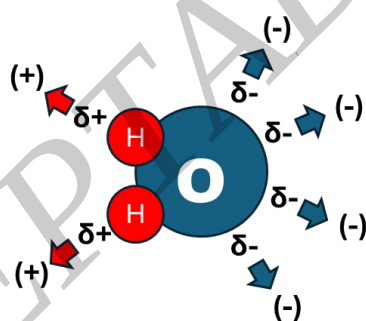


Figura 1. Polarización de la molécula del agua.

Otro requisito para que una molécula absorba radiación infrarroja, es el fenómeno de resonancia que consiste en una compatibilidad entre la frecuencia de vibración basal en el enlace en cuestión ($\bar{\nu}_1$) y la frecuencia de la radiación infrarroja incidente absorbida ($\bar{\nu}_i$). Cuando esto sucede el enlace atómico aumenta su nivel de vibración en dicha frecuencia ($\bar{\nu}_i$), lo cual se manifiesta en un espectro con la formación de una banda de absorción. En caso de no coincidir ambas

(basal y de absorción), se obtiene una interferencia destructiva, por lo tanto, no hay aumento en la vibración del enlace basal en la molécula, y por lo tanto no habrá banda de absorción (Figura 2).

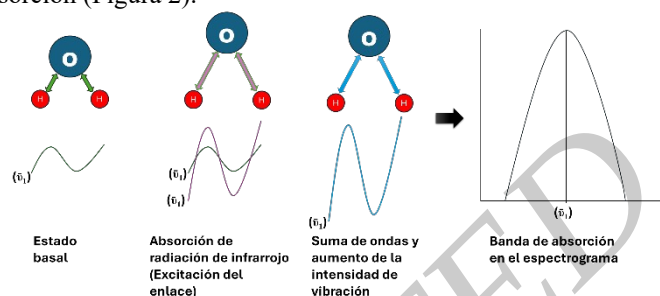


Figura 2. Representación gráfica de la obtención de un pico de absorción a partir de un enlace atómico en un espectro infrarrojo, relación entre la frecuencia basal del enlace y frecuencia incidente infrarrojo.

Otro requisito fundamental para que una molécula absorba radiación infrarroja es que ocurra un fenómeno de resonancia vibracional. Este se da cuando la frecuencia de vibración natural de un enlace en la molécula ($\bar{\nu}_1$) coincide con la frecuencia de la radiación infrarroja incidente (también $\bar{\nu}_1$). Al darse esta coincidencia, el enlace absorbe energía y aumenta su nivel de vibración en esa frecuencia específica, lo cual se manifiesta en el espectro como una banda de absorción. Si no hay coincidencia entre la frecuencia de la radiación y la frecuencia vibracional del enlace, ocurre una interferencia destructiva: la energía de la radiación no es absorbida, y el enlace no cambia su estado vibracional. (Hashimoto et al., 2021). En estos casos, no se observa ninguna banda de absorción en el espectro.

Desde el punto de vista instrumental, si los enlaces de la molécula no absorben la radiación infrarroja, el detector registra la misma energía que fue emitida por la fuente, es decir, no hay pérdida de energía en ese número de onda, en cambio, cuando ocurre absorción, se detecta una disminución de intensidad en la radiación transmitida, lo que da lugar a una banda en el espectro infrarrojo. Seguramente has notado que en un espectro infrarrojo algunas bandas de absorción aparecen con mayor intensidad que otras, esto plantea una pregunta importante: ¿por qué ciertos enlaces absorben la radiación infrarroja de forma más intensa?

En compuestos orgánicos, los átomos están unidos mediante enlaces covalentes, es decir, comparten electrones para formar moléculas estables. Cuando la radiación infrarroja incide sobre una muestra, no todos los enlaces responden de la misma manera. Solo aquellos enlaces cuyas vibraciones entran en resonancia con la frecuencia de la radiación incidente podrán absorber energía. Pero eso no es todo: para que esta absorción sea efectiva, también debe haber un cambio en el momento dipolar del enlace durante la vibración. Este cambio en el momento dipolar es fundamental, ya que es lo que permite la interacción del enlace con el campo eléctrico de la radiación infrarroja. Cuanto mayor sea el cambio de momento dipolar durante la vibración, mayor será la intensidad de la banda de absorción en el espectro. (Hadjiivanov, 2020b). Además, la intensidad también depende de la cantidad de enlaces en la muestra que absorben en esa frecuencia específica. En resumen, la intensidad de las bandas en un espectro infrarrojo refleja qué un enlace puede

interactuar con la radiación infrarroja, como cuántos enlaces de ese tipo están presentes en la muestra.

