

# 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)

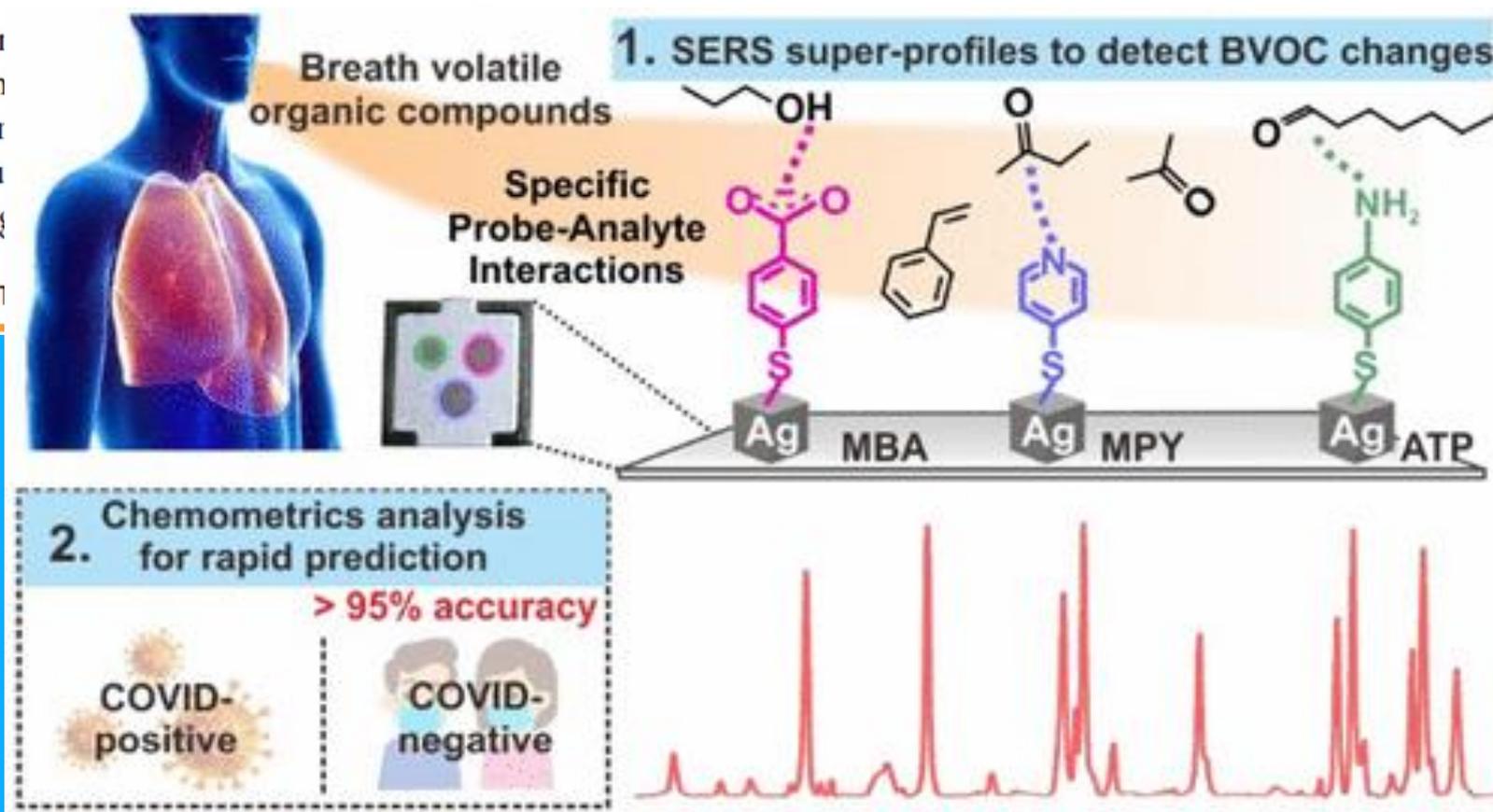
Miércoles, 22 Marzo 2023

# 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

