

Espectroscopia Raman

Edmur C. Neto - 12558492
Rafael F. Gigante - 12610500

Instituto de Física de São Carlos
Universidade de São Paulo

06/03/2024



UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

INTRODUÇÃO

- Predito teoricamente por A. Smekal em 1923, observado e interpretado corretamente por C. V. Raman em 1928;
- Experimento de Raman com filtros;

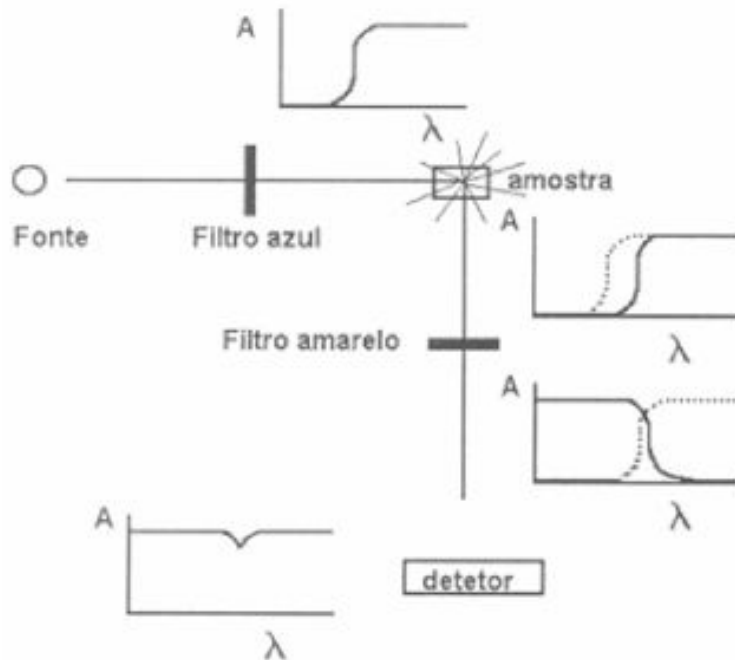


Figura 2. Experimento com filtros realizado por Raman



Figura 1. A. Smekal e C. V. Raman

INTRODUÇÃO

- Colisões entre Fótons e Matéria (Rayleigh, Stokes, Anti-Stokes)
- Propriedade das Intensidades das Colisões

$$\nu_{\text{espectro}} = \nu_{\text{incidente}} + \nu_{\text{vibracional}}$$

$$\nu_{\text{espectro}} = \nu_{\text{incidente}} - \nu_{\text{vibracional}}$$

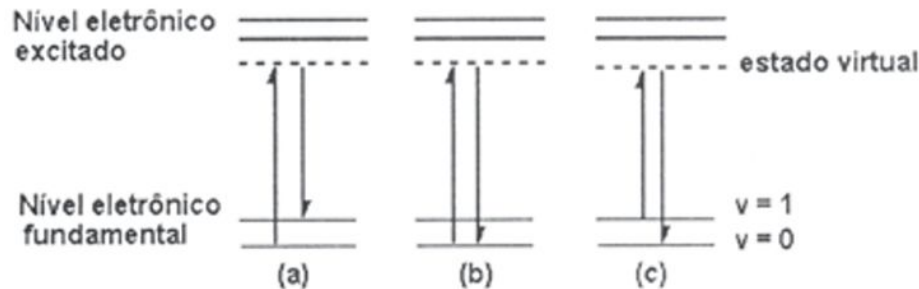


Figura 3. Espalhamento de luz: (a) espalhamento inelástico (região Stokes); (b) espalhamento elástico (Rayleigh); (c) espalhamento inelástico (região anti-Stokes)