La interacción de la radiación infrarroja con una muestra se puede entender observando los cambios en los momentos dipolares que ocurren durante las vibraciones y rotaciones de los átomos que conforman las moléculas. Cada átomo dentro de una molécula tiene tres grados de libertad, ya que puede moverse en las direcciones de los ejes x, y, z (Figura 3). Cuando una molécula vibra de forma natural, lo hace a una frecuencia específica. Si una radiación infrarroja incide sobre la muestra y su frecuencia coincide con la frecuencia de esa vibración, se produce una resonancia. Esto intensifica la vibración del enlace afectado y genera un cambio más marcado en su momento dipolar. Además de vibrar, las moléculas también pueden experimentar movimientos de rotación o traslación, aunque en el caso del infrarrojo, lo que se detecta principalmente son las vibraciones que provocan cambios en el momento dipolar. Estos cambios son los responsables de que ciertas frecuencias de la radiación infrarroja sean absorbidas por la muestra, lo cual se traduce en la aparición de bandas características en el espectro.

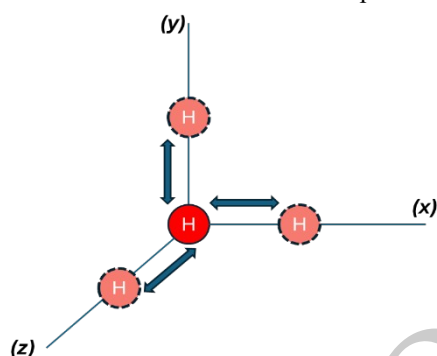


Figura 3. Representación de los movimientos (grados de libertad) de un átomo.

En general, las vibraciones pueden ser como aquellas que cambian longitudinalmente sus enlaces (estiramiento) o que cambien de ángulo sus enlaces (flexión) (Figura 4). Algunas de las vibraciones de estiramiento pueden ser de dos tipos, en fase (estiramiento simétrico) o fuera de fase (estiramiento asimétrico).

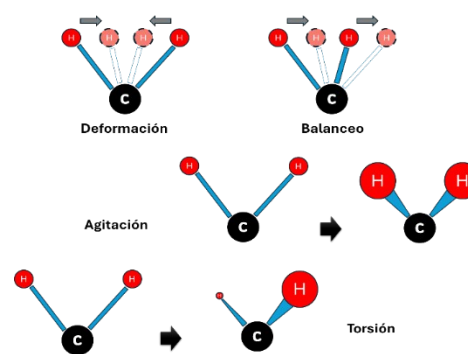
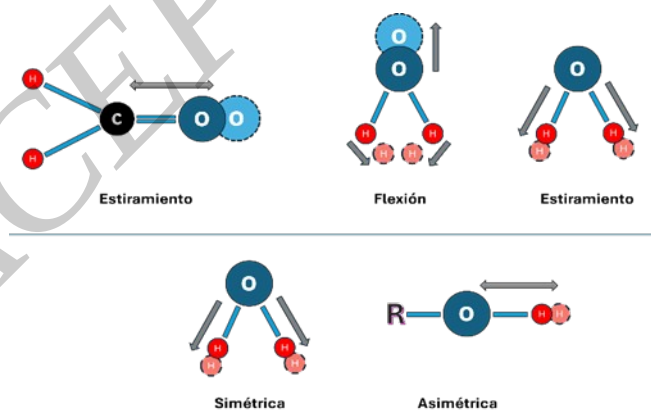
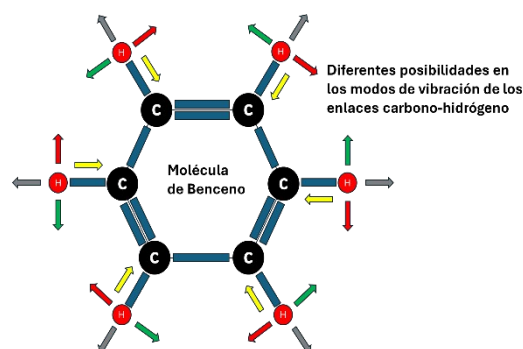


Figura 4. Vibraciones de estiramiento y flexión.