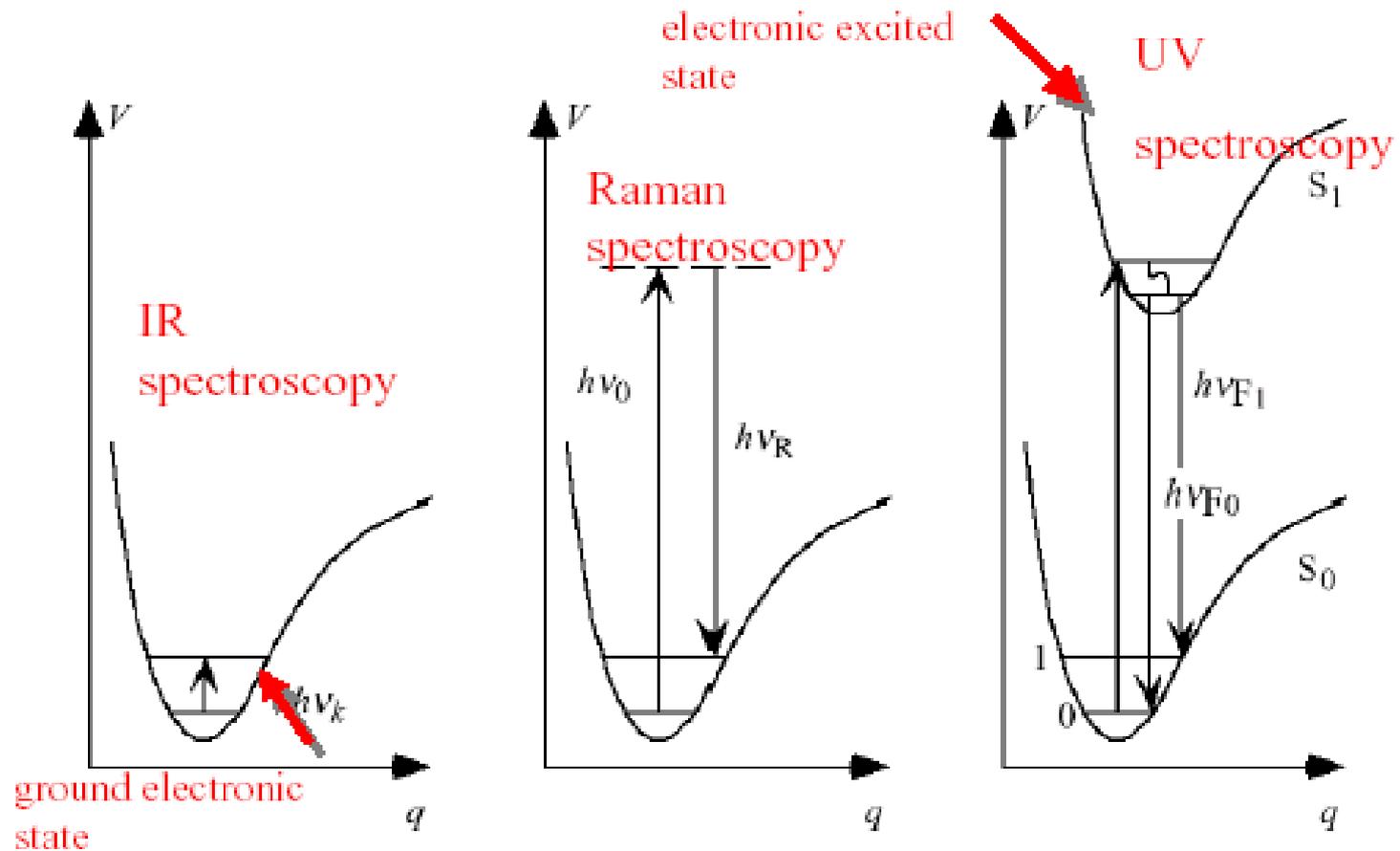


Cite 1



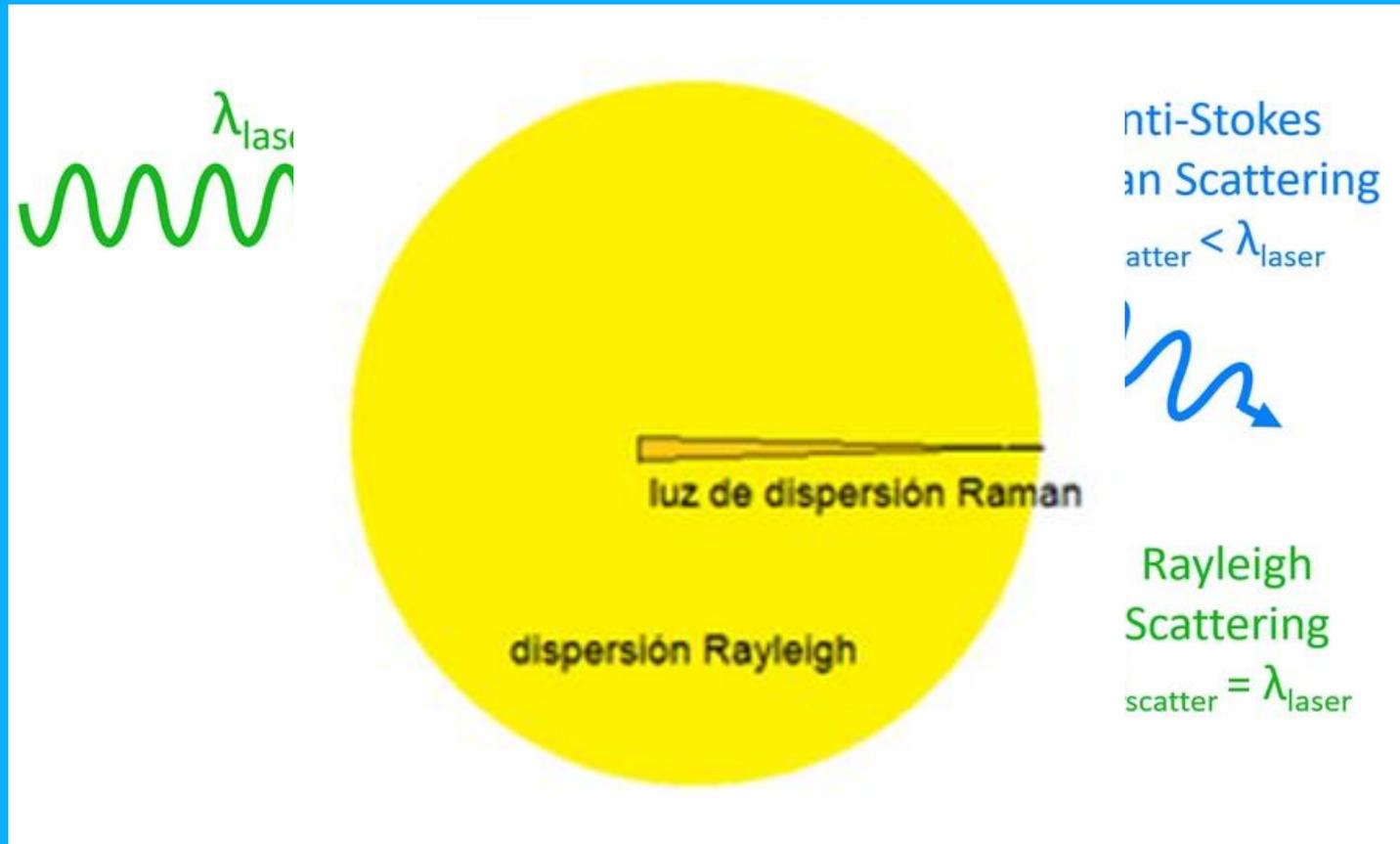
# Espectroscopía Raman

# Espectroscopía vibracional