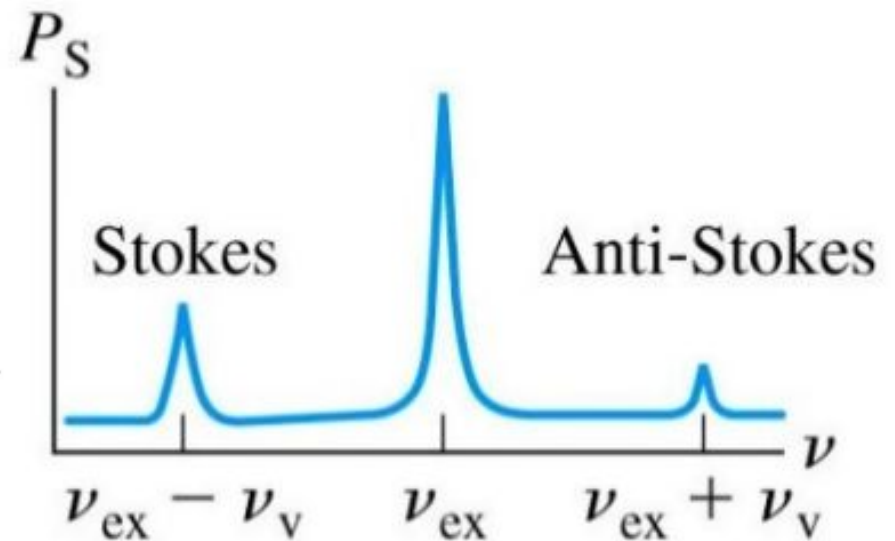


Figura 4. Representação gráfica das frequências Stokes e Anti-Stokes.

INTRODUÇÃO

➤ Regras de Seleção de Espectroscopia Raman:

- 1) A molécula deve ter um dipolo induzido se submetida a um campo elétrico;
- 2) A molécula deve ir para o próximo estado vibracional ao qual se encontra.

$$\overrightarrow{\mu_{f,i}} = \langle v_f | \alpha(x) | v_i \rangle \mathbf{E}$$

$$\overrightarrow{\mu_{f,i}} = \left[\alpha(0) \langle v_f | v_i \rangle + \left(\frac{d\alpha}{dx} \right)_0 \langle v_f | x | v_i \rangle + \dots \right] \mathbf{E}$$

$$\left(\frac{d\alpha}{dx} \right)_0 \neq 0 \text{ pois } \langle v_f | v_i \rangle = 0 \text{ para } f \neq i$$

$$\langle v_f | x | v_i \rangle \neq 0 \therefore v_f - v_i = \pm 1$$

INTRODUÇÃO

3500 - 3300 cm^{-1}	Elongação N-H	Aminas primárias e secundárias
3500 - 3200 cm^{-1}	Elongação O-H	Álcoois (banda forte e larga)
3300 - 2500 cm^{-1}	Elongação O-H	Ácidos (banda larga sobreposta com a banda de elongação C-H)
$\approx 3300 \text{ cm}^{-1}$	Elongação C-H	Alcinos
3100 - 3000 cm^{-1}	Elongação C-H	Alcenos e aromáticos
3000 - 2850 cm^{-1}	Elongação C-H	Alcanos
2840 - 2690 cm^{-1}	Elongação C - H	Aldeídos
2250 - 2100 cm^{-1}	Elongação $\text{C} \equiv \text{C}$	Alcinos
1760 - 1665 cm^{-1}	Elongação $\text{C}=\text{O}$	Cetonas, aldeídos, ésteres e ácidos
1680 - 1630 cm^{-1}	Elongação $\text{C} = \text{C}$	Alcenos
1600 - 1500 cm^{-1}	Elongação $\text{C} = \text{C}$ (anel)	Aromáticos
1300 - 970 cm^{-1}	Elongação C - O	Álcoois, ésteres e ácidos
1250 - 1000 cm^{-1}	Elongação C - N	Aminas
1600 - 1300 cm^{-1}	Elongação N - O	Compostos nitroílo

Tabela 1. Frequências conhecidas de vibrações de diversas ligações químicas



OBJETIVOS

- Familiarizar-se com os conceitos de espectroscopia vibracional das moléculas;
- Identificar a composição das substâncias submetidas ao experimento de Espectroscopia Raman;
- Qualificar as melhores configurações dos instrumentos e disposições do ambiente.

EXPERIMENTO

- Será utilizado um Fluorímetro e uma Fonte de Luz (Laser ou Lâmpada);
- Calibração do Fluorímetro;
- Preparo de amostras (solventes incolores);
- Aplicação do fluorímetro com variados diâmetros do “slit” e variadas velocidades de varredura;
- Leitura e Carregamento dos dados com o Software;
- Análise dos dados utilizando o Origin.

