



**CSIC**

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

# Espectroscopía Raman Intensificada por superficies: SERS

**Dr. M<sup>a</sup> Vega Cañamares**  
**Instituto de Estructura de la Materia. CSIC**

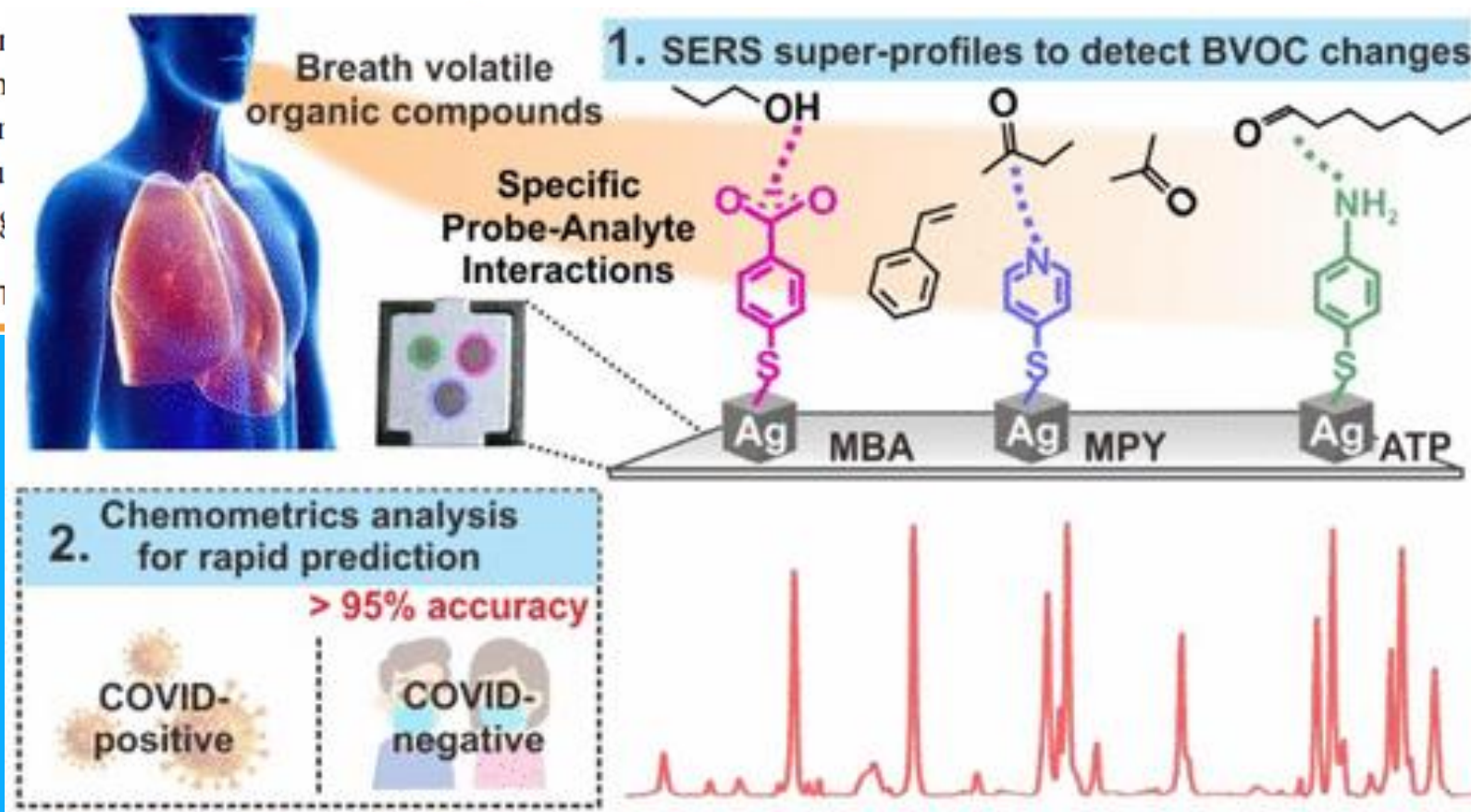
E-mail: [mvca@iem.cfmac.csic.es](mailto:mvca@iem.cfmac.csic.es)