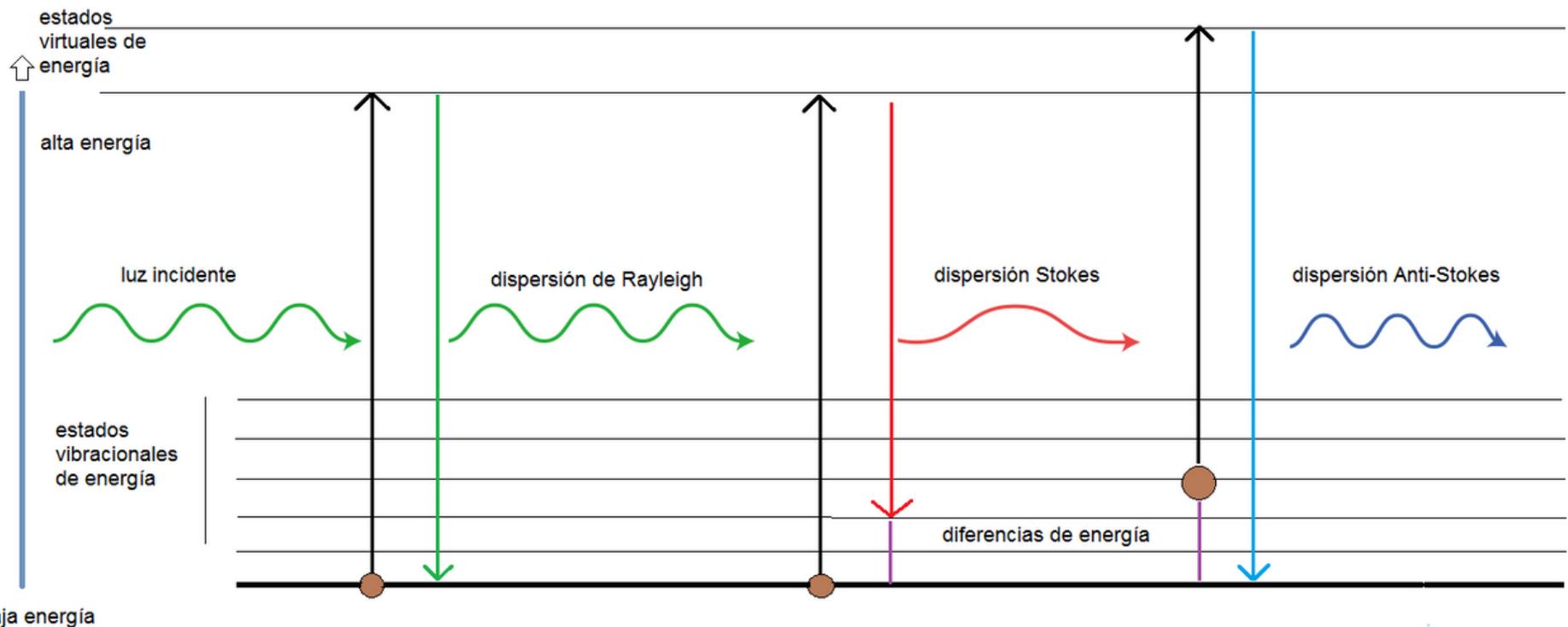


. a.) Infrared absorption; b.) Raman scattering; c.) fluorescence

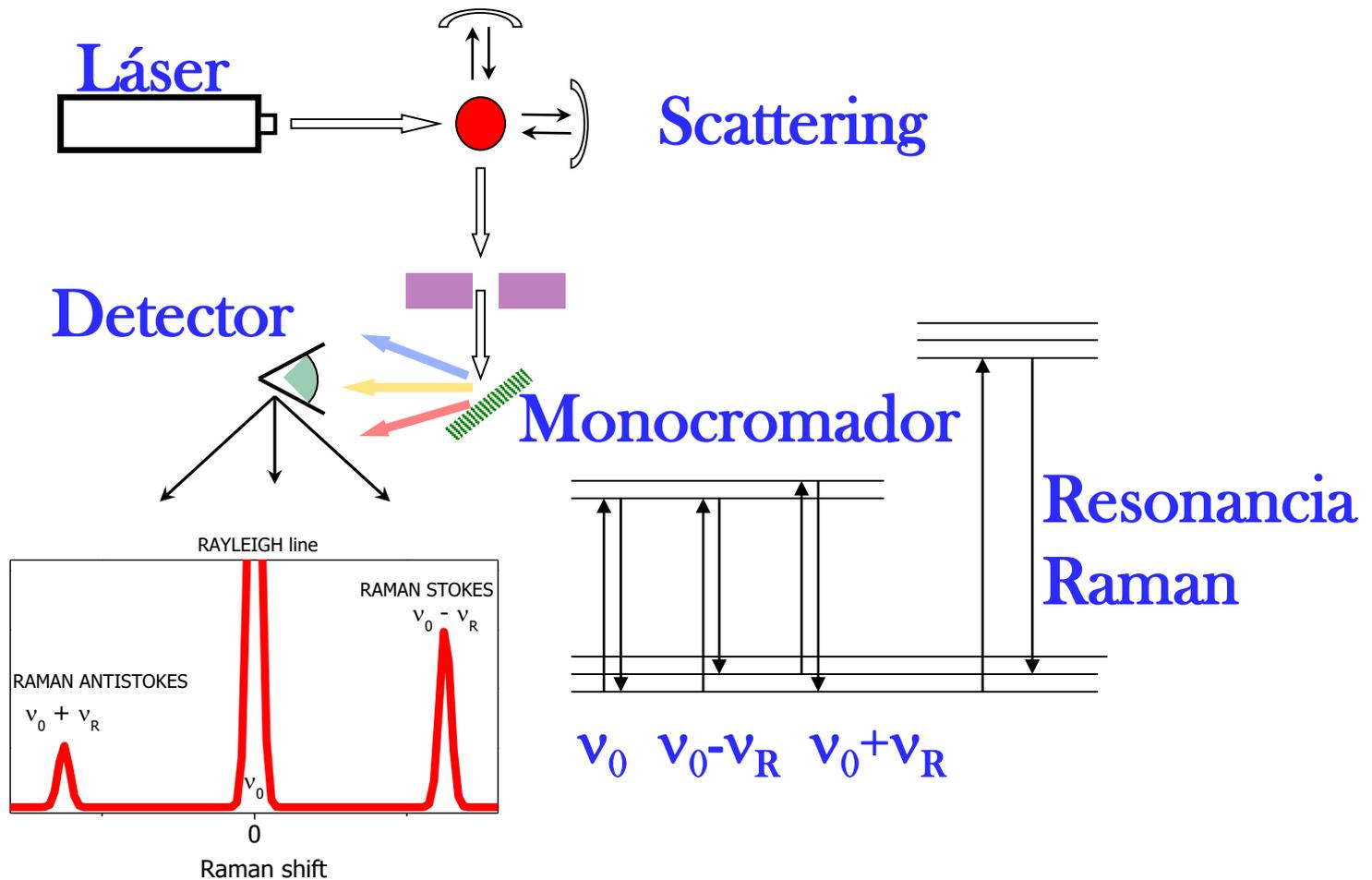
# Tipos de dispersión (scattering)



