

Fondamenti di Spettroscopia Molecolare: Hardware

CREIAMO
UNA SCIENZA MIGLIORE
TU ED AGILENT

Nel quadro del proprio impegno nei confronti del mondo accademico, Agilent Technologies consente l'accesso a contenuti di proprietà dell'azienda.

Questa serie di diapositive è stata creata da Agilent esclusivamente per l'insegnamento. Qualora si desiderino utilizzare le immagini, gli schizzi o i disegni per altri scopi, contattare anticipatamente Agilent.

Sommario

Introduzione

- [Classificazione](#)

Spettroscopia molecolare

- [Generale](#)
- [Spettroscopia UV-VIS](#)
 - [Impostazioni generali](#)
 - [Sorgente luminosa](#)
 - [Dispositivi di dispersione](#)
 - [Rivelatori](#)
 - [Sistema](#)
 - [Analisi qualitativa e quantitativa](#)
 - [Applicazioni](#)
 - [Esempi](#)
 - [Funzionalità](#)

- [Spettroscopia a fluorescenza](#)
 - [Impostazioni generali](#)
 - [Sorgente luminosa](#)
 - [Sistema](#)
 - [Applicazioni](#)
 - [Esempi](#)
 - [Funzionalità](#)
- [Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier](#)
 - [Impostazioni generali](#)
 - [Interferogramma](#)
 - [Analisi qualitativa e quantitativa](#)
 - [Sistema](#)
 - [Applicazioni](#)
 - [Esempi](#)
 - [Funzionalità](#)
- [Ulteriori informazioni](#)



Introduzione

Classificazione

La spettroscopia è una materia vasta che comprende numerose sotto-discipline classificabili in base al tipo di materiale sottoposto ad analisi. Questa presentazione si focalizza sulla **spettroscopia molecolare**.

ATOMI

Spettroscopia atomica

- AAS
- MP-AES
- ICP-OES
- ICP-MS

MOLECOLE

Spettroscopia molecolare

- UV-VIS
- UV-VIS-NIR
- FTIR
- Fluorescenza

CRISTALLI

- Cristallografia a raggi X

NUCLEI

- Risonanza magnetica nucleare

Spettroscopia molecolare

Informazioni generali

La combinazione degli atomi all'interno delle molecole dà luogo a stati di energia unici e, di conseguenza, a spettri altrettanto unici derivanti dalla transizione tra tali stati.

Gli spettri molecolari si possono ottenere tramite:

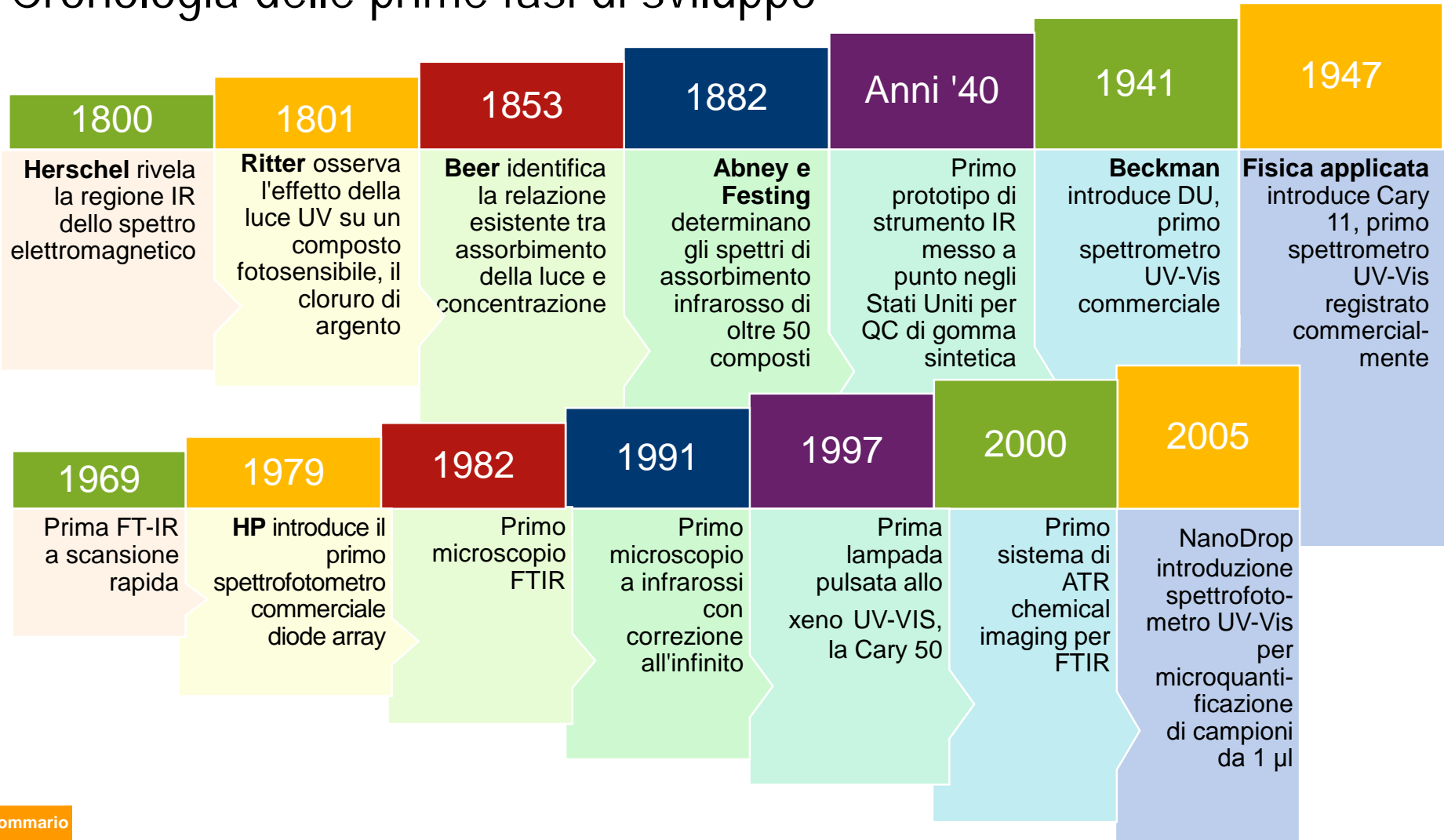
- stati di spin elettronico
- rotazioni molecolari
- vibrazioni molecolari
- stati elettronici

Spettroscopia molecolare

	Per applicazione
UV-Vis	Studia le interazioni tra energia UV-visibile ed elettromagnetica nell'infrarosso vicino e materia
FTIR	Studia le interazioni tra energia elettromagnetica a infrarossi e materia
Fluorescenza	Studia l'emissione di energia elettromagnetica generata in seguito all'interazione tra energia UV-visibile elettromagnetica e materia

Introduzione

Cronologia delle prime fasi di sviluppo



← Sommario

Spettroscopia UV-Vis

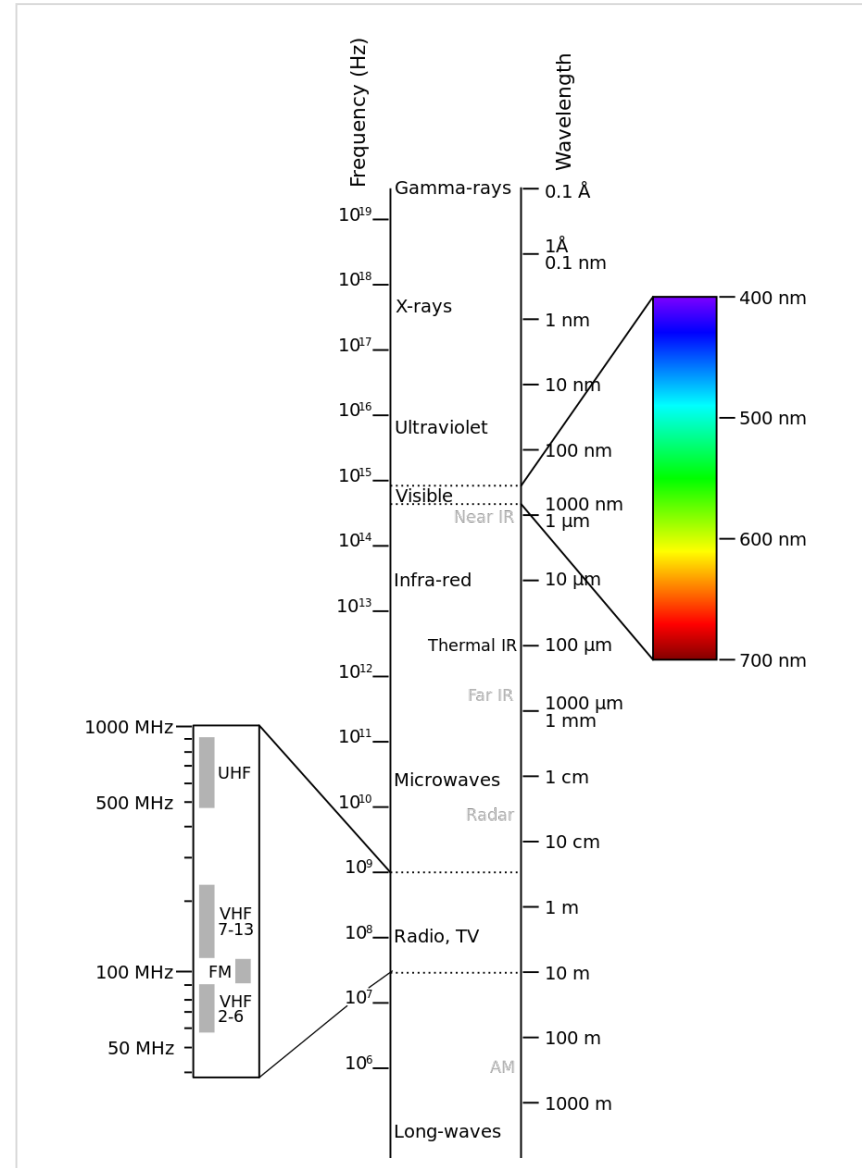
Informazioni generali

Lo **spettro elettromagnetico** si estende su svariati ordini di grandezza in termini di frequenza e di lunghezza d'onda.

La luce visibile rappresenta soltanto una piccola frazione dello spettro elettromagnetico.

- Luce ultravioletta: da 190 a 400 nm
- Luce visibile: da 400 a 800 nm
- Luce infrarossa: da 800 a 100.000 nm

*"Spettro
elettromagnetico" di
Victor Blacus*



Fonte: [Wikipedia \(sito inglese\)](#)

Spettroscopia UV-Vis

Informazioni generali

Uno spettrofotometro misura la quantità di luce trasmessa tramite, o riflessa da un campione.

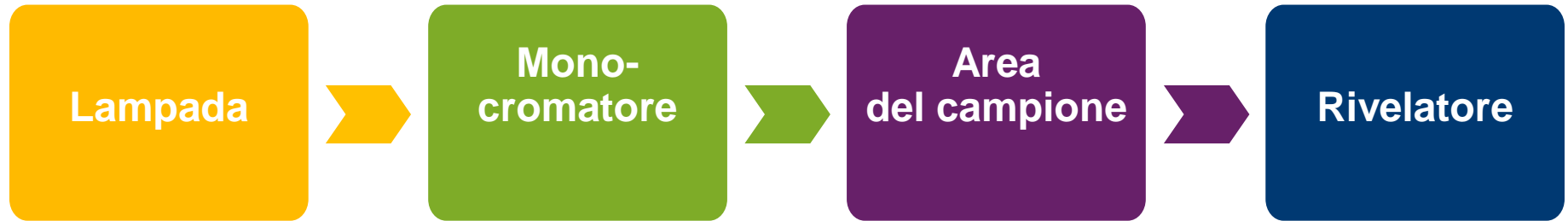
Tutti gli spettrofotometri di ricerca sono in grado di misurare la percentuale di luce trasmessa o riflessa a qualsiasi lunghezza d'onda da circa 190 nm (mid-UV) ad almeno 900 nm (infrarosso vicino) a una risoluzione con particelle di dimensioni inferiori a 2 nm.

Nelle soluzioni, la percentuale di luce trasmessa è espressa come assorbanza, la quale è direttamente proporzionale alla concentrazione.



