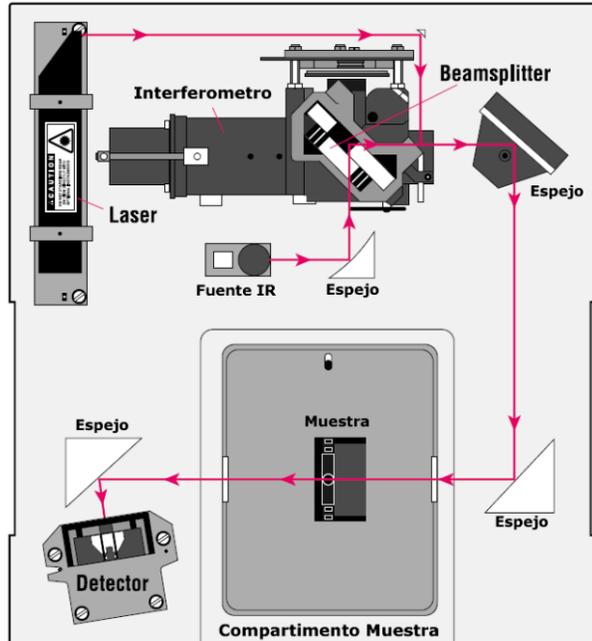


# Espectrometría Infrarroja

LSAP del Centro de Astrobiología (CAB, CSIC-INTA), Ctra. de Ajalvir, km 4, 28850 Torrejón de Ardoz, Madrid, España

## ¿Que es la espectroscopia Infrarroja?

Se trata de una técnica de análisis, para obtener información acerca de los procesos de absorción y emisión sobre las moléculas que se encuentra en la materia



### Objetivo de la técnica

Determinar la composición y el estado químico de los elementos presentes en materiales sólidos. Materiales aislantes y conductores, pueden ser analizados.

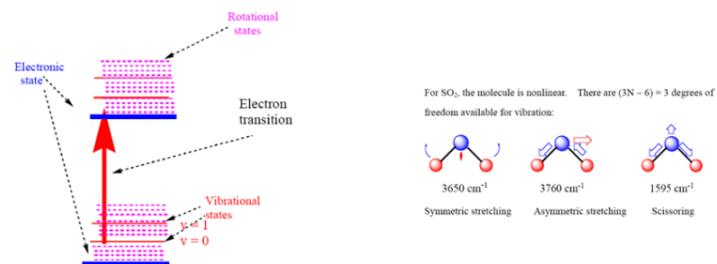


## Funcionamiento

Las técnicas espectroscópicas, se fundamentan en la interacción de la materia con la radiación. Esta interacción provoca procesos como la absorción o la difusión (scattering). Cuando una molécula absorbe o emite un fotón, su estado energético cambia. En general este cambio se manifiesta como un cambio en la energía traslacional de la molécula, y como un cambio en su estado electrónico vibracional o rotacional. Como las energías asociadas a cada uno de estos cambios son muy diferentes, cada uno de estos procesos se puede tratar de manera independiente. Exceptuando los cambios traslacionales, los estados energéticos de las moléculas están cuantizados, consecuentemente, los procesos de absorción y emisión sólo pueden darse a determinadas frecuencias de los fotones. Además, el conjunto de frecuencias a las que se producen estos procesos es propio de cada molécula. Para cada molécula dada, su espectro de adsorción/emisión constituye una "huella" de la misma.

Las absorciones que se producen en la región espectral del infrarrojo involucran energías mucho más pequeñas si las comparamos con las energías de absorción relacionadas con la estructura electrónica de la molécula (ultravioleta y visible). Con un modelo sencillo de molécula, se obtienen resultados buenos, como un conjunto de masas unidas por muelles. Según este sencillo modelo mecánico, esta puede absorber energía para rotar o para vibrar, es decir, para cambiar su estado energético rotacional o vibracional.

