

Espectroscopía Raman Intensificada por superficies: SERS

Dr. M^a Vega Cañamares
Instituto de Estructura de la Materia. CSIC

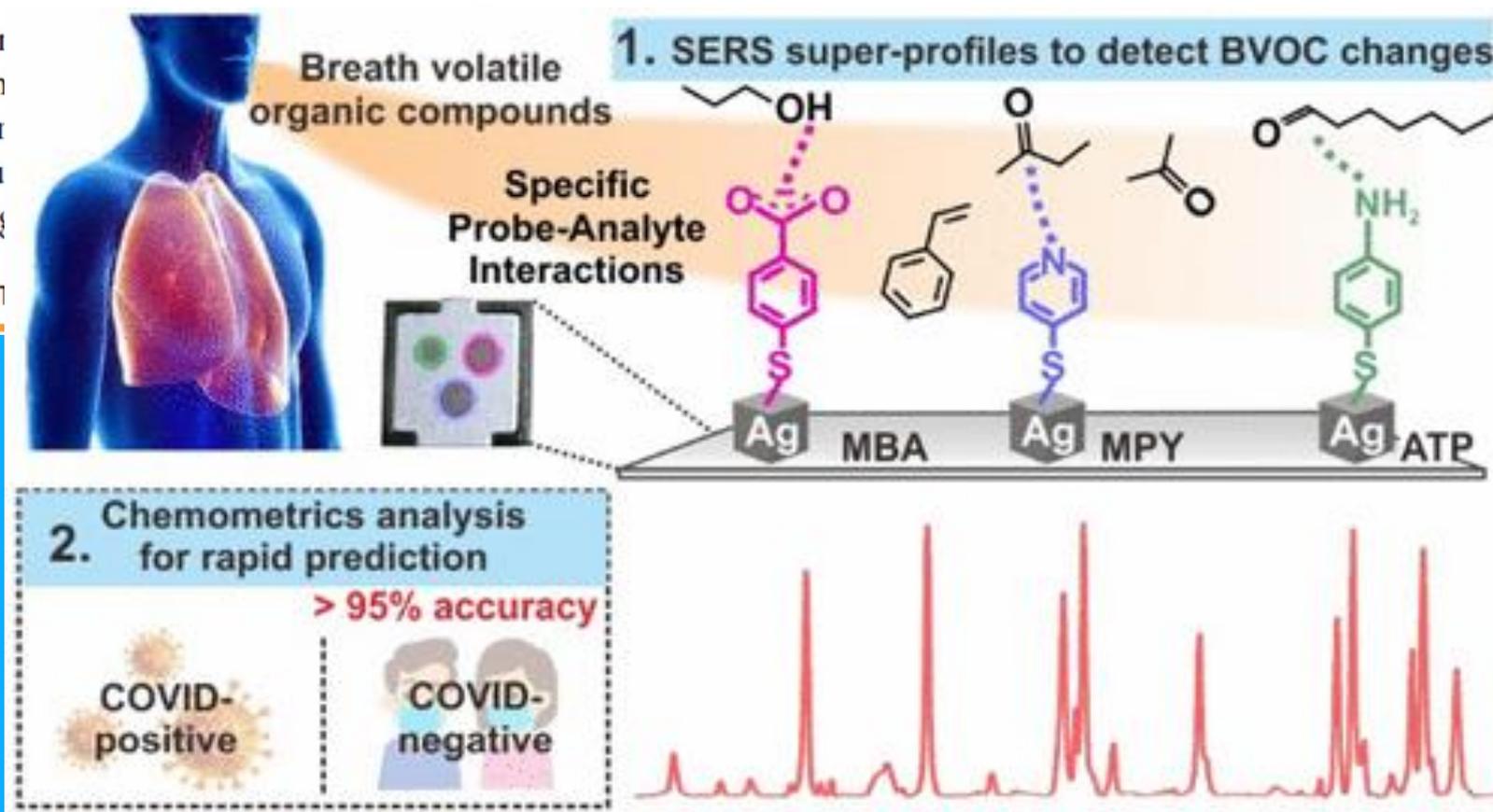
E-mail: mvca@iem.cfmac.csic.es

Noninvasive and Point-of-Care Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS)-Based Breathalyzer for Mass Screening of Coronavirus Disease 2019 (COVID-19) under 5 min