Spettroscopia UV-Vis

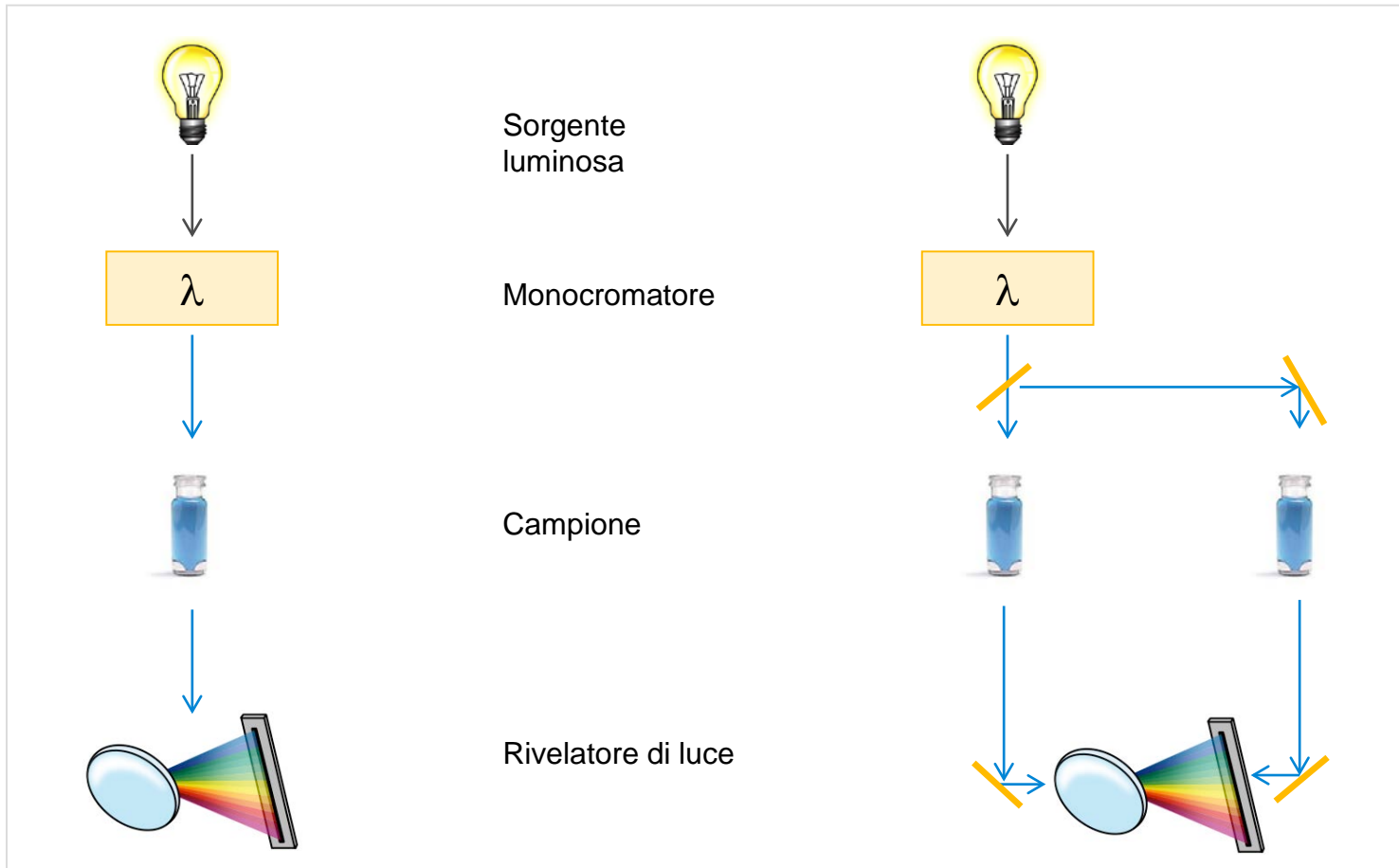
Impostazioni generali



- La lampada (sorgente) emette luce con una caratteristica gamma di lunghezze d'onda.
- Il monocromatore (dispositivo di dispersione) seleziona una lunghezza d'onda.
- L'analita assorbe la luce (area del campione).
- La luce trasmessa viene misurata (rivelatore).
- La concentrazione è determinata attraverso il confronto con gli standard.

Spettroscopia UV-Vis

Impostazioni generali: Spettrometro a singolo o doppio raggio



Lo schema ottico a doppio raggio consente di correggere le variazioni di intensità luminosa.

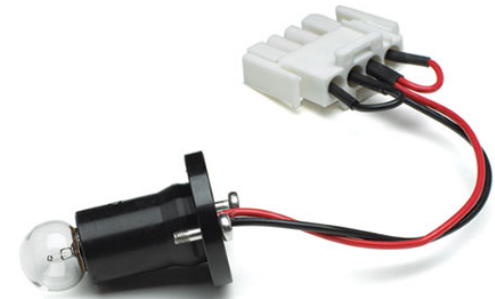
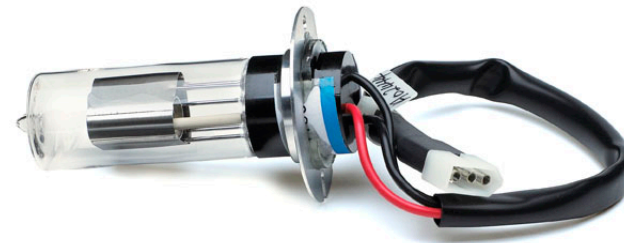
Spettroscopia UV-Vis

Sorgente luminosa

La sorgente luminosa ideale dovrebbe emettere un'intensità costante per tutte le lunghezze d'onda con ridotte emissioni di rumore e stabilità a lungo termine.

Sorgenti solitamente utilizzate negli spettrofotometri UV-Vis:

- **Lampada ad arco al deuterio** → fornisce intensità nella regione UV
- **Lampada alogena** → fornisce una buona intensità in corrispondenza della parte dello spettro UV e dell'intero campo visibile
- **Lampada allo xeno** → fornisce un buon continuum nella regione UV e in quella visibile



Sorgente al deuterio (sopra) e lampada alogena (sotto) usate con sistemi UV

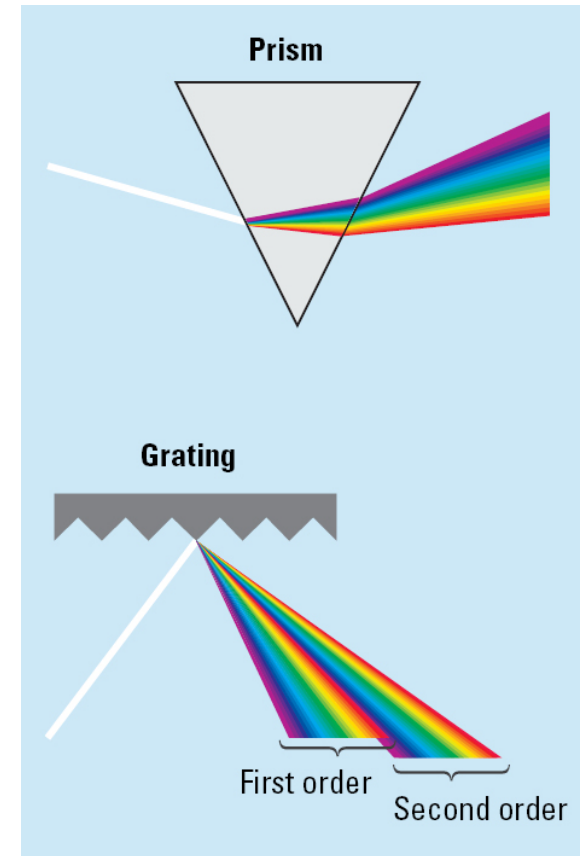
Spettroscopia UV-Vis

Dispositivi di dispersione

I dispositivi di dispersione emettono lunghezze d'onda di luce con diverse angolazioni. Se associati a una fenditura di uscita appropriata, questi dispositivi possono essere utilizzati per selezionare una particolare lunghezza d'onda (o, più precisamente, una gamma di lunghezza d'onda ristretta) di luce da una sorgente continua.

Esistono due tipi di dispositivi:

- **Prismi**
Generano un arcobaleno di luce solare; lo svantaggio sta nel fatto che l'angolo di dispersione è termosensibile.
- **Reticoli olografici**
Non sono termosensibili; la luce che cade sul reticolo viene riflessa a diverse angolazioni, a seconda della lunghezza d'onda.



Schema dei dispositivi di dispersione. Gli spettrometri di ultima generazione utilizzano la dispersione a reticoli.

Fonte: [Fundamentals of UV-visible spectroscopy](#)

Spettroscopia UV-Vis

Rivelatori

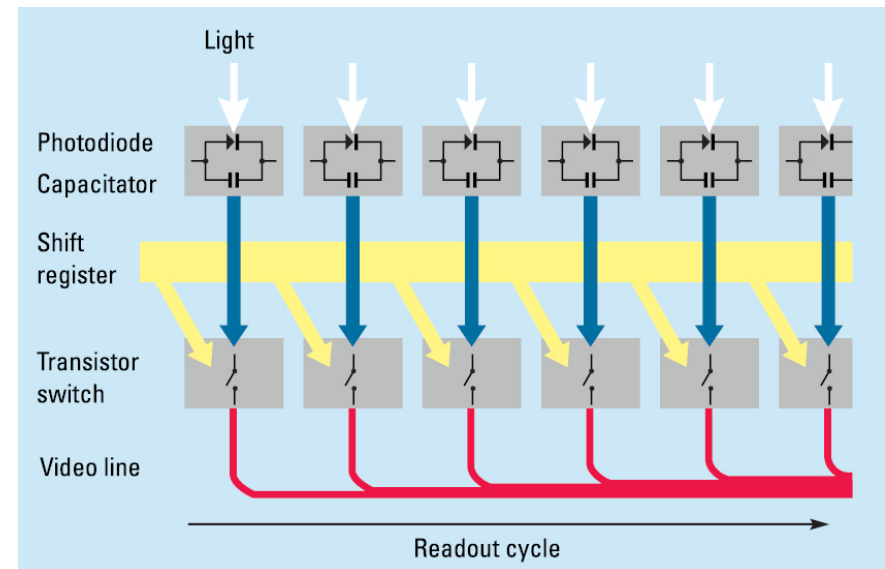
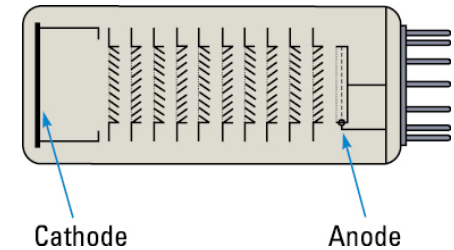
Un rivelatore converte un segnale luminoso in un segnale elettrico. Teoricamente, dovrebbe fornire una risposta lineare per una vasta gamma con ridotte emissioni di rumore e sensibilità elevata.

Rivelatore a tubo fotomoltiplicatore

Associa la conversione del segnale a diverse fasi dell'amplificazione all'interno del tubo; l'intero intervallo di lunghezze d'onda viene scansionato.

Rivelatore a fotodiodi

La luce che cade sul materiale semiconduttore consente agli elettroni di passarvi attraverso, riducendo quindi la carica in un condensatore connesso tramite il materiale. La carica necessaria per ricaricare il condensatore è proporzionale all'intensità della luce; l'intero intervallo di lunghezze d'onda viene misurato in una sola lettura.

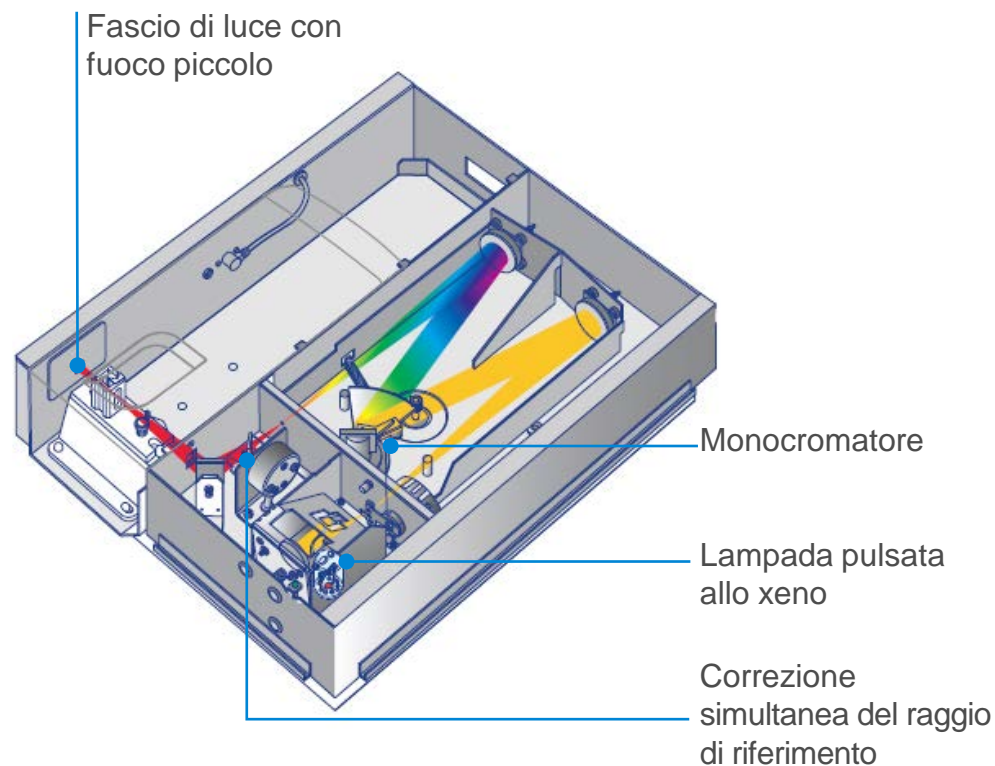


Schema di un rivelatore a tubo fotomoltiplicatore (sopra) e di uno a serie di fotodiodi (sotto).

