

Caracterización de Aminoácidos por Espectroscopía Raman

Laboratorio de Física Contemporánea II

Facultad de Ciencias, UNAM

Jesús Rafael Valverde Coria[†], José Francisco Jasso Guzmán[‡]

Facultad de Ciencias, UNAM, Circuito Exterior S/N, C.U., Coyoacán, 04510, CDMX, México

[†]rafaelvalverde@ciencias.unam.mx, [‡]josephxxw@ciencias.unam.mx

Enero de 2021

Abstract

En este trabajo se analizó de manera cualitativa el espectro Raman de cinco muestras de Glicina, L Glutamina, Fenilalanina, Ácido Glutámico y Triptofano, con el propósito de identificar qué tipo de vibraciones moleculares generan los picos prominentes de los espectros obtenidos con un espectroscopio Raman. El proceso requirió la simulación de las muestras a estudiar, en este caso aminoácidos, mediante el software Gauss View 6 y Gaussian 9, con el que se obtuvo el espectro teórico, con base 6-31G por el método numérico de Hartree-Fock para lograr un tiempo de cómputo relativamente corto. Se compararon los espectros teórico y experimental y posteriormente se analizaron los modos vibracionales obtenidos con el software. Los espectros que mejor pudieron empatarse y caracterizarse fueron los de Glutamina y Fenilalanina. Para los demás se pudo empatar satisfactoriamente solo una mitad del espectro. En el caso del triptofano el espectro experimental presentó una cantidad de ruido considerable que se asoció al fenómeno de fosforescencia.

1 Introducción

El fenómeno conocido como efecto Raman fue descrito por el físico indio Chandrasekhara Venkata Raman en el año 1928, lo que le supuso la obtención del premio Nobel de física en 1930. Sus estudios sobre este fenómeno se inspiraron en los trabajos realizados anteriormente por Rayleigh.

La Espectroscopia Raman es una técnica fotónica de alta resolución que proporciona en pocos segundos información química y estructural de casi cualquier material o compuesto orgánico y/o inorgánico permitiendo así su identificación. El análisis mediante espectroscopia Raman se basa en el examen de la luz dispersada por un material al incidir sobre él un haz de luz monocromático. Una pequeña porción de la luz es dispersada inelásticamente experimentando ligeros cambios de frecuencia que son característicos del material analizado e independientes de la frecuencia de la luz incidente. Se trata de una técnica de análisis que se realiza directamente sobre el material a analizar sin necesitar éste ningún tipo de preparación especial y que no conlleva ninguna alteración de la superficie sobre la que se realiza el análisis, es decir, es no-destructiva.

Raman observa los cambios en la polarización de los enlaces moleculares. La interacción de la luz con una molécula puede inducir una deformación de su nube de electrones. Esta deformación se conoce como un cambio

en la polarización. Los enlaces moleculares tienen transiciones de energía específicas en las que se produce un cambio de polarización, dando lugar a los modos activos Raman. Por ejemplo, las moléculas que contienen enlaces entre los átomos homonucleares, tales como carbono-carbono, sulfuro-sulfuro y nitrógeno-nitrógeno, sufren un cambio en la polarización cuando los fotones interactúan con ellos. Estos son ejemplos de bonos que dan lugar a bandas espectrales activas de Raman. Debido a que Raman es un efecto inherentemente débil, los componentes ópticos de un espeíctrómetro Raman deben estar bien adaptados y optimizados. Además, dado que las moléculas orgánicas pueden tener una mayor tendencia a ser fluorescentes cuando se utiliza radiación de longitud de onda más corta, se suelen utilizar fuentes de excitación monocromática de longitud de onda más larga, como los diodos láser de estado sólido que producen luz a 785 nm.

El proceso de dispersión Raman, como lo describe la mecánica cuántica, es cuando los fotones interactúan con una molécula y la molécula puede avanzarse a un estado virtual de mayor energía. Como consecuencia de este estado de mayor energía, puede haber algunos resultados diferentes. Uno de estos resultados sería que la molécula se relaja a un nivel de energía vibratoria que es diferente al de su estado inicial, con lo que se produce un fotón de energía diferente. La diferencia entre la energía del fotón incidente y la energía del fotón disperso es el llamado cambio Raman.⁵

Scattering of light by molecules

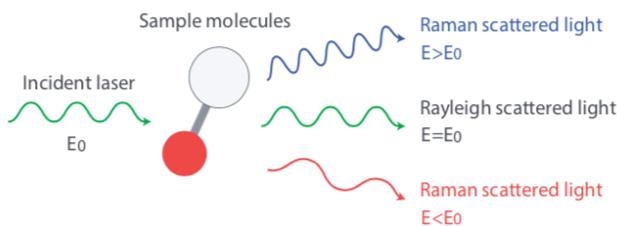


Fig. 1: Esquema

Cuando el cambio de energía del fotón disperso es menor que el del fotón incidente, la dispersión se conoce como dispersión Stokes. Algunas moléculas pueden comenzar en un estado de excitación vibratoria y cuando se avanzan al estado virtual de mayor energía, pueden relajarse hasta un estado de energía final que es más bajo que el del estado de excitación inicial. Esta dispersión se conoce como dispersión anti-Stokes.

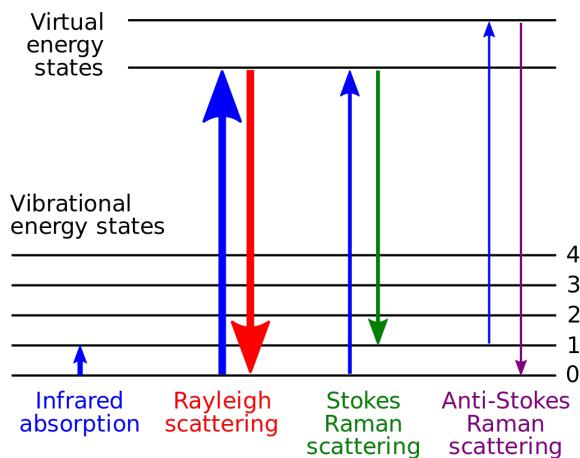


Fig. 2: Esquema representativo de los distintos tipos de scattering posibles

1.1 Modos Vibracionales

Las energías de los estados vibracionales contienen mucha información sobre la muestra, como la composición química, la tensión / deformación indicada, las simetrías cristalinas y la calidad del cristal. Sin embargo, en la mayoría de los casos, la composición química se investiga por espectroscopia.

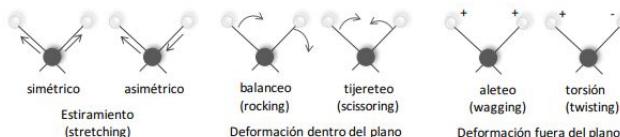


Fig. 3: Modos vibracionales.

Hay dos tipos principales de vibraciones, a saber, el estiramiento y la deformación (flexión). El estiramiento cambia la longitud del enlace químico y generalmente requiere más energía que la deformación.

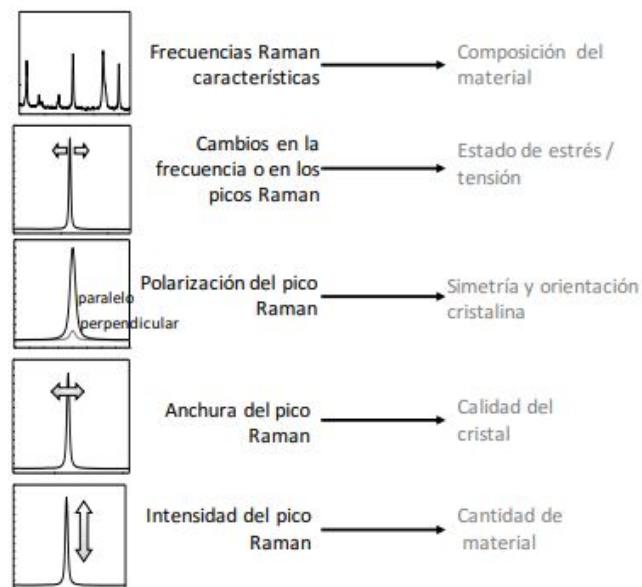


Fig. 4: Información que se puede obtener mediante la espectroscopia

A continuación se puede visualizar este comportamiento en la siguiente figura:

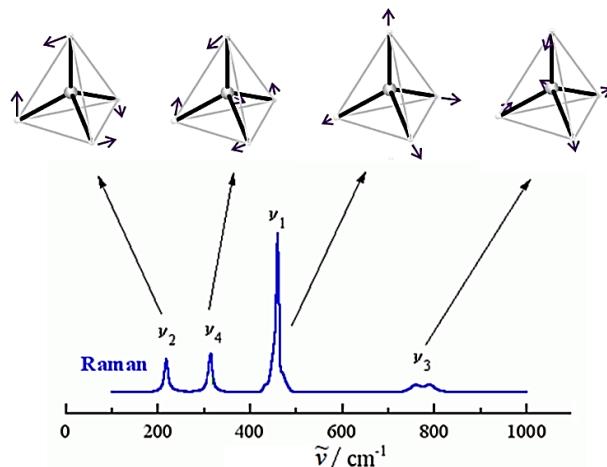


Fig. 5: Comparativo de pico contra su respectivo modo vibracional.

