

# Espectrometría Ultravioleta

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

## ¿Que es la espectroscopia Ultravioleta?

Utiliza la radiación del espectro electromagnético cuya longitud de onda está comprendida entre los 100 y los 800 nm (energía comprendida entre las 286 y 36 Kcal/mol) y su efecto sobre la materia orgánica, es producir transiciones electrónicas entre los orbitales atómicos y/o moleculares de la sustancia.

### Funcionamiento

Debemos tener en cuenta que la obtención de un espectro UV supone en primer lugar disolver la sustancia en un disolvente adecuado, que también absorbería en el UV, por lo que en la práctica la espectroscopia UV se ve limitada a longitudes de onda superiores a 200-220 nm. Debido a ello, como podemos imaginar, no son muchos los grupos funcionales que podremos determinar con la espectroscopia UV, siendo de destacar que todos ellos deben poseer al menos un enlace doble.

La existencia de un segundo doble enlace conjugado con el anterior o la presencia de un grupo auxocromo hace que aumente la  $\lambda_{max}$  de la absorción (efecto batocrómico) (también la absorbanza y  $\epsilon$ , (efecto hipercrómico). En caso de producirse por cualquier circunstancia una disminución de la  $\lambda_{max}$  sería un efecto ipsocrómico, o una disminución de la absorbanza (efecto hipocrómico).

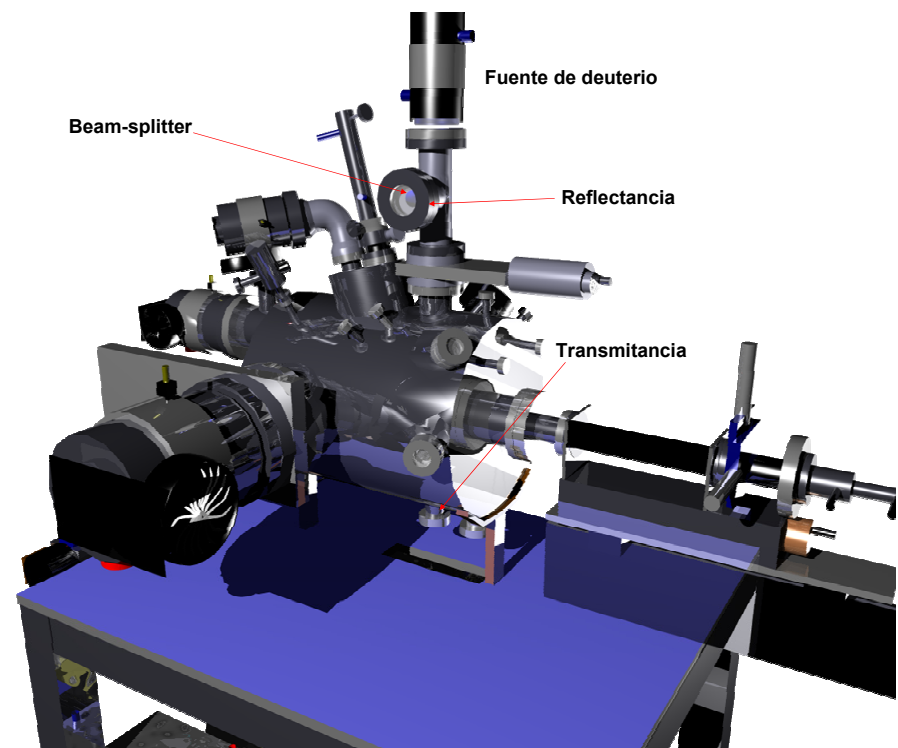
### Información Analítica

**Análisis elemental:** Aunque parezca de utilización limitada para la determinación estructural, la espectroscopia UV se muestra muy útil para el estudio de sistemas diénicos conjugados, en productos naturales, en compuestos carbonílicos  $\alpha,\beta$ -insaturados, en el estudio de productos quinónicos y en el de productos aromáticos y heterocíclicos, habiéndose establecido fórmulas empíricas que permiten determinar la  $\lambda_{max}$  en función de la estructura.

**Análisis químico:** Se determina además el estado químico de cada elemento a través de su energía de ligadura. Se pueden detectar concentraciones elementales muy bajas (0.1%), de este modo se puede determinar el estado de oxidación del átomo, los enlaces químicos y la estructura cristalina. Existen tablas con las energías de ligadura de todos los elementos químicos presentes en la naturaleza.

**Composición en sistemas multicomponente:** Se puede identificar la concentración de los elementos en los espectros, y determinar el área que ocupan cada uno de los máximos de esos espectros. Por medio de estos patrones de estudio, se determina la concentración química de los constituyentes presentes en la superficie.

Espesores en el crecimiento y de capas delgadas y moleculares.