Spettroscopia UV-Vis Sistema

Applicazioni principali

- Monitoraggio della cinetica
- Caratterizzazione di composti ignoti o sintetizzati di recente
- Valutazione della purezza del DNA
- Quantificazione del DNA e delle proteine
- Analisi dei nutrienti presenti nell'acqua, negli alimenti e in agricoltura



Spettroscopia UV-Vis

Analisi qualitativa e quantitativa

Solitamente, gli spettri UV-visibili mostrano solo alcune bande di assorbimento estese. La maggior parte dell'assorbimento da parte dei composti organici è il risultato della presenza di legami π (insaturi).

Un cromoforo è un gruppo molecolare che generalmente contiene un legame π . Quando viene inserito in un idrocarburo saturo (che non presenta spettri di assorbimento UV-visibili), produce un composto con assorbimento compreso tra 185 e 1000 nm.

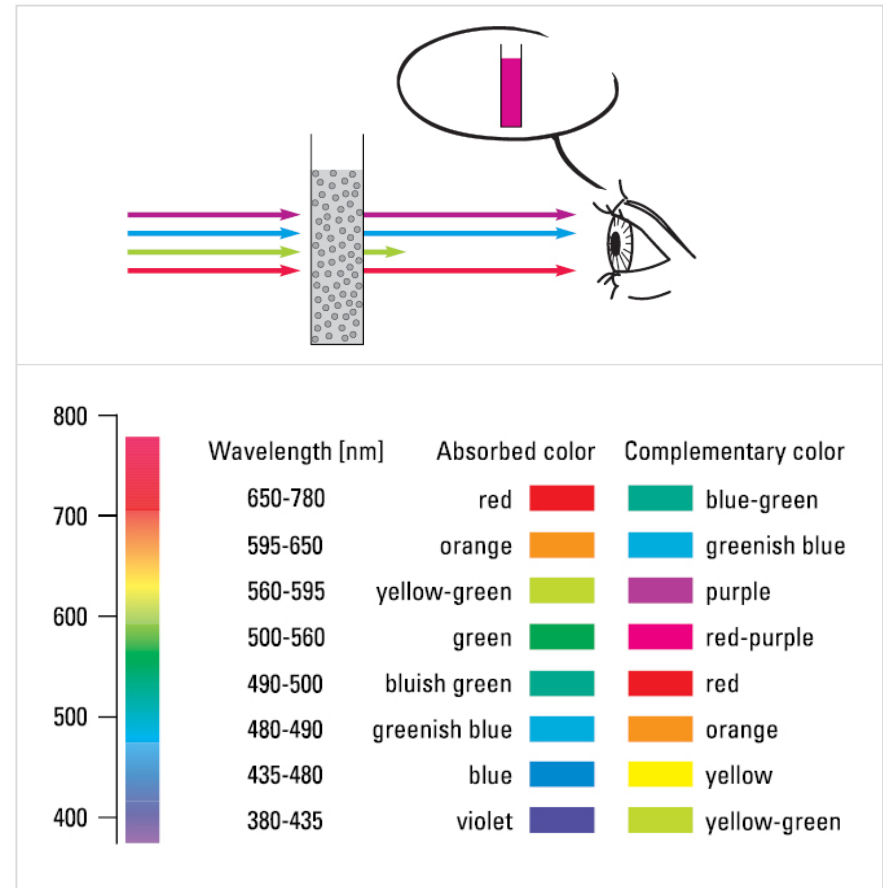
Cromofori selezionati e relativa assorbimento massima

Cromoforo	Formula	Esempio	λ_{\max} (nm)
Carbonile (chetone)	RR'C=O	Acetone	271
Carbonile (aldeide)	RHC=O	Acetaldeide	293
Carbossile	RCOOH	Acido acetico	204
Ammide	RCONH ₂	Acetammide	208
Nitrocomposto	RNO ₂	Nitrometano	271

Spettroscopia UV-Vis

Analisi qualitativa e quantitativa

Il colore è una proprietà fondamentale di una sostanza. Il colore della materia è legato alla relativa assorbività o riflettività. L'occhio umano vede il colore complementare rispetto a quello assorbito.



Trasmissione e colore (sopra)
Assorbanza e colori complementari (sotto)

Fonte: [Fundamentals of UV-visible spectroscopy](#)

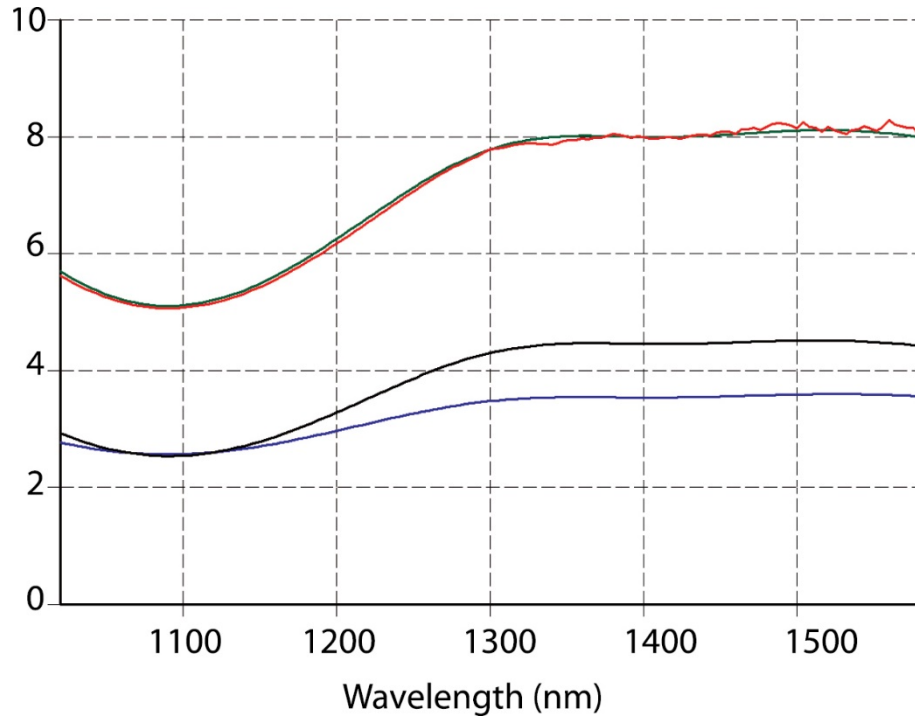
Spettroscopia UV-Vis

Applicazione

MERCATO	APPLICAZIONI
Materiale	<ul style="list-style-type: none">• Materiali sfusi• Componenti ottici: filtri, lenti, specchi, beamsplitter, polarizzatori, vetro• Film sottili, rivestimenti ottici e antiriflesso, materiali nanocompositi, vernici e celle solari• Occhiali protettivi• Pasta di legno e carta• Materiale mimetico• Occhiali da sole• Tessuti
Prodotti chimici	<ul style="list-style-type: none">• QA/QC su materie prime e prodotti finiti nell'industria manifatturiera• Identificazione chimica o studio dei processi chimici: laboratori di chimica sintetica, ricerca fotochimica, caratterizzazione di nanoparticelle, ricerca chimica delle superfici• Chimica analitica• Misurazioni del colore: Vernici e tessuti (color matching, QA/QC su tessuti, misure SPF)
Bioteχνologie e farmaceutica	<ul style="list-style-type: none">• Analisi del legame chimico• Reazioni enzimatiche• Analisi di campioni biologici a elevata torbidità, tessuti e omogenati cellulari• Misurazioni di ioni intracellulari• Determinazione di acido nucleico (RNA/DNA) e proteine• Misurazioni di denaturazione/rinaturazione di DNA e proteine

Spettroscopia UV-Vis

Misurazione dell'assorbanza del filtro in vetro Schott



Spettri del filtro UG11 1 (blu), filtro UG11 2 (nero) e spettro del filtro UG11 1 e 2 insieme (rosso). Lo spettro verde è il risultato previsto basato sulla somma dello spettro blu e nero.

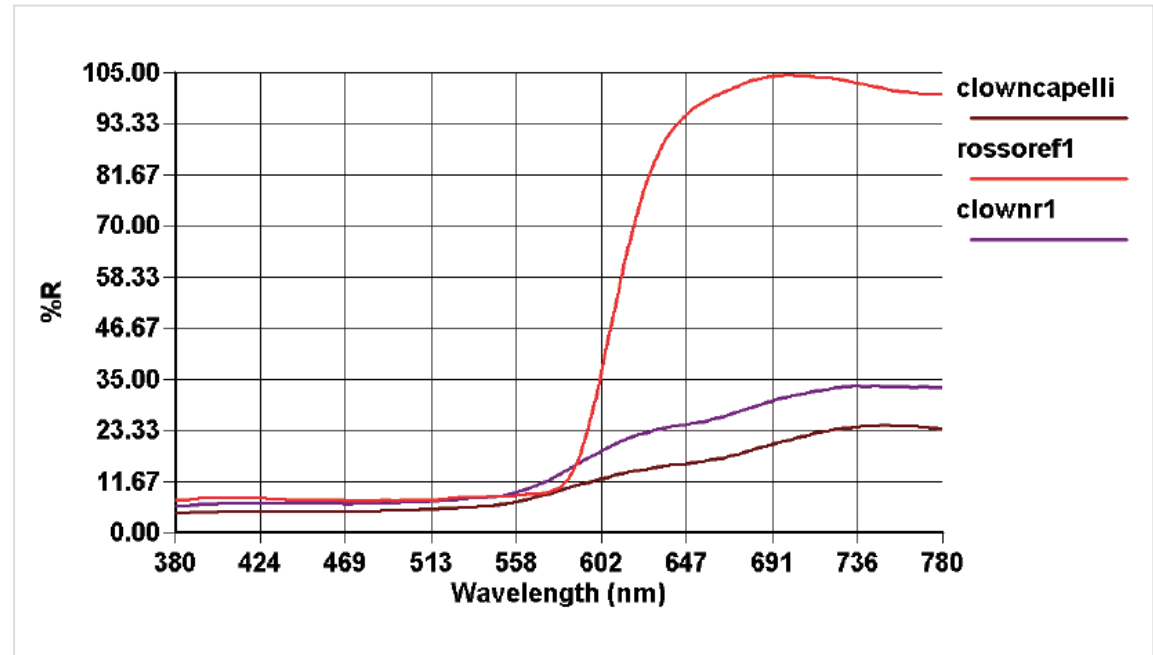
Due filtri sono stati misurati separatamente e quindi sommati tra loro (previsione). Questi risultati sono identici rispetto a quelli dei due filtri misurati insieme (misurazione).

Spettroscopia UV-Vis

Misurazione del colore della vernice su tela



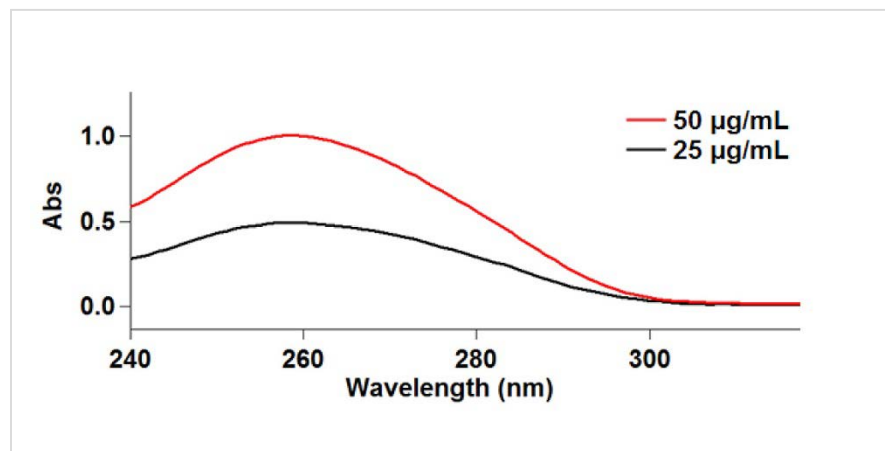
Gli spettri mostrano che i campioni clownnr1 e clowncapelli sono composti da materiali simili.