# 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



**Nanotecnología**



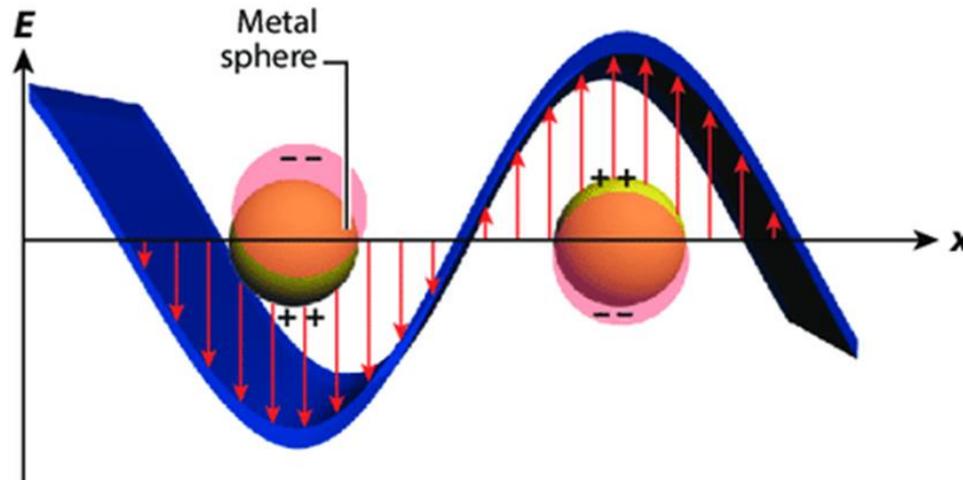
**SERS**

**Espectroscopía**

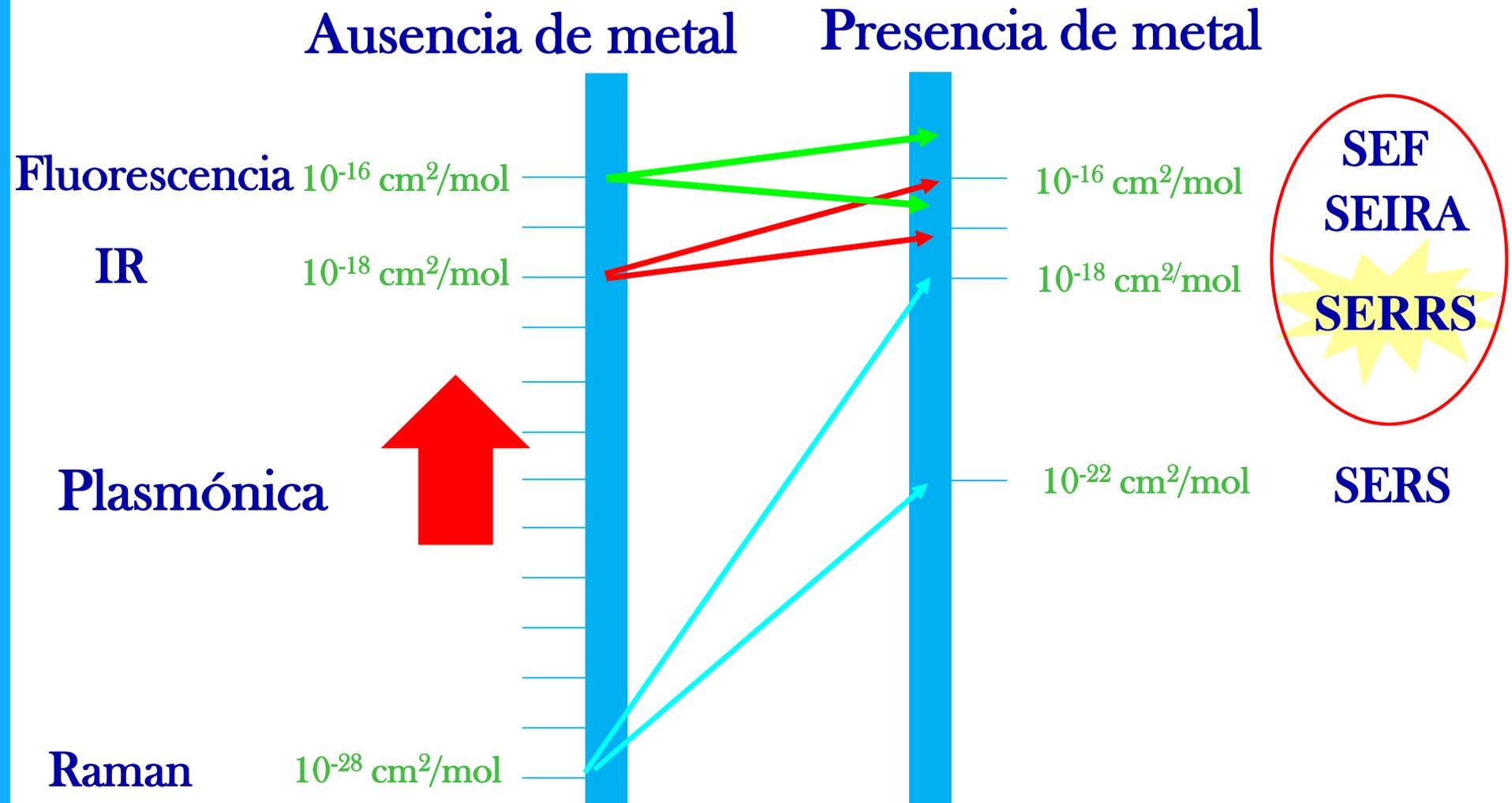
# Espectroscopía sobre NPs metálicas

## 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



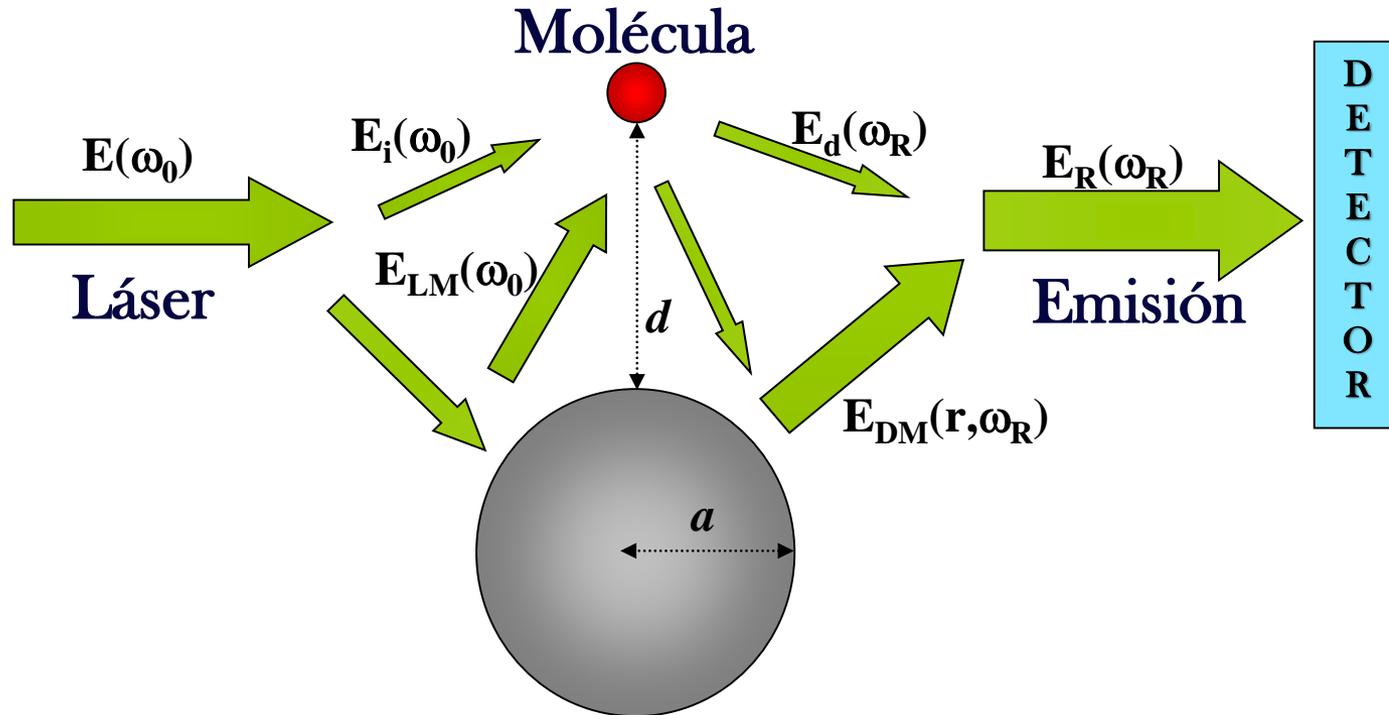