EXPERIMENTO

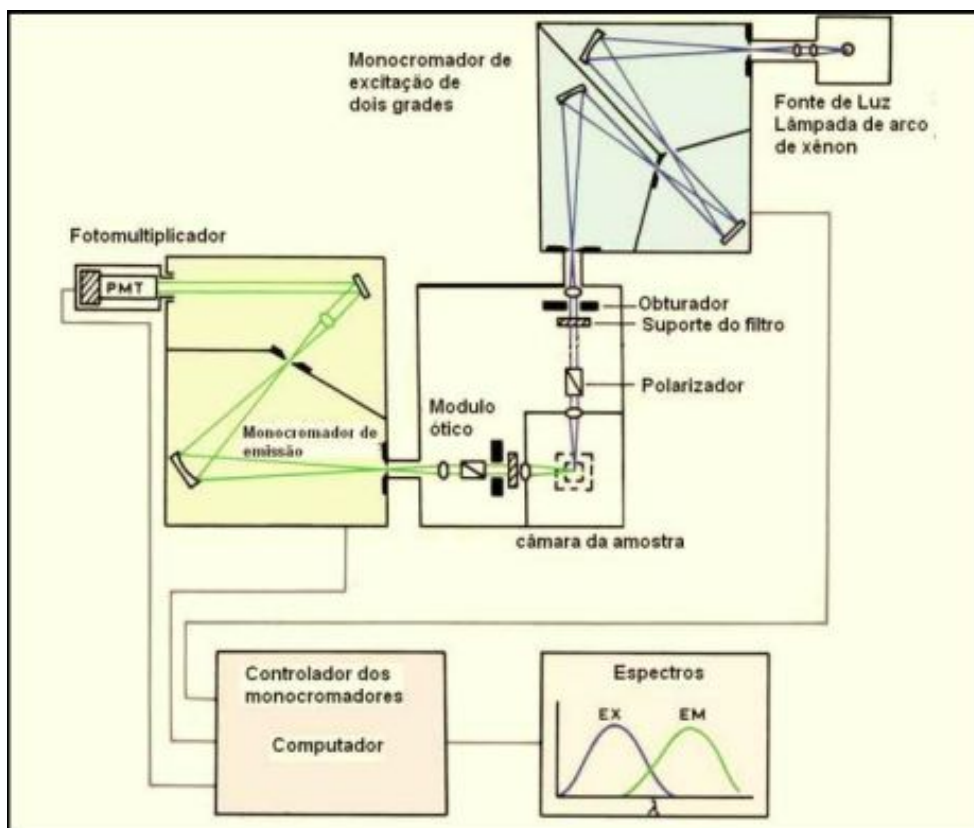


Figura 5. Representação esquemática de um fluorímetro comercial.



Figura 6. Fluorímetro LS-50B que será utilizado na prática.