Shi Xuan
Yih Hon
Lam Bar
Gia Chu
and Xinq

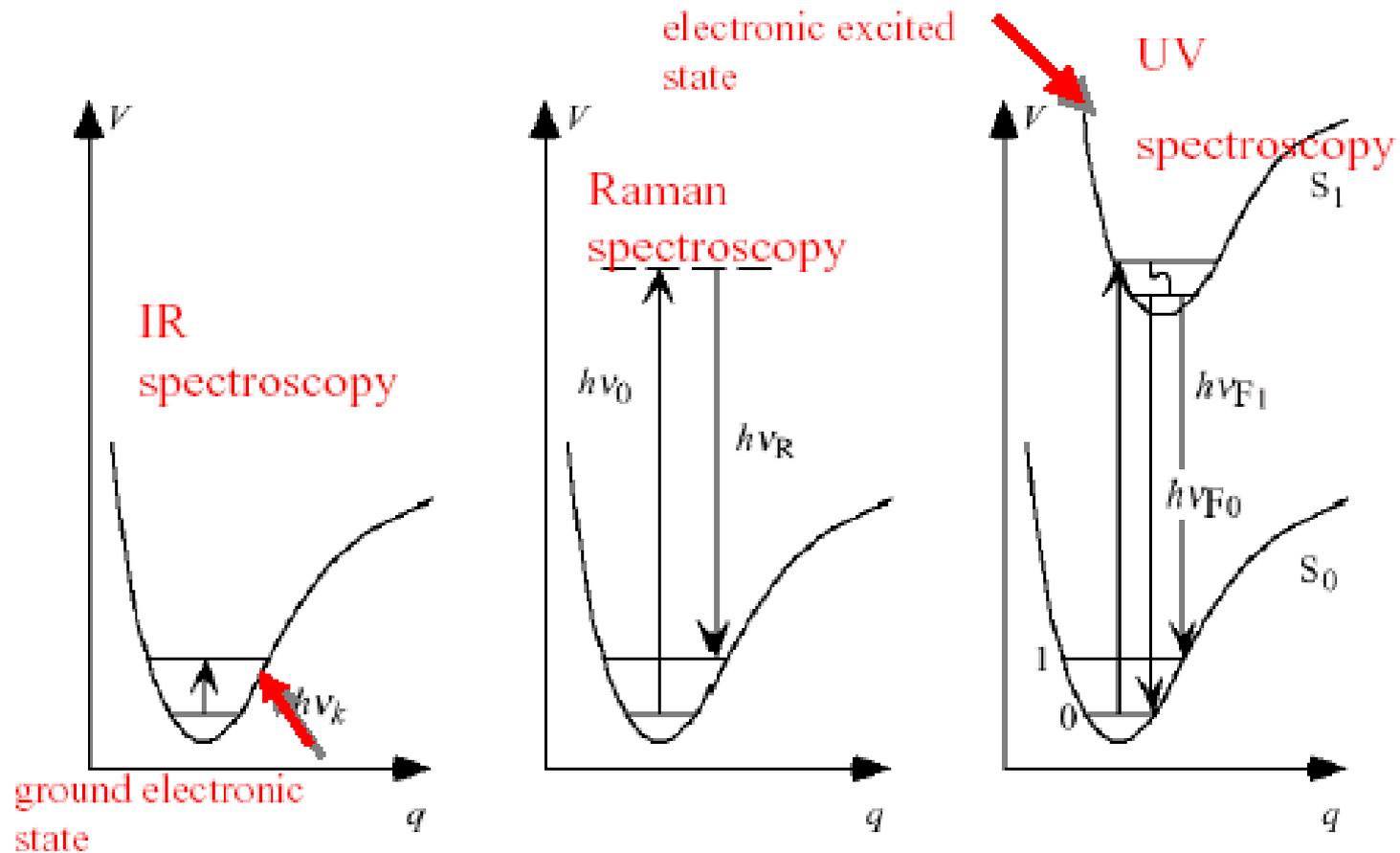


Cite 1



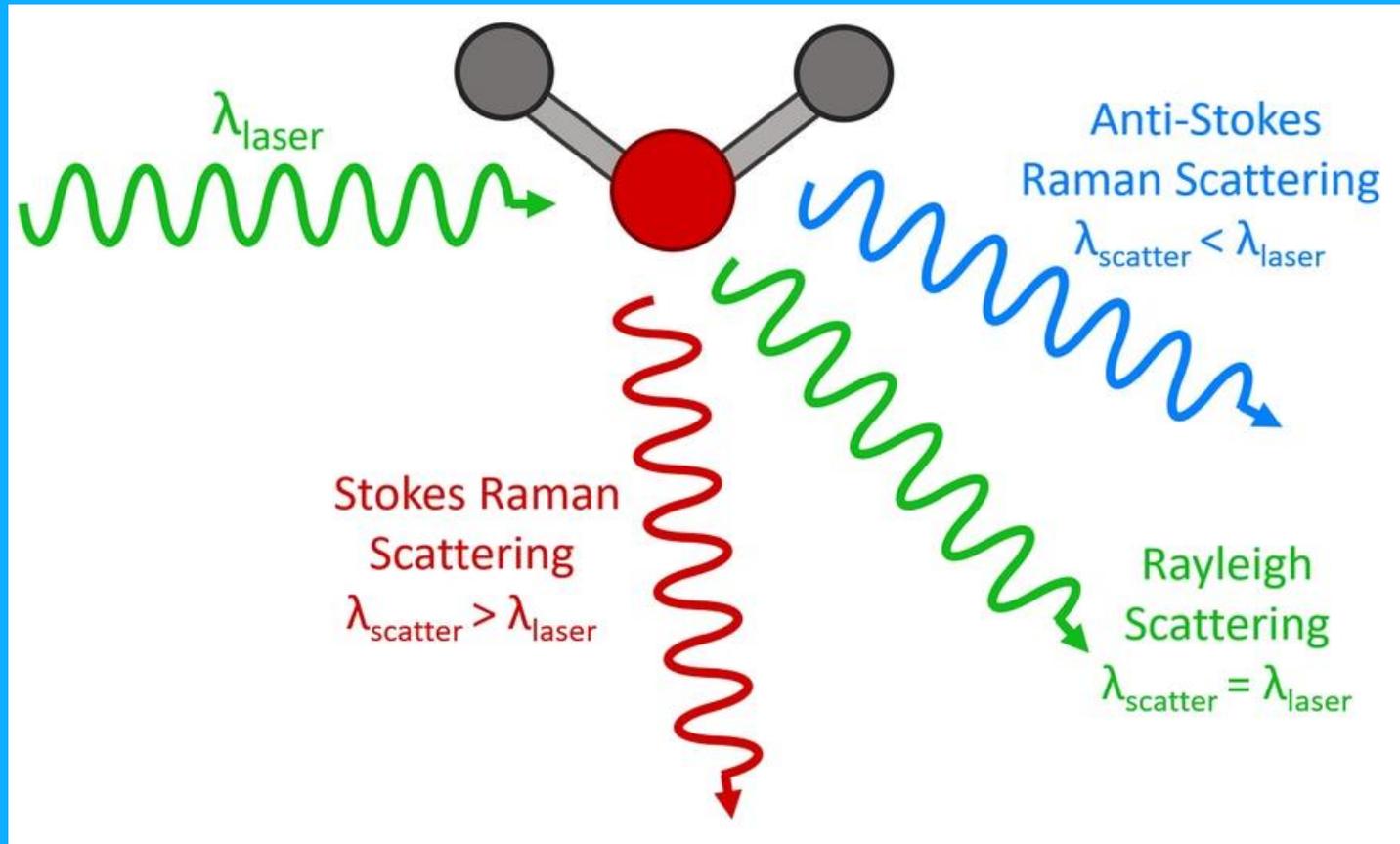
Espectroscopía Raman

Espectroscopía vibracional



. a.) Infrared absorption; b.) Raman scattering; c.) fluorescence

Tipos de dispersión (scattering)



Tipos de dispersión (scattering)