# 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

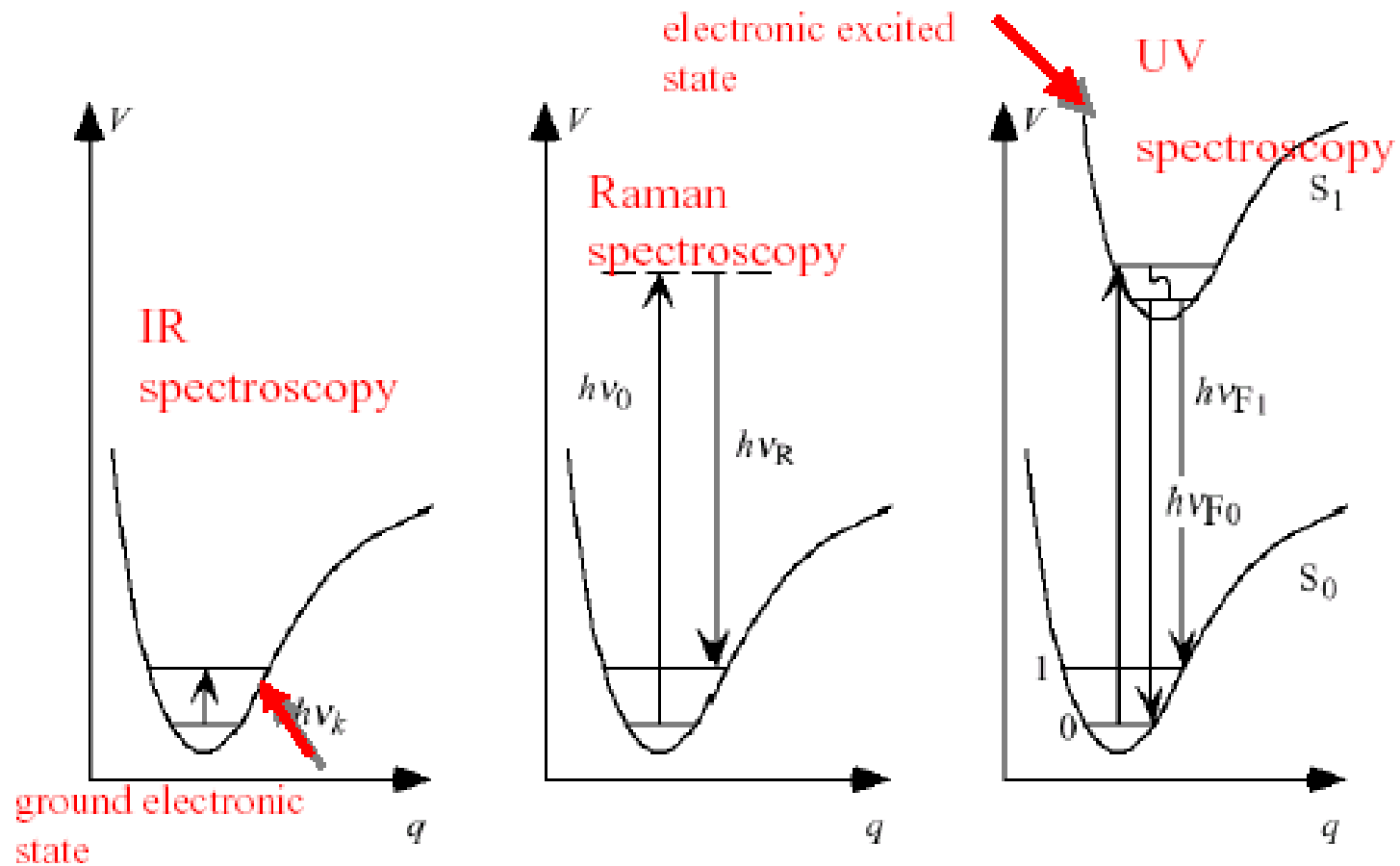


Cite 1



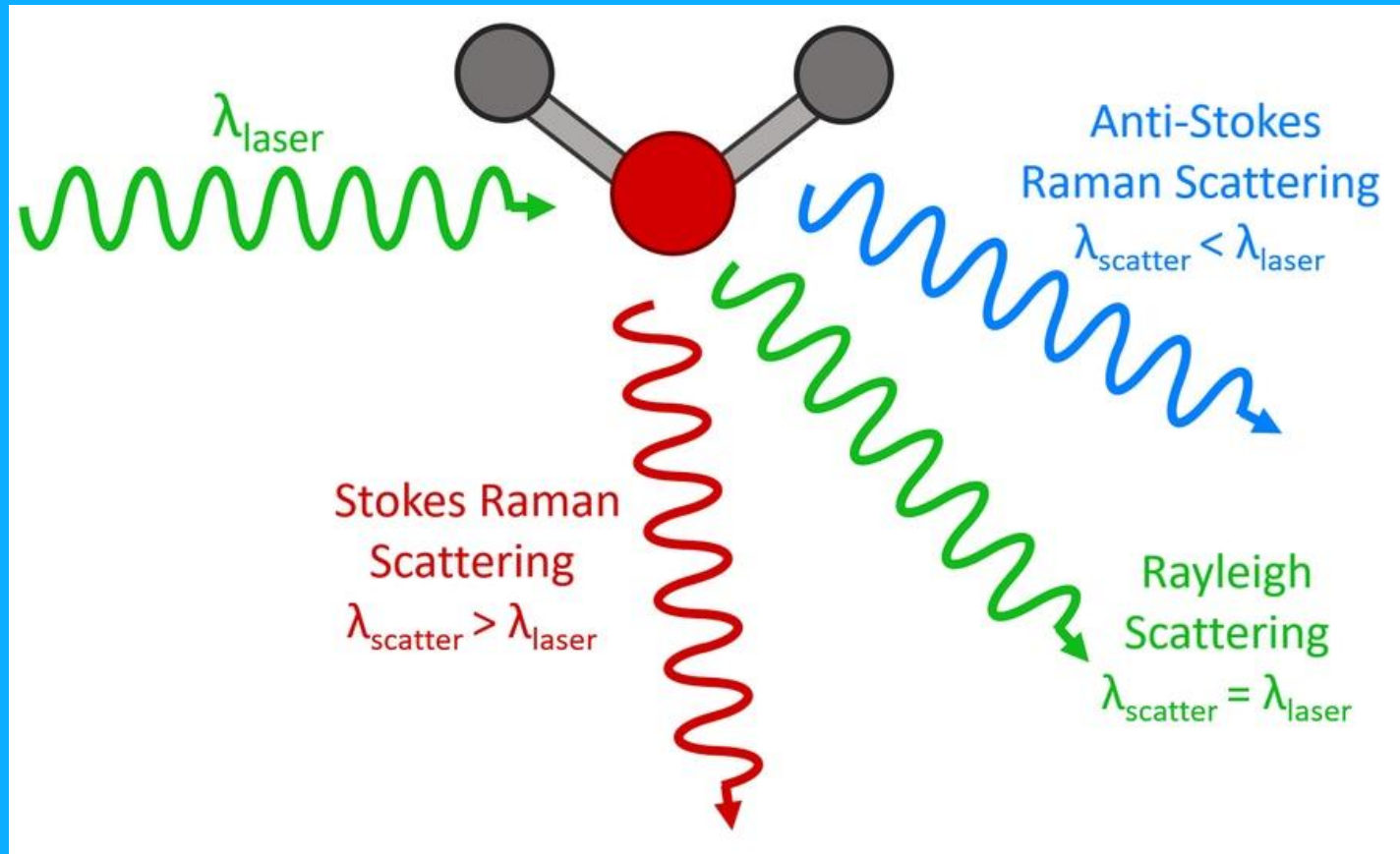
# Espectroscopía Raman

# Espectroscopía vibracional

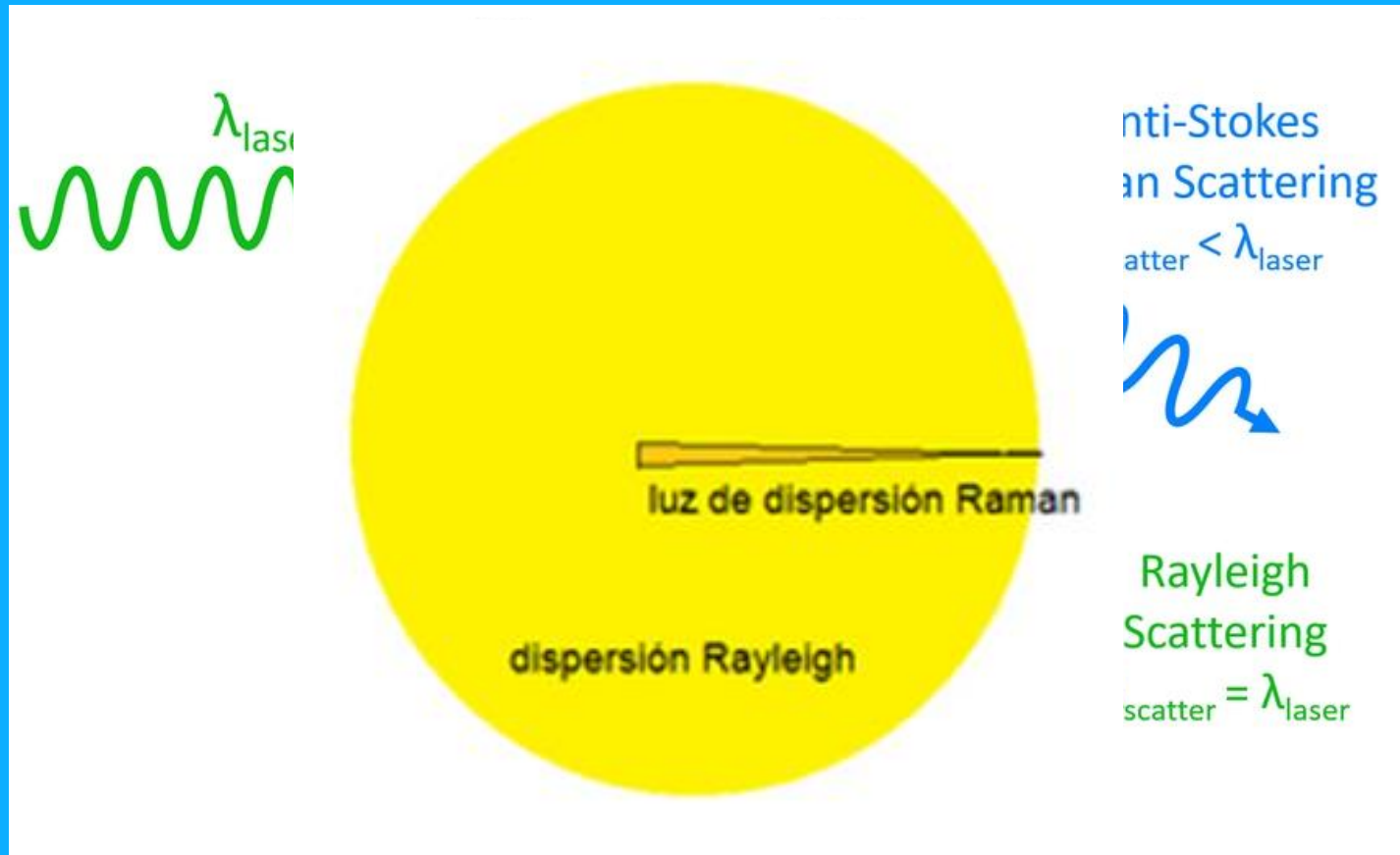