EXPERIMENTO

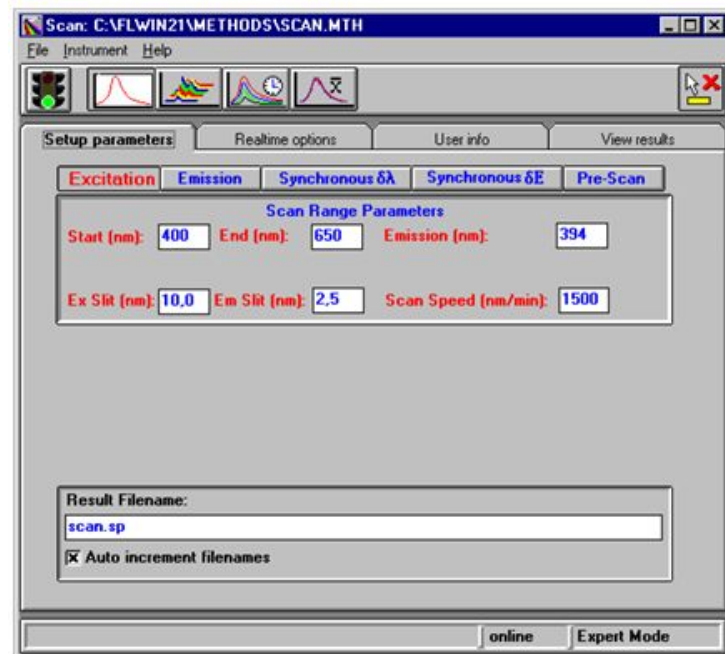
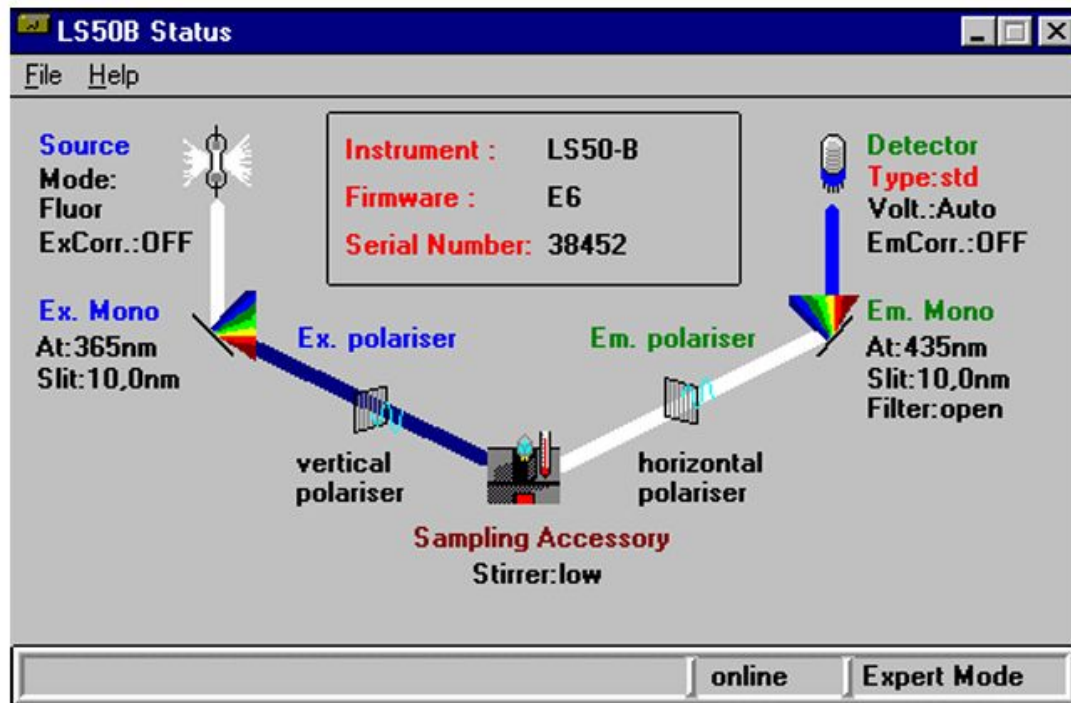


Figura 7. Capturas de tela do software que será utilizado na prática.

RESULTADOS ESPERADOS

- Com os dados coletados, esperamos gerar os seguintes gráficos:

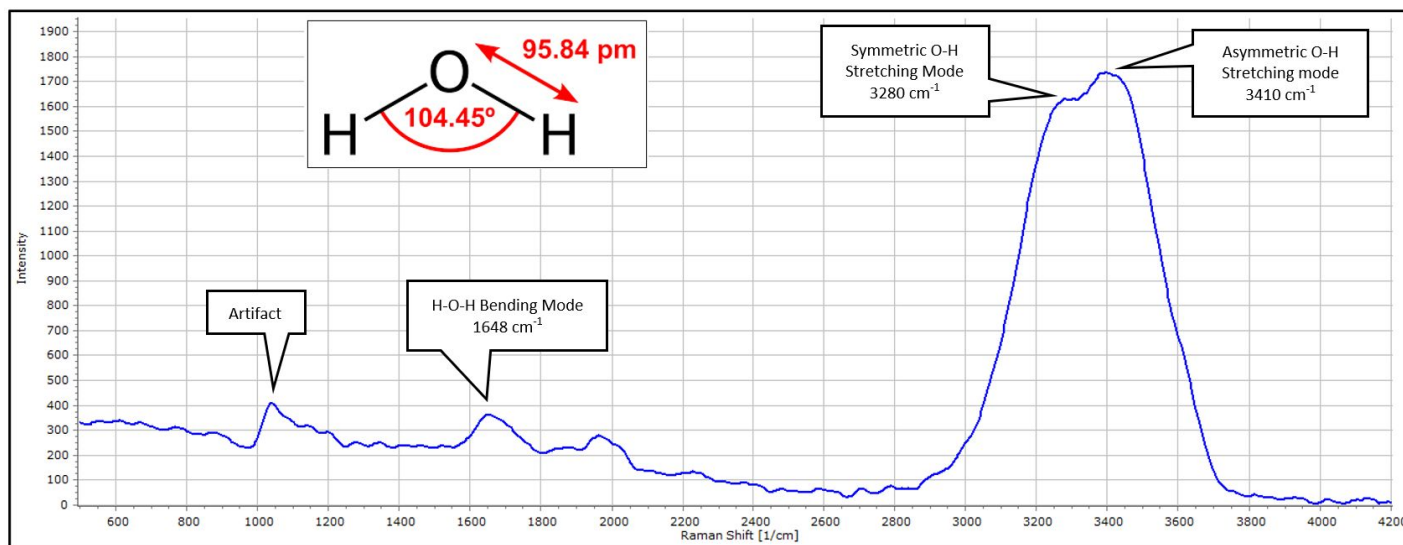
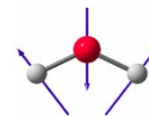