Sin embargo no todas las vibraciones y/o rotaciones producen una absorción de radiación incidente. Sólo los modos vibracionales y rotacionales de moléculas con momento bipolar diferente de cero, o bien aquellos modos que induzcan un momento diferente de cero en la molécula, son activos al infrarrojo. Para que exista un espectro rotacional activo en el infrarrojo se requiere que la molécula sea polar, mientras que para tener un espectro vibracional activo en el infrarrojo basta que el movimiento vibracional de los átomos de la molécula induzca un momento bipolar no nulo. Por ejemplo; Las moléculas diatómicas así como la de gases nobles no presentan espectros de absorción en el infrarrojo (2-20micras)

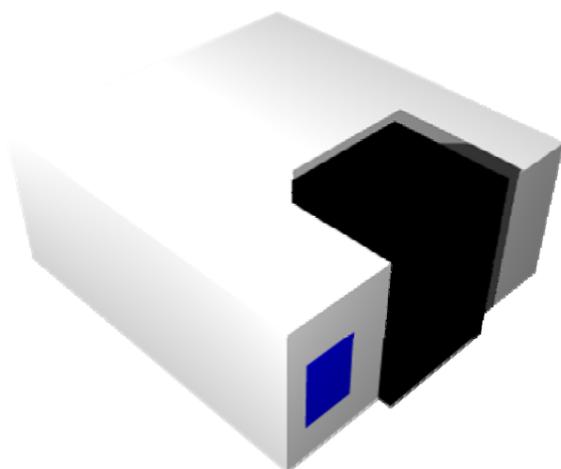


## Aplicaciones

- Análisis cualitativo**
  - Identificación y caracterización de sustancias
  - Frecuencia de grupo
  - Catálogo de espectros
- Análisis cuantitativo**
  - Ley de Lambert-Beer
- Estudios de superficies**
  - Especies adsorbidas (OH, H2O, CO3, etc...)
  - Determinación de centros activos
- Estudios estructurales**
  - Determinación de estructuras moleculares
  - Determinación de la simetría
  - Cambios de fase
  - Variaciones a altas y bajas presiones y temperatura

## Interferómetro

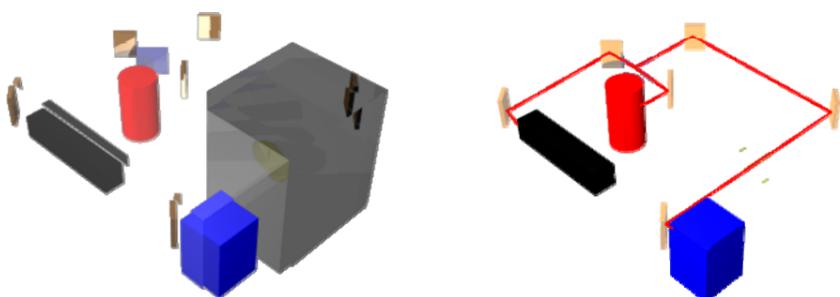
Existen dos tipos generales, de Interferómetro para espectroscopia Infrarroja. El de tipo dispersivo, y el de Transformada de Fourier. En el LSAP tenemos uno del tipo Transformada de Fourier



## Funcionamiento

Basado sobre el principio del interferómetro de Michelson. La radiación de la fuente, pasa a través de un "beamsplitter", que dirige la mitad de la radiación a un espejo fijo y la otra mitad a un espejo móvil. Los dos rayos se recombinan en el beamsplitter de una manera constructiva o destructiva dependiendo de la posición del espejo. El resultado es un interferograma (intensidad en función del tiempo) la cual se convierte via un algoritmo matemático (transformada de Fourier) en un diagrama de Intensidad en función de la frecuencia (espectro)

Para una radiación monocromática tal como una fuente LASER, el resultado es una onda senoidal, que es la transformada de Fourier de una función Delta, a la frecuencia del Laser. Cuando la fuente emite todo el rango de frecuencias, las ondas senoidales interaccionan constructivamente solamente cuando el espejo móvil y el fijo están a la misma distancia del "beamsplitter", y sirve para calibrar internamente la frecuencia del aparato.



## Ventajas

Ventajas del espectrofotómetro por transformada de Fourier

- Un simple recorrido del espejo móvil (<1s) contiene toda la información por lo que es fácil obtener elevadas relaciones señal/ruido. Esto permite usar accesorios como la reflectancia difusa en forma convencional.
- La energía que llega al detector está limitada solo por la fuente y la absorción de la muestra y no por la abertura de la rendija.
- El LASER suministra una calibración de una precisión aproximadamente 0.01cm⁻¹
- Para una resolución determinada (0.5cm⁻¹) el tiempo de medida es el que necesita el espejo móvil en recorrer la distancia proporcional. Debido a que el espejo se mueve muy rápido un espectro completo se puede obtener en funciones de segundo