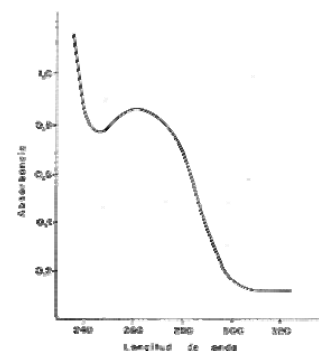


### Aplicaciones

- Análisis de contaminantes en películas delgadas
- Medida de la composición química
- Cuantificación de los perfiles de concentración de compuestos en superficies
- Identificación del estado químico de la superficie en películas delgadas

### Ventajas

- Información química a partir de corrimientos en energía de fotoelectrones.
- Daño al haz mínimo. Mínimos efectos de carga.
- Rápida recogida de espectros (< 5 minutos).
- Cuantificación con precisión, mejor que el 10%.
- Gran reproducibilidad. Estrecho rango de sensibilidad.
- Accesible base de datos.

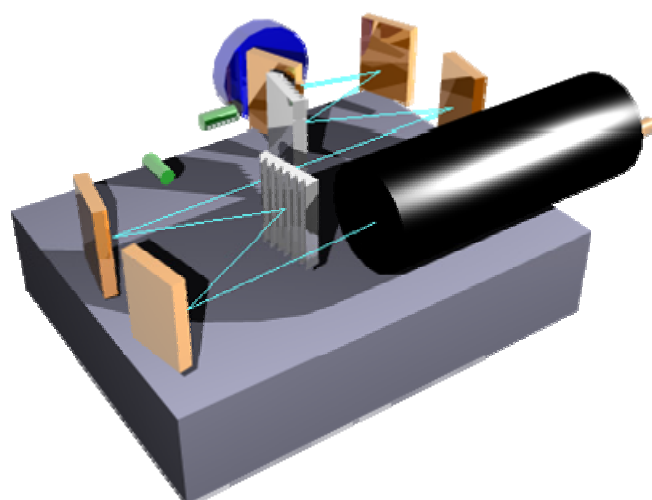


### Desventajas

- Posibilidades limitadas, para análisis de áreas muy pequeñas.
- No se puede utilizar en muestras muy aislantes.
- Información solo superficial

## Espectroradiómetro

Aparato, compuesto de monocromador, detector, y sistema de monitorización, diseñado para medir la longitud de onda de la radiación ultravioleta. En PECAS, necesitamos de un espectroradiómetro para estudiar los efectos de la radiación ultravioleta (simulación del SOL), sobre muestras de interés astrobiológico, en transmisión y en refracción.



### Monocromador

Es un seleccionador y separador de la radiación, para distintas longitudes de onda, para ello utiliza o prismas o redes de difracción. Los más comunes, usan redes de difracción. Esto es así ya que cuando la radiación pasa a través de un prisma se ve alterada, especialmente la ultravioleta. Además un prisma no puede ser modificado, mientras que en una red, el paso de líneas determina el factor de dispersión como:

$$\sin q = n \lambda / 2d$$

q: dispersión angular;  $\lambda$ : longitud de onda; d: separación de líneas; n: orden de dispersión

Por tanto, a más líneas, mas resolución. Para UV, las redes suelen tener 2400 líneas/mm, para 250nm.

Por último, la dispersión angular de un prisma no es lineal, especialmente los extremos del espectro, donde la radiación, llega a coincidir con los bordes del prisma

En el LSAP, contamos con un monocromador doble, que utiliza para separar las longitudes de onda, redes de difracción.

### Detector

Se usa para medir el rango de longitudes de onda y la sensibilidad. los detectores se engloban en tres grupos:

- Foto emisión (foto multiplicadores)
- Semiconductores (células semiconductoras)
- Térmicos (Termo pila)

Cada tipo de detector a su vez tiene multitud de modos de operación.

El Espectro radiómetro del LSAP, utiliza un detector foto multiplicador: Este dispositivo, está compuesto de foto cátodo, multiplicador de electrones y un ánodo conector. Se trata por tanto de un dispositivo fotoeléctrico, con un dispositivo interno de amplificación. El foto cátodo genera electrones, a partir de los fotones incidentes, como todo foto cátodo presenta un ritmo de emisión termoiónica en ausencia de radiación incidente que será función de la temperatura que condicionara el valor de ruido y la sensibilidad del dispositivo. Su aspecto térmico permite, enfriando el foto cátodo, reducir el valor de la emisión termoiónica.

**Ventana de entrada:** las características de la ventana de entrada, determinan el espectro radiante que realmente alcanza el foto cátodo.

**Cadena de dinodos:** La multiplicación de los electrones que salen del foto cátodo se realiza mediante una serie de dinodos colocados cada uno de ellos a un potencial positivo respecto al anterior. En cada dinodo los electrones incidentes producen emisión secundaria, consiguiendo así la multiplicación de los electrones. Las características fundamentales son: ganancia, linealidad, y velocidad de respuesta, que dependerán del material y del diseño de dinodos.