. a.) Infrared absorption; b.) Raman scattering; c.) fluorescence

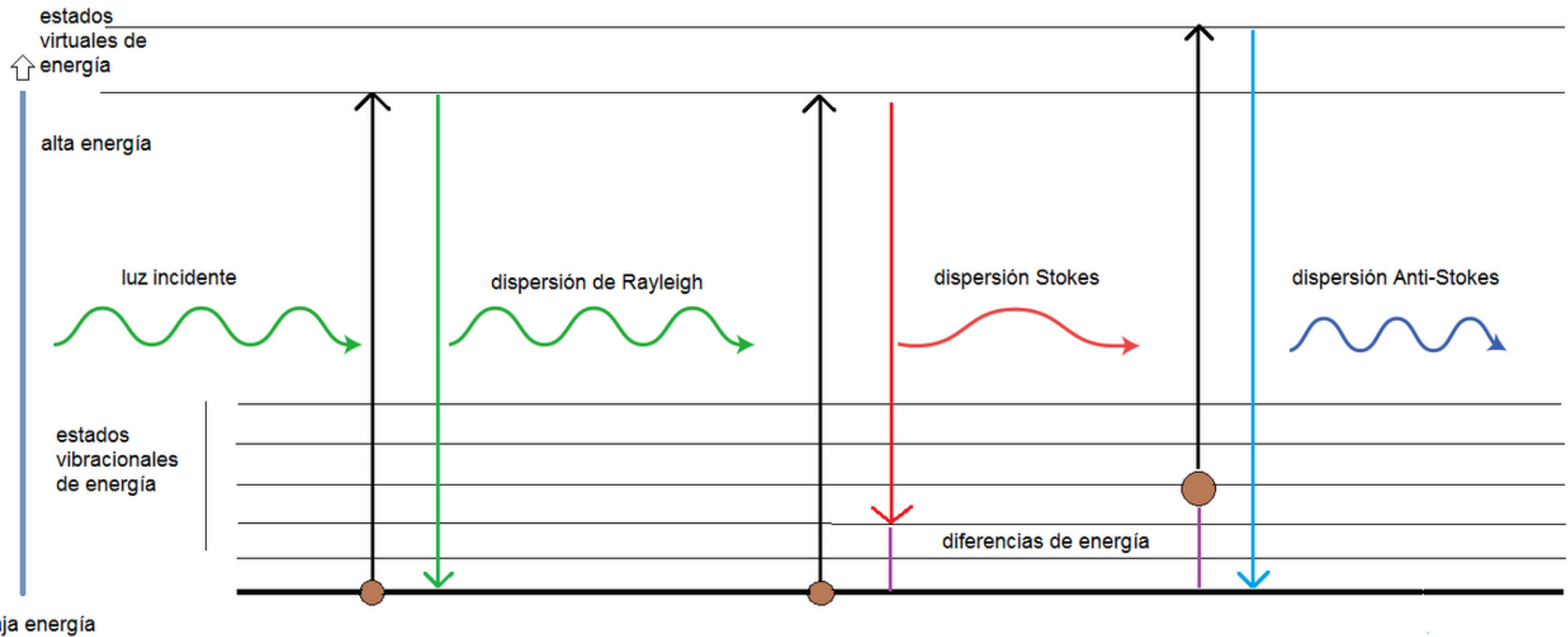
# Tipos de dispersión (scattering)



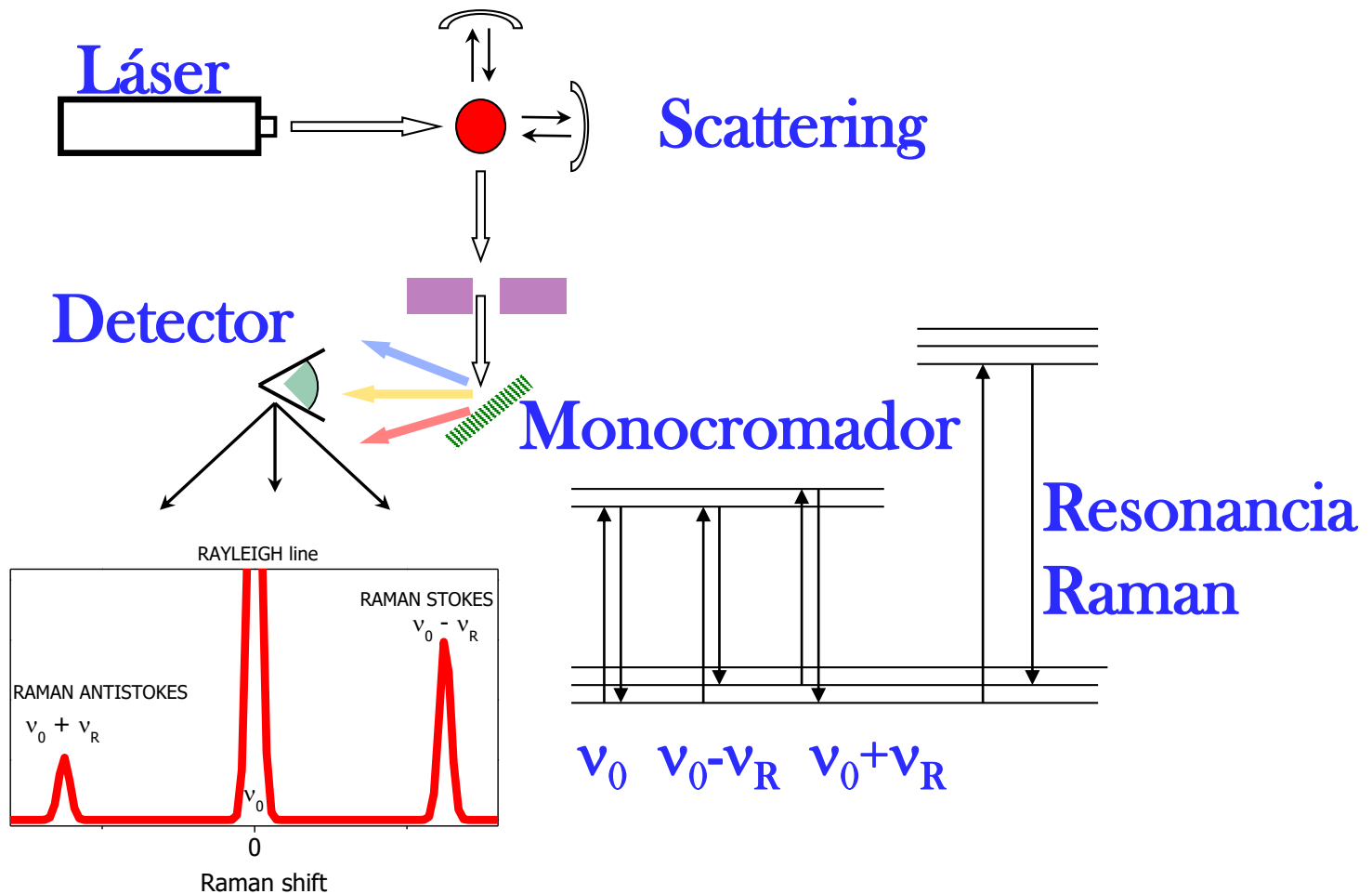
# Tipos de dispersión (scattering)