En una molécula, los átomos pueden vibrar de diferentes maneras, conocidas como modos normales de vibración. Estos incluyen vibraciones de flexión, que pueden clasificarse como: a) dentro del plano: deformación y balanceo. b) Fuera del plano: agitación y torsión. En moléculas simples, como el agua, estos movimientos son más evidentes. Sin embargo, en moléculas más complejas, donde los átomos están interconectados rígidamente, estas vibraciones se ven afectadas por la estructura de la red molecular. El número total de modos normales de vibración depende del número de átomos (n) de la molécula: para moléculas no lineales: $3n - 6$ y para moléculas lineales: $3n - 5$. (Dinu, 2024).

Por ejemplo, en la molécula de agua (H_2O), se observan tres modos normales: a) Estiramiento simétrico ($\approx 3500\text{ cm}^{-1}$), b) Estiramiento asimétrico ($\approx 3400\text{ cm}^{-1}$), c) Flexión angular ($\approx 1600\text{ cm}^{-1}$). No todas las moléculas presentan los mismos valores de frecuencia para un mismo tipo de vibración (como la tensión simétrica), ya que estos dependen de las masas atómicas y la fuerza de los enlaces. Cada molécula posee una energía de vibración característica, que puede aumentar si absorbe radiación infrarroja; al hacerlo, la molécula no cambia el tipo ni la frecuencia de vibración, pero sí aumenta la amplitud del movimiento, pasando a un estado vibracional más alto (Figura 5).



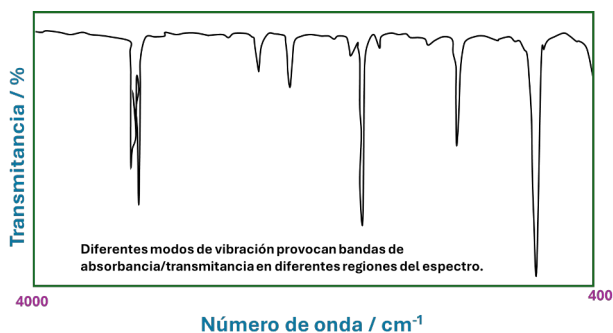


Figura 5. Diferencia de los modos de vibración de la molécula del benceno y ejemplo de su espectro de absorción infrarroja por transformada de Fourier.

4. Principales componentes de un espectrofotómetro

Los primeros espectrofotómetros, desarrollados en la década de 1940, eran extremadamente lentos en la obtención de espectros. En los años 50, se introdujeron los espectrómetros de infrarrojo de tipo dispersivo, los cuales utilizaban una rejilla monocromática para dividir la radiación en distintas frecuencias. Sin embargo, su velocidad de barrido y sensibilidad eran limitadas.

A partir de la década de 1980, se incorporó el uso de computadoras y la transformada de Fourier, lo que permitió la aparición de los espectrofotómetros FTIR (Fourier Transform Infrared). Estos equipos utilizan un interferómetro —un principio desarrollado por Michelson y Morley en 1881— que permite medir todas las frecuencias simultáneamente, mejorando notablemente la rapidez y resolución de los análisis.

Actualmente, los espectrofotómetros FTIR son compactos, fáciles de usar y capaces de generar espectros de alta resolución en pocos segundos (Figura 6). Compañías como Agilent, Bruker, Cole-Parmer y Nicolet lideran su fabricación a nivel mundial. (Griffiths, 2017).

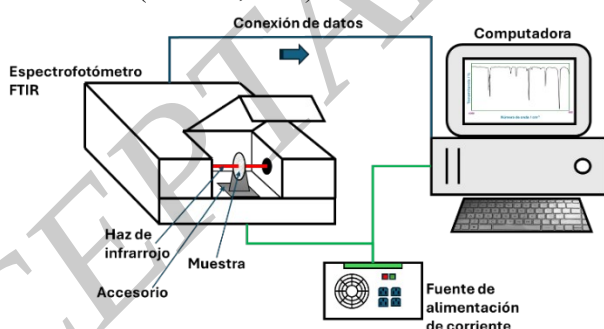


Figura 6. Representación gráfica de los componentes principales de un espectrofotómetro de FT-IR.