Esta imagen representa el objetivo final de esta práctica.

1.2 Ruidos en la espectroscopia

En el caso de la obtención de espectros Raman los ruidos más habituales pueden ser clasificados en cinco grupos diferentes:

- Ruido shot: es el resultado de la naturaleza aleatoria de la luz
- Ruido generado por la muestra: Incluye emisiones ópticas no deseadas y generadas por la propia muestra como es el caso de la fluorescencia.
- Ruido generado por la instrumentación: depende del diseño específico de la instrumentación empleada en el análisis, incluye los ruidos introducidos por el detector (ruido térmico, ruido de lectura o la dependencia de la eficiencia cuántica del detector con la longitud de onda).
- Ruido computacional: Es generado por la conversión de la señal del detector a un archivo digital.
- Ruido generado por fuentes externas: Generalmente está causado por alguna fuente de luz externa que contamina la señal en algún punto del equipo.

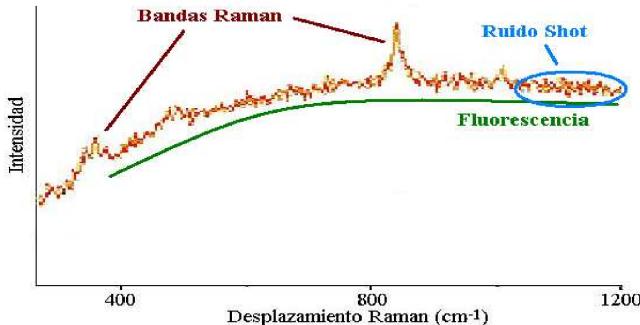


Fig. 6: Ejemplo de ruido shot y fluorescencia en una espectroscopia Raman.

1.3 Aminoácidos

Un aminoácido (a veces abreviado como AA), es una molécula orgánica con un grupo amino ($-NH_2$) en uno de los extremos de la molécula y un grupo carboxilo ($-COOH$) en el otro extremo. Son la base de las proteínas, sin embargo tanto estos como sus derivados participan en funciones celulares tan diversas como la transmisión nerviosa y la biosíntesis de porfirinas, purinas, pirimidinas y urea. Los aminoácidos juegan un papel clave en casi todos los procesos biológicos.⁴ Se procederá a estudiar los siguientes aminoácidos :

- Glicina
- L-Fenilalanina
- L-Ácido Glutámico
- L-Glutamina
- Triptofano

2 Desarrollo

Una parte de este proceso requiere la elaboración de los aminoácidos en Gaussian View, esto haciendo uso de las herramientas que proporciona el software:

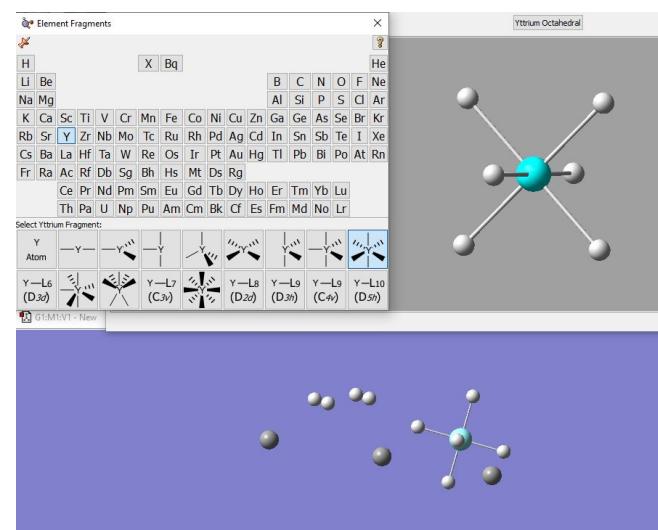


Fig. 7: Herramientas empleadas en Gauss View para elaborar los aminoácidos.

Con estas herramientas se procede a recrear los aminoácidos ha estudiado.

2.1 Glicina

La glicina es un aminoácido glucogénico no esencial, no polar y "non-optical". Es un neurotransmisor inhibidor del sistema nervioso central.

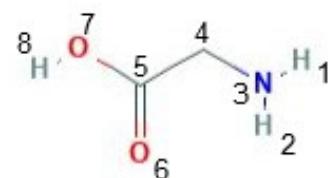


Fig. 8: Esquema químico de la Glicina en 2D, extraído de PubChem.

Además es un importante componente y precursor de muchas células macro moleculares.

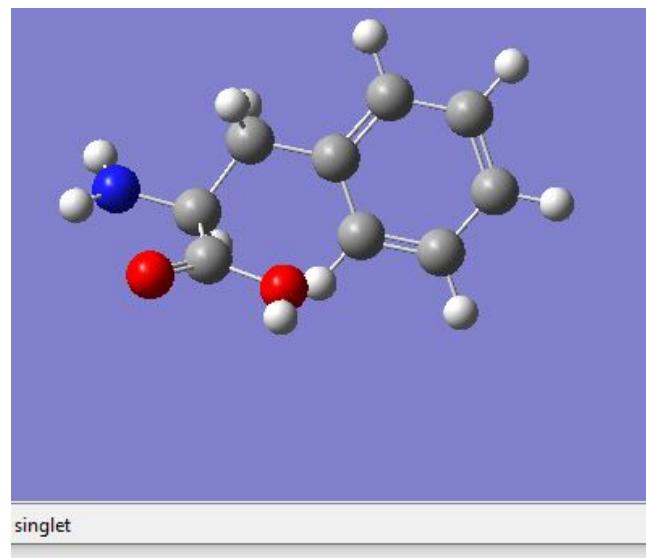
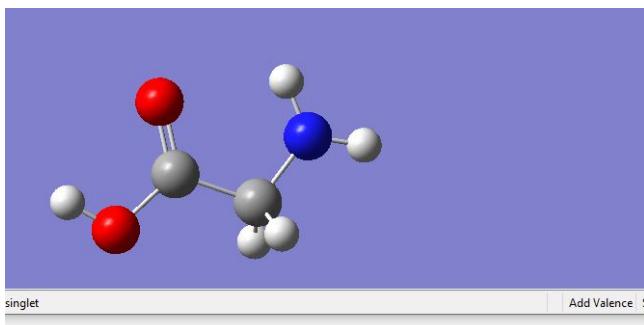


Fig. 9: Recreación del modelo 3D de Pubchem en Gaussview, el superior pertenece a Gaussview mientras que el inferior es de Pubchem.

2.2 L-Fenilalanina

Es un aminoácido aromático esencial en humanos (obtenido vía comida), juega un rol importante en la bio síntesis de otros aminoácidos y es importante en la estructura y función de muchas proteínas y enzimas.

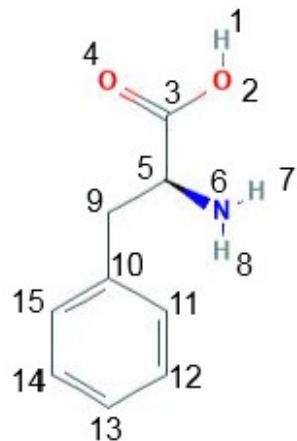


Fig. 10: Esquema químico de la Fenilalanina en 2D, extraído de PubChem.³

Es convertida en tyrosine, usado en la bio síntesis de los neurotransmisores de la dopamina y noradrenalina. La forma L de la fenilalanina es incorporada en proteínas, mientras que la forma D actúa como analgésico.