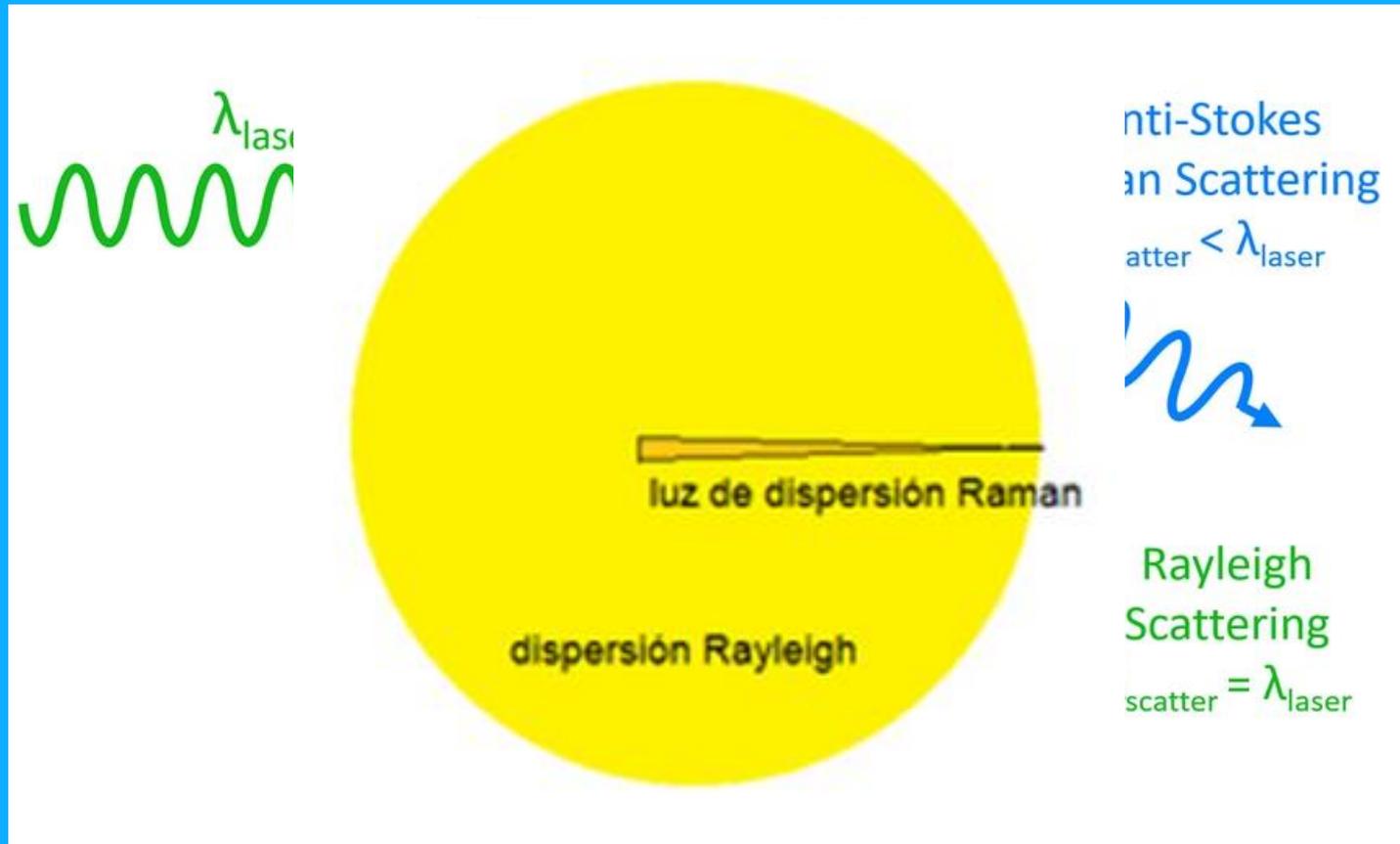
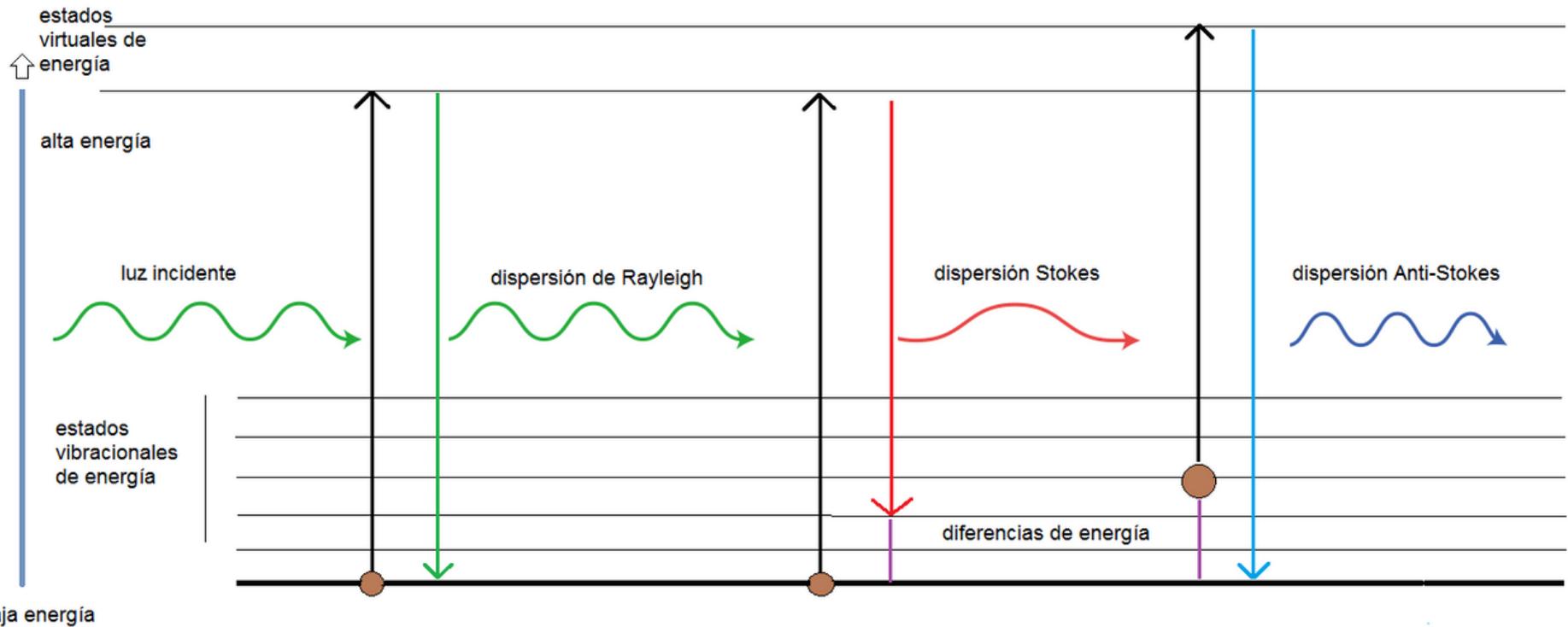
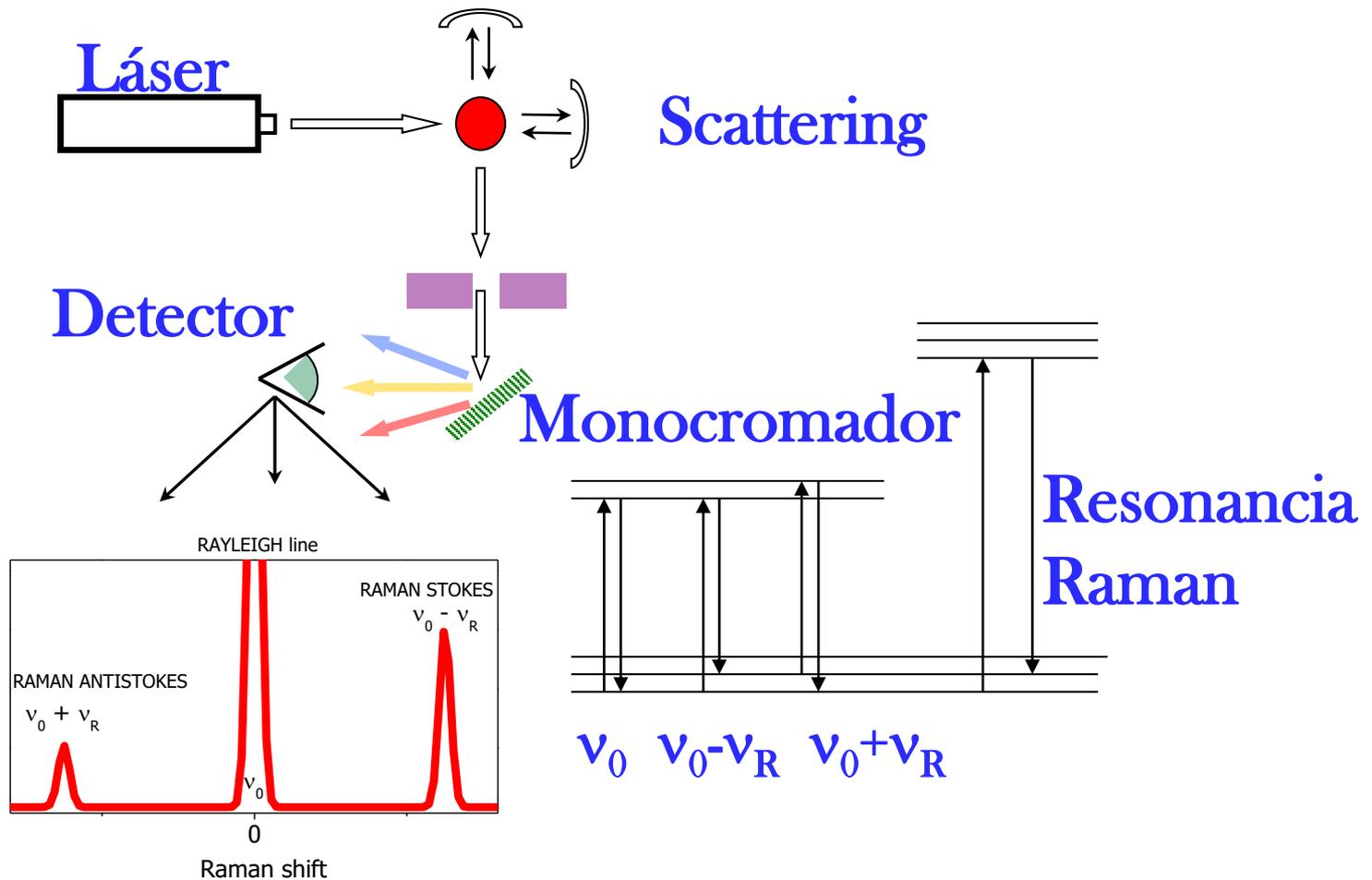


Diagrama de niveles de energía



Espectrómetro Raman



Espectroscopía Raman vs. IR



- Señal débil del agua
- Manejo sencillo de las muestras
- Mayor información espectroscópica:
polarización,
líneas anti-stokes,
microscopía