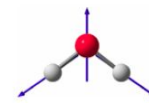
Figura 8. Gráfico esperado pela análise de espectroscopia Raman em uma amostra de água pura.

gas-phase water

bend
1595 cm^{-1}



symmetric stretch
3657 cm^{-1}



antisymmetric stretch
3756 cm^{-1}

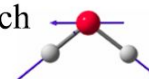


Figura 9: Possíveis vibrações da molécula de Água.

RESULTADOS ESPERADOS

- Com os dados coletados, esperamos gerar os seguintes gráficos:

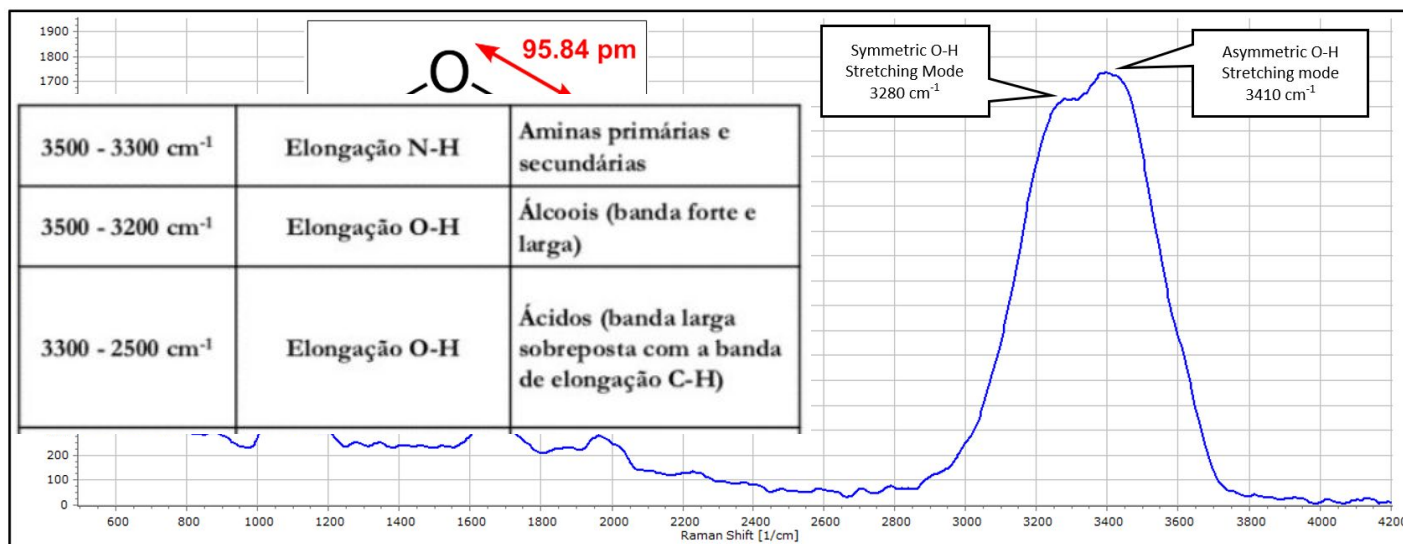


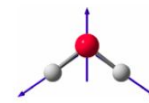
Figura 8. Gráfico esperado pela análise de espectroscopia Raman em uma amostra de água pura.

gas-phase water

bend
1595 cm⁻¹



symmetric stretch
3657 cm⁻¹



antisymmetric stretch
3756 cm⁻¹

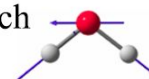


Figura 9: Possíveis vibrações da molécula de Água.