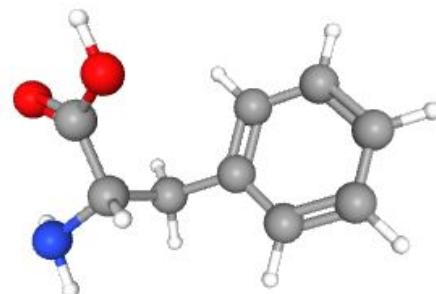


Fig. 11: Recreación del modelo 3D de Pubchem en Gaussview, el superior pertenece a Gaussview mientras que el inferior es de Pubchem.

2.3 L-Ácido Glutamico

Es una forma óptimamente activa del ácido glutámico teniendo configuración L.

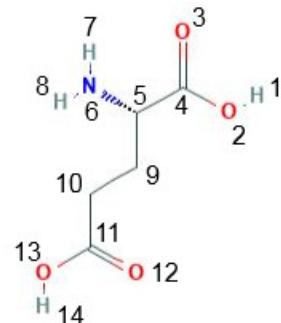


Fig. 12: Esquema químico del Ácido Glutamico en 2D, extraído de PubChem.³

Tiene un rol como nutraceutico , un micro nutriente y un neurotransmisor.

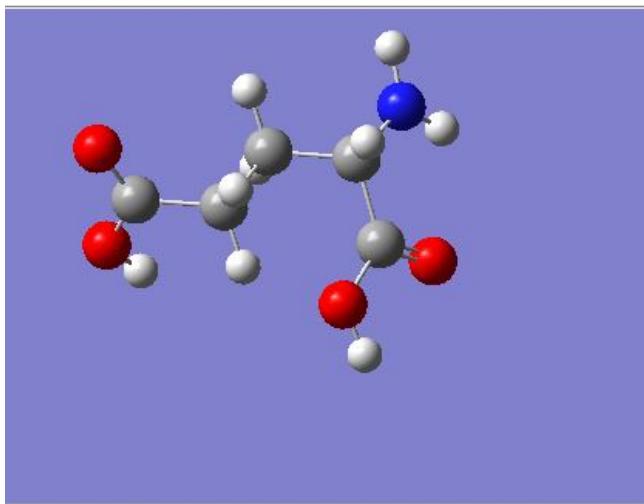


Fig. 13: Recreación del modelo 3D de Pubchem en Gaussview, el superior pertenece a Gaussview mientras que el inferior es de Pubchem.

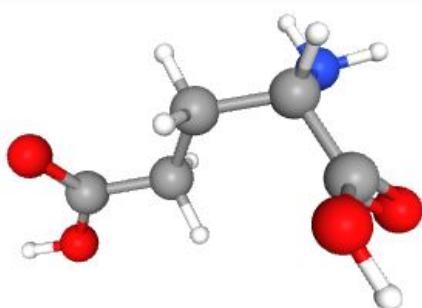


Fig. 13: Recreación del modelo 3D de Pubchem en Gaussview, el superior pertenece a Gaussview mientras que el inferior es de Pubchem.

2.4 L-Glutamina

Es un alfa-aminoácido. Está catalogado como aminoácido no esencial ya que el organismo humano puede sintetizarlo a partir de otras sustancias en el músculo esquelético, pulmón y cerebro principalmente.



Fig. 14: Esquema químico de la Glutamina en 2D, extraído de PubChem.³

Es el primer y principal transportador de amoníaco desde el músculo hasta el hígado para ser transformado en urea.

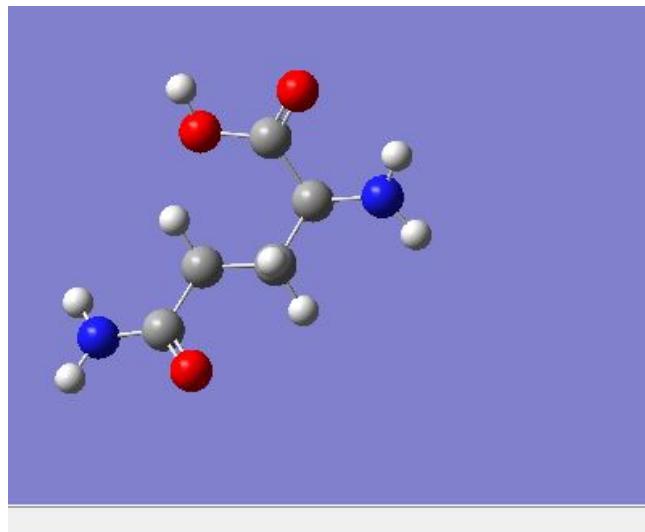
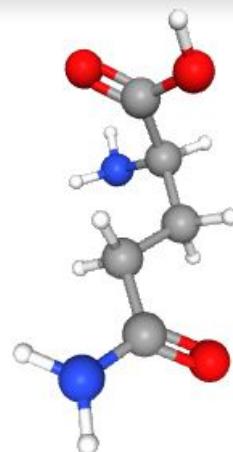


Fig. 15: Recreación del modelo 3D de Pubchem en Gaussview, el superior pertenece a Gaussview mientras que el inferior es de Pubchem.



2.5 Triptófano

Es el menos abundante de todos los 22 aminoácidos y es un aminoácido esencial en humanos (obtenido vía comida), se encuentra en la mayoría de las proteínas y un precursor de la serotonina, neurotransmisor esencial para regular apetito, sueño, humor y dolor.

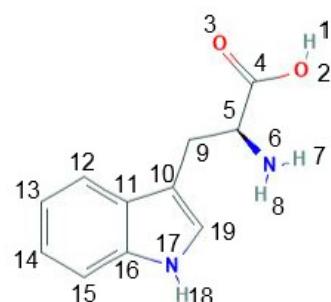


Fig. 16: Esquema químico de la Triptófano en 2D, extraído de PubChem.³

El triptófano es un sedante natural y está presente en muchos productos lácteos, carnes, arroz, pescado y en la soya.

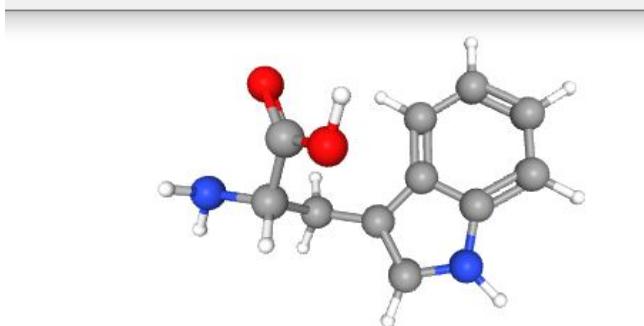
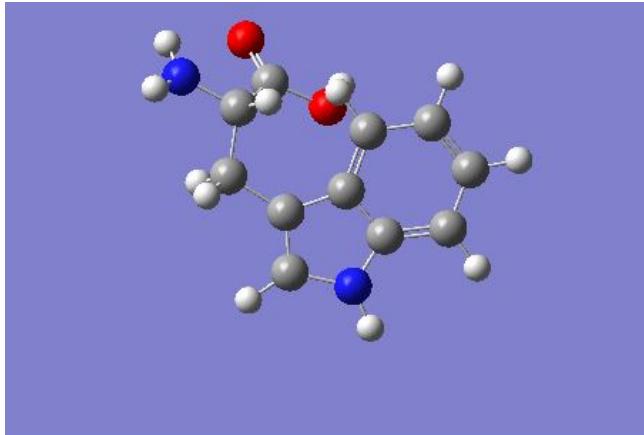


Fig. 17: Recreación del modelo 3D de Pubchem en Gaussview, el superior pertenece a Gaussview mientras que el inferior es de Pubchem.

2.6 Parte experimental

Usando un microscopio Raman, se deben considerar muchos parámetros experimentales relacionados con el microscopio, el espectrómetro y la fuente láser. Los parámetros más importantes: 1) Longitud de onda del láser, 2) Potencia láser, 3) Tiempo de adquisición, 4) Acumulaciones, 5) Magnificación objetiva.

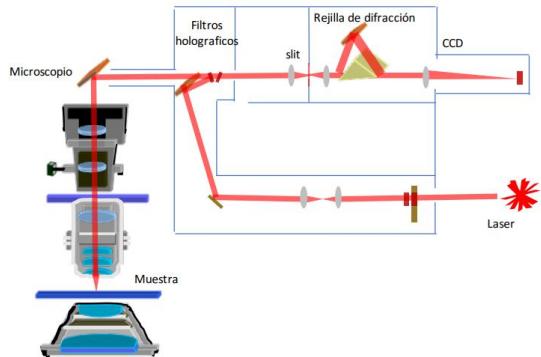


Fig. 18: Esquema de un microscopio Raman.