# 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

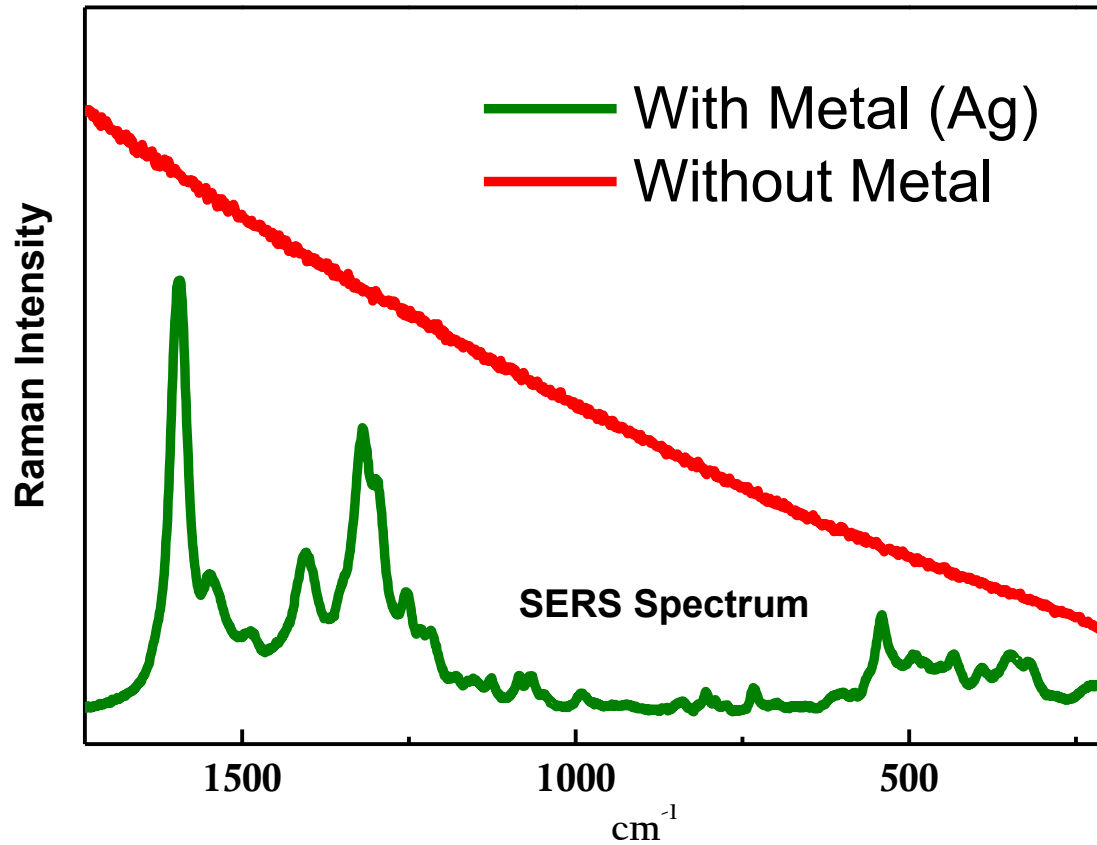
 SERS

# Espectroscopía SERS

**SERS o no SERS, esa es la cuestión**



# SERS o no SERS, esa es la cuestión



**Nanotecnología**



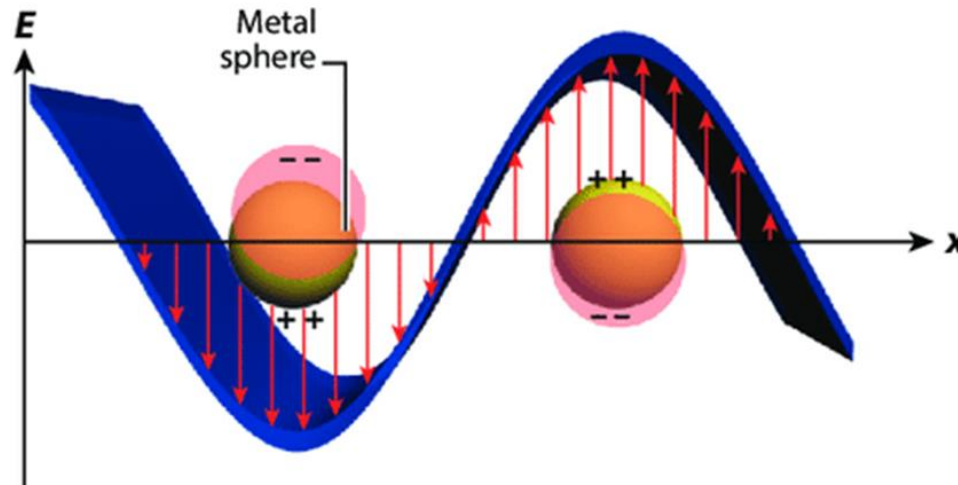