De forma general los espectrofotómetros poseen los siguientes componentes.

Fuente de radiación infrarroja: Generalmente es una lámpara de glowbar (carburo de silicio) que emite radiación en el rango medio del infrarrojo ($4000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$), su función es generar la energía necesaria que atraviesa la muestra y permite observar las absorciones.

Interferómetro (tipo Michelson): Es el corazón del FTIR está compuesto por un divisor de haz (beam splitter), espejo fijo, espejo móvil, produce un interferograma (señal de interferencia), que luego se transforma en el espectro IR mediante una Transformada de Fourier. En Spectrum Two es un interferómetro de tipo Dynascan™, más estable y robusto (no requiere realineación frecuente).

Sistema óptico de guía de luz: Este contiene espejos y lentes que dirigen el haz desde la fuente hacia la muestra, recogen la luz transmitida o reflejada y la llevan al detector, también incluye el sistema OpticsGuard™ que protege la óptica contra la humedad y contaminación ambiental.

Compartimiento de muestra: Es el lugar donde se coloca la muestra para analizar, es un sistema “plug-and-play”, es decir, reconoce automáticamente el accesorio conectado. También admite diferentes accesorios intercambiables, por ejemplo: ATR (attenuated total reflectance): el más común y fácil de usar.

Detector (LiTaO_3 o DTGS): Convierte la señal infrarroja en una señal eléctrica. Las Opciones comunes son: el DTGS que es un detector de triglicina sulfato, robusto y sin enfriamiento y el LiTaO_3 que es más sensible, excelente para mediciones rápidas, ambos tienen alta relación señal/ruido, y en Spectrum Two están integrados en el sistema.

Sistema de calibración y verificación: Contiene APV (Automatic Performance Verification) que es un sistema de filtros rotatorios para verificar alineación y precisión automáticamente y AVI (Absolute Virtual Instrument) que estandariza el instrumento usando un patrón gaseoso de metano para obtener resultados comparables entre equipos.

Unidad de procesamiento y software: El instrumento se controla a través de Spectrum 10 / Spectrum 10 es (software completo) y Spectrum Touch (modo simplificado para uso en campo) que permiten el análisis cualitativo y cuantitativo, comparación con librerías de espectros y la creación de métodos y reportes automatizados.

Conectividad y portabilidad: Puede conectarse a PC, pantalla táctil o funcionar de forma independiente, tiene opciones de alimentación por batería o fuente externa (ideal para campo) y cuenta con conectividad USB, Wi-Fi y Bluetooth (según modelo).

Una vez comprendido el principio de funcionamiento de la espectroscopía infrarroja, y los componentes de un espectrofotómetro es fundamental familiarizarse con el uso práctico del equipo. En este caso, se aborda el espectrofotómetro PerkinElmer Spectrum Two, uno de los modelos más comunes y accesibles en laboratorios de análisis químico y de materiales. A continuación, se describen sus principales componentes, así como el procedimiento general de uso, desde el encendido hasta el apagado, pasando por la preparación de muestras y la adquisición de espectros.

El encendido del equipo comienza verificando que el espectrofotómetro esté conectado a una fuente de energía regulada. Una vez conectado, se presiona el botón de encendido y el sistema realiza un autodiagnóstico. Es necesario esperar entre 10 y 15 minutos para que la fuente de radiación, normalmente un glóbulo de carburo de silicio (SiC), alcance una temperatura estable. Mientras tanto, se puede iniciar el software de control, ya sea Spectrum o Spectrum

Touch, y asegurarse de que el accesorio de reflectancia total atenuada (ATR) esté bien instalado. Antes de realizar cualquier análisis, es indispensable ejecutar una medición de fondo (background), lo que garantiza la precisión de los espectros adquiridos posteriormente.

En cuanto a la calibración, el equipo no requiere una calibración manual diaria. No obstante, se recomienda verificar semanalmente la resolución espectral utilizando una muestra estándar de poliestireno, especialmente cuando se busca asegurar la estabilidad del sistema a lo largo del tiempo.