# Ganancia de señal espectroscópica: sección eficaz



# Mecanismos SERS

## Mecanismo electromagnético (EM)

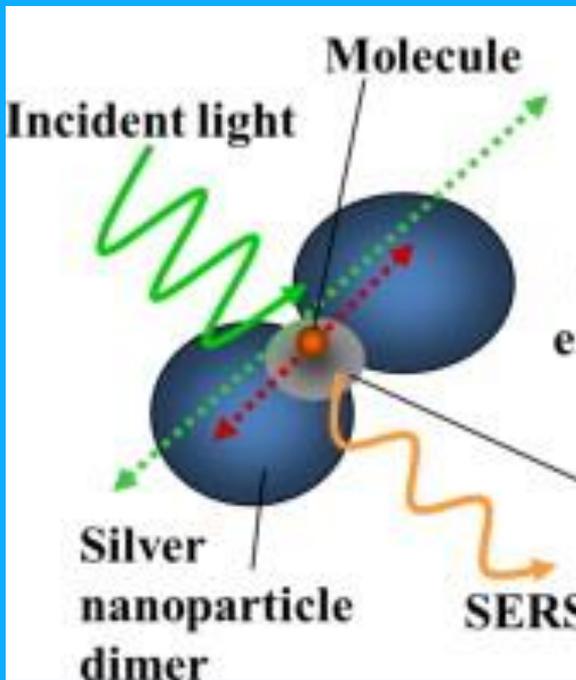
- Intensificación doble



## 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

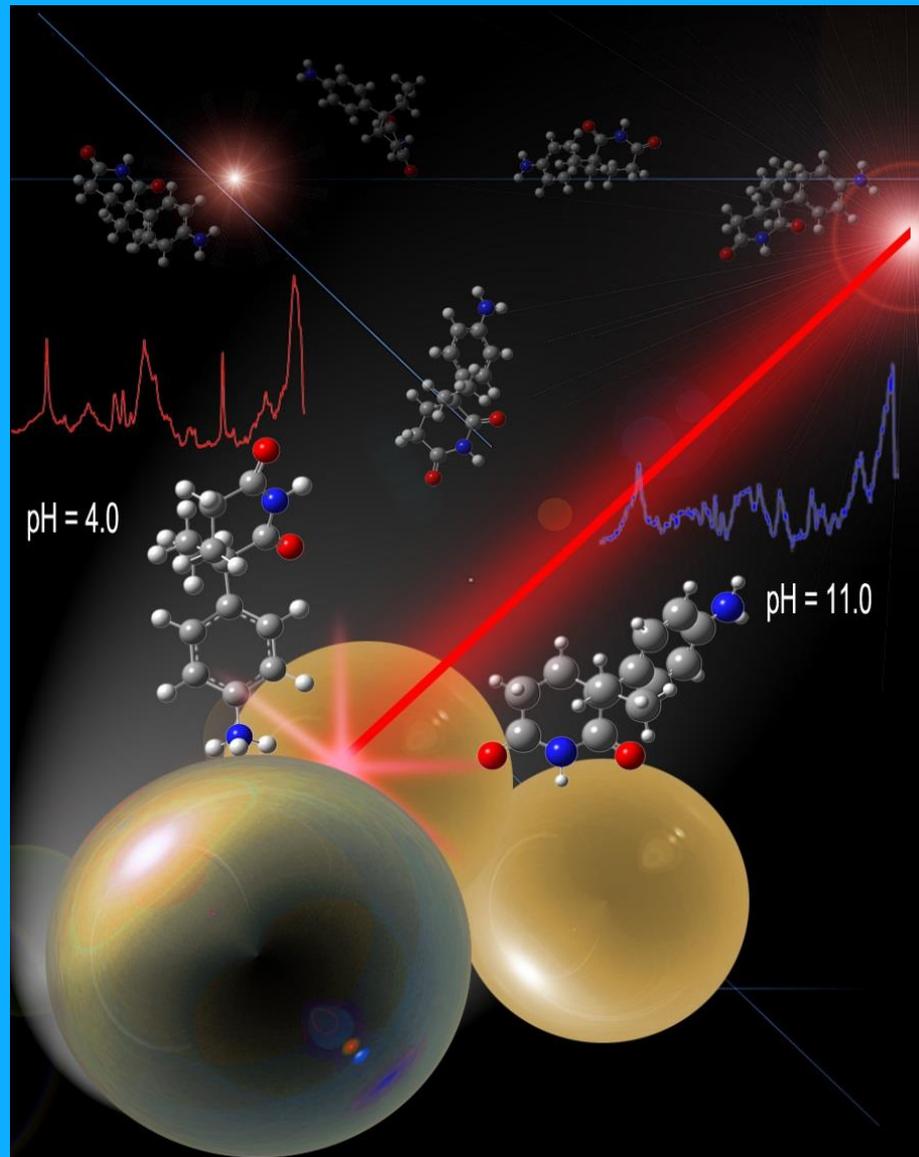
## Orientación

(Reglas de selección SERS)