**SERS**

**Espectroscopía**

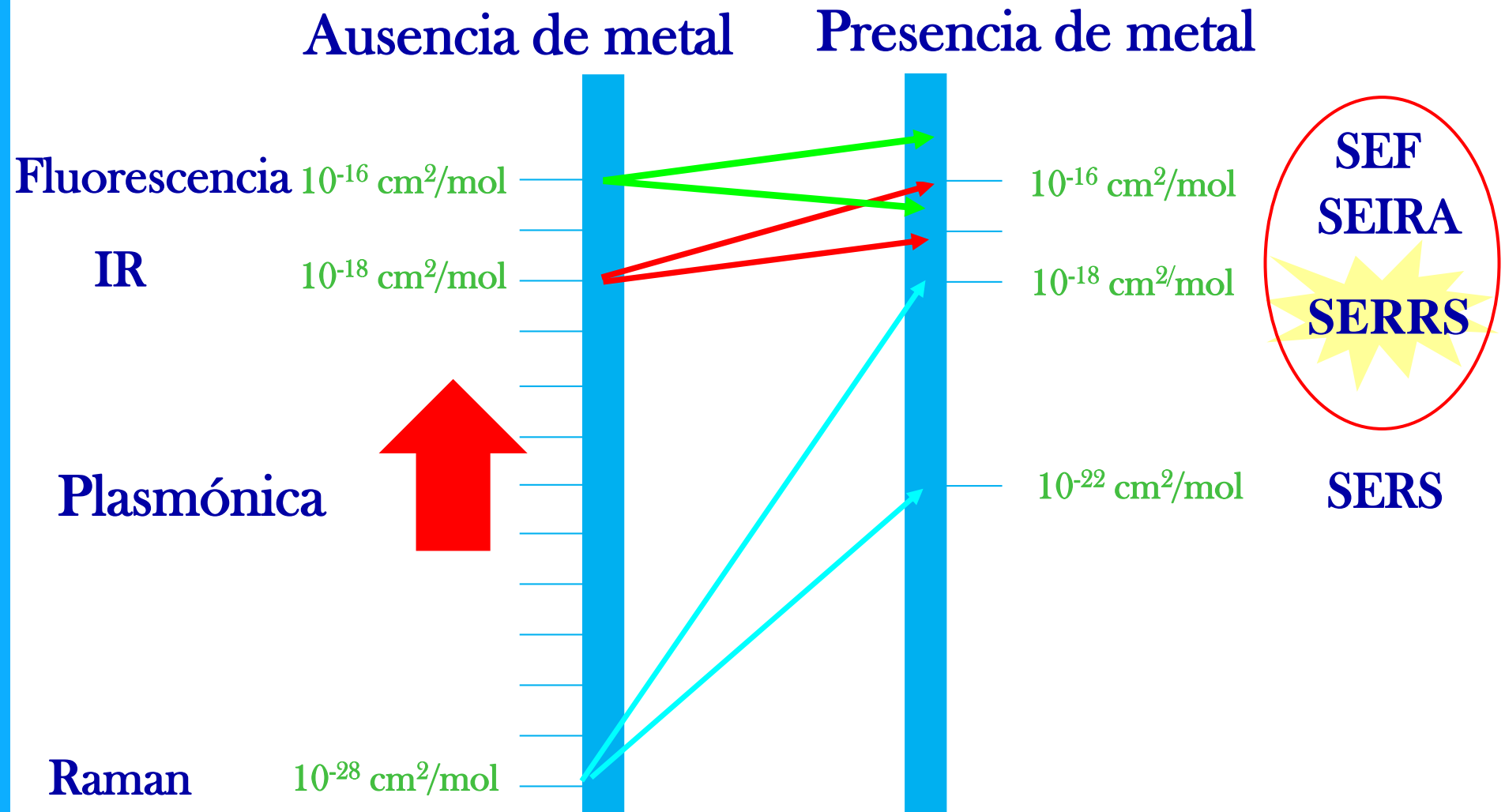
# Espectroscopía sobre NPs metálicas

## 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



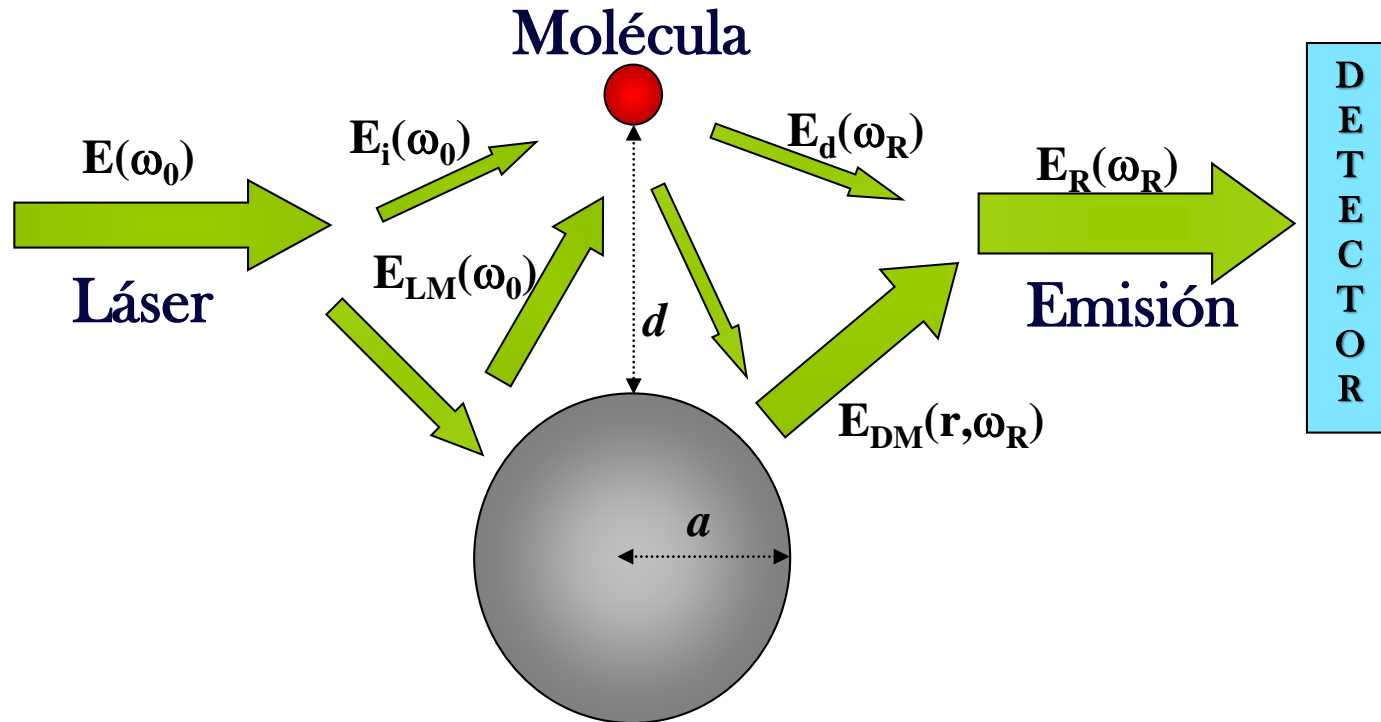
# Ganancia de señal espectroscópica: sección eficaz