Fonte: [Measuring the color of a paint on canvas directly with external diffuse reflectance using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer](#)

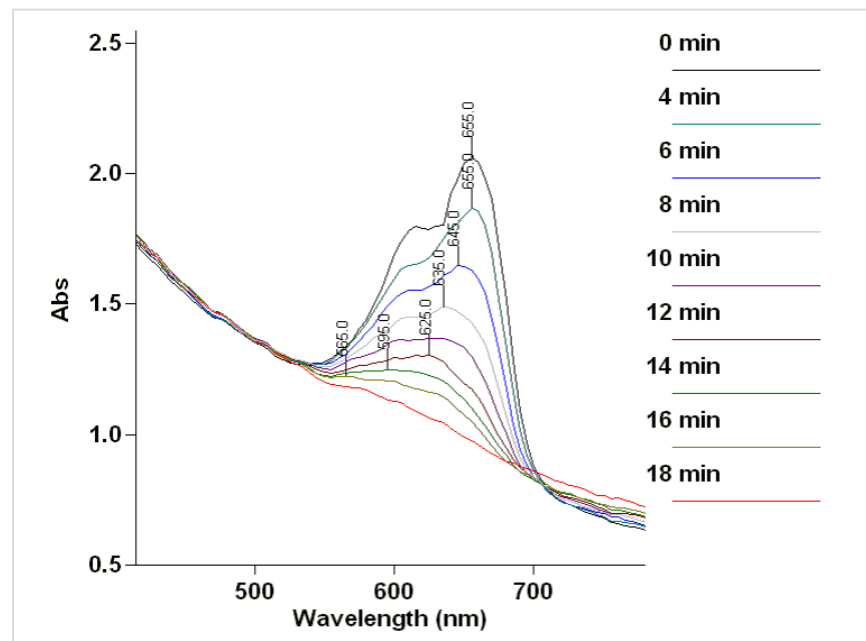
Spettroscopia UV-Vis

Analisi della purezza e analisi cinetica



Scansioni di campioni di DNA da 150 µL a 4 °C a due concentrazioni che mostra il picco di assorbimento caratteristico a 260 nm. Picco di assorbimento di 1,0 unità di assorbimento per 50 µg/mL di DNA rispetto a picco di assorbimento di 0,5 unità di assorbimento per 25 µg/mL di DNA, in rispetto alla legge di Beer-Lambert.

Fonte: [Measuring the purity of low volumes of DNA at 4 °C using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer with fiber optics microprobe](#)



Scansione della cinetica usando fibre ottiche in situ di blu di metilene con esposizione a lampada UV ad alta intensità (lampada Hg(Xe) Oriell 500 W) per 20 minuti in un intervallo compreso tra 400 e 800 nm. I marcatori riflettono le lunghezze d'onda di assorbimento massime.

Fonte: [Simple, automated measurements of the photocatalytic properties of colorimetric species using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer with fiber optics.](#)

Spettroscopia UV-Vis

Funzionalità

La relazione semplice e lineare esistente tra assorbanza e concentrazione, nonché la facilità di misurazione della luce UV-visibile hanno reso la spettroscopia UV-visibile il metodo di analisi quantitativa prediletto da migliaia di persone.

Spettroscopia UV-Vis

Vantaggi

- Vasta applicazione per analisi qualitative e quantitative
- Può essere impiegata per numerosi tipi di molecole e ioni organici e inorganici
- Facilità d'uso
- Rapidità
- A bassa manutenzione
- Misurazione non distruttiva

Limiti

- Maggiori limiti di rivelazione (peggiori) rispetto alla fluorescenza
- Possibili interferenze dovute a sovrapposizione di bande di assorbimento
- Possibile difficoltà con composti fotosensibili in caso di utilizzo di sorgenti al D2 e Q1 (non applicabile con sorgente allo xeno)



Spettroscopia a fluorescenza

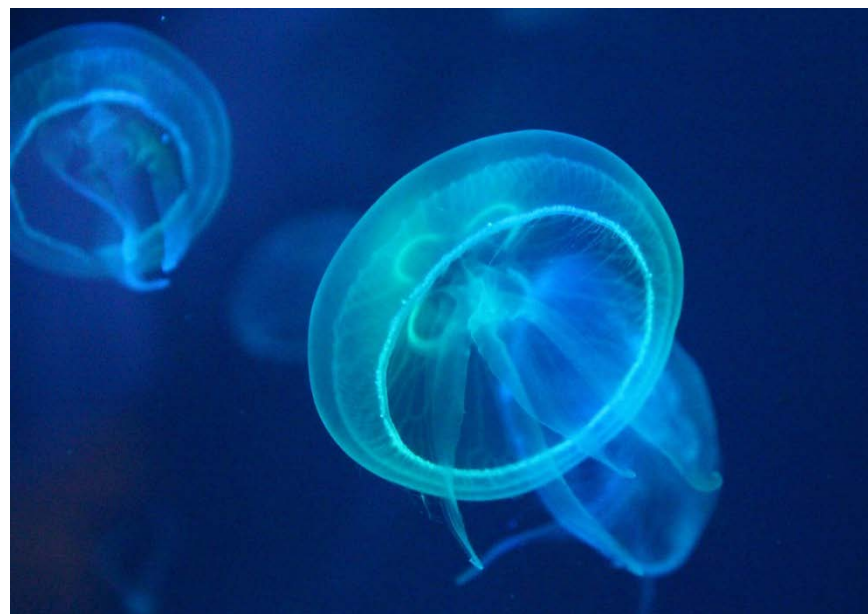
Informazioni generali

La fluorescenza consiste nell'emissione di fotoni in seguito all'eccitazione di fotoni di un'energia superiore.

Gli spettrometri a fluorescenza offrono elevata sensibilità (picomolare) poiché rivelano un segnale in rapporto a un background scuro, diversamente dagli spettrofotometri.

Gli strumenti per uso di ricerca usano i monocromatori a scansione per eccitazione ed emissione.

Diversi sistemi a fluorescenza possono inoltre misurare la fosforescenza e la luminescenza.



Spettroscopia a fluorescenza

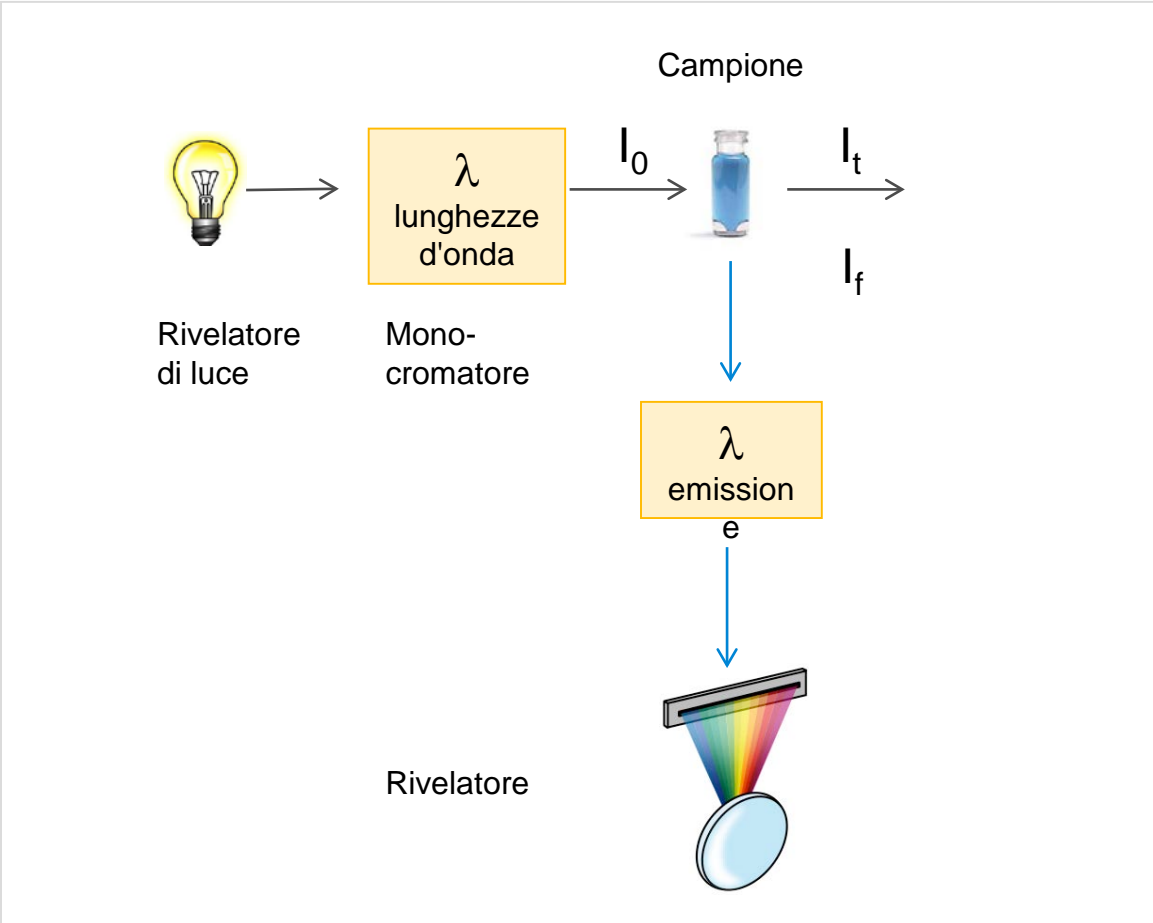
Impostazioni generali



- La lampada (sorgente) emette luce con una caratteristica gamma di lunghezze d'onda.
- Il monocromatore seleziona la lunghezza d'onda di eccitazione.
- L'area del campione contiene il campione, l'analita assorbe la luce.
- Luce emessa a una lunghezza d'onda più lunga.
- Il monocromatore seleziona la lunghezza d'onda di emissione.
- La luce trasmessa viene misurata (rivelatore).

Spettroscopia a fluorescenza

Impostazioni generali



Nota: Il rivelatore non si trova in linea diretta con la sorgente luminosa al fine di ridurre al minimo il rischio che la luce incidente trasmessa o riflessa raggiunga il rivelatore.

Spettroscopia a fluorescenza

Sorgente luminosa

Gli spettrofotometri a fluorescenza utilizzano diverse sorgenti luminose:

- **Lampada allo xeno:** spettro a emissione continua a intensità pressoché costante compresa tra 300 e 800 nm
- **Lampada a vapori di mercurio:** una lampada di linea, ossia una lampada che emette luce vicino alle lunghezze d'onda di picco
- **Laser:** selezione di lunghezze d'onda limitata; non possono essere cambiate

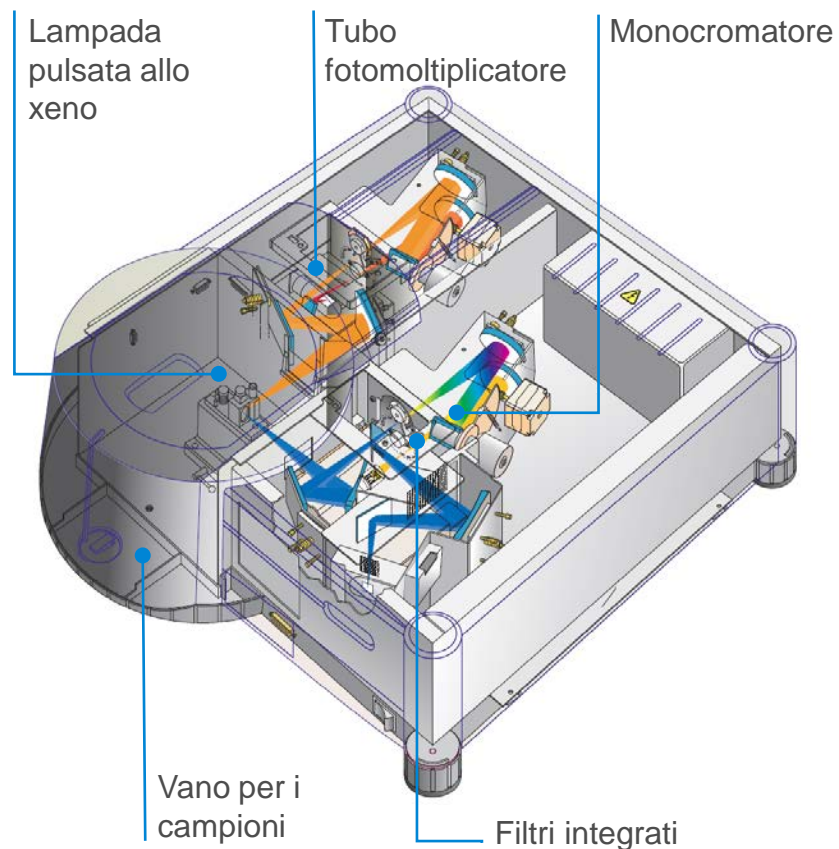


Spettroscopia a fluorescenza

Sistema

Applicazioni principali

- Stabilità termica di biocatalizzatori
- Caratterizzazione di marcatori biologici per l'imaging cellulare dal vivo
- Miscele di idrocarburi in oli di petrolio
- Caratterizzazione dell'oligomerizzazione GPCR



