

ESTIMATION OF SURFACE-ENHANCED RAMAN SPECTROSCOPY (SERS) ENHANCEMENT FACTOR

Autores

Edgar Guevara, Francisco Javier González

Descripción

El programa *Estimation of surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) enhancement factor* (Estimación del factor de amplificación de espectroscopía Raman amplificada en superficie) se usa para calcular el factor de amplificación (Childs, Vinogradova, Ruiz-Zepeda, Velazquez-Salazar, & Jose-Yacaman, 2016) al añadir nanopartículas a la muestra, a fin de lograr un incremento en la intensidad del espectro Raman. El programa se desarrolló mediante el ambiente de programación MATLAB (The MathWorks, Natick, MA, USA). Dicho programa consta de los siguientes archivos:

README.md	Archivo de presentación del programa
SERS_data_example.mat	Archivo con datos de ejemplo
sers_enhancement_factor.m	Función que realiza la estimación del factor de amplificación
sers_help.pdf	Archivo con instrucciones de uso
SERS_screenshot.png	Imagen de ejemplo de resultado
sers_enhancement_factor_script.m	Script de ejemplo, para mostrar el funcionamiento del programa

Instrucciones

A continuación, se detallan los pasos a seguir para un uso correcto del programa de cómputo, mostrando también resultados de un ejemplo de uso.

SINTAXIS

[EF, paramStruct] = sers_enhancement_factor(waveNumber, ramanSpectrum, SERSspectrum);

Entradas

Requeridas

waveNumber	Vector de corrimiento Raman (cm^{-1})
ramanSpectrum	Espectro Raman normalizado (a.u.)
SERSspectrum	Espectro SERS normalizado (a.u.)

Los parámetros anteriores que son obligatorios, pueden seguirse de pares nombre/valor para especificar variables adicionales en los cálculos.

[Opcionales]

band: Banda Raman de interés (cm^{-1})

lambda: Longitud de onda del láser de excitación (nm)

molWeight: Peso molecular de la sustancia bajo prueba (g/mol)

NA: Apertura numérica del objetivo

rho: Densidad de la molécula bajo prueba (g/cm^3)

surfArea: Área superficial de la molécula bajo prueba (nm^2)

showPlot: Señala si se debe desplegar una gráfica de los espectros y el factor de amplificación

Salidas

Requeridas

EF factor de amplificación SERS

[Opcionales]

paramStruct Estructura que contiene los siguientes parámetros:

band: Banda Raman de interés (cm^{-1})

Inormal: Intensidad del espectro Raman normal en una banda dada (a.u.)

ISERS: Intensidad del espectro SERS en una banda dada (a.u.)

lambda: Longitud de onda del láser de excitación (nm)

molWeight: Peso molecular de la sustancia bajo prueba (g/mol)

NA: Apertura numérica del objetivo

Nnormal: Número de moléculas excitadas en Raman normal

NSERS: Número de moléculas excitadas en SERS

ramanSpectrum: Espectro Raman normal (a.u.)

rho: Densidad de la molécula bajo prueba (g/cm^3)

SERSspectrum: Espectro SERS (a.u.)

surfArea: Área superficial de la molécula bajo prueba (nm^2)

showPlot: Señala si se ha desplegado una gráfica de los espectros y el factor de amplificación

waveNumber: Vector de corrimiento Raman (cm^{-1})

r: Radio del haz de impacto del láser (m)

h: Profundidad de foco (m)

volExc: volumen de excitación (m^3)

La estimación del factor de amplificación de espectroscopía Raman amplificada en superficie se basa en el artículo científico de Childs et al. (Childs et al., 2016).

EJEMPLO DE USO DEL PROGRAMA

El usuario teclea el siguiente comando en la interfaz de MATLAB:

sers_enhancement_factor_script

El programa guardará los resultados en las dos variables siguientes, a disposición del usuario:

EF = 1.6138e+07

paramStruct

band: 1.1616e+03

Inormal: 4.5388

ISERS: 363.8396

lambda: 570

molWeight: 550

NA: 0.2500

Nnormal: 1.5284e+11

NSERS: 7.5920e+05

ramanSpectrum: [1357x1 double]

rho: 1.2600

SERSspectrum: [1357x1 double]

showPlot: 1

surfArea: 8

`waveNumber: [1357x1 double]`

`h: 1.8240e-05`

`r: 1.3904e-06`

`volExc: 1.1078e-16`

Opcionalmente el programa hace su función desplegando los resultados en forma gráfica, como se muestra en la Ilustración 1. Asimismo, los resultados se guardan en cuatro variables disponibles para el usuario:

El presente programa de cómputo se dio a conocer el 17 de febrero de 2017 en la dirección web <https://github.com/guevaracodina/sers>