RESULTADOS ESPERADOS

- Com os dados coletados, esperamos gerar os seguintes gráficos:

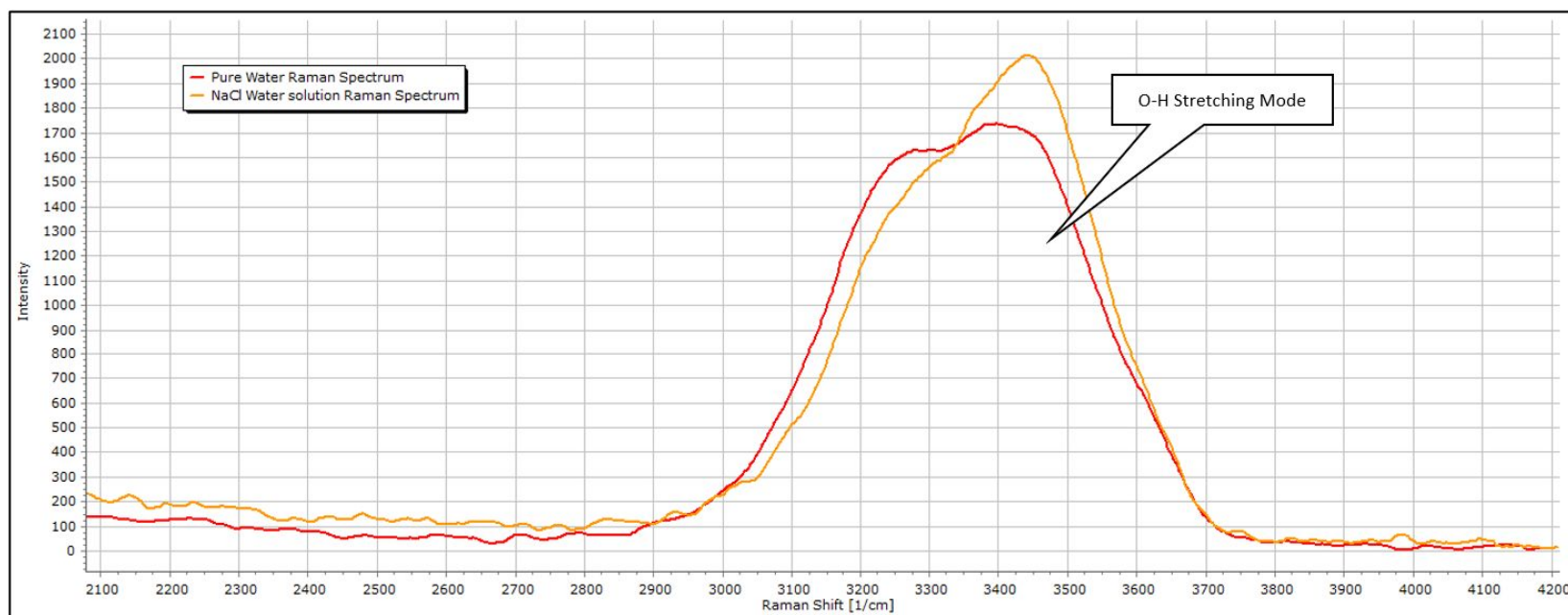


Figura 9. Gráfico esperado pela análise de espectroscopia Raman de uma solução de água e NaCl (laranja) comparado com o espectro de uma amostra de água pura (vermelho).

RESULTADOS ESPERADOS

- Com os dados coletados, esperamos gerar os seguintes gráficos:

