

Características gerais dos métodos espectroscópicos

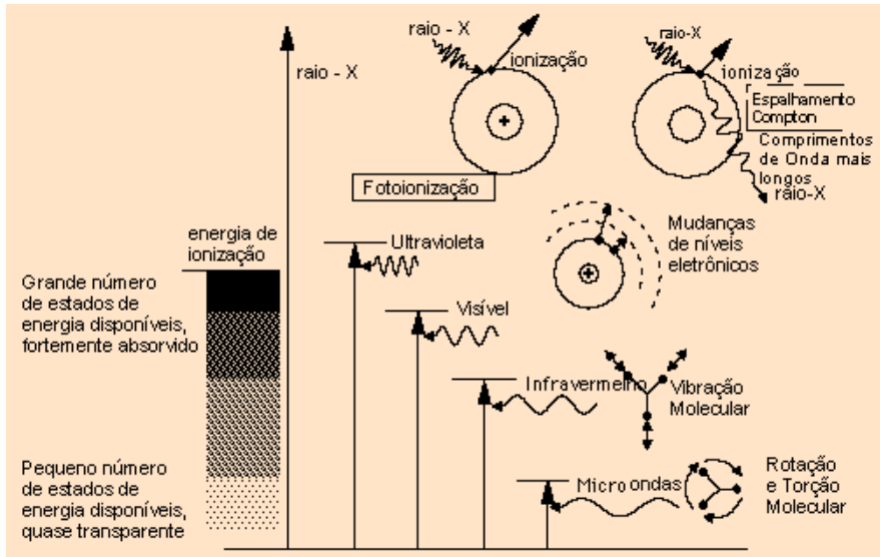
Belarmino Matsinhe

August 16, 2023



- 1 Mecanismos de interacção radiação-matéria;
- 2 Quantificação de energia;
- 3 Transições energéticas;
- 4 Sinais espectrais;
- 5 Análise espectral.

Interação da radiação electromagnética com a matéria



Simulação da interação da radiação não ionizante

Acesse aqui

[https://phet.colorado.edu/pt_BR/simulations/
molecules-and-light](https://phet.colorado.edu/pt_BR/simulations/molecules-and-light)

Interacção da radiação electromagnética com a matéria

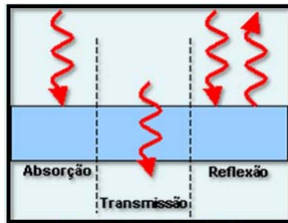


Figure: Mecanismos de interacção da radiação com a matéria

Interacção da radiação electromagnética com a matéria



O que realmente, interage com a matéria?

Interacção da radiação electromagnética com a matéria

As propriedades ondulatórias correspondem às variações dos campos eléctricos e magnéticos. São estes **campos eléctricos e magnéticos**, responsáveis pela interacção com a matéria, resultando num espectro. Este espectro, nos revela a estrutura da matéria irradiada.

Aproximação de Born-Openheimer

$$E = E_{rot} + E_{vib} + E_{ele} + \quad (1)$$

Condição de ressonância: Equação de Planck

$$\Delta E = h\nu \quad (2)$$

Condição de absorção: lei de Beer-Lambert

$$A = \varepsilon Cd \quad (3)$$

Onde; "d" [cm], "C" [mol/litro] ou [M], e "ε" [litros/(mol.cm)].

São previsões da Mecânica quântica que determinam quais níveis de energia de um sistema atómico ou molecular irão participar de uma transição espectral (de um nível para o outro).

Probabilidade de transição

$$P(\alpha) = g(\alpha)e^{-\left(\frac{E_{\alpha}}{kT}\right)} \quad (4)$$

$$P(\beta) = g(\beta)e^{-\left(\frac{E_{\beta}}{kT}\right)} \quad (5)$$

Lei de distribuição de partículas de Boltzmann

$$\frac{N_{\beta}}{N_{\alpha}} = g(\alpha + 1)e^{-\left(\frac{\Delta E}{kT}\right)} \quad (6)$$

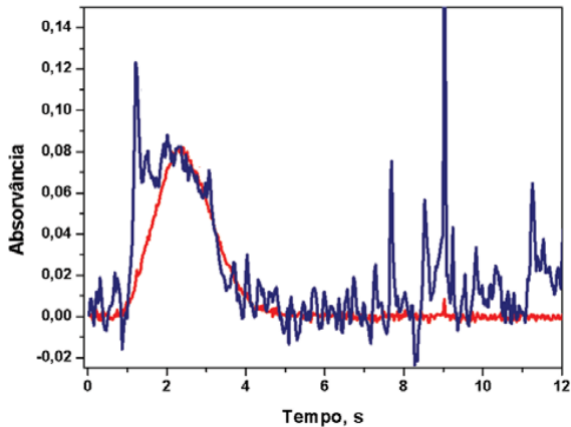


Figure: Sinal-Ruído



O que causa o ruído espectral?