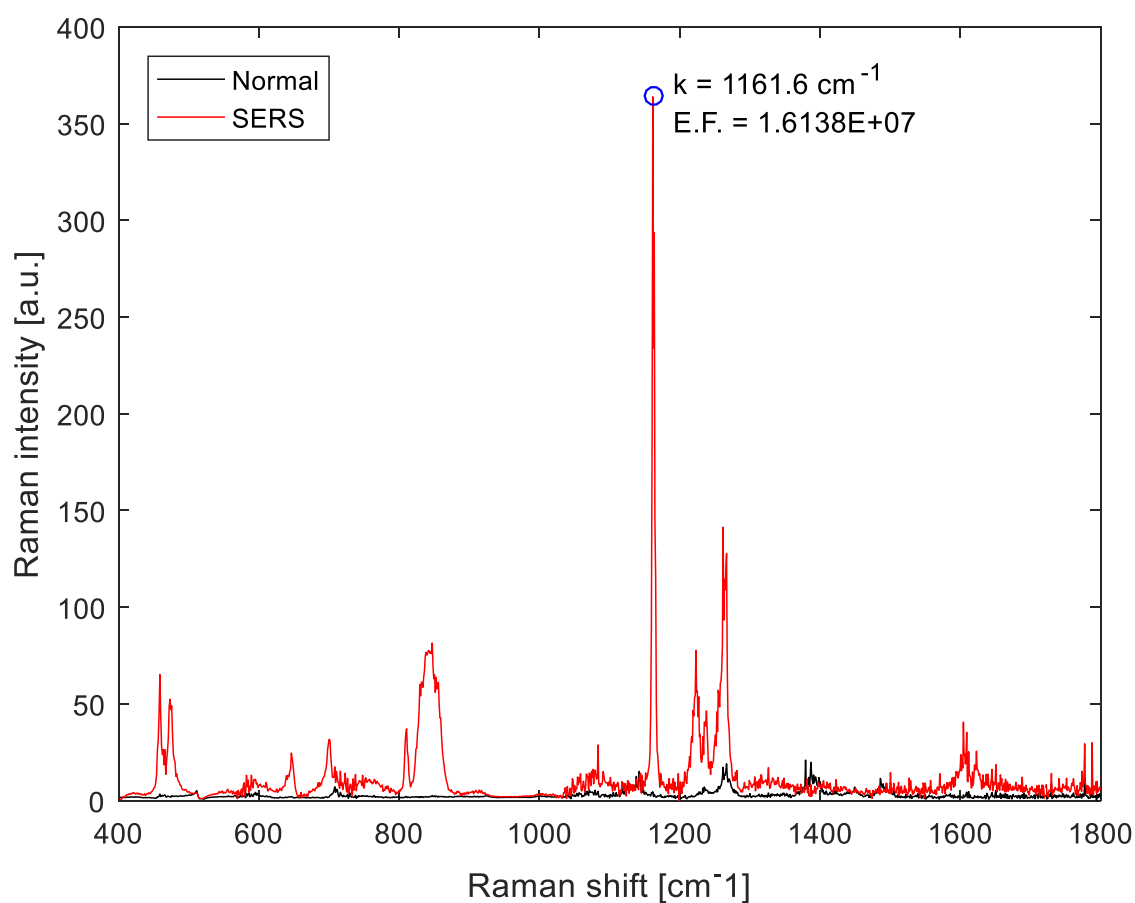


Ilustración 1: Resultado del algoritmo de remoción de la señal de auto-fluorescencia de un espectro Raman

Si, en cambio el usuario ingresa:

`sers_enhancement_factor(waveNumber,ramanSpectrum, SERSspectrum,'band',1262)`

el programa estimará el factor de amplificación en la banda más cercana a 1262 cm⁻¹.

NOTAS

El programa acepta datos del espectrómetro en formato nativo de MATLAB, vectores columna, siendo el primero el vector de corrimiento Raman, el segundo la intensidad Raman registrada por el instrumento sin amplificación y el tercero el espectro Raman obtenido con amplificación de superficies (SERS), por ejemplo:

401.867000000000	1.60174376400000	0.590364358000000
403.085000000000	1.66098868000000	0.674085984000000
404.302000000000	1.60062862500000	0.707839698000000
...
1797.800000000000	1.82337422500000	5.43428345200000
1798.680000000000	3.49657946100000	6.94648650900000
1799.560000000000	1.79188465200000	5.27833716700000

Referencias

Childs, A., Vinogradova, E., Ruiz-Zepeda, F., Velazquez-Salazar, J. J., & Jose-Yacaman, M. (2016).

Biocompatible gold/silver nanostars for surface-enhanced Raman scattering. *Journal of Raman*

Spectroscopy, 47(6), 651–655. <https://doi.org/10.1002/jrs.4888>