La preparación de las muestras varía según su estado físico. Para muestras sólidas, el método más común es el uso del accesorio ATR, donde se coloca el sólido directamente sobre el cristal y se presiona con la palanca correspondiente. Si se requiere mayor resolución, como en estudios cuantitativos, puede optarse por la técnica

del KBr, mezclando 1 mg de muestra con 100 mg de bromuro de potasio anhidro y prensando la mezcla a 10 toneladas por centímetro cuadrado para formar una pastilla. En el caso de muestras líquidas, se recomienda depositar de 1 a 2 gotas directamente sobre el cristal del ATR, y cubrir si es necesario para evitar evaporación. También pueden utilizarse celdas de NaCl para mediciones por transmisión. Para muestras gaseosas, se emplean celdas con ventanas de KBr y sellado hermético. En todos los casos, es importante asegurarse de que las muestras estén libres de humedad y polvo, y evitar el uso directo de disolventes volátiles sobre el cristal sin una evaporación previa.

Una vez preparada la muestra, se procede a la adquisición del espectro. La configuración estándar del escaneo suele incluir una resolución de 4 cm^{-1} , un rango espectral de 4000 a 400 cm^{-1} , y un número de escaneos entre 4 y 16, dependiendo de la concentración de la muestra. El procedimiento implica colocar la muestra sobre el cristal, ejecutar la medición desde el software, y esperar la generación automática del espectro. Los resultados pueden guardarse en diversos formatos, como .SP, .CSV o .JPG, según las necesidades del análisis. Tras la medición, se limpia cuidadosamente el cristal del ATR utilizando etanol o acetona y un paño suave.

Para apagar el equipo, primero se deben cerrar el software y guardar todos los archivos generados. Luego, se limpia completamente la superficie del ATR. Si se utilizaron disolventes inflamables, es recomendable esperar unos minutos antes de apagar el sistema. Posteriormente, se apaga el espectrofotómetro desde el botón principal y se desconecta del suministro eléctrico si no se usará durante varios días.

El cuidado y mantenimiento del equipo son esenciales para prolongar su vida útil. No deben emplearse materiales abrasivos para limpiar el cristal del ATR, y se debe evitar la exposición prolongada a ambientes húmedos. Al finalizar cada sesión de trabajo, es recomendable cubrir el equipo con su tapa antipolvo. Además, se sugiere realizar un mantenimiento anual por parte de técnicos certificados para asegurar el correcto funcionamiento del sistema.

5. Preparación de muestra y uso del software

En el software puede abrir como usuario o como analista se recomienda como usuario para evitar que se borre alguna configuración o que deshabiliten el instrumento.

En el espectrómetro de FTIR, el dispositivo donde se produce la interacción entre la radiación infrarroja y la muestra a ser analizada se le conoce como accesorio de interacción. La muestra a ensayar, que pueden ser líquidas, sólidas, semisólidas, gaseosas, en polvo o en forma de laminilla delgada.

La forma en que se prepara la muestra depende de su estado físico: Es importante que la muestra esté seca, limpia y libre de contaminantes que puedan interferir en el espectro. Sólidos: Se pueden analizar directamente usando el accesorio ATR, presionando ligeramente el sólido contra el cristal del sensor (Figura 7). También pueden triturarse con KBr (en una proporción 1:100) y prensarse para formar una pastilla translúcida. Por otro lado, los líquidos se depositan directamente sobre el cristal del ATR, asegurándose de que cubran completamente el área de análisis.



Figura 7. Componente que se utilizan en el instrumento ATR.

Antes de analizar una muestra, es necesario realizar una medición de fondo (background), es decir, una lectura sin muestra para restar la señal ambiente y la del sistema (Figura 8)