# Mecanismos SERS

## Mecanismo electromagnético (EM)

- Intensificación doble

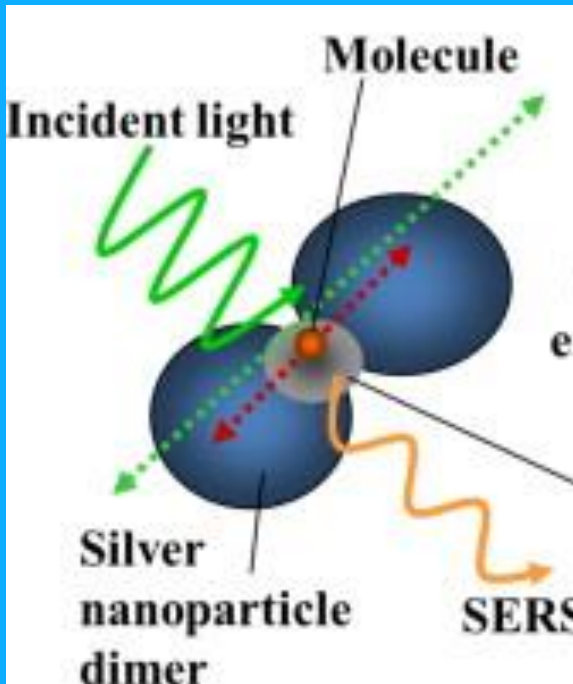


## Mecanismo químico (CM)



# 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

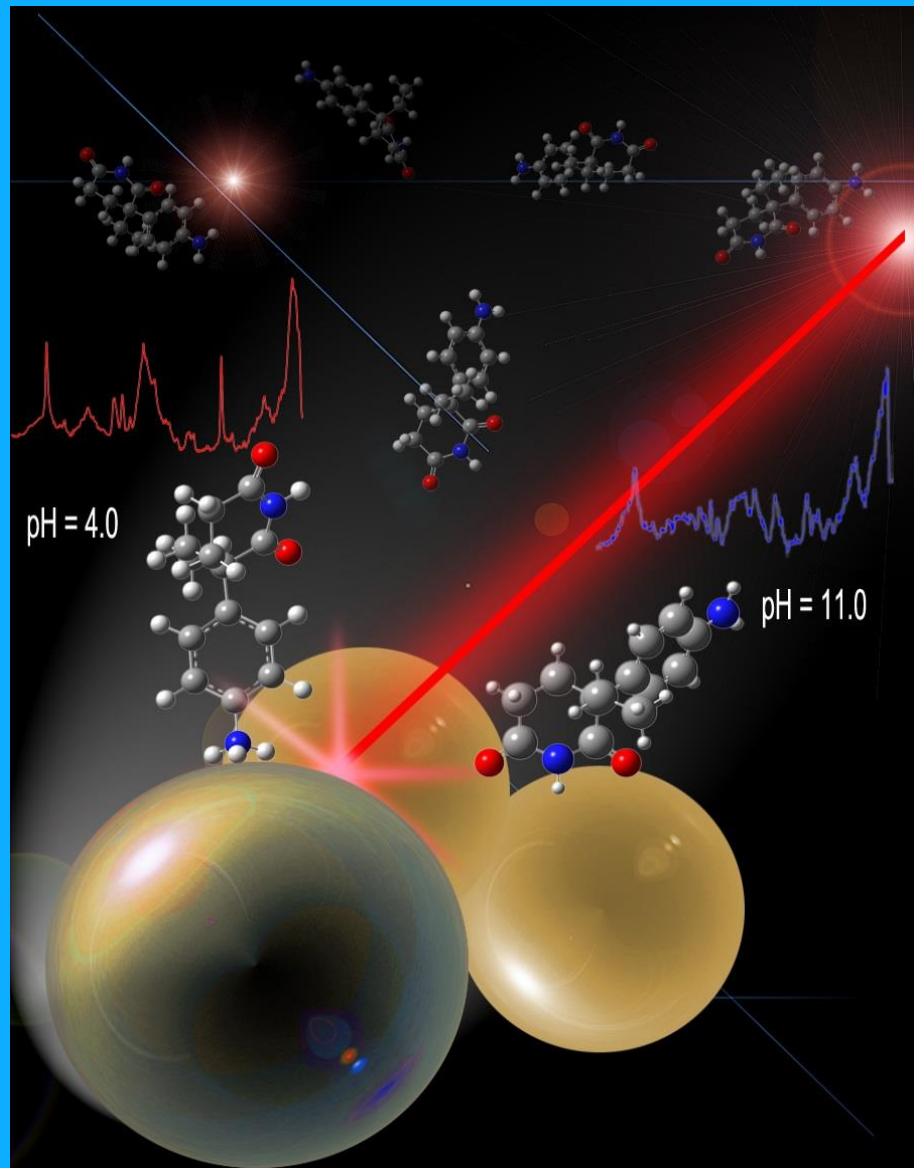
## Orientación

(Reglas de selección SERS)

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

Efecto de corto alcance

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



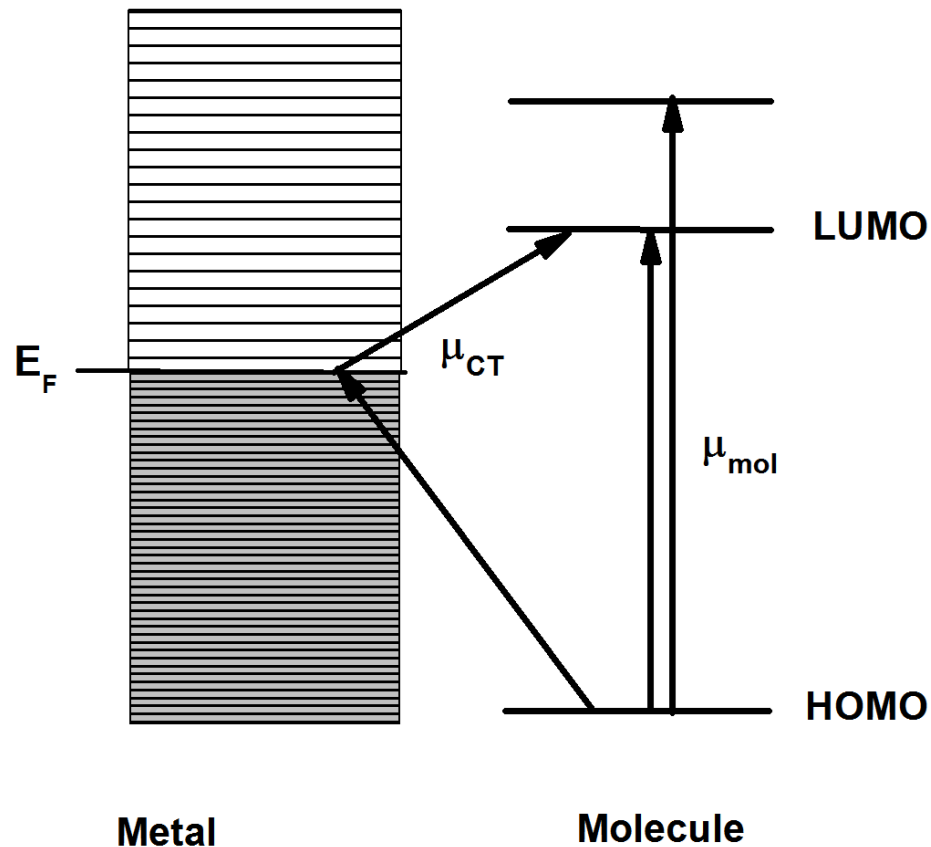
# Mecanismo Químico (CM)