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

Efecto de corto alcance

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



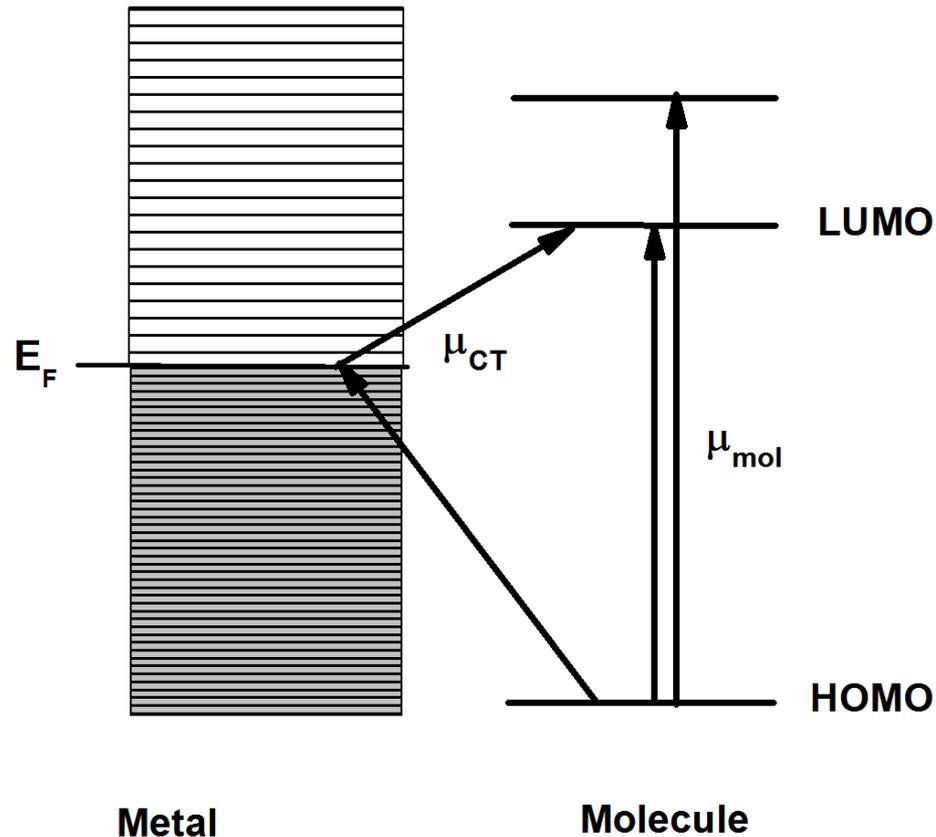
# Mecanismo Químico (CM)