Sabiendo los parámetros y composición de un microscopio Raman se procede a la toma del espectro, este proceso ahora ya es casi automatizado, con mínima asistencia humana y analizando algún tipo de software que depende del espectroscopio que se use.



Fig. 19: Fotografía de un espectroscopio Raman moderno, de enfoque manual, vía microscopio.

En general el proceso efectuado es la preparación de la muestra (esta puede ser pospuesta dependiendo de la forma en que se prepara la muestra), encendido y calibración del instrumento, la calibración es la norma hacerla con base a muestras de silicio, la calibración se hace con ayuda de algún software, posterior a la calibración se procede a la toma de mediciones y adquisición de datos, dependiendo del instrumento usado y el software se puede tener en esta parte opciones para remover rayos cósmicos o filtrar ciertos ruidos que se puedan tener, finalmente se exportan los datos en el formato que se requiera y ofrezca el software. Posterior a esto se apaga el equipo conforme el instructivo correspondiente.²

3 Resultados y Análisis de Datos

De la serie de datos experimentales proporcionada por el equipo Raman, se obtuvieron los espectros experimentales que se muestran de las figuras 26 a la 31 del apéndice del texto. En el caso particular de la figura 26 se puede observar el espectro de una muestra de Silicio. El punto máximo del espectro se encontró a un número

de onda o corrimiento de 509.33 cm^{-1} , sin embargo, el valor de referencia conocido¹ resulta estar alrededor de 520.5 cm^{-1} (fig. 20). Esto indica que el equipo de medición no estaba calibrado, por lo que se tomó la diferencia entre estos valores de 11.17 cm^{-1} como un valor de corrección el cual se sumó a cada valor del número de onda de cada espectro obtenido.

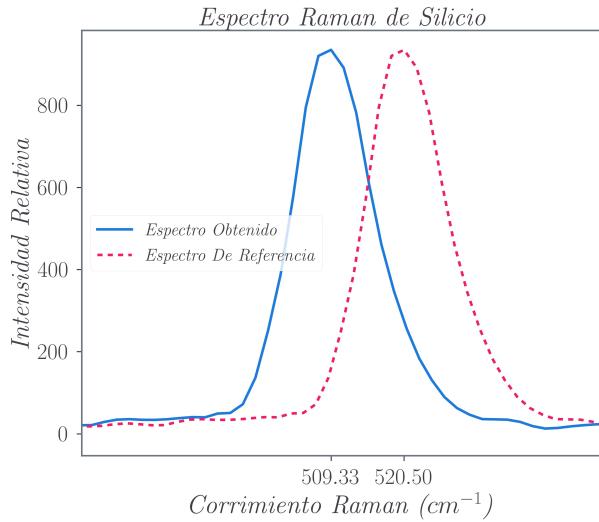


Fig. 20: Espectro experimental obtenido de Silicio junto con el espectro de referencia con un máximo en 520.5 cm^{-1} .

Este mismo espectro de silicio se puede utilizar para asociar una incertidumbre a las mediciones, ajustando una curva normal y tomando como error el ancho de esta. Así, se podría tener una incertidumbre total en términos de la suma estadística de la desviación estándar del ajuste y de la incertidumbre dada por el equipo Raman en el manual. Sin embargo, dado que las descripciones de interés en este trabajo son solamente cualitativas, esto no será necesario.

Para poder comparar los resultados experimentales y caracterizar algunos de los picos obtenidos, se modelaron teóricamente los aminoácidos de las moléculas glicina, glutamina, fenilalanina, ácido glutámico y triptofano con el software *Gaussian*. Posteriormente, mediante cálculos numéricos realizados por el mismo programa por el método de Hartree-Fock, se obtuvieron los espectros teóricos de cada molécula que se muestran en las figuras 32 a 36 del apéndice y que son visualizados a través del software *Gaussian View*. Para poder comparar ambas curvas teórica y experimental, se multiplicó todos los datos de intensidades por una constante de normalización c , de manera que si f fuera una función que describe la distribución de las intensidades, entonces c cumple que

$$c \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} f(x) dx = 1$$

La integración se realizó de manera numérica con ayuda del lenguaje Python 3, al igual que los gráficos que en

adelante se presentan. Debido a que el software utilizado devuelve información tanto del espectro teórico como de los modos normales de oscilación de los átomos que conforman cada muestra, se realizó un gráfico para cada molécula en el que se comparan ambos espectros, teórico y experimental, y se asocia a cada pico máximo de interés uno de estos modos normales mencionados. El software también permite observar mediante una animación gráfica el tipo de oscilación que debe ocurrir entre los átomos para generar cada modo, lo cual, se utilizará para caracterizar cada espectro.

Dado que existieron ciertas diferencias entre la predicción teórica y el espectro real, como puede observarse en las gráficas completas de los espectros que se encuentran en el apéndice, se multiplicó el corrimiento Raman teórico por un factor cercano a 1, el cual se determinó por tanteo para sobreponer los espectros y que se pudiera comparar cómodamente. Esto bajo la consideración de que interesa más la descripción cualitativa. De cada lado de los espectros se multiplicó por factores distintos, de manera que coincidieran mejor con los picos experimentales y se observaran mejor las zonas de interés.

En el caso de la glicina, del lado izquierdo se multiplicó por 0.885, mientras que del derecho, por 0.928. Se colocó el modo normal de oscilación asociado algunos de los picos que se caracterizarán, pero los modos completos junto con su posición en el dominio y su intensidad dados por Gaussian se pueden encontrar, aún sin ser multiplicados en el corrimiento por los factores descritos, en la tabla B1 del apéndice B.

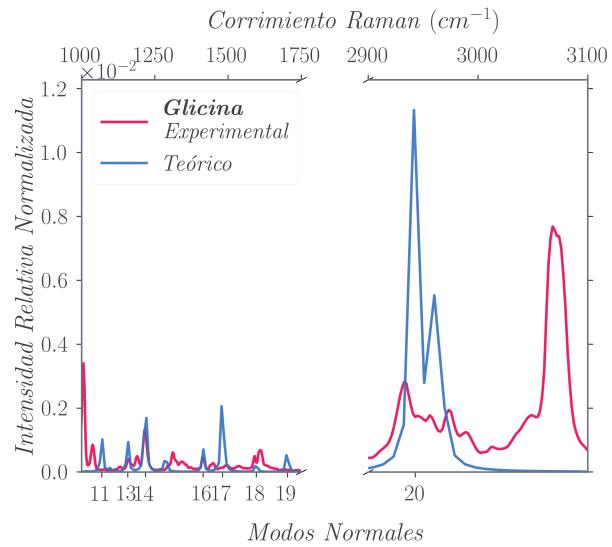


Fig. 21: Comparación entre los espectros teóricos y experimentales obtenidos para la glicina. Del lado izquierdo se multiplicó al espectro teórico por un factor de 0.885. Del lado derecho el factor fue de 0.928

Generando las animaciones para cada modo, se puede encontrar el tipo de movimiento (...) que genera los picos del espectro de glicina marcados en la figura 21. Estos, junto con las moléculas relacionadas, se resumen en la

tabla 1.

Modos	Movimiento	Moléculas Relacionadas
11	tijereteo	3,4
13	tijereteo	2,3,4
14	torsión	4
16	estiramiento asimétrico	5,4,3
17	aleteo	4
18	aleteo	1,2,3
19	estiramiento simétrico	7,5,4,6
20	estiramiento simétrico	4

Tabla 1: Movimientos asociados a los modos normales con los que se explica la aparición de los picos experimentales más cercanos del espectro de L Glicina. Se muestran en la tercera columna las moléculas involucradas en el movimiento identificadas por las etiquetas colocadas en el esquema químico 8.

Para el caso de la L Glutamina, usando el mismo procedimiento descrito anteriormente, se obtuvo la figura (22) así como la tabla asociada 2. Se muestran en esta última algunos movimientos indicados por "varios". En estos casos no fue posible determinar un solo tipo de movimiento, sino que se observó una combinación de ellos en distintas partículas.