## 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

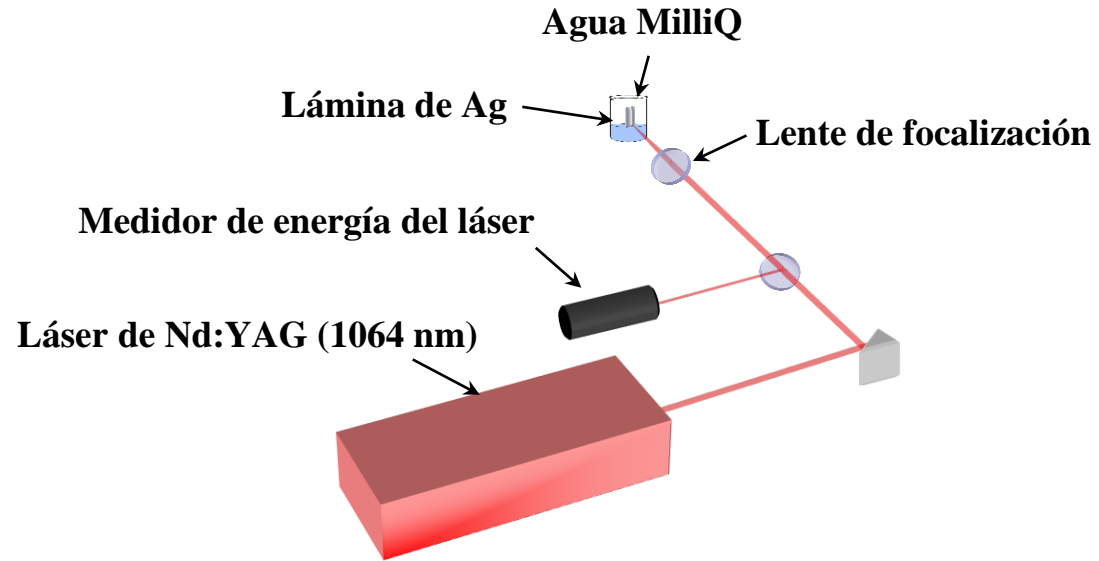
# Fabricación y caracterización de NPs

## Ablación láser

Tiempo

Fluencia

Longitud de onda



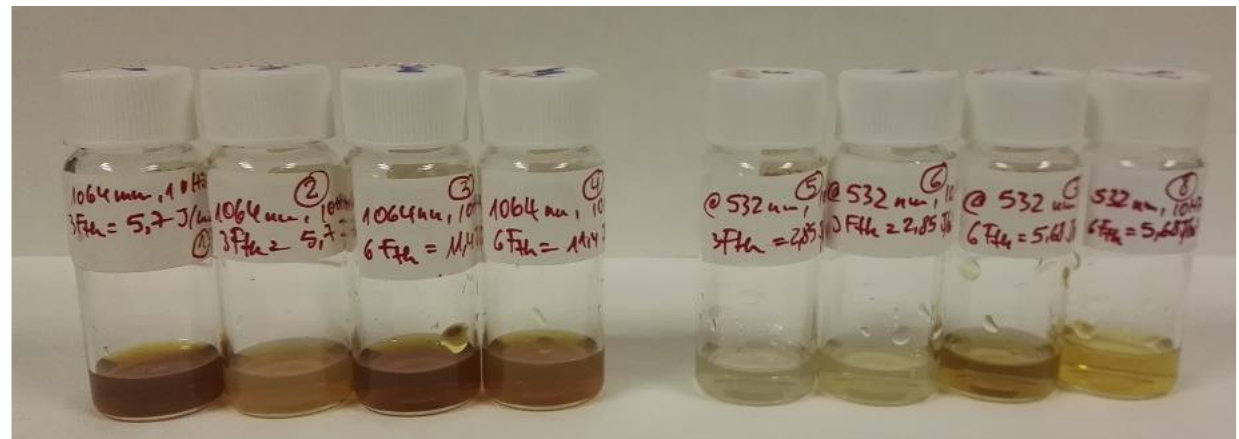
## Caracterización

UV-Vis

Microcopía SEM

Espectroscopía

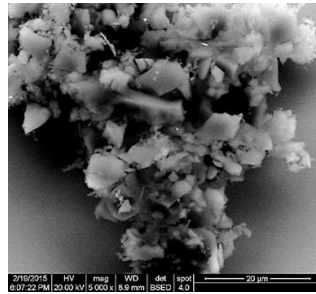
Raman



# Fabricación y caracterización de NPs

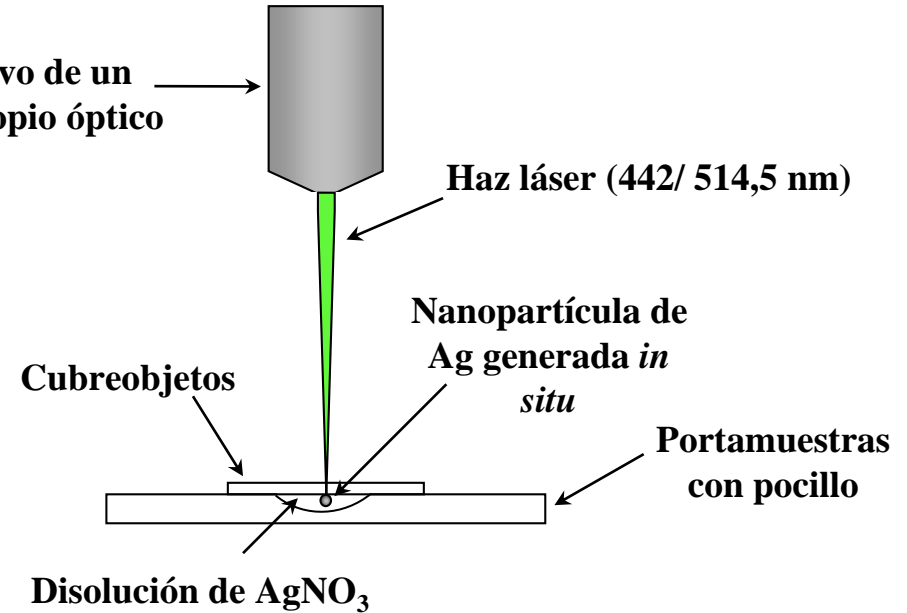
## Fotorreducción

Tiempo  
Longitud de onda  
Potencia



## Caracterización

Objetivo de un  
microscopio óptico





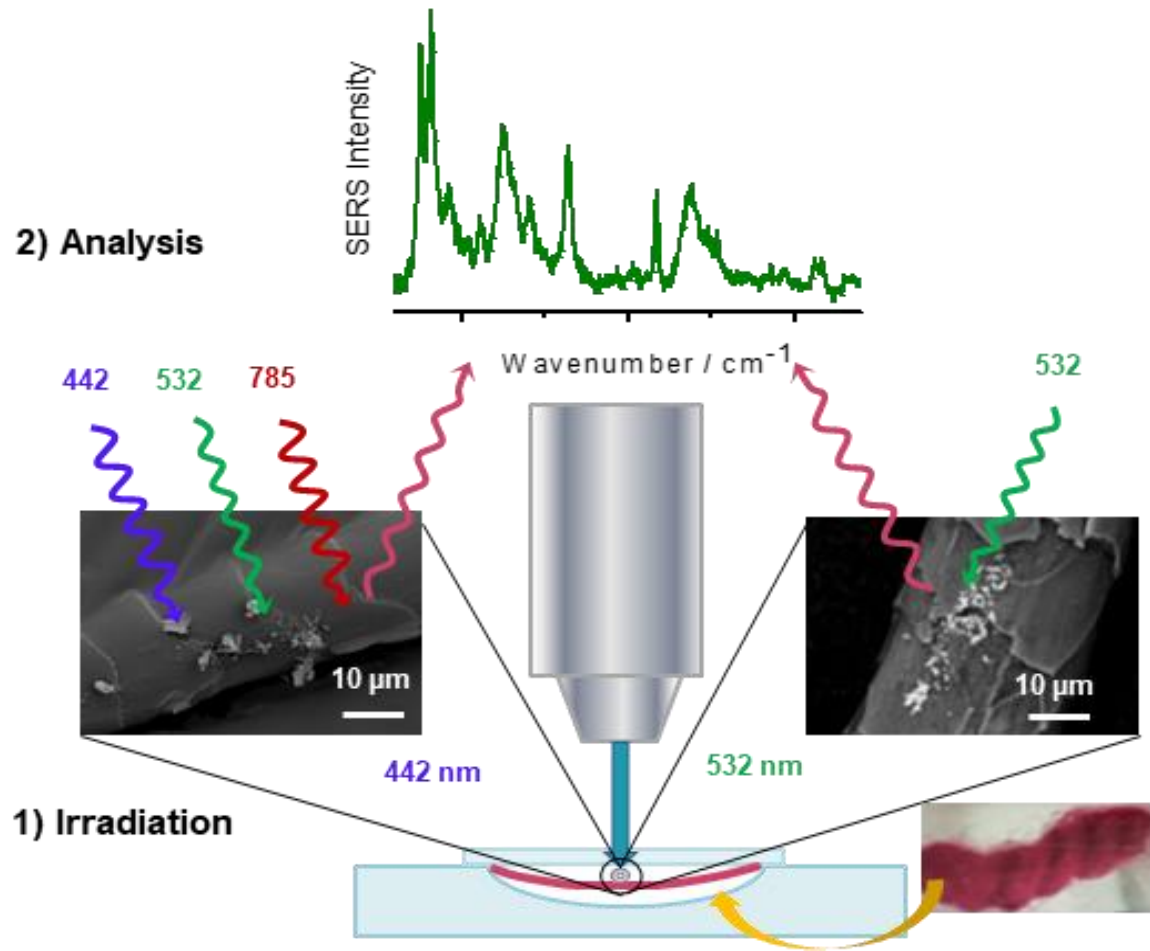
# Fabricación y caracterización de NPs

## Fotorreducción

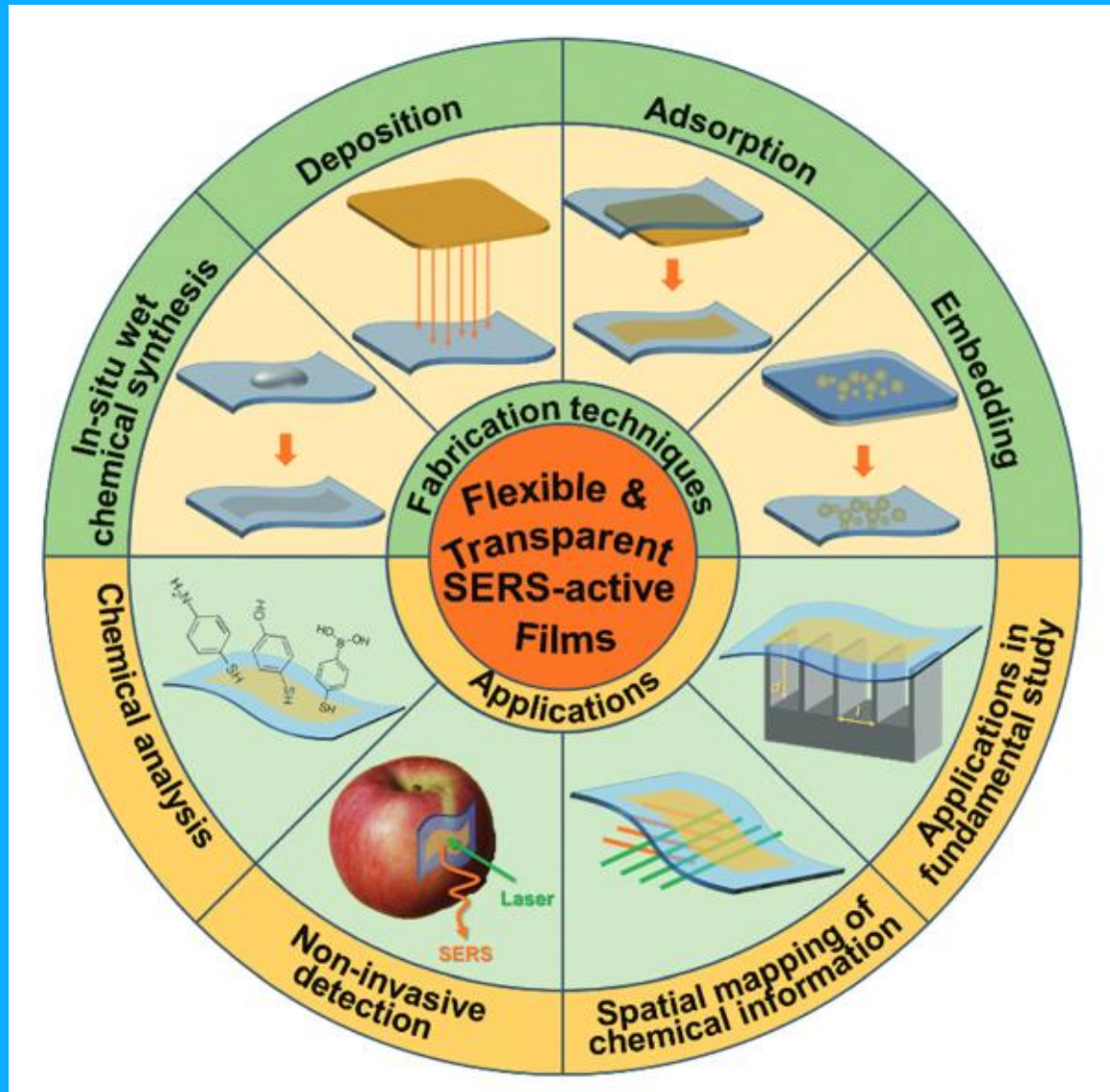
Tiempo  
Longitud de onda  
Potencia

## 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<sup>†</sup>

M. V. Cañamares,<sup>a,b\*</sup> D. A. Reagan,<sup>c</sup> J. R. Lombardi<sup>b</sup> and M. Leona<sup>d</sup>

### 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,<sup>a</sup> Francesca Gallazzi,<sup>a</sup> Alba Espina,<sup>b</sup> Maria Vega Cañamares,<sup>b\*</sup> Silvia Prati,<sup>a</sup> Rocco Mazzeo<sup>a</sup> and Santiago Sanchez-Cortes<sup>b</sup>

# 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](http://interscience.wiley.com)

## TECHNICAL NOTE CRIMINALISTICS

Vinesh Rana,<sup>1</sup> M.A.; Maria V. Cañamares,<sup>2</sup> Ph.D.; Thomas Kubic,<sup>1</sup> Ph.D.; Marco Leona,<sup>3</sup> Ph.D.; and John R. Lombardi,<sup>2</sup> 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](http://pubs.acs.org/JPCC)