## 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

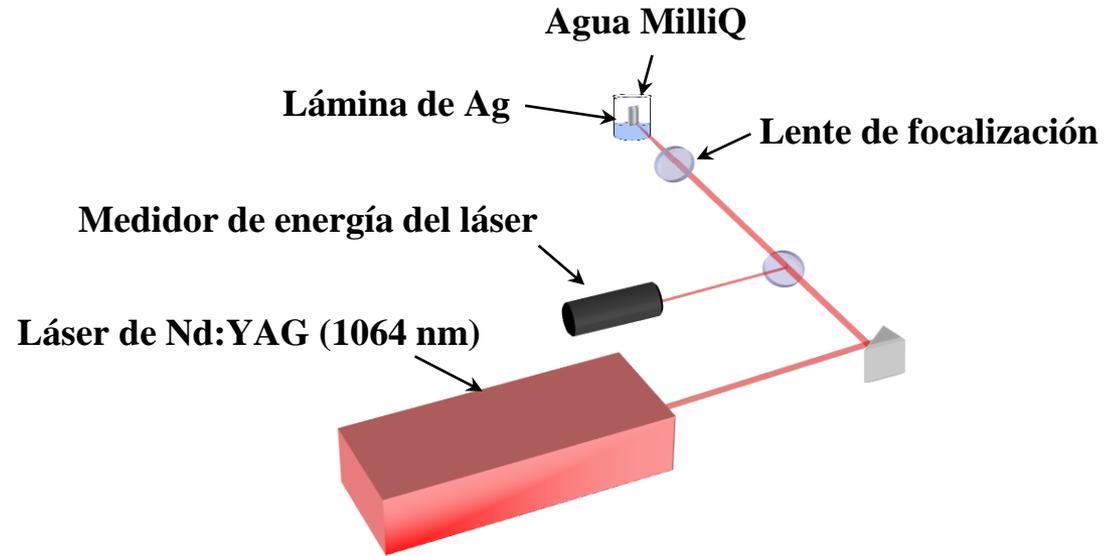
# Fabricación y caracterización de NPs

## Ablación láser

Tiempo

Fluencia

Longitud de onda



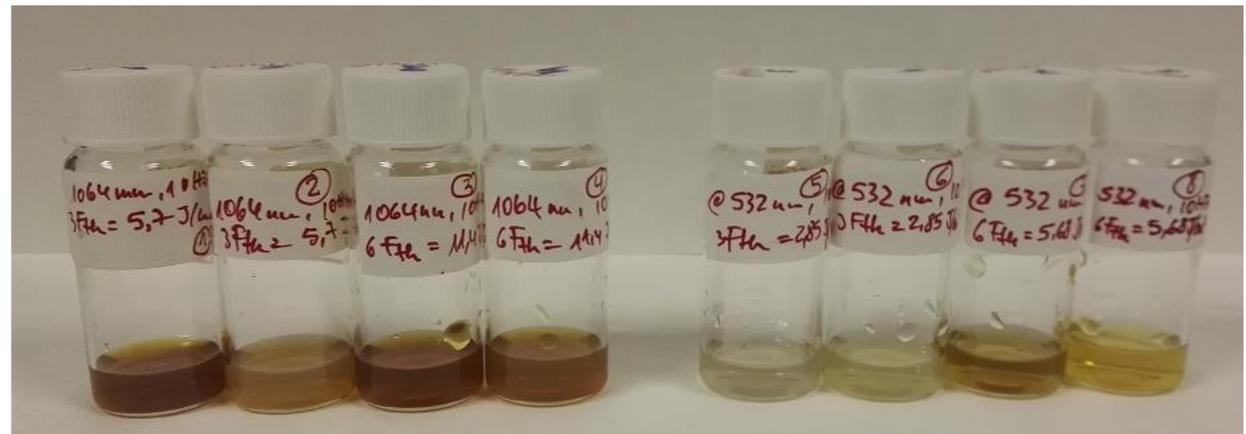
## Caracterización

UV-Vis

Microcopía SEM

Espectroscopía

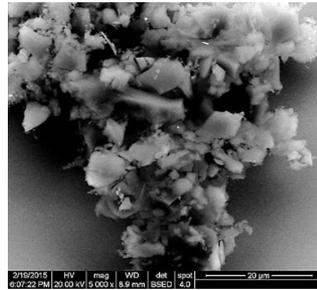
Raman



# Fabricación y caracterización de NPs

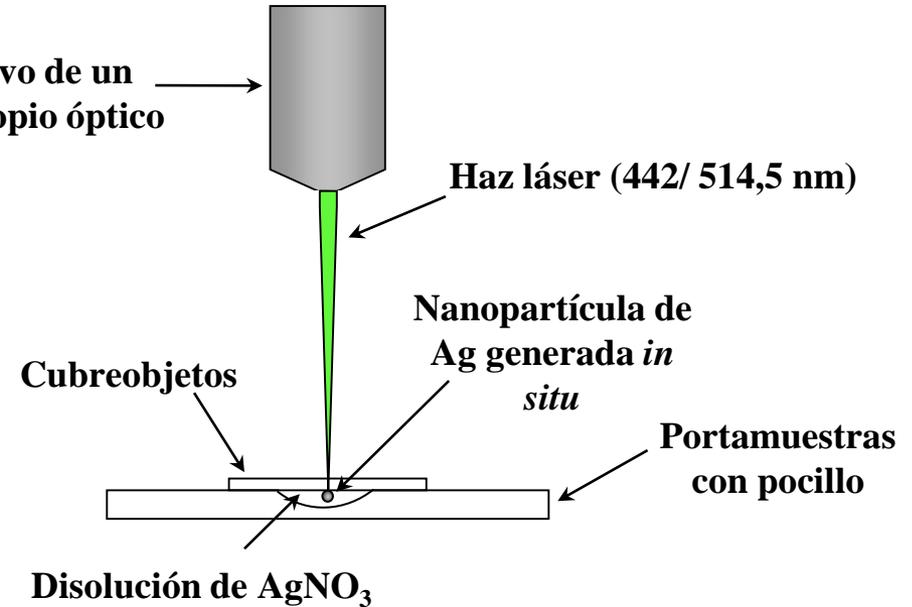
## Fotorreducción

Tiempo  
Longitud de onda  
Potencia



## Caracterización

Objetivo de un  
microscopio óptico



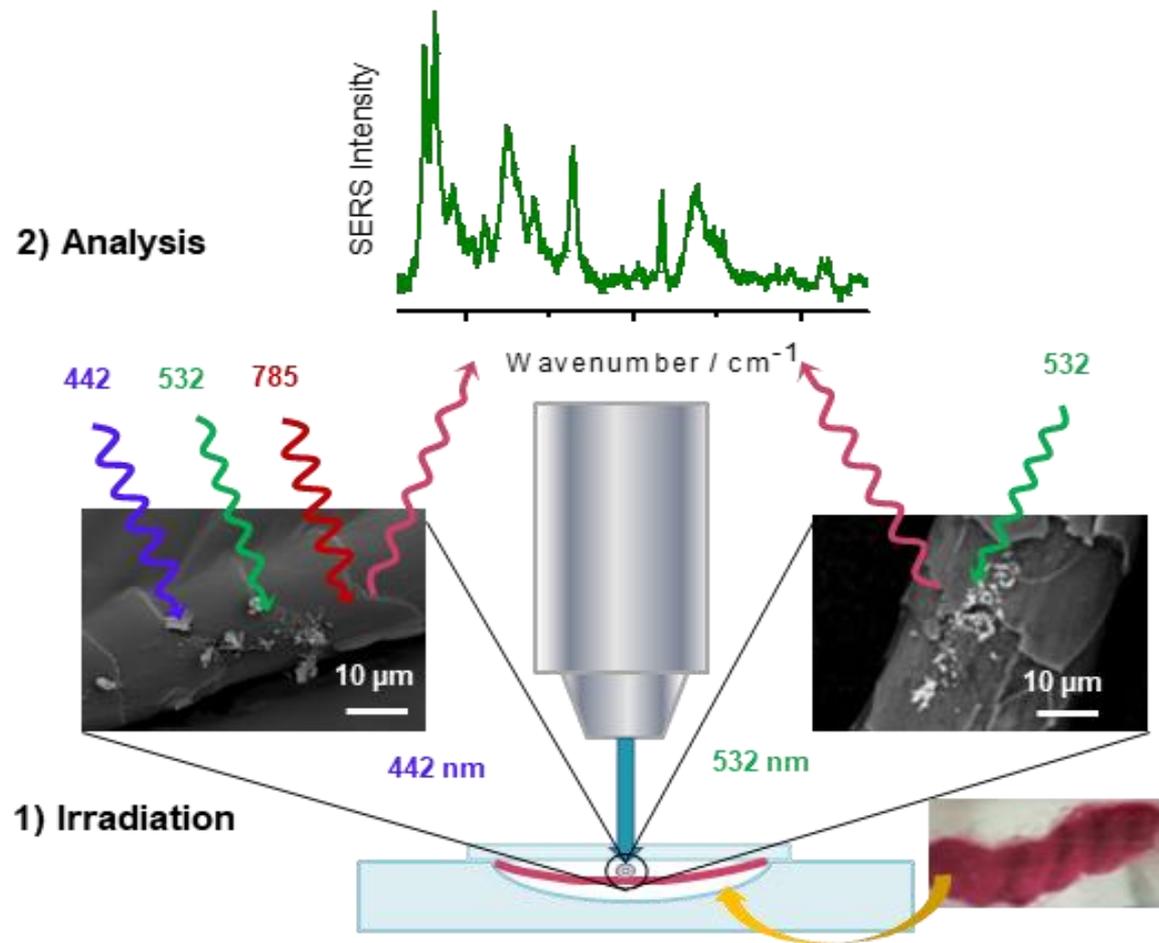