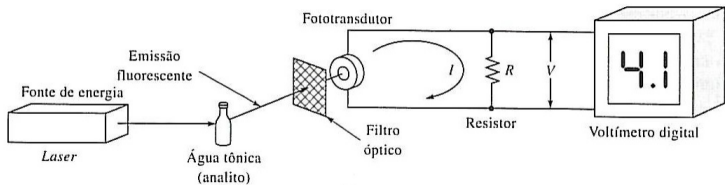
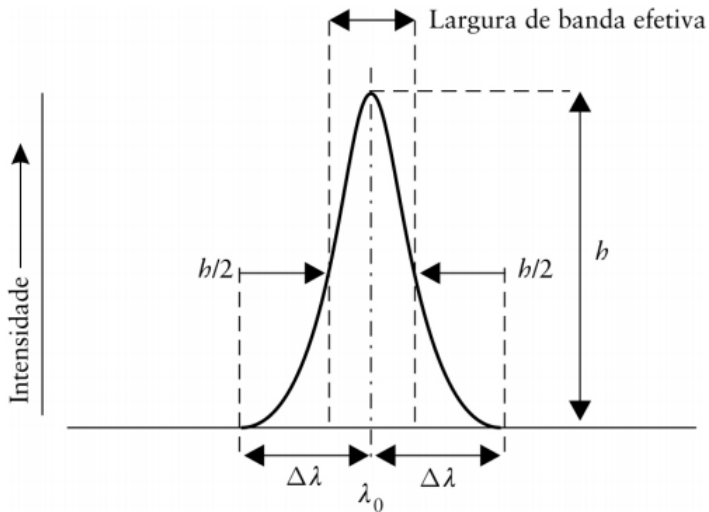


Figure: Diagrama dos componentes de um espectrômetro

Poder de resolução

Em espectroscopia é definido pelo número de linhas espectrais e pela amplitude do intervalo de frequências ou comprimento de onda de cada banda.

Sinal espectral: Poder de resolução



Poder de resolução

$$R = \frac{F_{wHM}}{\lambda} \quad (7)$$

Poder de resolução: Largura espectral

$$\Delta\nu = \frac{32\pi^3\nu^3}{(4\pi\epsilon_0)3hc^3}|R_{\alpha,\beta}|^2 \quad (8)$$

Factores que influenciam o Poder de resolução

- Efeito Doppler;
- Interação entre moléculas;
- Intensidade dos campos electromagnéticos (Efeito Zeeman ou Stark).

Intensidade do sinal espectral

- A probabilidade de transição;
- A população atómica dos estados energéticos;
- A concentração da amostra.



Como um sinal espectral é Processado?

Como podemos saber em que intervalos de frequência se concentra a energia do sinal eléctrico transduzido pelo fototransdutor?

Processamento do sinal

- Medição (obtenção do sinal);
- Identificação;
- Descrição;
- Análise espectral.

Processamento do sinal

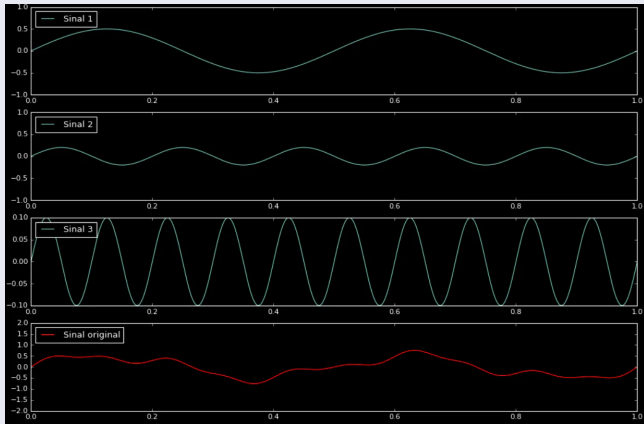


Figure: Formação de um sinal

Transformada Rápida de Fourier (FFT- Fast Fourier Transform)