- Baja sensibilidad
- Emisión de fluorescencia

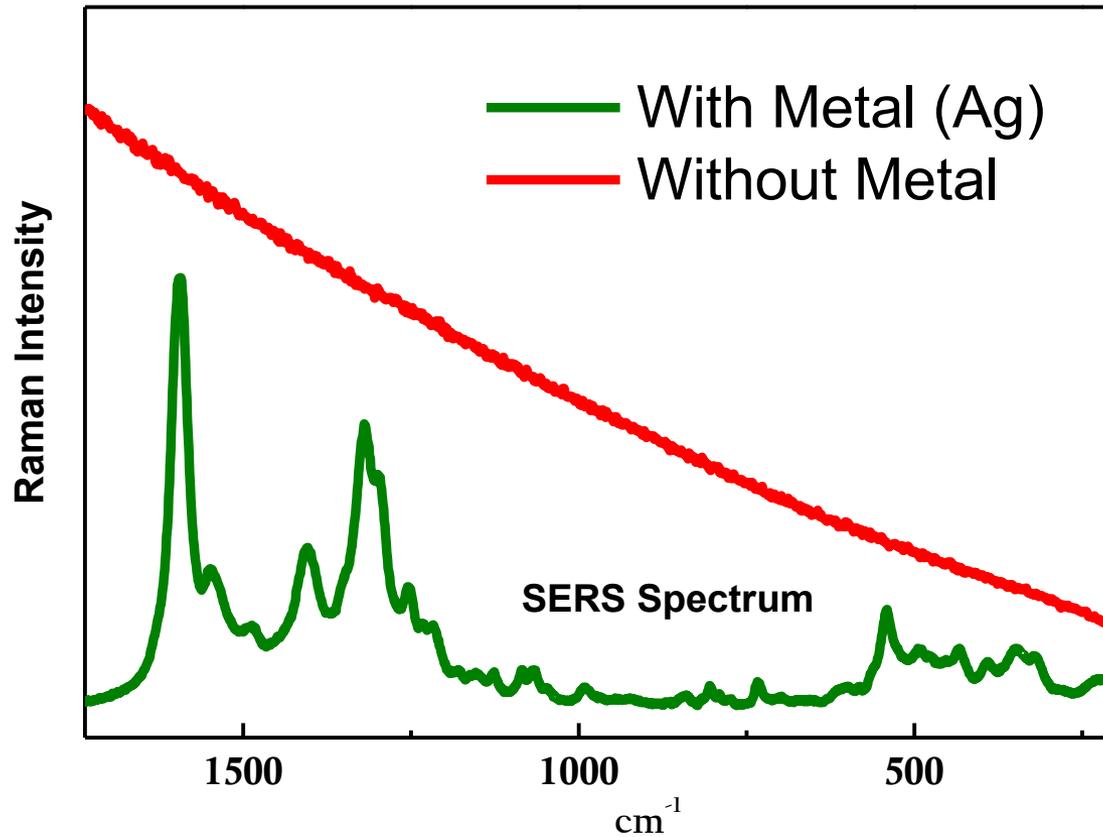
 SERS

Espectroscopía SERS

SERS o no SERS, esa es la cuestión



SERS o no SERS, esa es la cuestión



Nanotecnología



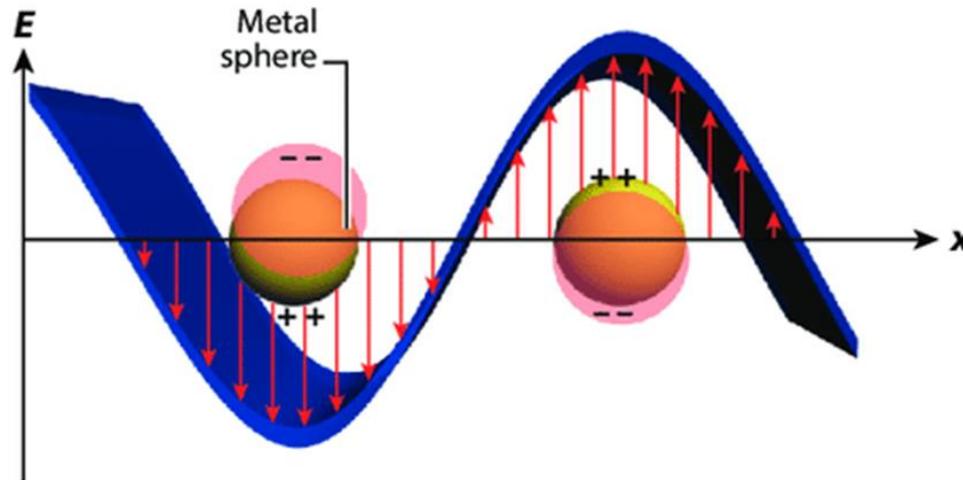
SERS

Espectroscopía

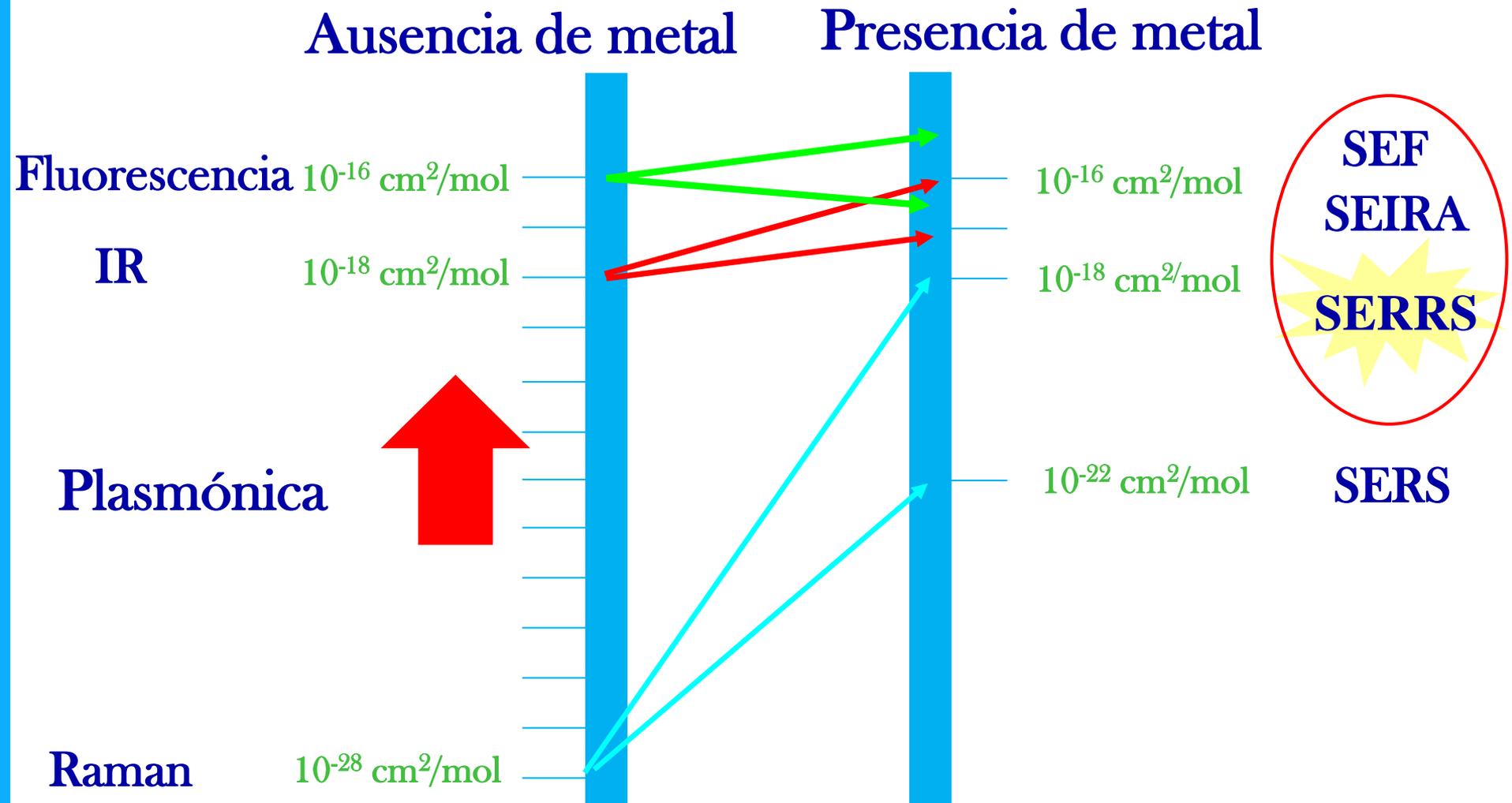
Espectroscopía sobre NPs metálicas

NPs metálicas plasmones superficiales localizados (LSPR)