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

María Vega Cañamares,<sup>\*,†</sup> Federica Pozzi,<sup>‡</sup> and John R. Lombardi<sup>§</sup>

Chemical Physics 536 (2020) 110812



ELSEVIER

Contents lists available at [ScienceDirect](http://ScienceDirect)

Chemical Physics

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/chemphys](http://www.elsevier.com/locate/chemphys)



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

Syed K. Islam<sup>a,\*</sup>, Yin Pak Cheng<sup>b</sup>, Ronald L. Birke<sup>b</sup>, Maria Vega Cañamares<sup>c</sup>, Cyril Muehlethaler<sup>d</sup>,  
John R. Lombardi<sup>b</sup>



# SERS + DFT

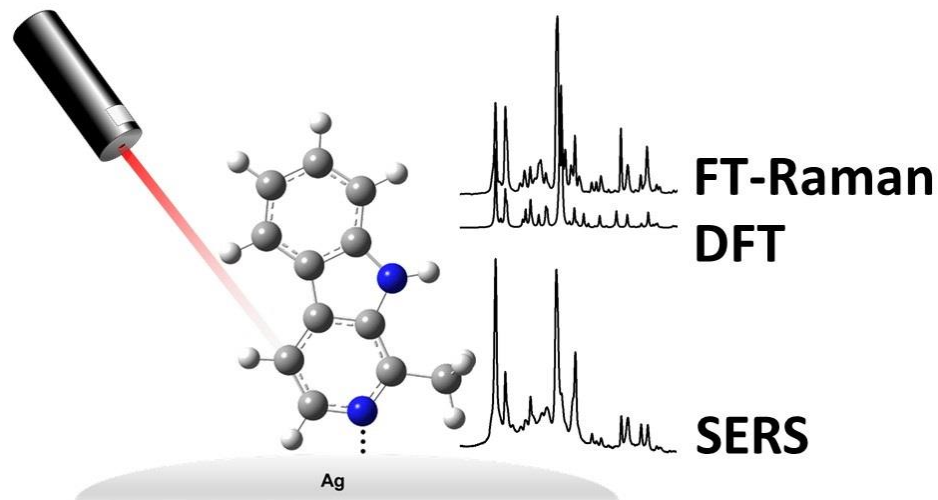
Trabajo experimental + computacional

Gaussian = optimización geometría + espectro Raman

Comparación espectro experimental + calculado

Análisis vibracional - modos normales

Interacción molécula-NP



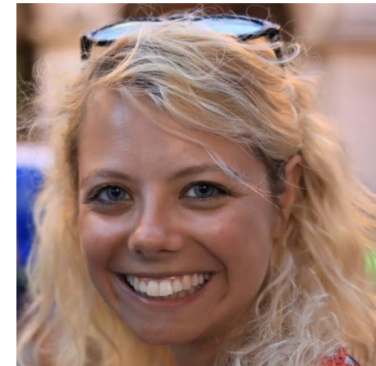
# IEM



# CSIC

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

## Espectroscopía Raman Intensificada por superficies: SERS



Dr. M<sup>a</sup> Vega Cañamares

[https://www.iem.cfmac.csic.es/evpm//group\\_ssasp.html](https://www.iem.cfmac.csic.es/evpm//group_ssasp.html)

E-mail: [mvca@iem.cfmac.csic.es](mailto:mvca@iem.cfmac.csic.es)