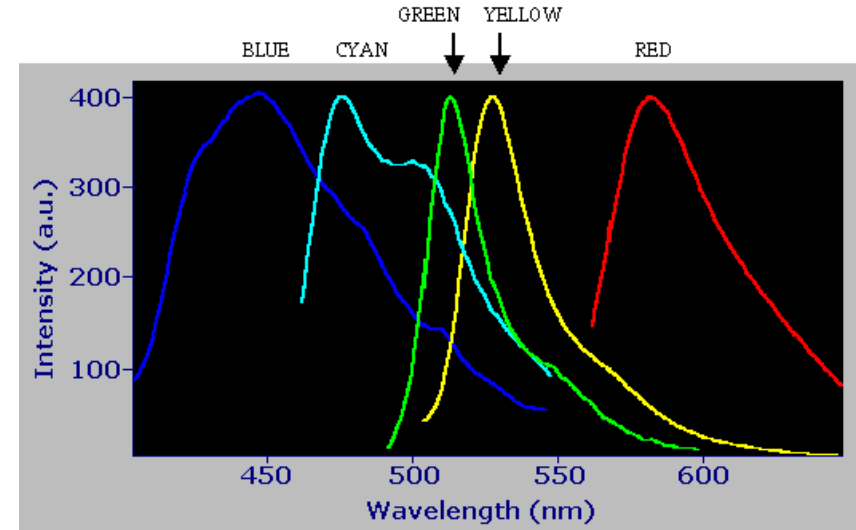
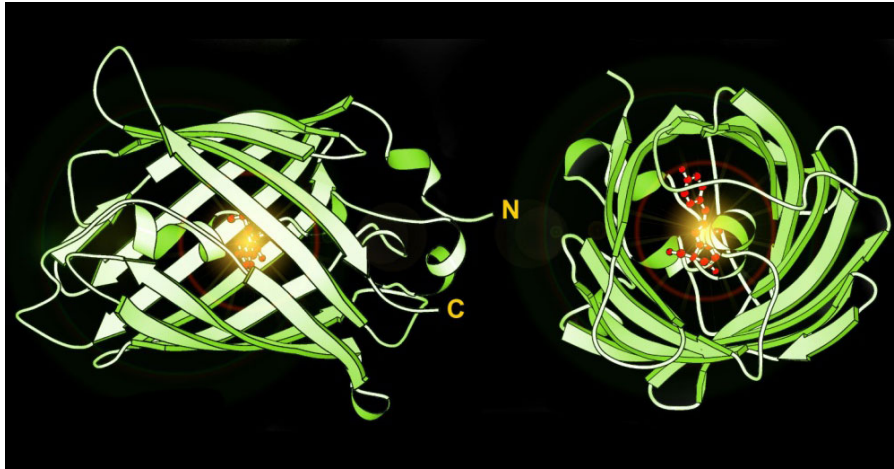
Spettroscopia a fluorescenza

Applicazioni

MERCATO	APPLICAZIONI
Prodotti chimici	<ul style="list-style-type: none">• Ricerca fotochimica• Caratterizzazione delle nanoparticelle• Ricerca sulla chimica delle superfici• Chimica analitica
Farmaceutica e biotecnologia	<ul style="list-style-type: none">• Ricerca biochimica e biofisica• Quantificazione delle proteine e studi strutturali: interazioni proteina-proteina, studi sulla membrana• Enzimologia: cinetica enzimatica usando un substrato fluorescente• Biologia molecolare: Quantificazione DNA e RNA

Spettroscopia a fluorescenza

Espressione citosolica della proteina fluorescente verde

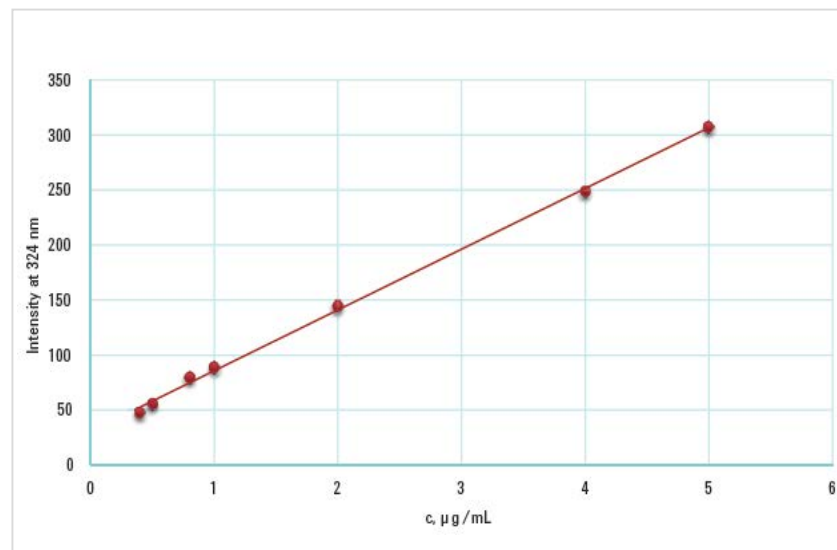
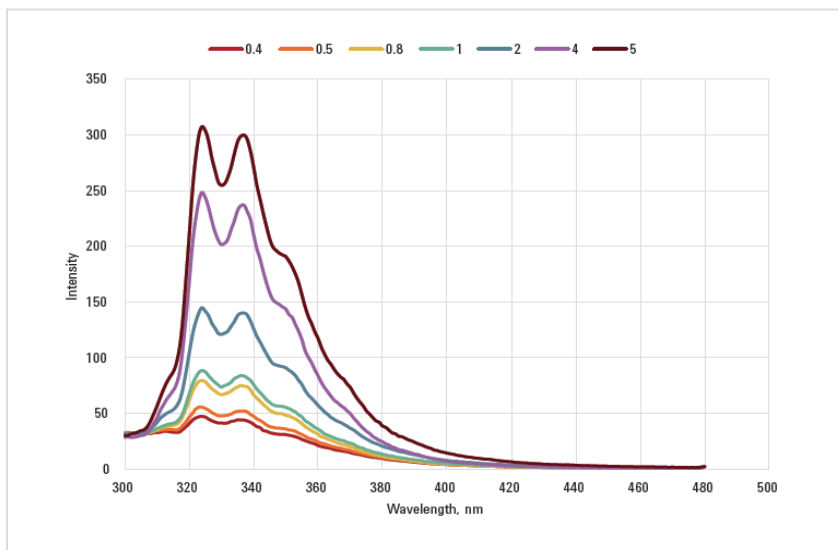


Rappresentazione schematica della proteina fluorescente verde. Sinistra: fluoroforo tripeptide in rosso. Destra: Intensità ed emissione per lo spettro intero delle proteine fluorescenti.

Fonte: [Cytosolic expression of Green Fluorescent Protein \(GFP\) and its derivatives in the yeast *Saccharomyces cerevisiae*: Detection in vivo using the Agilent Cary Eclipse](#)

Spettroscopia a fluorescenza

Quantificazione di idrocarburi aromatici policiclici od oli di petrolio



Spettro fluorescente di naftalene, lunghezza d'onda Ex. 250 nm, fenditura Ex. 10 nm, fenditura Em. 5 nm (sinistra); diagramma di calibrazione (i punti per la stessa concentrazione sono in media) per la determinazione fluorometrica di naftalene a 324 nm, lunghezza d'onda Ex. 250 nm, fenditura Ex. 10 nm, fenditura Em. 5 nm.

Fonte: [Quantification of complex polycyclic aromatic hydrocarbons or petroleum oils in water with Cary eclipse fluorescence spectrophotometer According to astm d 5412-93 \(2000\)](#)

Spettroscopia a fluorescenza

Funzionalità

A basse concentrazioni, l'intensità di fluorescenza solitamente è proporzionale alla concentrazione del fluoroforo.

Gli effetti del quenching possono influenzare il risultato. Con quenching si intende la riduzione dell'intensità di fluorescenza di una data sostanza e può derivare da una serie di processi come le reazioni degli stati di eccitazione o il quenching di collisione.

Spettroscopia a fluorescenza

Vantaggi

- Estremamente sensibile per composti insaturi e aromatici
- Può essere applicata ad altri composti con derivatizzazione o marcatura
- Facilità d'uso
- A bassa manutenzione

Limiti

- Solo per alcuni tipi di composti
- Le miscele possono necessitare una purificazione
- Possibilità di quenching

Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

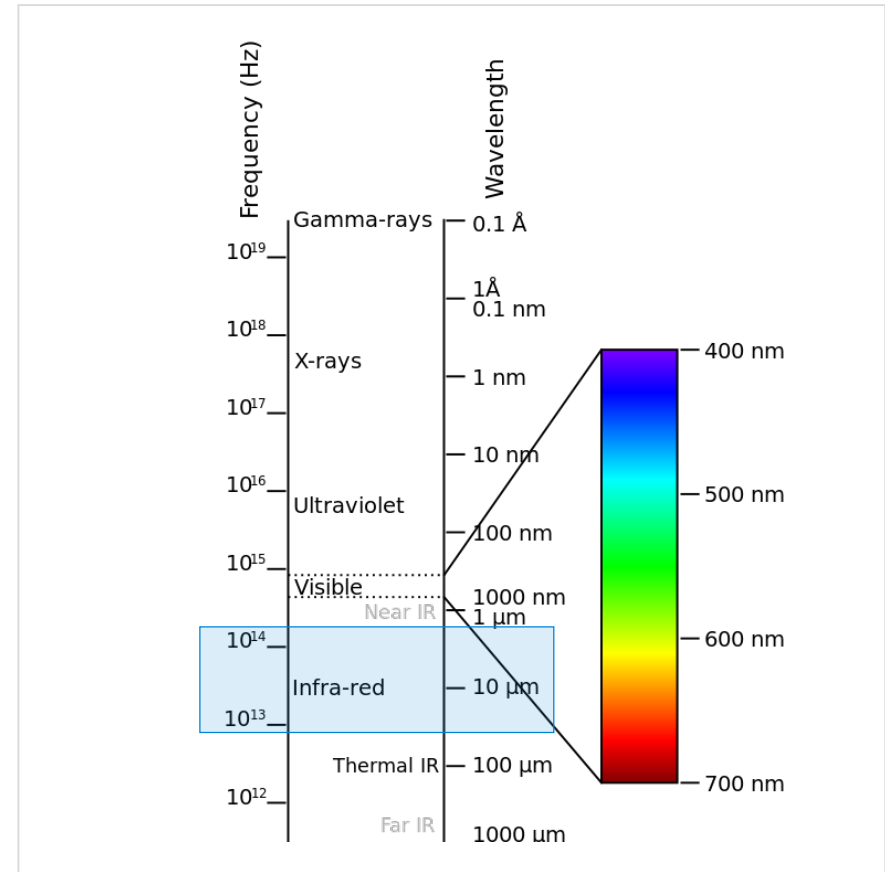
Informazioni generali

La luce infrarossa ha una lunghezza d'onda più lunga e una frequenza inferiore rispetto alla luce visibile.

Lo spettro infrarosso è diviso in radiazioni nell'infrarosso vicino, medio o lontano. La regione maggiormente utilizzata è quella dell'infrarosso medio (frequenza: 4000 e 400 cm^{-1}).

La spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier (FTIR) è una tecnica che ottiene uno spettro infrarosso di assorbimento, emissione, fotoconduttività o dispersione Raman di solidi, liquidi o gas.

Uno spettrometro FTIR raccoglie simultaneamente dati ad alta risoluzione spettrale in un ampio intervallo spettrale.