- Tamaño - 10-200 nm
- Alta amplificación del CEM cerca de NP - 10^3 - 10^4
- Rango espacial pequeño - 10-50 nm



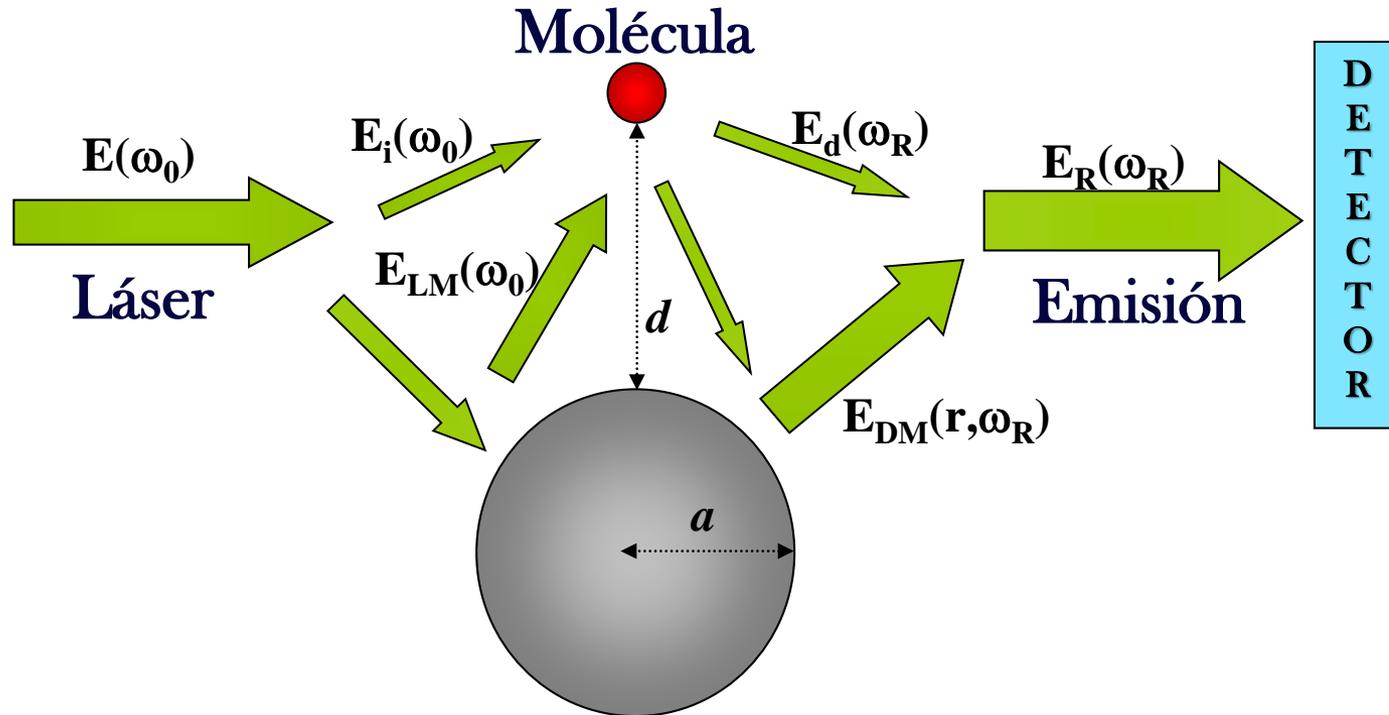
Ganancia de señal espectroscópica: sección eficaz



Mecanismos SERS

Mecanismo electromagnético (EM)

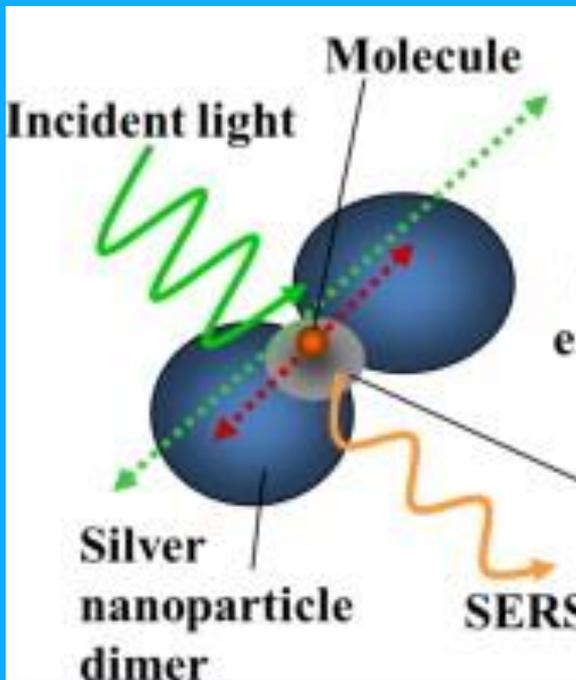
- Intensificación doble



Mecanismo químico (CM)

Factor de intensificación

Incremento del campo EM



Electric field enhanced by plasmon resonance

$$\frac{|M_{total}|^2}{\text{SERS total enhancement factor}} = \underbrace{\left| \frac{E^{Loc}(\omega_L)}{E^I(\omega_L)} \right|^2}_{\text{First enhancement}} \times \underbrace{\left| \frac{E^{Loc}(\omega_R)}{E^I(\omega_R)} \right|^2}_{\text{Second enhancement}}$$

Hotspot, a place where Fermi's golden rule may breakdown

$$P \propto \rho(\omega) \langle f | M | i \rangle$$

Factor de intensificación, G

$$\omega_L \approx \omega_R$$

$$G(\omega) = \left| \frac{E_{loc}}{E_{inc}} \right|^4$$

Factores importantes

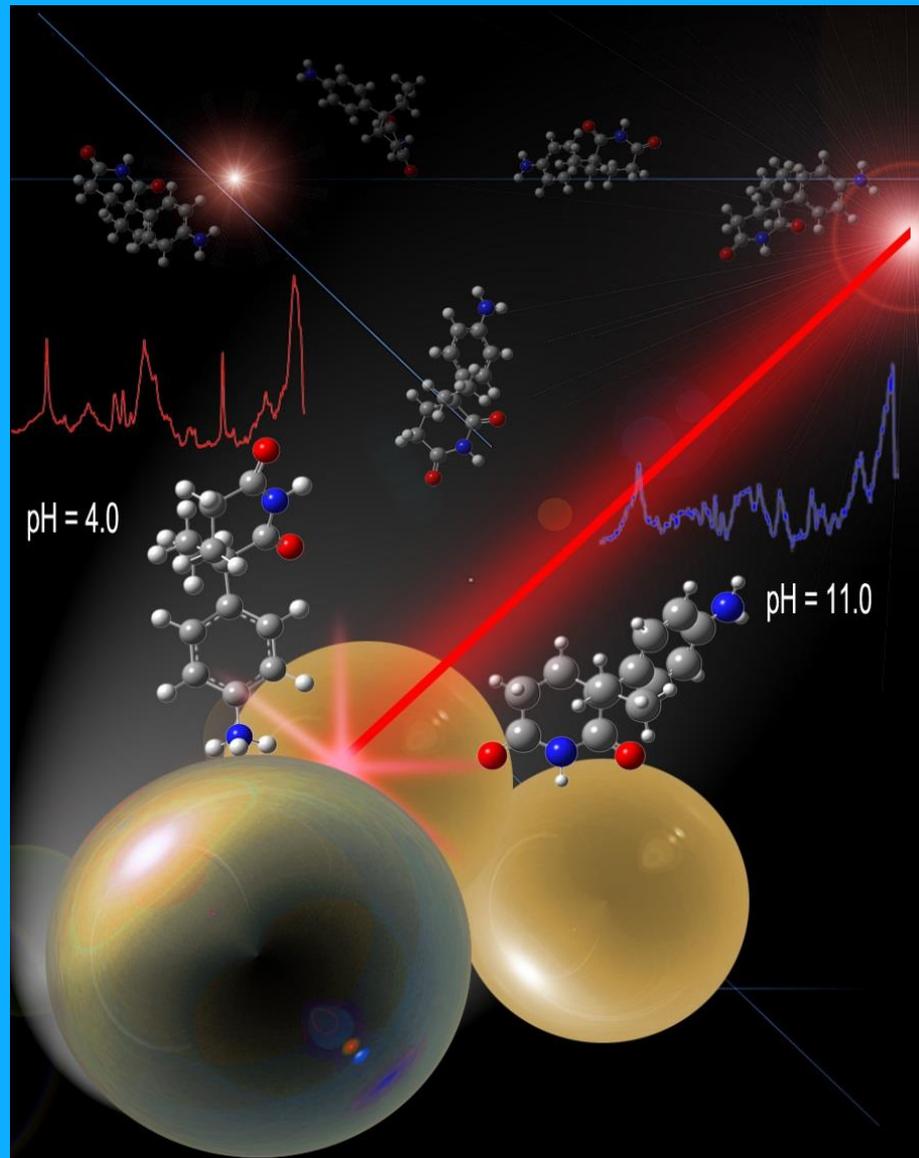
Orientación

(Reglas de selección SERS)