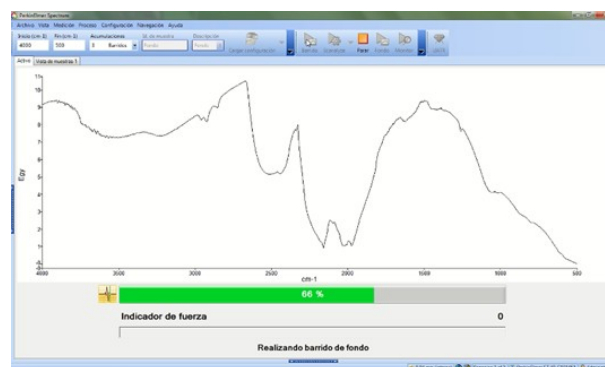


Figura 8. Representación del fondo cuando se usa el instrumento ATR

Para la medición se coloca la muestra en el accesorio correspondiente (generalmente un ATR de diamante o ZnSe) y realice el escaneo. El espectro obtenido mostrará las bandas características de los enlaces presentes en la muestra (Figura 9)

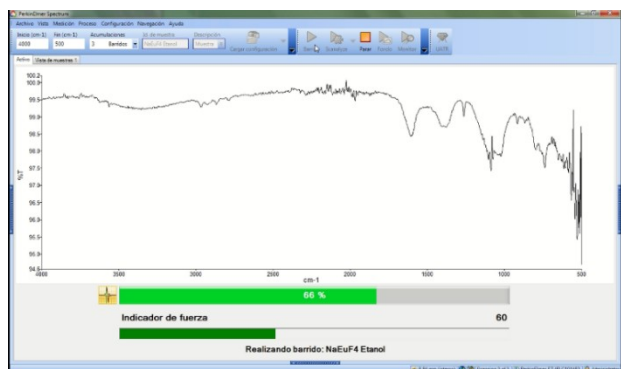


Figura 9. Obtención de un espectro FT-IR usando el instrumento ATR.

Después de cada medición, limpie cuidadosamente el cristal del ATR con un paño suave y un disolvente adecuado (por ejemplo, etanol o acetona) para evitar contaminación cruzada. No aplique demasiada fuerza sobre el cristal del ATR, ya que este es costoso y puede dañarse, el indicador de fuerza debe mostrar un 80 %. Use un número adecuado de escaneos (normalmente entre 4 y 16) para obtener espectros con buena relación señal-ruido sin alargar demasiado el tiempo de análisis. Si no se va a usar el equipo por un periodo prolongado, apáguelo correctamente y proteja el accesorio ATR con su cubierta antipolvo.

6. Procesamiento e interpretación de espectros infrarrojo

El análisis de un espectro infrarrojo va mucho más allá de identificar la posición de las bandas de absorción. El verdadero valor científico de esta técnica reside en cómo se procesan, limpian e interpretan los datos obtenidos. Estas etapas permiten obtener información precisa sobre la composición y estructura de las muestras, incluso cuando las señales son débiles o están superpuestas.

Uno de los primeros pasos esenciales es la corrección de línea base (baseline correction). Esta operación elimina las señales de fondo que no provienen directamente de los enlaces químicos de la muestra, sino que son producto de interferencias ópticas, dispersión o efectos instrumentales. Una línea base inclinada o curva puede distorsionar la intensidad de las bandas o incluso ocultar señales relevantes. Por ello, se utilizan métodos como el trazo de líneas rectas entre puntos de referencia, ajustes polinomiales de orden variable (entre 1 y 4), o algoritmos automáticos disponibles en software especializado como Origin, OMNIC o SpectraGryph. El resultado es un espectro más limpio, con una mejor relación señal/ruido, lo cual facilita un análisis más confiable.

La normalización de espectros es otra herramienta clave, especialmente cuando se desea comparar múltiples espectros entre sí. Este procedimiento ajusta todos los espectros a una escala común, eliminando las diferencias debidas a la concentración, el espesor de la muestra o la intensidad del haz. La forma más habitual consiste en escalar la intensidad máxima a un valor fijo, generalmente 1. Así, se pueden comparar directamente la forma y la posición de las bandas, lo que resulta útil en estudios de variaciones por dopaje, pureza, degradación o formulación de mezclas.

En compuestos con estructuras complejas, las bandas de absorción pueden estar solapadas, dificultando su análisis. Para abordar este problema, se recurre a la deconvolución espectral, un proceso matemático que permite separar picos superpuestos en sus componentes individuales. Esta técnica, que utiliza funciones de forma como Gauss, Lorentz o Voigt, puede implementarse mediante ajustes por mínimos cuadrados o transformadas inversas. La deconvolución no solo mejora la resolución espectral sin modificar el equipo, sino que también permite detectar impurezas, identificar especies funcionales similares y realizar análisis cuantitativos más detallados.