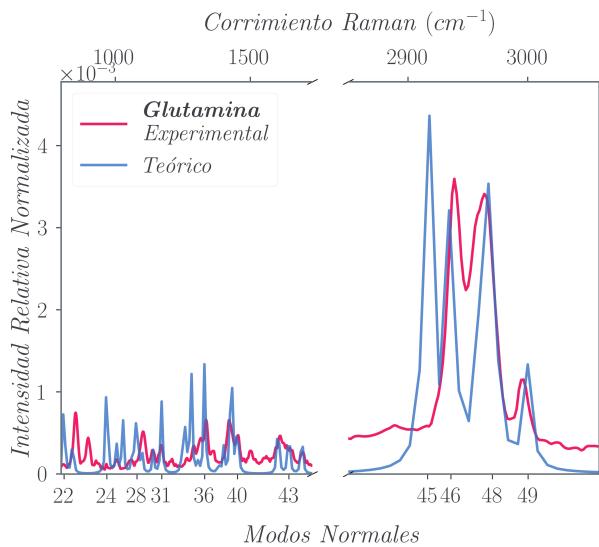


Fig. 22: Comparación entre los espectros teóricos y experimentales obtenidos para la L Glutamina. Del lado izquierdo se multiplicó al espectro teórico por un factor de 0.88, mientras el lado derecho por un factor de 0.913. Modos normales obtenidos de la tabla B2 del apéndice.

Modos	Movimiento	Moléculas Relacionadas
22	torsión	respecto a 9 y 10
28	varios	
36	torsión	5 y 9
40	aleteo	9
43	estiramiento simétrico	13, 11, 10
46	estiramiento simétrico	10
48	estiramiento asimétrico	5
49	estiramiento asimétrico	9 y 10

Tabla 2: Movimientos asociados a los modos normales con los que se explica la aparición de los picos experimentales más cercanos del espectro de L Glicina. Se muestran en la tercera columna las moléculas involucradas en el movimiento identificadas por las etiquetas colocadas en el esquema químico 14. En el caso de indicarse tres moléculas, se debe entender simetría respecto a la de en medio.

Para la Fenilalanina, análogamente, se obtuvo la figura (23) así como la tabla 3. Se logró identificar que los picos más prominentes se deben a estiramientos, ya sea simétricos, para el modo 60, o asimétricos, para el modo 58, de los hidrógenos del anillo de la molécula respecto a un centro en común.

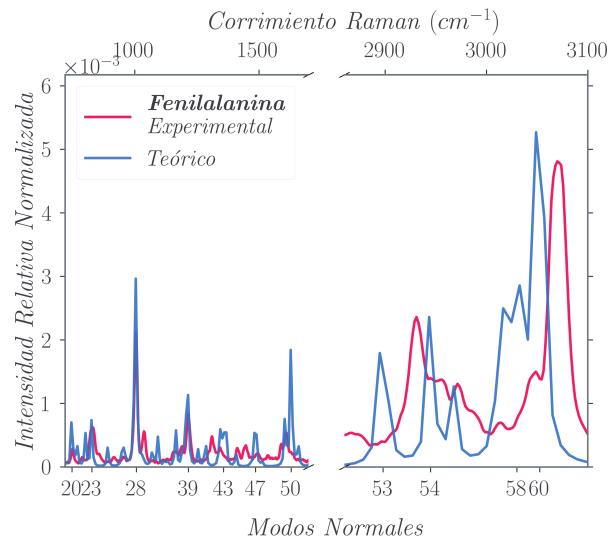


Fig. 23: Comparación entre los espectros teóricos y experimentales obtenidos para Fenilalanina. Del lado izquierdo se multiplicó al espectro teórico por un factor de 0.9, mientras el lado derecho por un factor de 0.901. Modos normales obtenidos de la tabla B3 del apéndice.

Modos	Movimiento	Moléculas Relacionadas
28	torsión (varias)	
39	torsión (varias)	
50	estiramiento asimétrico	mol. de anillo
54	estiramiento asimétrico	9 y 5
58	estiramiento asimétrico	H's del anillo
60	estiramiento simétrico	H's del anillo

Tabla 3: Movimientos asociados a los modos normales con los que se explica la aparición de los picos experimentales más cercanos del espectro de Fenilalanina. Se muestran en la tercera columna las moléculas involucradas en el movimiento identificadas por las etiquetas colocadas en el esquema químico 10.

Con la molécula de ácido glutámico se obtuvieron la gráfica 24 y la tabla 4.

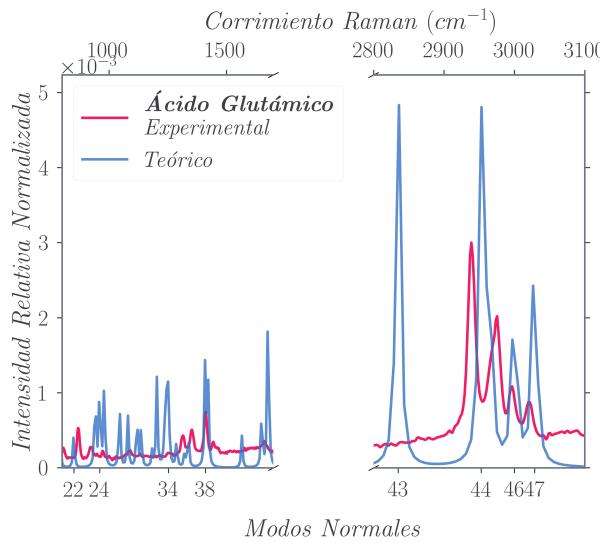


Fig. 24: Comparación entre los espectros teóricos y experimentales obtenidos para ácido glutámico. Del lado izquierdo se multiplicó al espectro teórico por un factor de 0.885 , mientras el lado derecho por un factor de 0.916. Modos normales obtenidos de la tabla B4 del apéndice.

Modos	Movimiento	Moléculas Relacionadas
43	estiramiento asimétrico	5
44	estiramiento simétrico	10 y 9
46	estiramiento asimétrico	9 y 8
46	estiramiento asimétrico	9 y 8

Tabla 4: Movimientos asociados a los modos normales con los que se explica la aparición de los picos experimentales más cercanos del espectro de ácido glutámico. Se muestran en la tercera columna las moléculas involucradas en el movimiento.

Con la molécula de triptofano se obtuvieron los gráficos y tablas 25 y 5. En este caso en particular se tuvo que reescalar las amplitudes, pues como puede observarse en el espectro sin modificar del triptofano (figura 31), se observa una línea creciente que de hecho se superpone a algunos de los picos del espectro. Esto se asoció al

fenómeno de fluorescencia, pues como se indica en la literatura,¹ es común que ocurra.

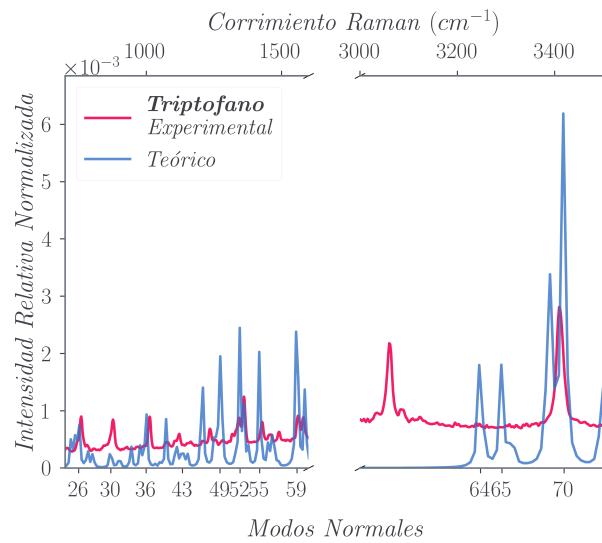


Fig. 25: Comparación entre los espectros teóricos y experimentales obtenidos para Triptofano. Del lado izquierdo se multiplicó al espectro teórico por un factor de 0.89, mientras el lado derecho por un factor de 1.01. Modos normales obtenidos de la tabla B5 del apéndice.

Modos	Movimiento	Moléculas Relacionadas
52	balanceo	H's de anillo y de 19
65	estiramiento asimétrico	9
70	estiramiento simétrico	H's del anillo (12,13,14 y 15)

Tabla 5: Movimientos asociados a los modos normales con los que se explica la aparición de los picos experimentales más cercanos del espectro de Triptofano. Se muestran en la tercera columna las moléculas involucradas en el movimiento identificadas por las etiquetas colocadas en el esquema químico 16.

Para los picos más pequeños de nuevo no fue posible determinar un solo tipo de movimiento de manera simple, pues se observaba una combinación de ellos.