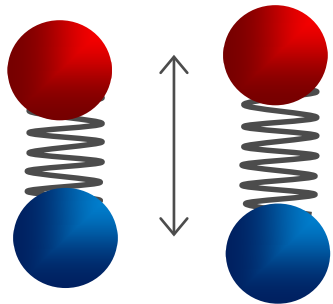
"Spettro elettromagnetico" di Victor Blacus

Fonte: [Wikipedia \(sito inglese\)](#)

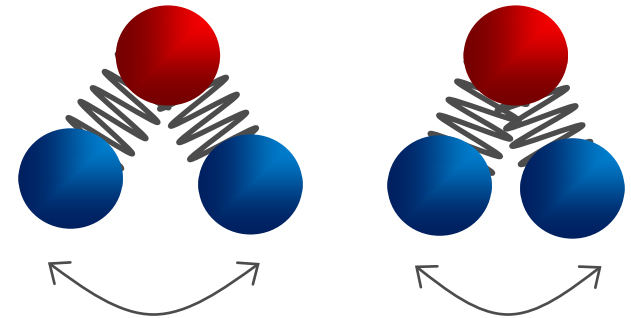
Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Informazioni generali

La luce infrarossa assorbita può causare vibrazioni molecolari.
La spettroscopia a infrarossi misura la variazione dell'ampiezza.



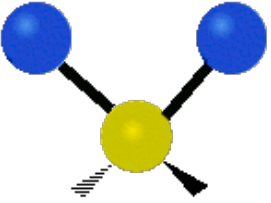
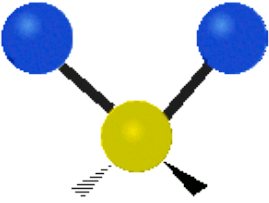
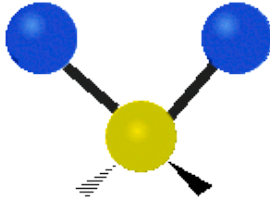
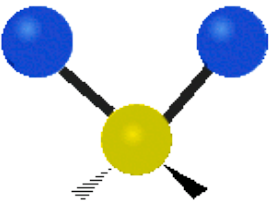
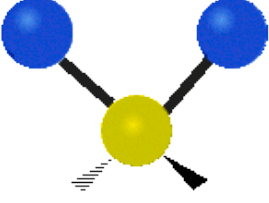
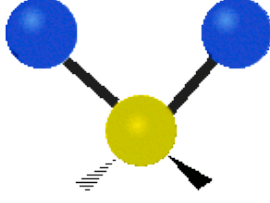
$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$



$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Informazioni generali

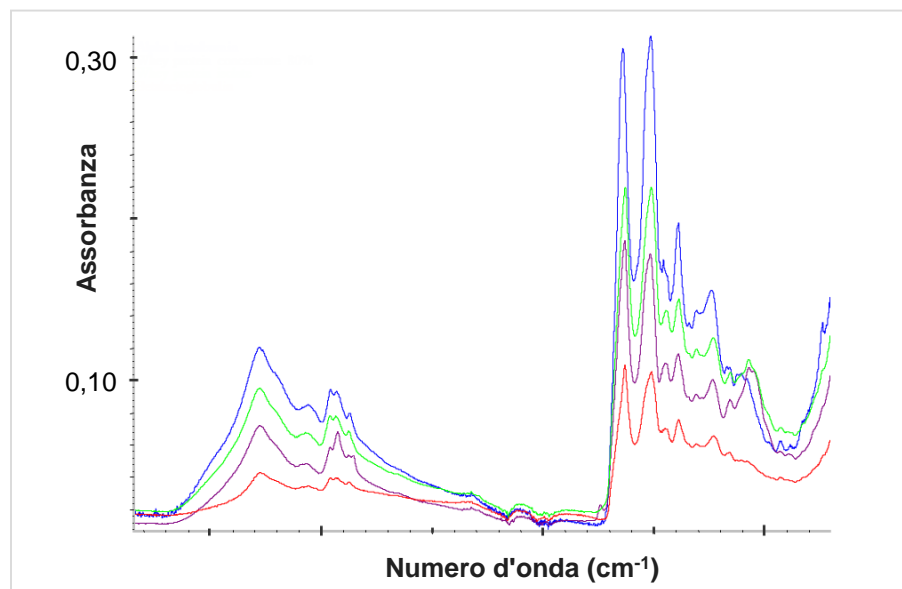
Stretching simmetrico	Stretching asimmetrico	Scissoring
		
Rocking	Wagging	Twisting
		



Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Informazioni generali

- I legami IR-attivi producono picchi.
- Questi legami vibrano a frequenze specifiche.
- Piccole variazioni della posizione e dell'altezza del picco favoriscono la differenziazione.
- Lo spettro IR può fungere da impronta digitale di un composto.



IR

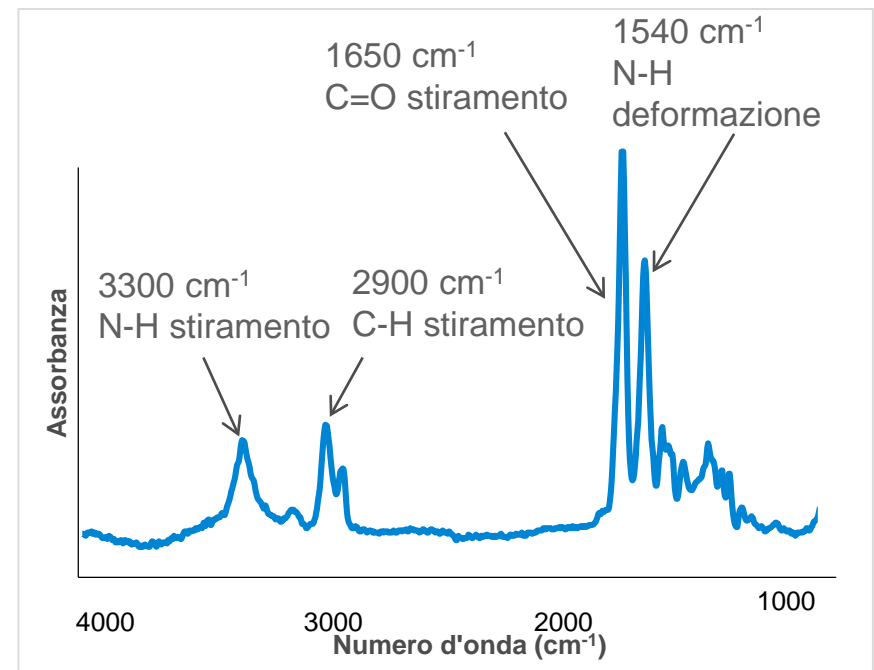
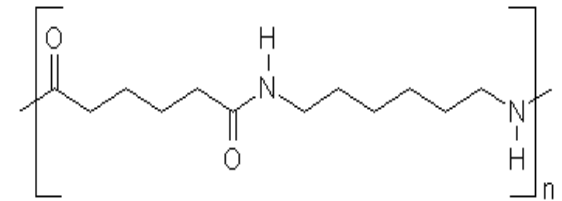


Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Informazioni generali

Il numero d'onda in corrispondenza del quale assorbono diversi legami (solitamente definiti come “gruppi funzionali”) indica la forza del legame. I legami più forti assorbono a numeri d'onda più elevati.

Ogni gruppo funzionale assorbe secondo una frequenza caratteristica propria, rendendo possibile l'identificazione della struttura chimica di un materiale a partire dallo spettro infrarosso.



Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Informazioni generali

Legami molecolari e lunghezze d'onda

Legame	Tipo di vibrazione	Numero d'onda Intervallo (cm ⁻¹)
C-H	Alcano (stiramento)	3.000 – 2.850
	-CH ₃ (deformazione)	1.450 e 1.375
	-CH ₂ (deformazione)	1.465
	Alchene (stiramento)	3.100 – 3.000
	(deformazione fuori dal piano)	1.000 – 650
	Aromatico (stiramento)	3.150 – 3.050
Alchino	(stiramento)	900 – 600
	(deformazione fuori dal piano)	~ 3.300
	(stiramento)	2.900 – 2.700
C=C	Alchene	1.680 – 1.600
	Aromatico	1.600 e 1.475
C≡C	Alchino	2.250 – 2.100
C=O	Aldeide	1.740 – 1.720
	Chetone	1.725 – 1.705
	Acido carbossilico	1.725 – 1.700
	Esteri	1.750 – 1.730
	Ammide	1.680 – 1.630
	Anidride	1.810 – 1.760

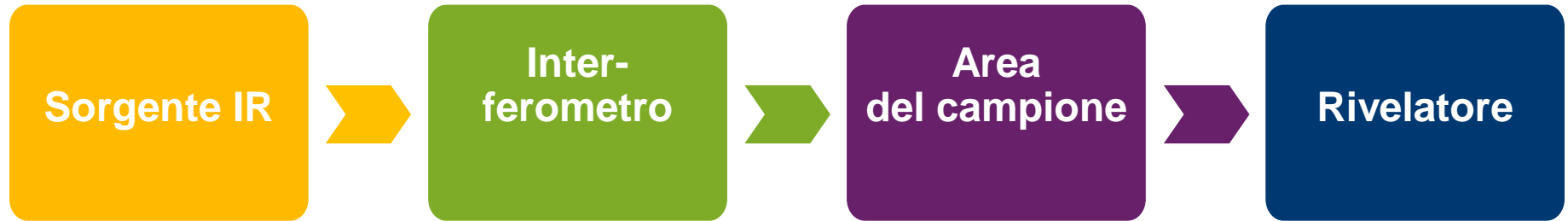
Legame	Tipo di vibrazione	Numero d'onda Intervallo (cm ⁻¹)
C-O	Alcoli, esteri, eteri, acidi carbossilici, anidridi	1.300 – 1.000
O-H	Esente da alcoli, fenoli	3.650 – 3.600
	H-legato Acidi carbossilici	3.400 – 3.200 3.400 – 2.400
N-H	Ammine e ammidi primarie e secondarie (stiramento) (deformazione)	3.500 – 3.100
		1.640 – 1.550
C-N C=N	Ammine Immine e ossime	1.350 – 1.000 1.690 – 1.640

◀ Sommario



Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Impostazione generale



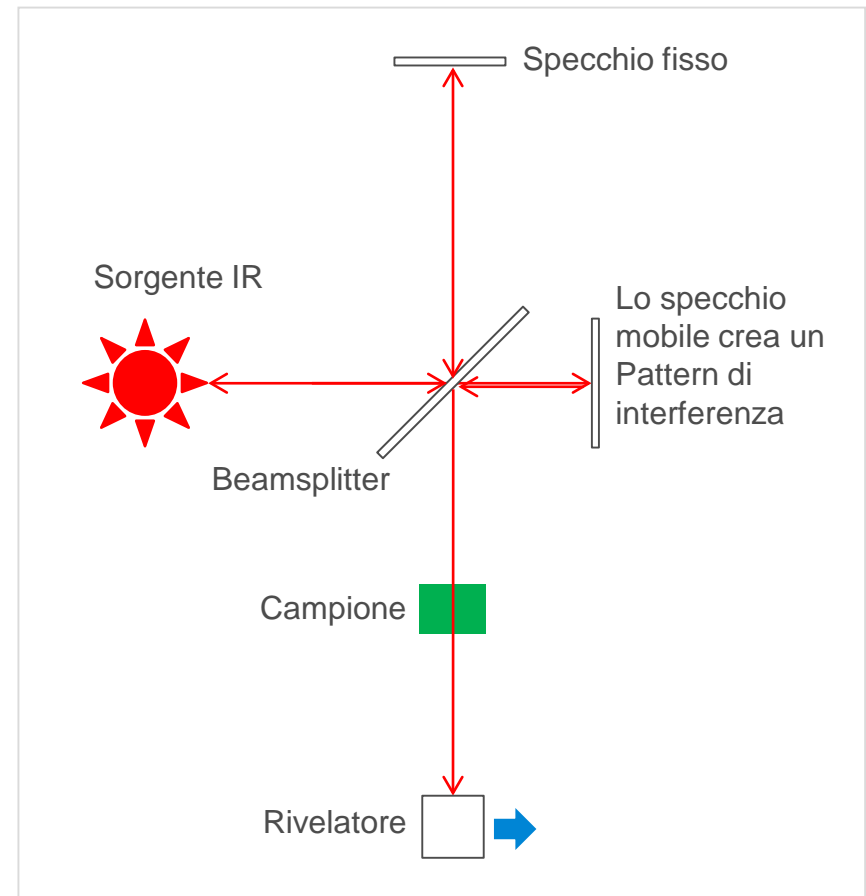
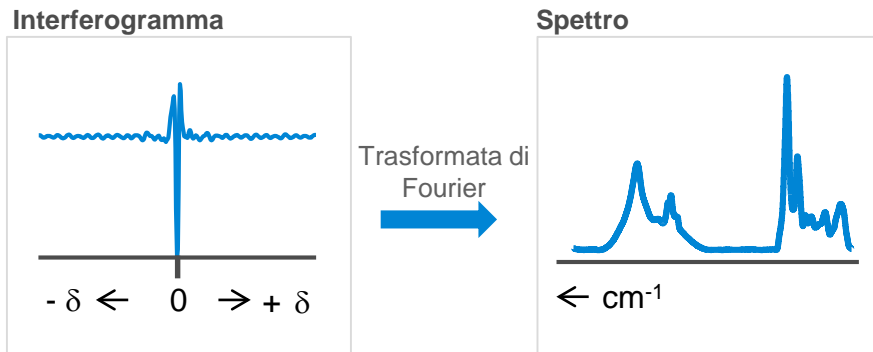
- La sorgente IR genera un fascio luminoso a infrarossi (sorgente luminosa a banda larga).
- L'interferometro (configurazioni dello specchio) crea un pattern di interferenza.
- Nella zona del portacampione, il fascio infrarosso attraversa il campione.
- Il rivelatore genera l'interferogramma.
- Il computer converte l'interferogramma in uno spettro.

Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Interferogramma

Un interferogramma è una rappresentazione dell'intensità IR rispetto alla posizione dello specchio mobile.

L' algoritmo della trasformata di Fourier converte l'interferogramma in uno spettro, separando le singole frequenze di assorbanza e creando un'intensità in funzione del tracciato del numero d'onda.

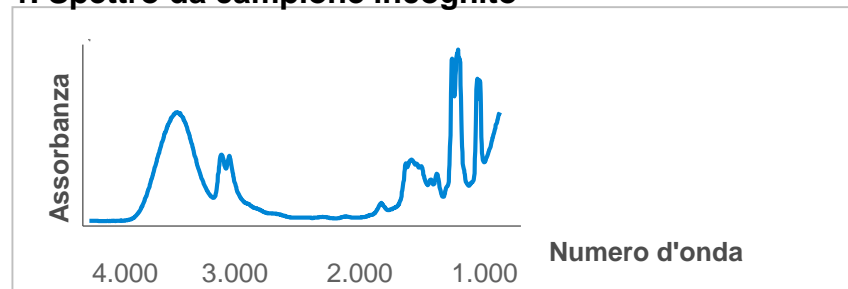


Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

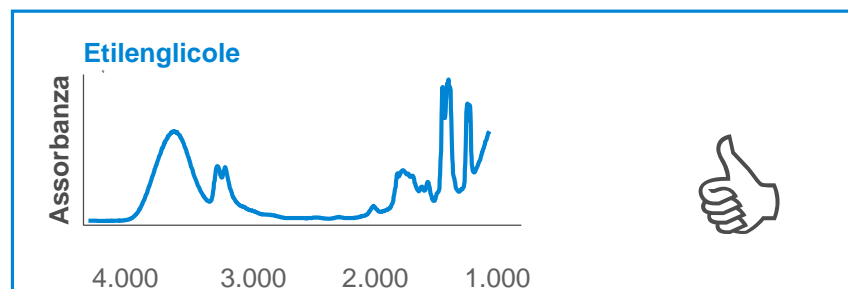
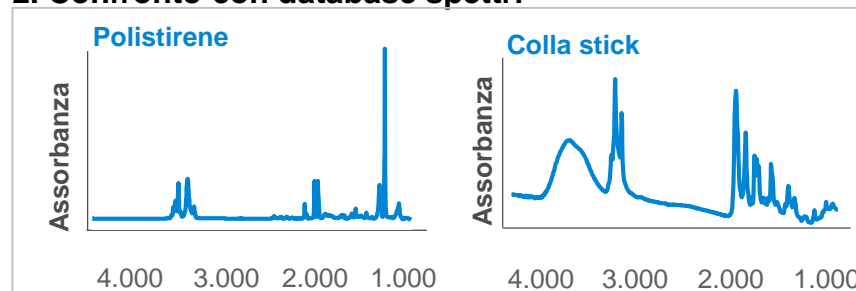
Analisi qualitativa

- I composti possono essere identificati grazie al loro spettro infrarosso caratteristico.
- Gli spettri infrarossi forniscono indicazioni in merito alla struttura molecolare (per esempio, la presenza del gruppo ciano).
- I computer effettuano una ricerca nel database di infrarossi per identificare il composto.

1. Spettro da campione incognito



2. Confronto con database spettri

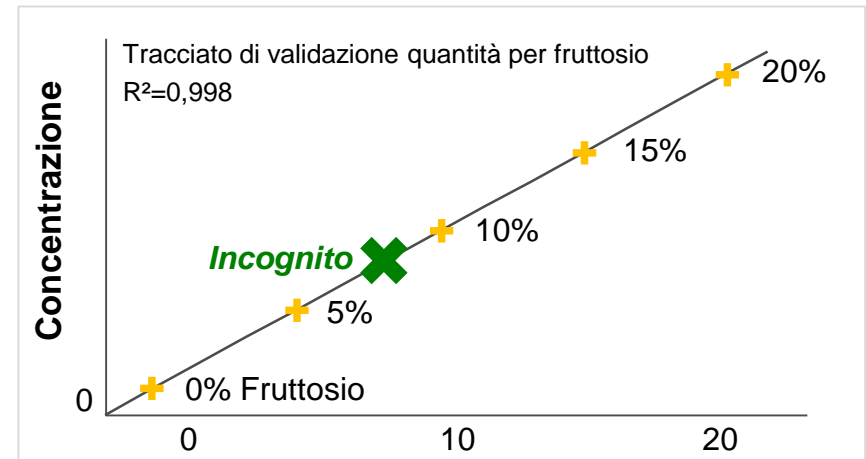
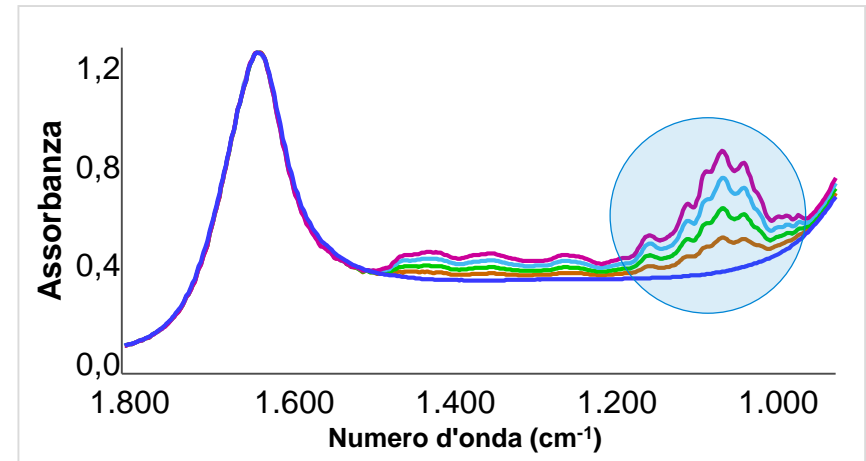


Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Analisi quantitativa

Quantificazione

- La legge di Beer-Lambert può essere applicata alla spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier.
- Confronta il campione in funzione della curva di calibrazione dell'assorbanza rispetto alla concentrazione di uno standard.
- Applicabile alle miscele - quantificazione simultanea.



Curva di calibrazione del fruttosio da 0-20%

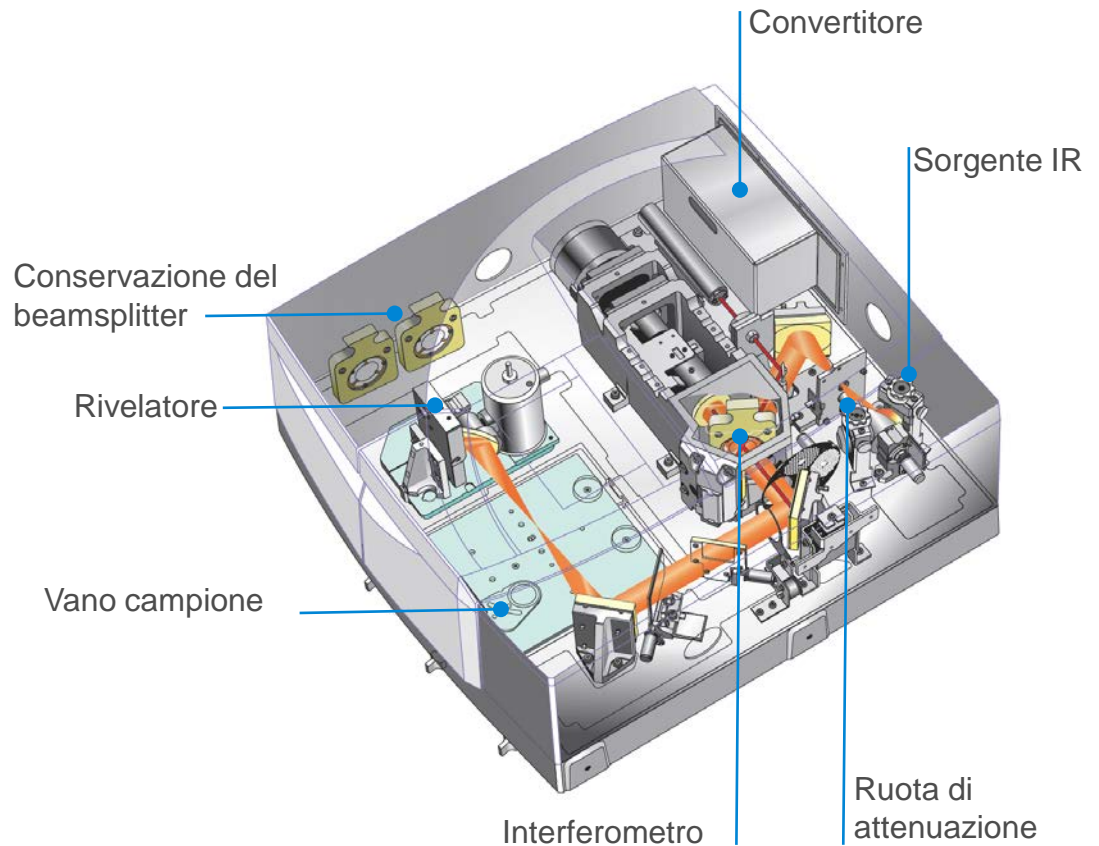
Fonte: Materiale di formazione interna Agilent

Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Sistema

Applicazioni principali

- Imaging biomedico (tessuto)
- Chemical imaging
- Controllo dei processi (biodiesel)
- Ricerca/controllo materiale/polimero
- Applicazioni forensi (contenuto di alcool nel sangue)



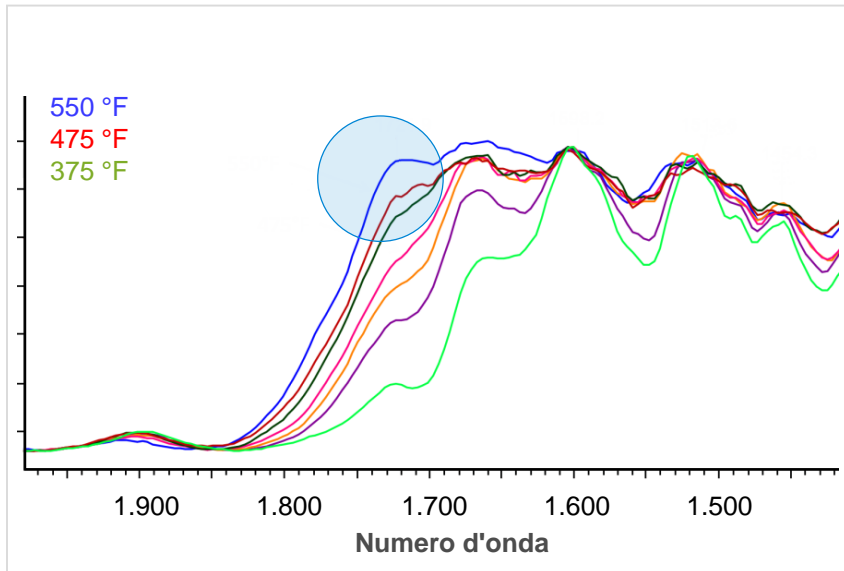
Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Applicazioni