Otra estrategia poderosa es el uso de derivadas de espectros, especialmente la primera y segunda derivada. Al aplicar la derivada matemática a la curva espectral, se acentúan los cambios en la pendiente, lo que ayuda a distinguir bandas solapadas o débiles y a resaltar transiciones sutiles. Sin embargo, este enfoque debe aplicarse con precaución, ya que también amplifica el ruido de fondo. Por esta razón, suele combinarse con técnicas de suavizado, como el filtro de Savitzky–Golay.

Finalmente, el filtrado y suavizado del espectro mejora notablemente la interpretación visual, al reducir el ruido de fondo sin comprometer la resolución. Métodos como el promedio móvil, Savitzky–Golay o filtros basados en transformadas de Fourier están disponibles en la mayoría del software especializado. Estos procesos permiten una visualización más clara, reducen el riesgo de falsos positivos y facilitan la integración precisa de áreas bajo las curvas.

7. Plataforma abierta espectroscopia infrarroja para todos.

Actualmente el acceso a equipos especializados o software comercial puede ser limitado para estudiantes, docentes y personas interesadas en adentrarse en este campo, para ellos se desarrolló una plataforma web integral diseñada tanto para usuarios principiantes como para expertos, que busca democratizar el conocimiento y el análisis del espectro infrarrojo.

La plataforma cuenta con una estructura amigable, organizada en tres secciones principales (Figura 10):

Fundamentos teóricos: Esta sección introduce los conceptos básicos de la espectroscopia de infrarrojo, explicando de forma clara qué es, cómo funciona y para qué sirve esta técnica, esta sección está pensada para estudiantes, docentes o personas autodidactas que desean comprender el valor del espectro infrarrojo como herramienta analítica.

Manejo del equipo de laboratorio: Aquí se ofrece información detallada sobre el uso del equipo Spectrum Two de PerkinElmer, desde la preparación adecuada de muestras hasta la correcta interpretación de los espectros generados, esta sección busca apoyar a usuarios que trabajan con el equipo físico, facilitando su capacitación y uso eficiente en entornos educativos o de laboratorio.

Graficador interactivo: Esta es la sección más destacada de la plataforma, ya que permite a los usuarios cargar archivos de datos en formato .asc o .csv —obtenidos de espectros reales— y generar gráficas espectrales interactivas usando Bokeh, una poderosa biblioteca de visualización, el sistema también permite comparar múltiples archivos simultáneamente, lo que facilita la observación de diferencias entre materiales.

A través de una base de datos interna, la plataforma permite identificar y resaltar bandas de absorción características de diversos compuestos, los administradores del sitio pueden agregar nuevos materiales y rangos espectrales, lo que mejora continuamente la precisión del análisis automático y enriquece la experiencia del usuario, esta capacidad de autoalimentación convierte al graficador en una herramienta dinámica, adaptable y en constante crecimiento.

Además de estas funciones principales, la plataforma incorpora un foro de discusión donde visitantes y entusiastas pueden dejar comentarios, compartir experiencias y generar debates relacionados con la espectroscopía. También incluye una sección dedicada a artículos recientes y contenidos de interés científico, lo que la convierte en un punto de encuentro digital para la comunidad académica y técnica.



Figura 10. Página de inicio de la plataforma web.

El desarrollo de la plataforma se realizó utilizando tecnologías de código abierto como Python, JavaScript, HTML y SQLite, lo que garantiza su ligereza y facilidad de implementación. La arquitectura está basada en Flask, un microframework de Python que permite construir aplicaciones web de forma flexible y eficiente. Esta combinación tecnológica facilita la integración de gráficos, bases de datos y funcionalidades interactivas dentro de una misma interfaz.

La plataforma será implementada en Cloud Run de Google, una solución en la nube que permite alojar aplicaciones web de manera segura, escalable y sin necesidad de administrar servidores, esta opción resulta ideal porque garantiza que el sitio esté disponible en todo momento, pueda atender a múltiples usuarios al mismo tiempo sin interrupciones, y ofrezca un rendimiento eficiente. Además, al estar en la nube, los usuarios pueden acceder desde cualquier lugar con conexión a internet.