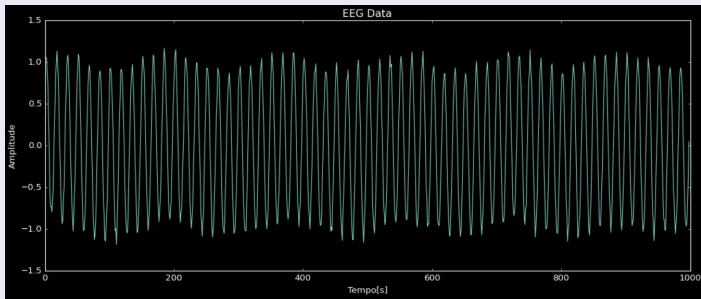


Figure: Sinal no domínio do Tempo

Transformada Rápida de Fourier (FFT- Fast Fourier Transform)

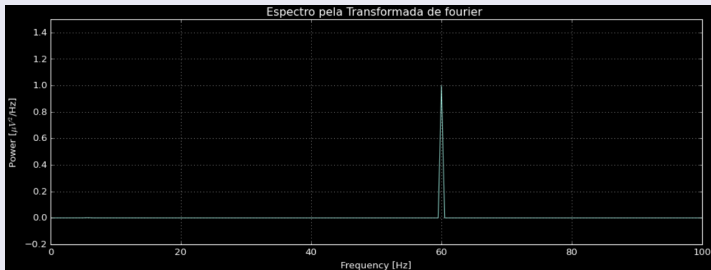


Figure: Sinal no domínio de frequências

Transformada Rápida de Fourier (FFT- Fast Fourier Transform)

$$h(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} H(\omega) e^{i\omega t} d\omega = F[H(\omega)] \quad (9)$$

A sua inversa será:

$$H(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(t) e^{-i\omega t} dt = F^{-1}[h(t)] \quad (10)$$

Manipulação espectral



Figure: efeitos da filtragem de frequências

Processamento do sinal

- Convolução de sinais;
- Correlação de sinal.

Processamento do sinal

- Convolução de sinais

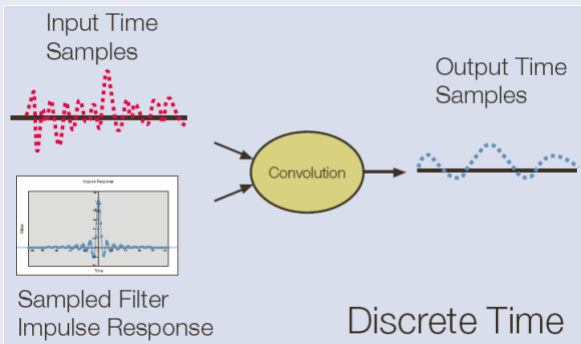


Figure: Filtragem de frequências

Processamento do sinal

- Convolução de sinais

A convolução de dois sinais, $g(t)$ e $x(t)$ é definido como:

$$g(t) \cdot x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\tau) x(t - \tau) d\tau \quad (11)$$

Processamento do sinal

- Convolução de sinais

Calcular a função convolução, $y(t)$, de dois sinais descritos por:

$$x(t) = u(t) - u(t - 1)$$

$$h(t) = (t - 1)[u(t - 1) - u(t - 3)]$$

Processamento do sinal

- Correlação de sinal

A correlação cruzada de dois sinais, $g(t)$ e $h(t)$ é definido como:

$$g(t) \times h(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g^*(\tau)x(t+\tau)d\tau \quad (12)$$

$$g(t) \times h(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g^*(\tau-t)x(\tau)d\tau \quad (13)$$

As imagens foram retiradas em:

- 1 Imagens sobre transformadas de Fourier

<https://www.brainlatam.com/blog/analise-espectral-e-transformada-de-fourier-em-processamento-de-sinal-de-eeg-4248>

- 2 Outras imagens: Carecem de fontes e não pertencem ao autor desta aula

**Quando era criança
também havia DRONES**



**Este foi o primeiro
que vi a voar...**

Se isso influenciou na aprendizagem, não sei!!!
Mas, podemos testar contigo.