$$E_{\perp} \gg E_{\parallel}$$

Efecto de corto alcance

$$G \propto r^{-12}$$



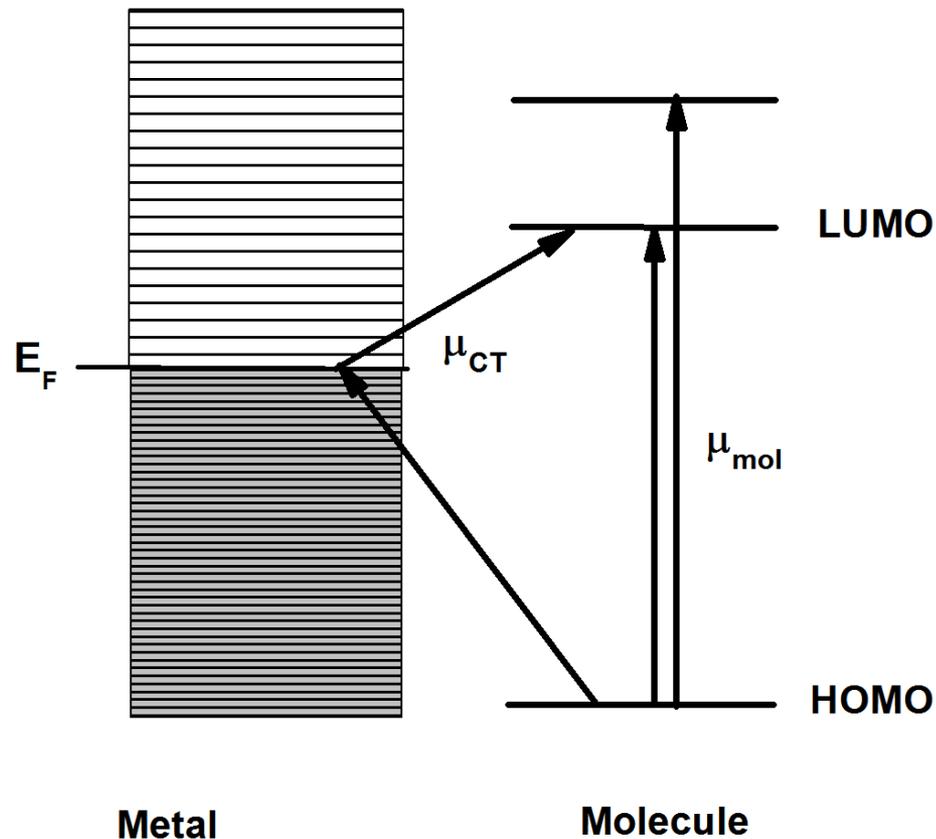
Mecanismo Químico (CM)

Mecanismo de transferencia de carga (CT)