Conclusión

La espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FT-IR) constituye una herramienta esencial en la ciencia de materiales, ya que permite identificar grupos funcionales y estructuras moleculares en una amplia diversidad de compuestos. Para aprovechar al máximo su potencial no basta con contar con equipos especializados, sino que también se requiere una sólida comprensión teórica, una adecuada preparación de muestras y un correcto procesamiento de los datos espectrales. En este contexto, el desarrollo de una plataforma de acceso abierto con fundamentos teóricos, herramientas para la representación gráfica e identificación de grupos funcionales, así como la posibilidad de generar y

consultar bases de datos espectrales, representa un recurso de gran valor. Esta iniciativa no solo favorece la formación de nuevas generaciones de especialistas en la técnica, sino que también constituye un recurso educativo y práctico que fomenta el aprendizaje, la investigación y la divulgación de la espectroscopía infrarroja en todos los niveles.

Agradecimientos

Agregue sus agradecimientos hasta la aceptación del manuscrito.

Referencias

- Dinu, D. F. (2024). How vibrational notations can spoil infrared spectroscopy. *ACS Physical Chemistry Au*, 4(1), PP. 1–11. DOI:10.1021/acspchemau.4c00053
- Griffiths, P. R. (2017). The early days of commercial FT-IR spectrometry: A personal perspective. *Applied Spectroscopy*, 71(3), pp. 329-340. DOI: 10.1177/0003702816683529
- Hadjiivanov, K. I., Lezcano G., & Rodríguez R. (2020a). Power of Infrared and Raman Spectroscopies to Characterize Metal–Organic Frameworks. *Chemical Reviews* 120(4), pp. 2095-2169. DOI:10.1021/acs.chemrev.0c00487
- Hadjiivanov, K. I., Panayotov, D. A., Mihaylov, M. Y., Ivanova, E. Z., Chakarova, K. K., Andonova, S. M., y Drenchev, N. L. (2020b). Power of Infrared and Raman Spectroscopies to Characterize Metal–Organic Frameworks and Investigate Their Interaction with Guest Molecules. *En Chemical Reviews* (Vol. 121, Números 3, pp. 1286-1424). DOI: 10.1021/acs.chemrev.0c00487.
- Hashimoto, K., Badarla, V. R., Ideguchi, T. (2021). Broadband complementary vibrational spectroscopy with cascaded intra-pulse difference-frequency generation. *arXiv preprint*. DOI:10.48550/arXiv.2109.11699
- Michelson, A. A., Morley, E. W. (1887). On the relative motion of the Earth and the luminiferous ether. *American Journal of Science*, 34*(203), 333–345. DOI: 10.2475/ajs.s3-34.203.333
- Milonni, P. W. (1984). Dualidad onda-partícula de la luz: Una perspectiva actual. In: Diner, S., Fargue, D., Lochak, G., Selleri, F. (Eds.) *El dualismo onda-partícula. Teorías fundamentales de la física*, vol. 3. Springer, DOI:10.1007/978-94-009-6286-6_2
- Newton, J. H., Person, W. B. (1978). Dipole moment derivatives and infrared intensities. 5. Atomic polar tensors from methane. *The Journal of Physical Chemistry*, 82(2), 226-229. DOI: 10.1021/j100491a018
- Santabárbara Serrano, J., y Lasheras, I. (2020). Docencia de Bioestadística en Medicina con software gratuito jamovi: Una ventana de oportunidad. *En Revista Española de Educación Médica* (Vol. 1, Número 1, pp. 9-10). DOI:10.6018/edumed.421421.
- Wang, T, Tan Y., Chen Z., Tan Ch., (2023). Infrared spectral analysis for prediction of functional groups using deep learning. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63(7), pp. 2145–2155. DOI:10.1021/acs.jcim.3c00749
- Workman, J., (2024). Avances en espectroscopía infrarroja para los espectroscopistas de hoy: Una revisión de las últimas aplicaciones de investigación utilizando espectroscopía FT-IR. *Suplementos de espectroscopia*, 39(8), pp. 22–28. DOI: 10.56530/spectroscopy.ak9689m8



Intente igualar las dos columnas en la última página. Elimine este texto



ACEPTADO--ACCEPTED