# Fabricación y caracterización de NPs

## Fotorreducción

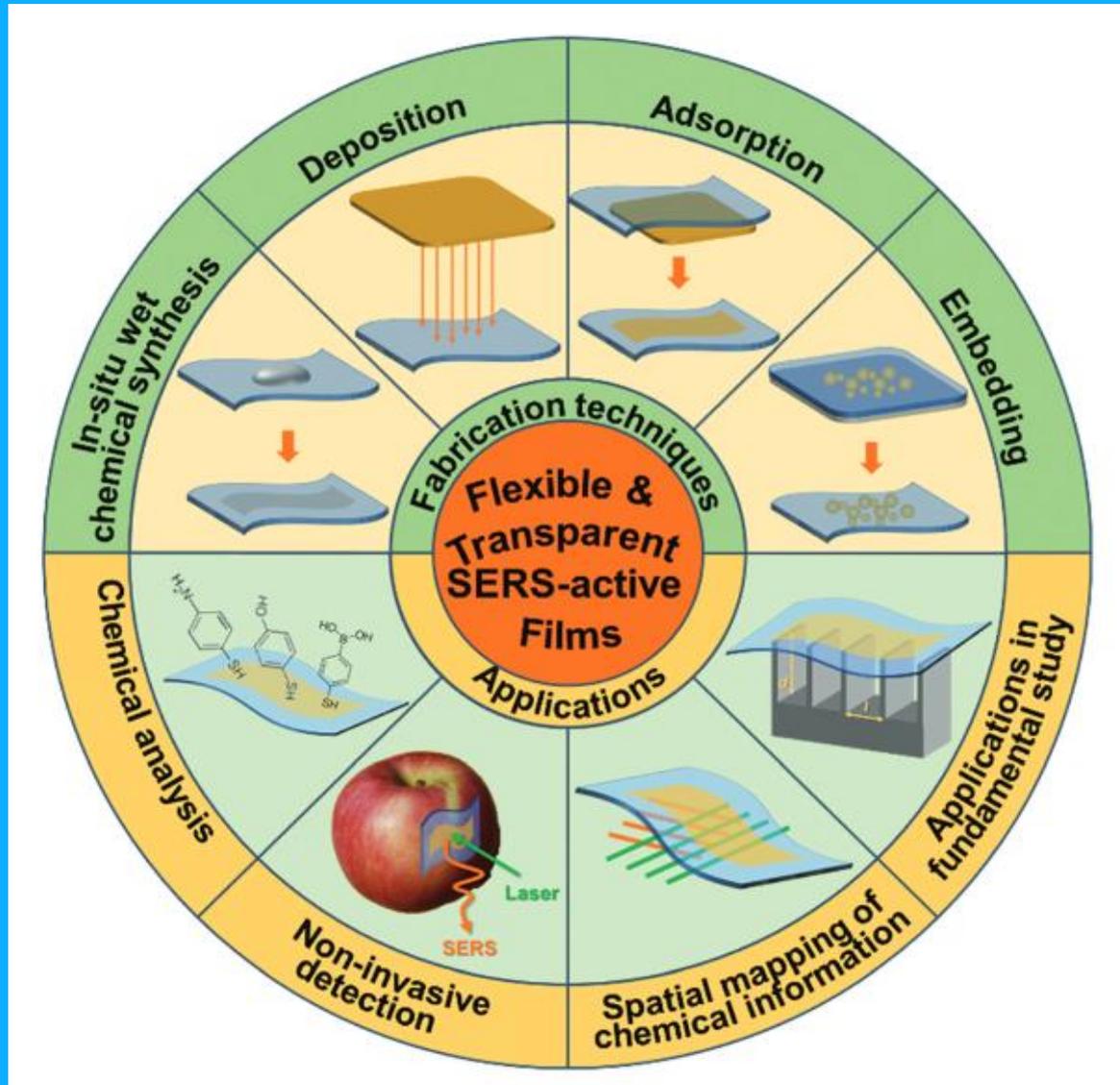
Tiempo  
Longitud de onda  
Potencia

## Caracterización

Microcopia SEM  
Espectroscopía Raman



# Soportes flexibles - Sensores



# Aplicaciones SERS



**Colorantes**

**Tintas**

**Tapices**

**Pinturas**

**Manuscritos**



**Drogas**

**Pinturas**

**Tintas**

**Falsificaciones**



**Pesticidas**

**Contaminantes**

**Efecto en suelos**

# SERS + DFT

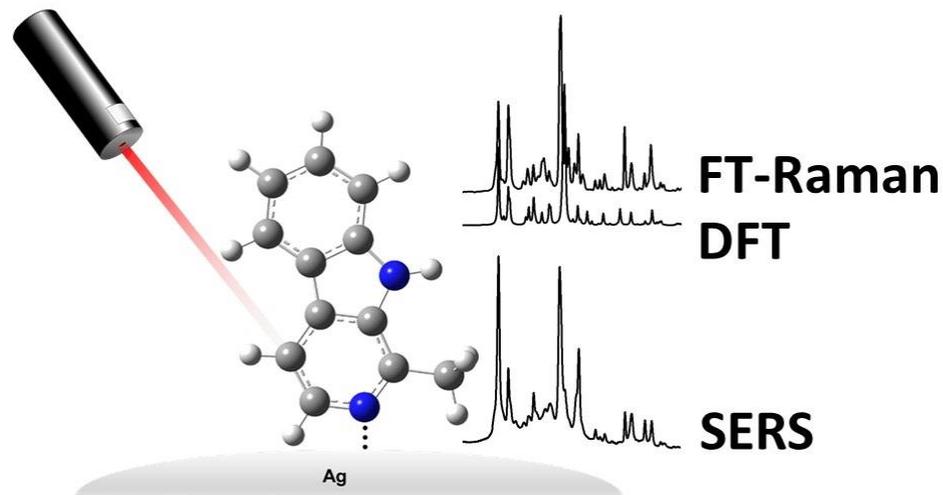
Trabajo experimental + computacional

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)