Contacto metal-molécula - enlace químico

Complejo TC

Nivel de
Fermi



OM de
menor E
no
ocupado

OM de
mayor E
ocupado

Líneas de investigación

Nanotecnología
+
Espectroscopía

Desarrollo de soportes SERS

Fabricación y
caracterización
NPs

- Ablación láser
- Fotoreducción

Funcionalización

- Formación de hot spots
- Substancias no interaccionan

Soportes
flexibles

- Sin toma muestra
- Sensores

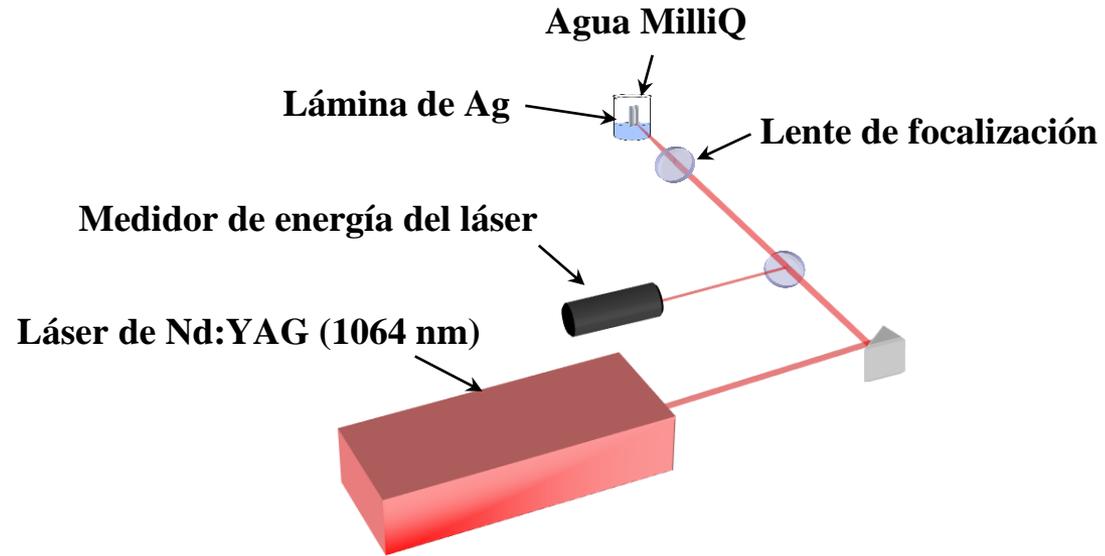
Fabricación y caracterización de NPs

Ablación láser

Tiempo

Fluencia

Longitud de onda



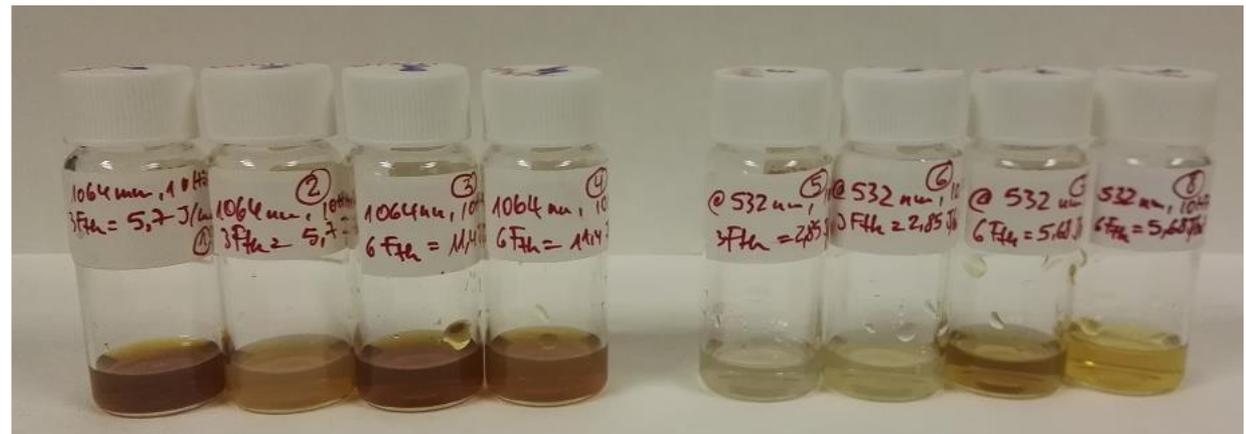
Caracterización

UV-Vis

Microcopía SEM

Espectroscopía

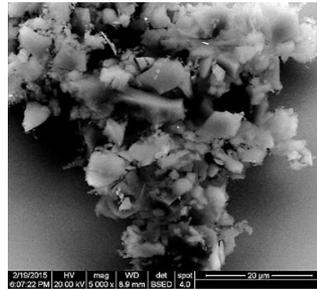
Raman



Fabricación y caracterización de NPs

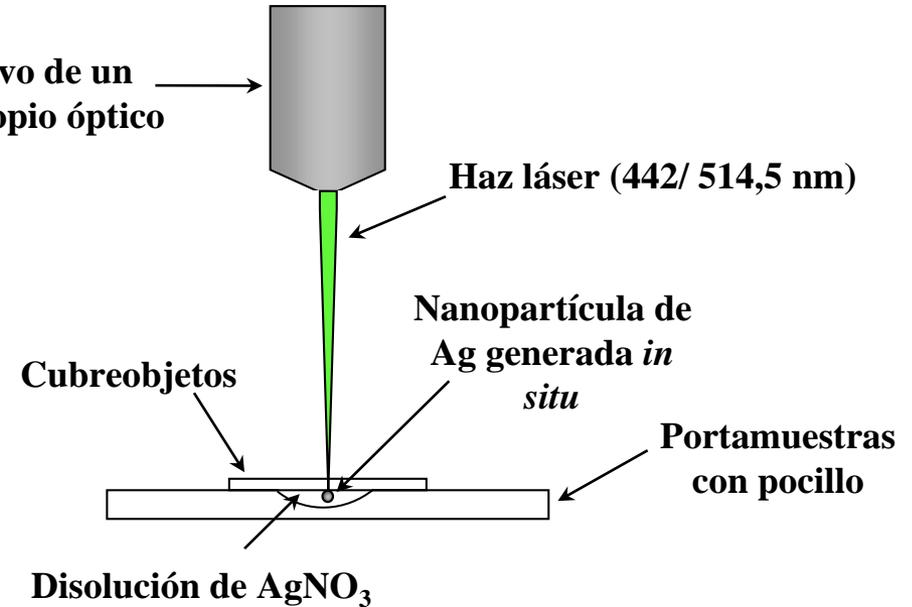
Fotorreducción

Tiempo
Longitud de onda
Potencia



Caracterización

Objetivo de un
microscopio óptico



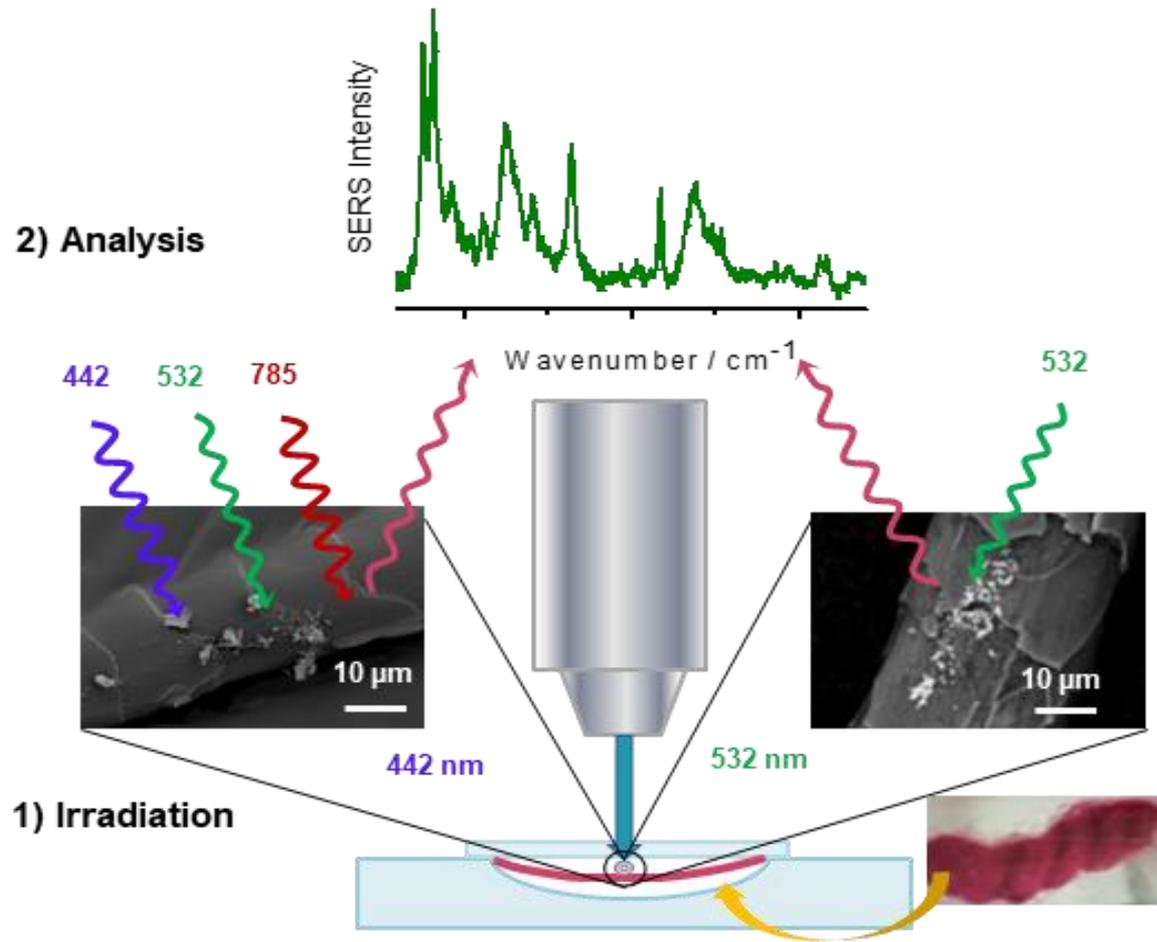
Fabricación y caracterización de NPs

Fotorreducción

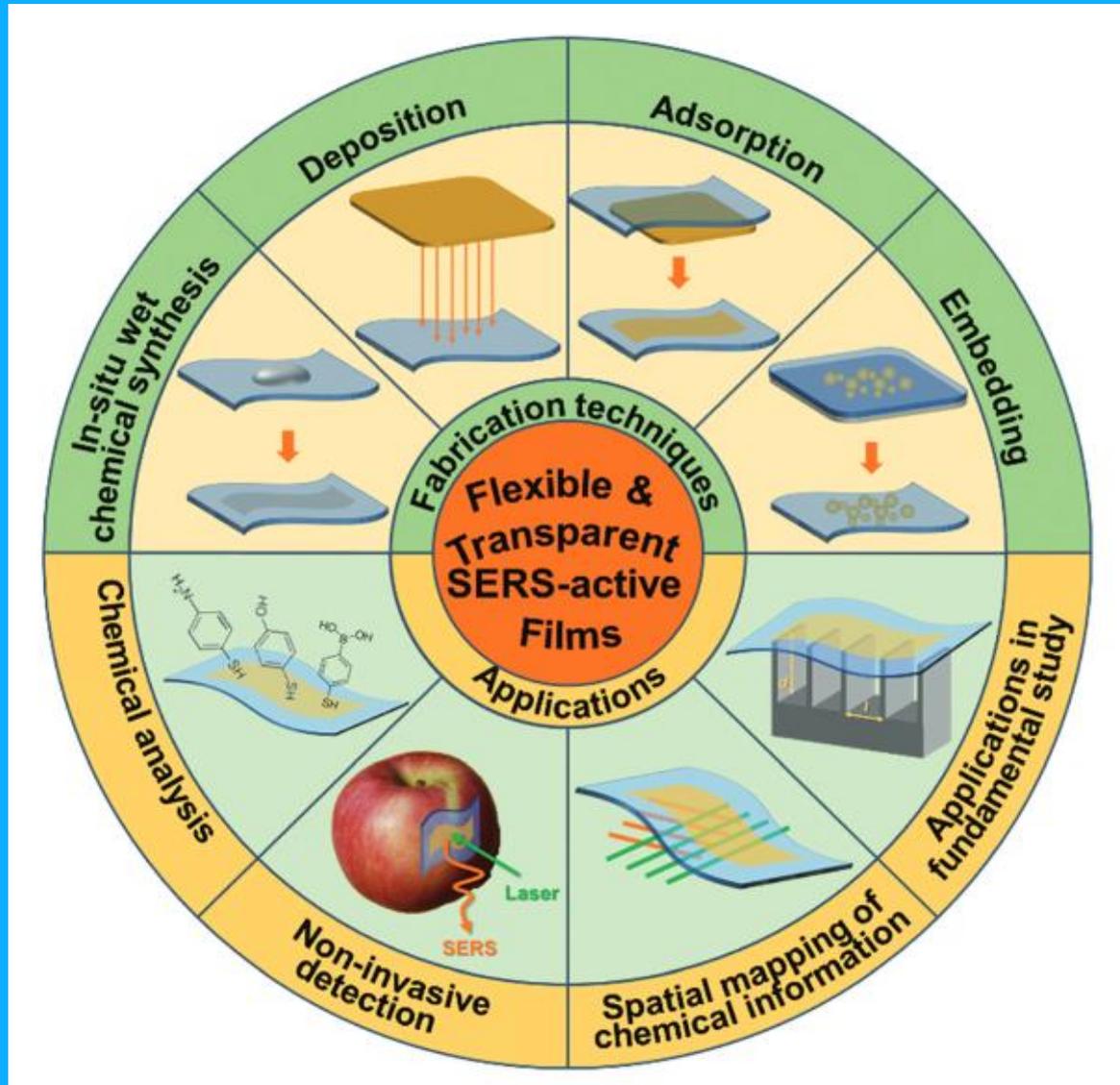
Tiempo
Longitud de onda
Potencia

Caracterización

Microcopía SEM
Espectroscopía Raman



Soportes flexibles - Sensores



Aplicaciones SERS



Colorantes

Tintas

Tapices

Pinturas

Manuscritos



Drogas

Pinturas

Tintas

Falsificaciones



Pesticidas

Contaminantes

Efecto en suelos

Condiciones experimentales

Longitud de onda de excitación

- Resonancia Raman → Intensidad

NPs metálicas

pH

- Ionización → Cambios estructura molecular

Concentración

- LOD → Isoterma de Langmuir

Análisis de colorantes artísticos

JOURNAL OF RAMAN SPECTROSCOPY

J. Raman Spectrosc. 2004, **35**: 921–927

Published online 25 August 2004 in Wiley InterScience (www.interscience.wiley.com). DOI: 10.1002/jrs.1228

JRS

Surface-enhanced Raman scattering study of the adsorption of the anthraquinone pigment alizarin on Ag nanoparticles

M. V. Cañamares, J. V. Garcia-Ramos, C. Domingo and S. Sanchez-Cortes*

Degradation of Curcumin Dye in Aqueous Solution and on Ag Nanoparticles Studied by Ultraviolet–Visible Absorption and Surface-Enhanced Raman Spectroscopy

M. V. CAÑAMARES, J. V. GARCIA-RAMOS, and S. SANCHEZ-CORTES*

Instituto de Estructura de la Materia. CSIC., Serrano, 121. 28006-Madrid, Spain

Research article

JOURNAL OF
RAMAN
SPECTROSCOPY

Received: 30 December 2013

Revised: 31 March 2014

Accepted: 5 May 2014