4 Discusiones

En general, de los espectros analizados se encontró que los picos poco pronunciados son producidos por distintos movimientos de varias de sus moléculas en conjunto, por lo que en estos casos no se pudo dar un solo movimiento simple como posible razón del pico del espectro. Por el contrario, en los picos más pronunciados de los espectros si se encontraron movimientos que se pudieron relacionar de forma clara con los movimiento señalados en la figura 3.

En el espectro de la glicina. se pudo observar que uno de los máximos picos, el del modo no. 20 1, se debe al estiramiento simétrico de los hidrógenos alrededor de su

carbón. Sin embargo, para el pico máximo no se pudo determinar el tipo de oscilación que lo produce, pues no se obtuvo teóricamente un pico cercano a tal que se relacionara.

En la Glutamina, nuevamente se centra la atención en los picos más grandes (modos 45, 46, 48 y 49) y se observó en las animaciones que estos los producen principalmente, estiramientos de hidrógenos alrededor de su molécula. Algunos fueron simétricos (46), y otros asimétricos (45, 48 49).

En la fenilalanina se observó un comportamiento particular, pues los máximos picos se deben a movimientos en los anillos. Para el modo 60 los hidrógenos de alrededor del anillo se estiran conjuntamente. El modo 58, que es el segundo más intenso, también lo produce un estiramiento de estos anillos pero este no muestra simetría. Por el contrario, en el tercer máximo, el modo 54, el anillo no se mueve, sino que lo producen estiramientos de los hidrógenos alrededor del carbono 9 y 5. El modo 53 también está relacionado con estiramientos de las moléculas del anillo que se puede entender como si los carbonos 14, y 15 y 11 y 12 se acercara y se alejaran entre si.

Para el ácido glutámico se encontró que los tres principales picos que se encuentran cerca de del máximo se produjeron, de nuevo, pro estiramientos asimétricos de las moléculas. 10 y 9 del esquema químico correspondiente.

Finalmente, de lo observado para la fenilalanina, se esperaba que los principales máximos del espectro de triptofano vinieran de vibraciones de los anillos. Y efectivamente esto ocurrió con el modo 70, el mayor de los picos del espectro, que se asoció a estiramientos conjuntos y simétricos de los hidrógenos del anillo, que se expandían y se acercaban de este.

Para los picos teóricos obtenidos con Gaussian cerca de 4000 cm^{-1} no se observaron máximos experimentales. Esto se esperaba puesto que la mayoría de equipos de espectroscopía Raman no obtienen datos en ese rango. Por otro lado, con el software también se pudieron obtener los espectros teóricos que se esperarían al hacer espectroscopía infrarroja a las muestras. No se incluyen en este trabajo porque va más allá de los intereses y de los resultados experimentales con los que se cuenta. Pero se observó en ellos que en los rangos en que los espectros Raman no era muy claros, en el infrarrojo si lo eran.

5 Conclusiones

Por el método de espectroscopía Raman se determinaron los espectros Raman de cinco muestras previamente conocidas de Glicina, Glutamina, Ácido Glutámico, Fenilalanina y Triptofano. De los esquemas químicos teóricos de las muestras se modelaron las moléculas con el software Gaussian y se obtuvieron sus espectros teóricos junto con una simulación gráfica de las vibraciones que generan el espectro. Empatando estos datos con los experimentales se pudo caracterizar algunas de las líneas de cada uno de los espectros. Esto se logró de forma clara para los picos más grandes. Con los picos de intensidad relativamente corta no fue posible identificar movimientos específicos simples que los produjeran.

En moléculas que contienen arreglos anillos de carbonos e hidrógenos se observó que estas estructuras son las responsables de emitir la luz de intensidad máxima del espectro. Otra fuente importante que se encontró que contribuye especialmente a los espectros únicos de las moléculas analizadas fueron los movimientos de estiramiento de los hidrógenos alrededor de un carbono. Especialmente los estiramientos simétricos y en segunda medida, los estiramientos asimétricos.

Para los picos de intensidad relativa baja, se observó del modelo teórico que la espectroscopía infrarroja si arrojaba picos de intensidad más notable. Por esto se propone como trabajo a futuro el caracterizar las muestras por espectroscopía infrarroja en el rango en el que Raman no fue de mucha ayuda.

Referencias

- [1] Medina, C., (2003) *Caracterización de Muestras Biomédicas por Espectroscopía Raman* (Tesis de Doctorado). Universidad de Guanajuato, Aguascalientes, México.
- [2] Manual Raman, <http://www.linan-ipicyt.mx/ManualdeRaman.pdf>.
- [3] Base de datos de compuestos químicos, *pubchem*, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>.
- [4] Aminoácidos, <https://es.wikipedia.org/wiki/Amino%C3%A1cido>.
- [5] Raman, https://www.mt.com/mx/es/home/applications/L1_AutoChem_Applications/Raman-Spectroscopy.html

Apéndice

Espectros Experimentales

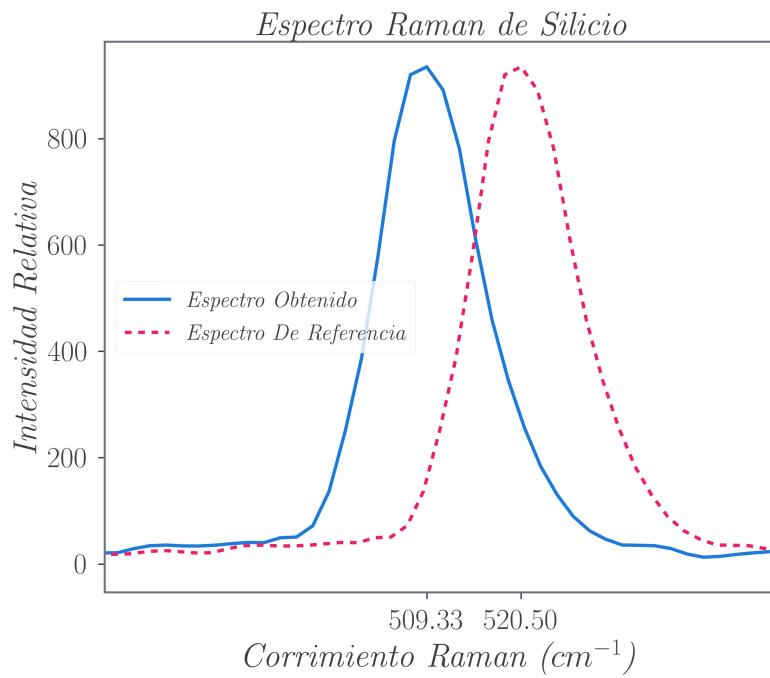


Fig. 26: Espectro experimental obtenido para Silicio por espectroscopía Raman. Este se utilizó para calibrar el espectroscopio, pues se contó con la referencia del valor real del máximo.

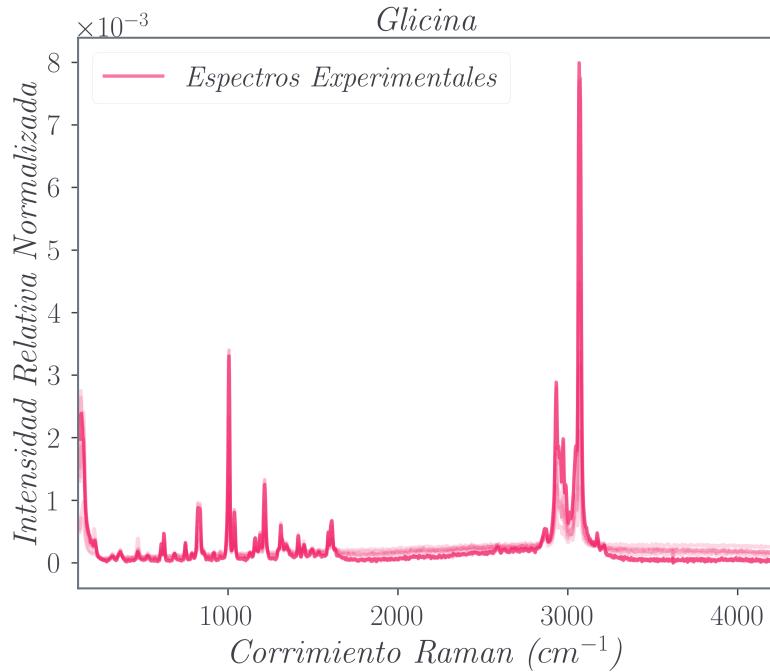


Fig. 27: Espectro experimental obtenido para Glicina por espectroscopía Raman.

