




Espectrometría óptica

Noelia Canda Pazos, 1ºA



Espectroscopia: técnica de análisis (interacción luz-materia) que proporciona información tanto cualitativa como cuantitativa de una sustancia bajo estudio. El análisis de la luz que es absorbida, emitida, dispersada o reflejada permite recibir información sobre la constitución interna de la sustancia que estudiemos y sobre su cantidad.

- **W. HERSCHEL:** descubre en 1800 una luz invisible al ojo humano pero detectable por su calor, que conocemos como **luz infrarroja (IR)**.
- **J. RITTER:** encuentra otra radiación, en 1801, que no producía calor, pero podía ennegrecer el AgCl, la **luz ultravioleta (UV)**.
- **MAXWELL y HERTZ:** demuestran que las ondas luminosas no son ondas materiales, sino ondas **electromagnéticas**, sobre 1870. A partir de este estudio se descubrieron otros tipos de radiaciones: **microondas**, **rayos X** y **rayos gamma**.

Frecuencia de onda (f): n° de oscilaciones que la onda realiza por unidad de tiempo por el medio en que se mueve. La unidad de frecuencia del SI es el **hercio (Hz)**.

$$f=1/T$$



Tipos de espectroscopia

- Espectroscopia de fluorescencia
- **Espectroscopia de rayos X**
- Espectroscopia de llama
- **Espectroscopia atómica**
- Espectroscopia de emisión de plasma
- Espectroscopia de chispa
- **Espectroscopia de masas**
- Espectroscopia visible
- **Espectroscopia Raman**
- **Espectroscopia ultravioleta**
- **Espectroscopia infrarroja**
- **Espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN)**
- Espectroscopia de fotoemisión
- **Espectroscopia Mössbauer**



Espectroscopia de rayos X

Abarca todas las técnicas espectroscópicas que determinan la estructura electrónica de los materiales mediante excitación por **rayos X**. Se utiliza especialmente para determinar las estructuras cristalinas y muestras sólidas.

La absorción, emisión, fluorescencia y dispersión de los rayos X se utilizan en varias técnicas que nos dan información sobre la estructura y composición de la materia:

- La **fluorescencia** nos aporta información sobre la superficie de la muestra.
- **Emisión electrónica Auger**.

Espectroscopia atómica

Método instrumental de la química analítica que permite medir las concentraciones específicas de un material en una mezcla y determinar una gran variedad de elementos.

Se utiliza para determinar la concentración de un elemento particular en una muestra y determinar más de 70 elementos diferentes en solución o directamente en muestras sólidas utilizadas en farmacología, biofísica o investigación toxicológica.



Espectrometría de masas

Técnica de análisis que permite determinar la distribución de las **moléculas** de una sustancia en función de su masa.

El **espectrómetro de masas** es un dispositivo que permite analizar con gran precisión la composición de diferentes elementos químicos e isótopos atómicos, separando los núcleos atómicos en función de su relación entre **masa y carga (m/z)**. Puede utilizarse para identificar los diferentes elementos químicos que forman un compuesto o determinar el contenido isotópico de diferentes elementos en un mismo compuesto.

Espectroscopia Raman

Técnica usada en **química y física de la materia conservada** para estudiar modos de baja frecuencia como los vibratorios, rotatorios, y otros.

Se basa en los fenómenos de dispersión inelásticas de la luz monocromática, generalmente de un láser en el rango de luz visible, infrarrojo cercano o ultravioleta cercano. La luz láser interactúa con fonones u otras excitaciones en el sistema, provocando que la energía de los fotones del láser experimente un desplazamiento hacia arriba o hacia abajo.



Espectroscopia ultravioleta

Es una espectroscopia de emisión de fotones. Utiliza radiación electromagnética de las regiones **visible, ultravioleta cercana e infrarroja cercana** del espectro electromagnético.

Se utiliza para identificar grupos funcionales de moléculas y determinar el contenido y fuerza de una sustancia. Generalmente se usa en la determinación cuantitativa de componentes de soluciones de iones de metales de transición y compuestos orgánicos altamente conjugados. Se utiliza extensivamente en **laboratorios de química y bioquímica** para determinar pequeñas cantidades de cierta sustancia.

Espectroscopia infrarroja

Conjunto de técnicas, siendo la más común una forma de **espectroscopia de absorción**. Puede usarse para identificar un compuesto e investigar la composición de una muestra. Se divide en:

- **Espectroscopia de infrarrojo cercano**
- **Espectroscopia de infrarrojo medio**
- **Espectroscopia de infrarrojo lejano**

Es usada en investigación y en la industria como una simple y confiable práctica para realizar mediciones, control de calidad y mediciones dinámicas.



Resonancia Magnética Nuclear

Empleada principalmente en la elucidación de estructuras moleculares, aunque también se puede usar con fines cuantitativos y en estudios cinéticos y termodinámicos.

Algunos núcleos atómicos sometidos a un campo magnético externo absorben radiación electromagnética en la región de las **frecuencias de radio**. Como la frecuencia exacta de esta absorción depende del entorno de estos núcleos, se puede emplear para determinar la estructura de la molécula en donde se encuentran. Para que se pueda emplear los núcleos deben tener un momento magnético distinto de 0.

Espectroscopia Mössbauer

Se basea en la absorción resonante y emisión de **rayos gamma** en sólidos. Es similar a la espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear en que sondea transiciones nucleares y así ser sensible a las interacciones **electrón-núcleo** que causa el **desplazamiento químico RMN**.

Debido a la alta energía y a los estrechos anchos de línea de los rayos gamma, es una de las técnicas más sensibles en términos de resolución de energía con capacidad de detectar cambios de apenas algunas partes por 10^{11}