Published online in Wiley Online Library: 24 June 2014

(wileyonlinelibrary.com) DOI 10.1002/jrs.4508

TLC-SERS of mauve, the first synthetic dye[†]

M. V. Cañamares,^{a,b*} D. A. Reagan,^c J. R. Lombardi^b and M. Leona^d

Research article

JOURNAL OF
RAMAN
SPECTROSCOPY

Received: 17 February 2017

Revised: 29 March 2017

Accepted: 31 March 2017

Published online in Wiley Online Library: 26 May 2017

(wileyonlinelibrary.com) DOI 10.1002/jrs.5164

Sensitive 'on the fiber' detection of synthetic organic dyes by laser photoinduced plasmonic Ag nanoparticles

Irene Bonacini,^a Francesca Gallazzi,^a Alba Espina,^b Maria Vega Cañamares,^{b*} Silvia Prati,^a Rocco Mazzeo^a and Santiago Sanchez-Cortes^b

Análisis de drogas

JOURNAL OF
**FORENSIC
SCIENCES**



J Forensic Sci. January 2011, Vol. 56, No. 1
doi: 10.1111/j.1556-4029.2010.01562.x
Available online at: interscience.wiley.com

TECHNICAL NOTE CRIMINALISTICS

Vinesh Rana,¹ M.A.; Maria V. Cañamares,² Ph.D.; Thomas Kubic,¹ Ph.D.; Marco Leona,³ Ph.D.; and John R. Lombardi,² Ph.D.

Surface-enhanced Raman Spectroscopy for Trace Identification of Controlled Substances: Morphine, Codeine, and Hydrocodone

THE JOURNAL OF
PHYSICAL CHEMISTRY C

Article

Cite This: *J. Phys. Chem. C* 2019, 123, 9262–9271

pubs.acs.org/JPCC

Raman, SERS, and DFT Analysis of the Main Alkaloids Contained in Syrian Rue

María Vega Cañamares,^{*,†} Federica Pozzi,[‡] and John R. Lombardi[§]

Chemical Physics 536 (2020) 110812



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Chemical Physics

journal homepage: www.elsevier.com/locate/chemphys



An analysis of tetrahydrocannabinol (THC) and its analogs using surface enhanced Raman Scattering (SERS)

Syed K. Islam^{a,*}, Yin Pak Cheng^b, Ronald L. Birke^b, Maria Vega Cañamares^c, Cyril Muehlethaler^d,
John R. Lombardi^b



SERS + DFT

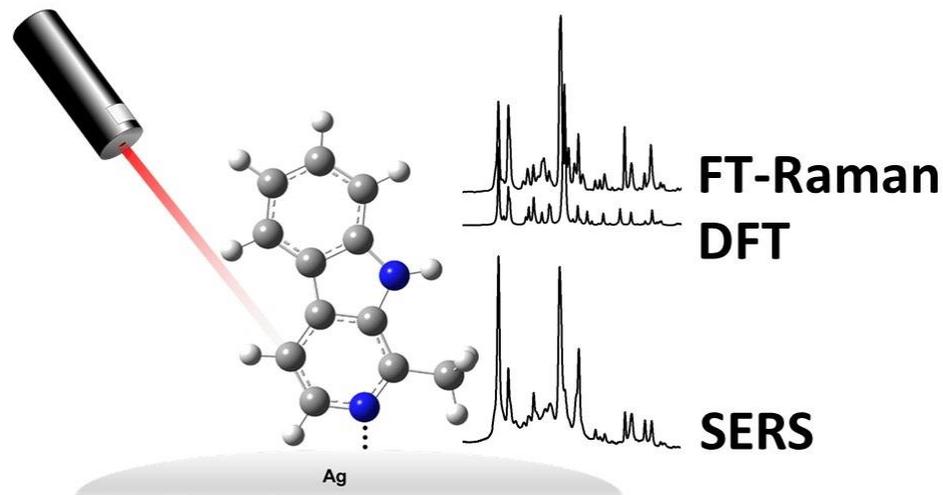
Trabajo experimental + computacional

Gaussian = optimización geometría + espectro Raman

Comparación espectro experimental + calculado

Análisis vibracional - modos normales

Interacción molécula-NP



IEM



CSIC

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

Espectroscopía Raman Intensificada por superficies: SERS



Dr. M^a Vega Cañamares

https://www.iem.cfmac.csic.es/evpm//group_ssasp.html

E-mail: mvca@iem.cfmac.csic.es