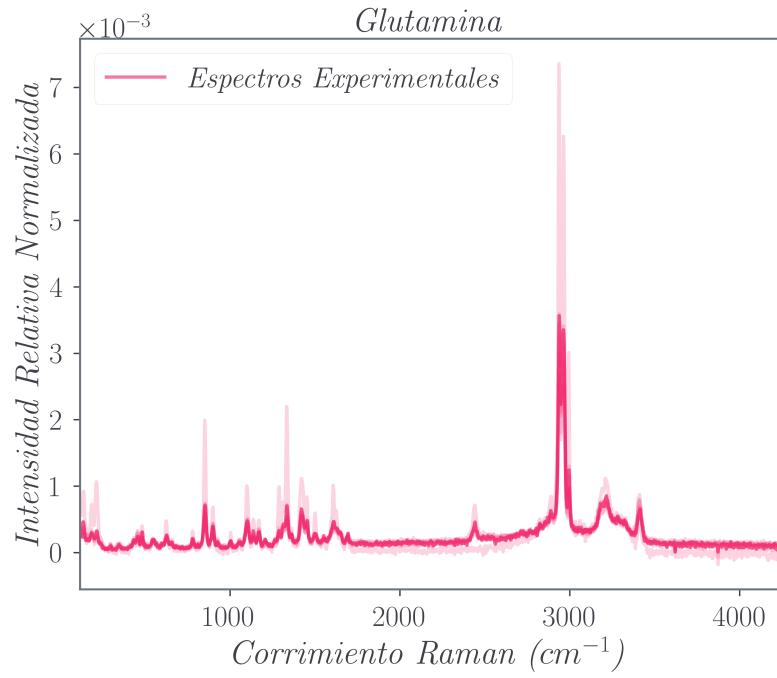


Fig. 28: Espectro experimental obtenido para L Glutamina por espectroscopía Raman.

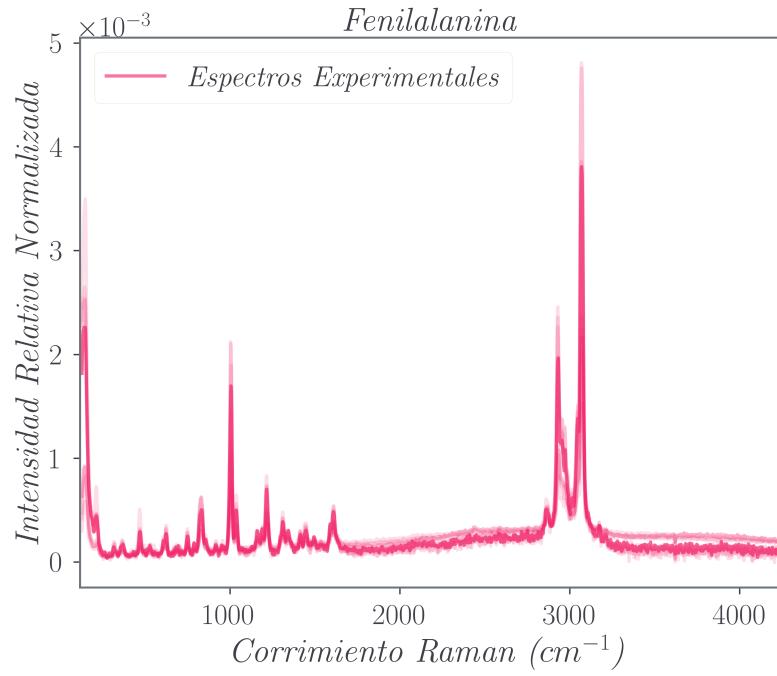


Fig. 29: Espectro experimental obtenido para L Fenilalanina por espectroscopía Raman.

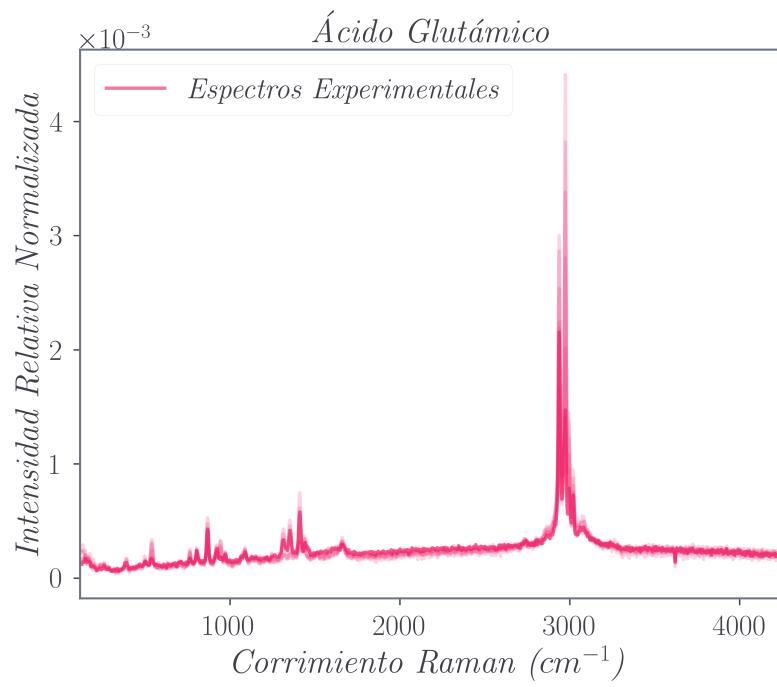


Fig. 30: Espectro experimental obtenido para Ácido Glutámico por espectroscopía Raman.

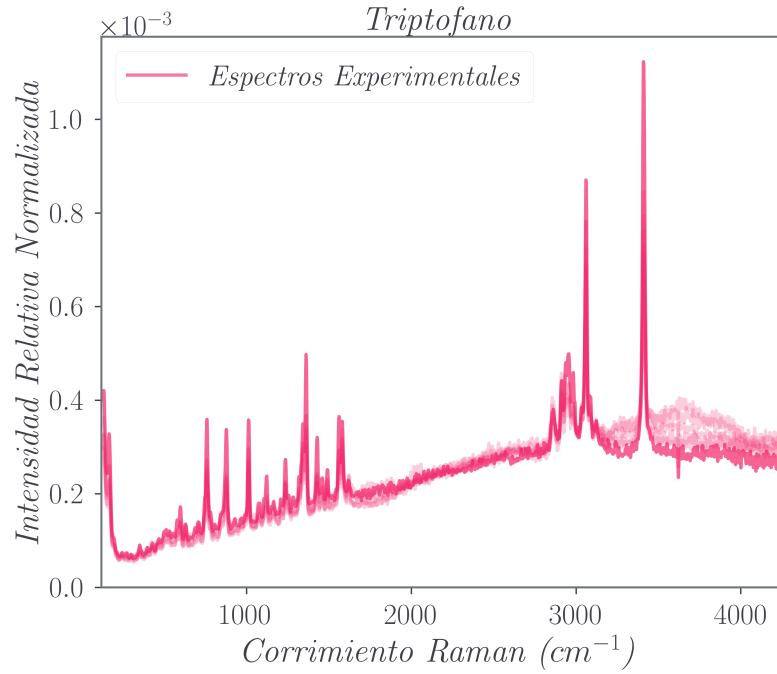


Fig. 31: Espectro experimental obtenido para Triptofano por espectroscopía Raman.