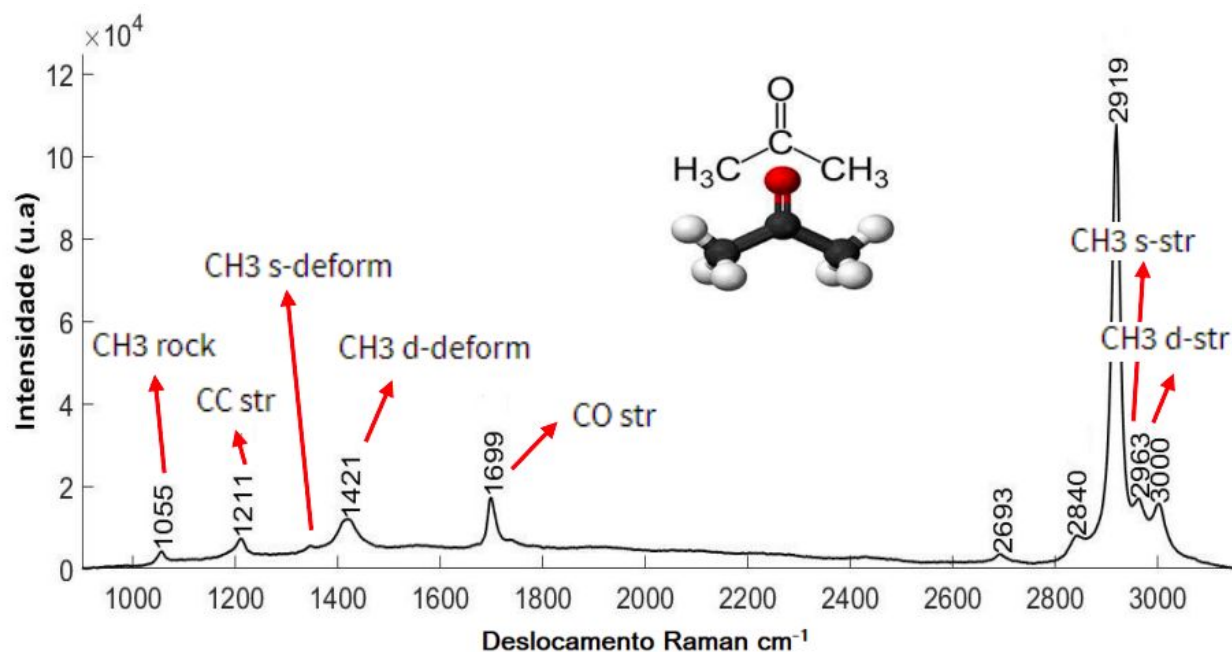


Figura 10. Gráfico esperado pela análise de espectroscopia Raman em uma amostra de acetona (CH_3COCH_3).

REFERÊNCIAS

Lady Katherine Soto Gómez. "Desenvolvimento e aplicações da técnica espectroscopia Raman anti-Stokes coerente multiplex". [Online] Disponível em: [\[https://repositorio.ufmg.br/bitstream/1843/49992/1/diserta%C3%A7%C3%A3o_lady%20katherine%20soto.pdf\]](https://repositorio.ufmg.br/bitstream/1843/49992/1/diserta%C3%A7%C3%A3o_lady%20katherine%20soto.pdf). Acesso em 28 de fevereiro de 2024.

"Espectroscopia Raman". [Online] Disponível em: [\[https://www.ifsc.usp.br/~lavfis/lavfiswp/wp-content/uploads/2023/04/Espectroscopia-Raman.pdf\]](https://www.ifsc.usp.br/~lavfis/lavfiswp/wp-content/uploads/2023/04/Espectroscopia-Raman.pdf) Acesso em: 28 de fevereiro de 2024.

"Water Molecule Vibrations with Raman Spectroscopy". [Online] Disponível em: <https://physicsopenlab.org/2022/01/08/water-molecule-vibrations-with-raman-spectroscopy/>. Acesso em 29 de fevereiro de 2024.

Emiliane Gerbasi Ricci. "APLICAÇÃO DO MÉTODO DE ANÁLISE DOS COMPONENTES PRINCIPAIS E ESPECTROSCOPIA RAMAN PARA A AVALIAÇÃO DA MISTURA DE ETANOL-METANOL". [Online] Disponível em: [\[https://repositorio.unicid.edu.br/jspui/bitstream/123456789/815/1/Emiliane%20Gerbasi%20Ricci.pdf\]](https://repositorio.unicid.edu.br/jspui/bitstream/123456789/815/1/Emiliane%20Gerbasi%20Ricci.pdf) Acesso em 29 de fevereiro de 2024.

Prof. Dr. José Pedro Donoso. "SFI 5800 Espectroscopia Física Simetria e Teoria de Grupos". [Online] Disponível em: [\[https://www.ifsc.usp.br/~donoso/espectroscopia/Simetria.pdf\]](https://www.ifsc.usp.br/~donoso/espectroscopia/Simetria.pdf). Acesso em 29 de fevereiro de 2024.

Andreas W. Momber. "The 50th anniversary of the death of Adolf Gustav Smekal (1895–1959), a pioneer in materials physics". [Online] Disponível em: [\[https://link.springer.com/article/10.1007/s10853-009-3996-4\]](https://link.springer.com/article/10.1007/s10853-009-3996-4). Acesso em 29 de Fevereiro de 2024.