Espectros Teóricos Obtenidos con el Software Gaussian

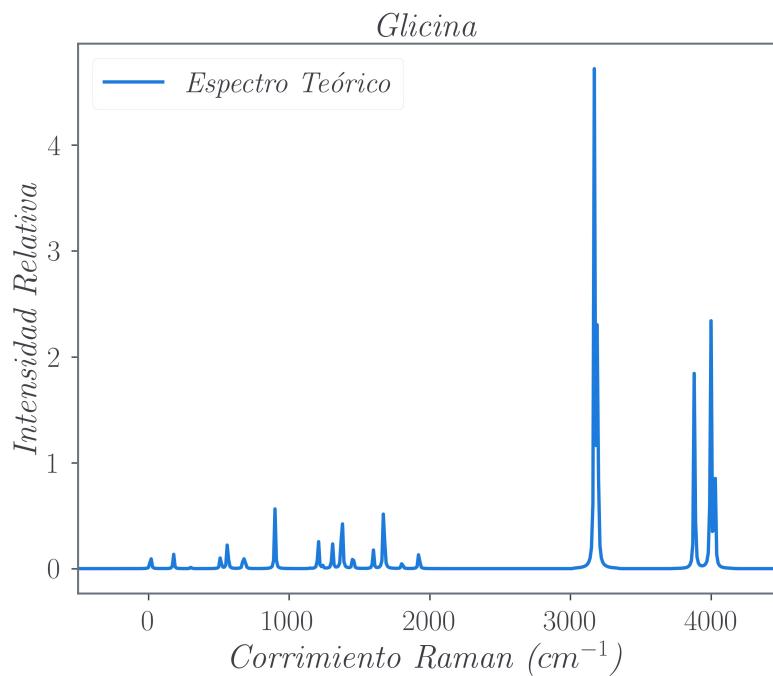


Fig. 32: Espectro teórico obtenido para Glicina con el software Gaussian.

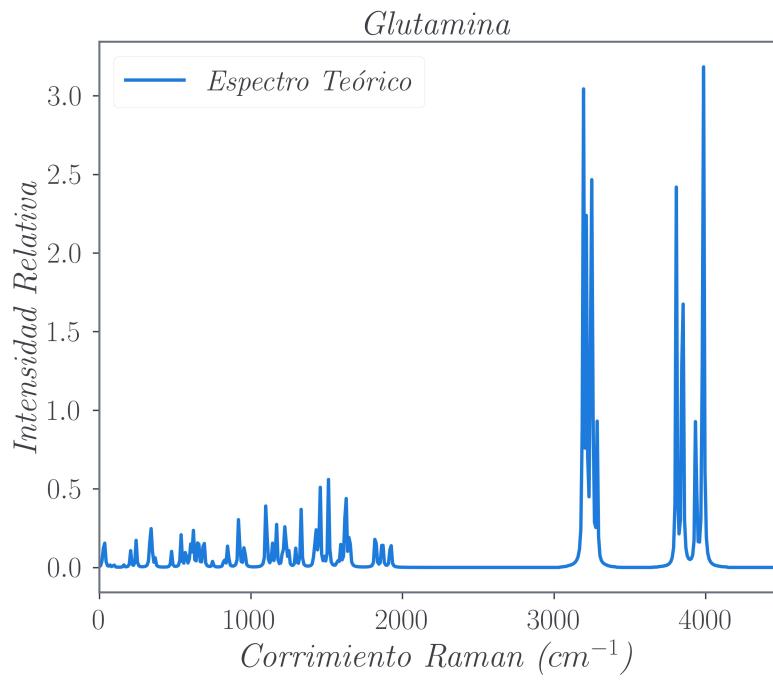


Fig. 33: Espectro teórico obtenido para L Glutamina con el software Gaussian.

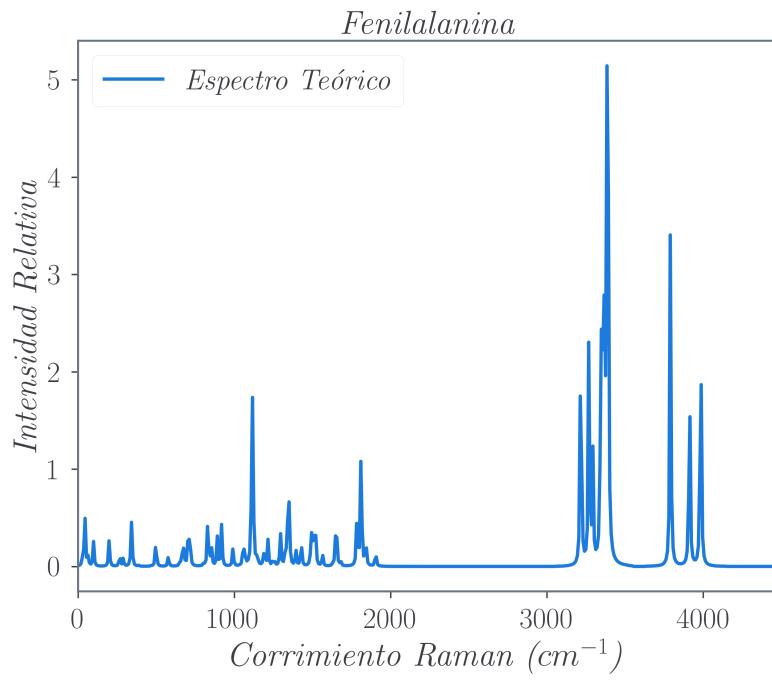


Fig. 34: Espectro teórico obtenido para L Fenilalanina con el software Gaussian.

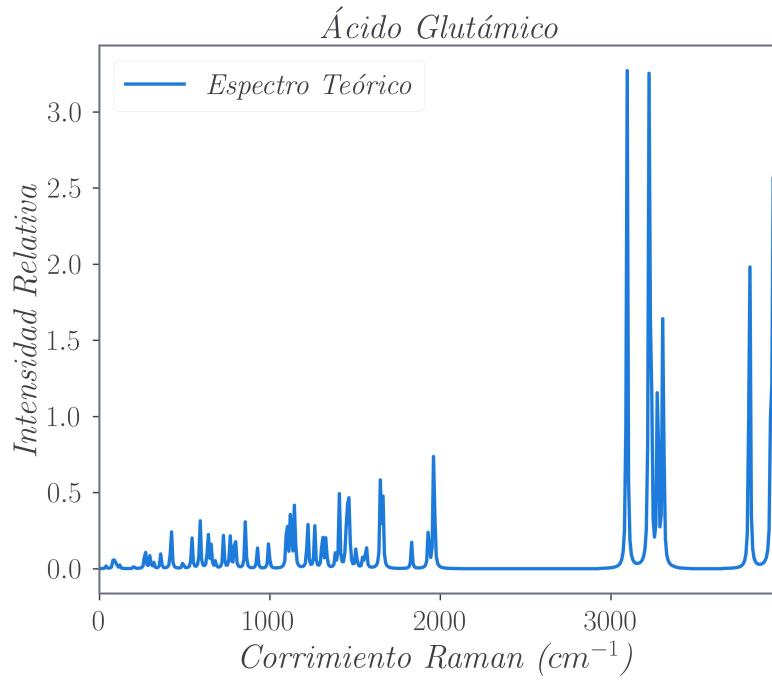


Fig. 35: Espectro teórico obtenido para Ácido Glutámico con el software Gaussian.

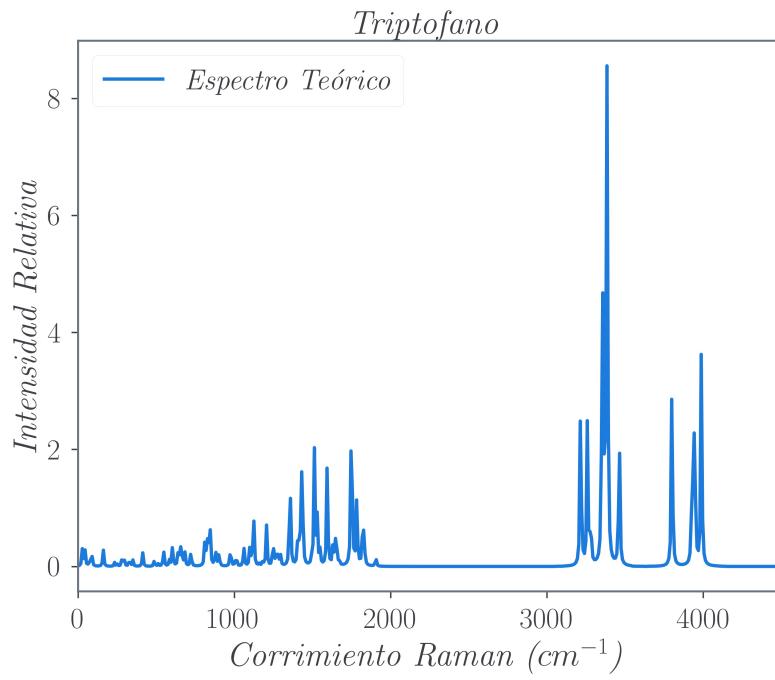


Fig. 36: Espectro teórico obtenido para Triptofano con el software Gaussian.