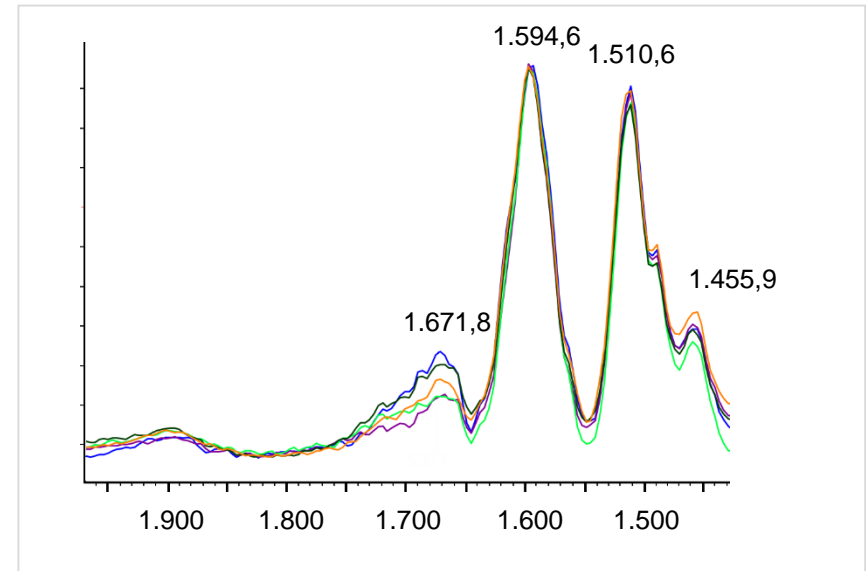
MERCATO	APPLICAZIONI
Materiali	<ul style="list-style-type: none">• Danni provocati da calore e UV sui compositi, essiccazione dei compositi• Identificazione del rivestimento superficiale, purificazione e preparazione delle superfici, usura dei rivestimenti e effetti degli agenti atmosferici.• Controllo della qualità, conservazione artistica e storica, ricerca dei materiali
Energia e sostanze chimiche	<ul style="list-style-type: none">• Controllo della qualità delle materie prime liquide in ingresso e dei prodotti finiti, incluse sostanze chimiche organiche, tensioattivi, lubrificanti e oli alimentari
Settore alimentare	<ul style="list-style-type: none">• Controllo della qualità di materie prime in ingresso e di prodotti finiti

Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Determinazione del danno ai compositi



Materiali compositi a nastro non levigato epossidico 1 termicamente danneggiato. I campioni compositi sono esposti a una serie di temperature nell'arco di 1 ora. La banda di assorbimento a 1.722 cm⁻¹ (cerchio blu) deriva dalla vibrazione di stiramento del carbonile associata all'ossidazione della resina e indica la sovraesposizione termica.



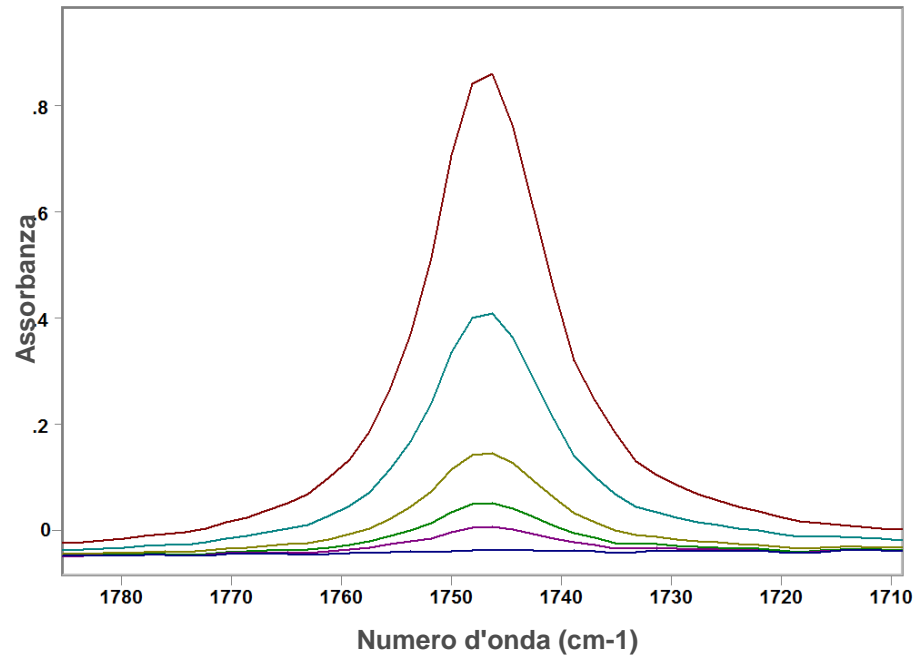
Materiali compositi epossidici (nastro sabbatiato) 1 termicamente danneggiato. I campioni compositi sono esposti a una serie di temperature nell'arco di 1 ora. La vibrazione a 1.722 cm⁻¹ è assente in ambiente anaerobico.

La diminuzione dell'assorbimento a 1.672 cm⁻¹ fornisce una buona correlazione negativa all'esposizione alla temperatura.

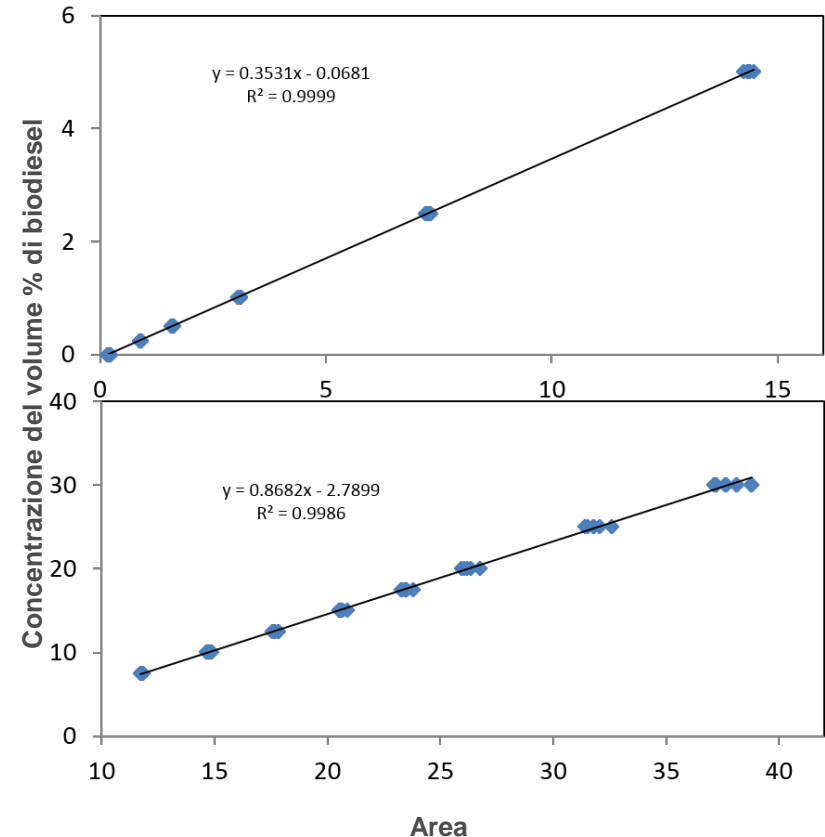
Fonte: [Non-Destructive Evaluation of Composite Thermal Damage with Agilent's New Handheld 4300 FTIR](#)

Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Misurazione della concentrazione biodiesel nel combustibile diesel con numero di cetano elevato



Spettri infrarossi sovrapposti di combustibili diesel e calibrazione per diverse concentrazioni di biodiesel in combustibile diesel con numero di cetano elevato. Regione di assorbanza da 1.713 a 1.784 cm⁻¹, usata nella calibrazione per l'intervallo di concentrazione compreso tra 0 e 6%.



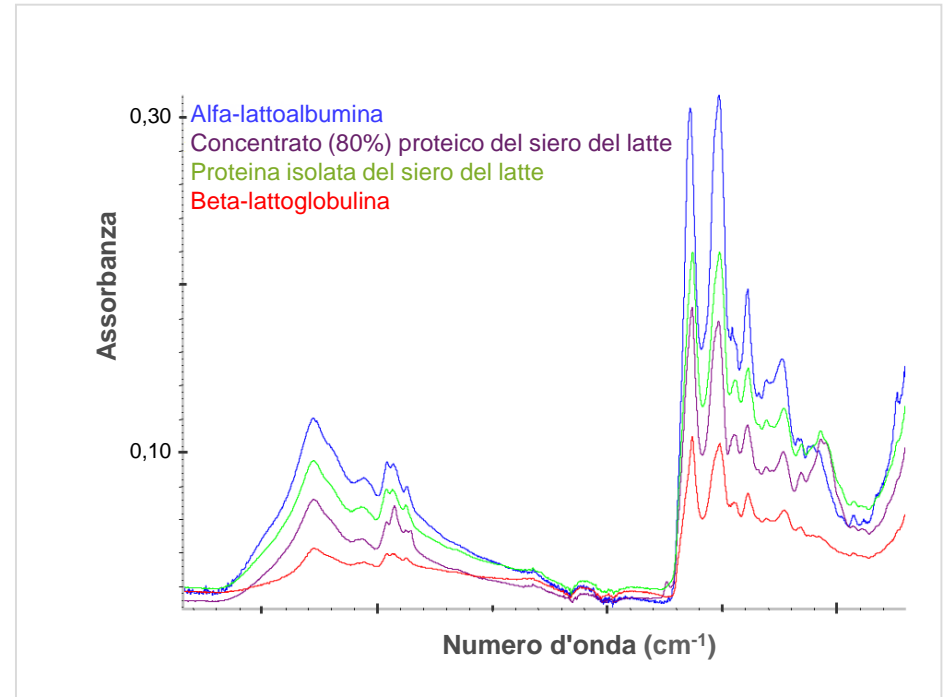
Fonte: [ASTM D7806-12 for Biodiesel in Petroleum-based Diesel Fuel Oil](#)

Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Controllo della qualità delle polveri del latte

Acquisizione dello spettro eseguita tramite:

- posizionamento di una piccola quantità di polvere proteica sulla superficie ATR in diamante
- pressione dei campioni contro il cristallo del diamante usando il morsetto a pressione integrato (un innesto di sicurezza posto sul morsetto previene eventuali serraggi eccessivi.)
- raccolta di 64 spettri co-aggiunti (tempo di acquisizione di ~30 sec con risoluzione di 4 cm^{-1}) tra 4.000 e 650 cm^{-1} .



Spettri infrarossi di polveri del latte selezionate registrati con l'analizzatore ATR-FTIR Cary 630

Fonte: [Analisi QA/QC di polveri di latte tramite l'analizzatore ATR-FTIR Agilent Cary 630](#)

Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Misurazione dell'acrilammide nelle patatine fritte

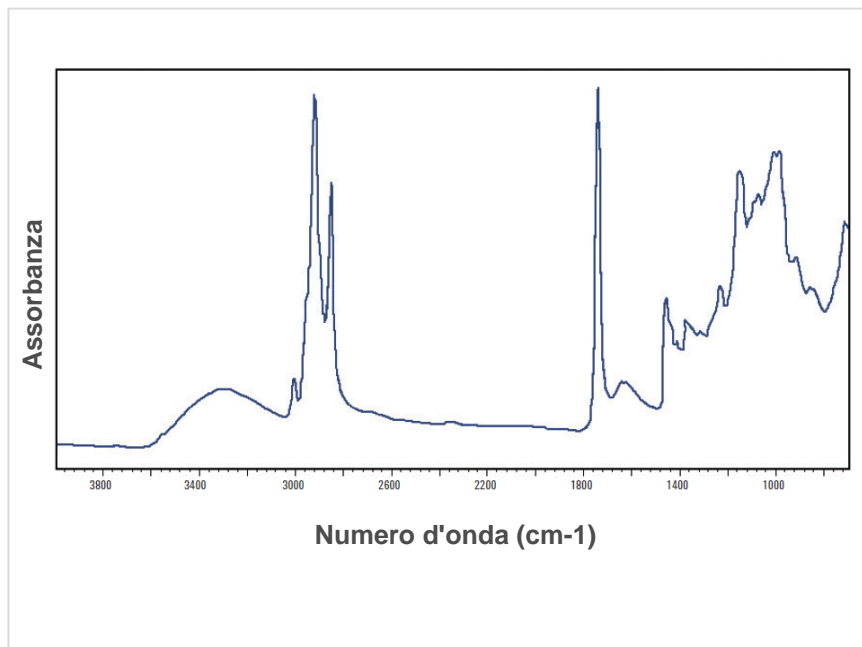
Sensor	Potato Chip Type	Factors	SE ($\mu\text{g/L}$)	r	
Portable Cary 630 MIR	^a Regular	Calibration	7	65	0.95
		Cross Val.	7	74	0.93
		Prediction*	7	75	0.90
	^b Seasoned	Calibration	7	59	0.96
		Cross Val.	7	75	0.92
	^c Sweet	Calibration	7	74	0.99
Cross Val.		7	98	0.98	

^a "Regular" refers to potato chips containing only potatoes, vegetable oils and salt.

^b "Seasoned" refers to potato chips containing additional ingredients.

^c "Sweet" refers to sweet-potato chips.

* independent variable predictions made on regular potato chips only



Risultati e spettro di una compressa di patatina fritta misurati tramite analizzatore FTIR portatile dotato di tecnologia di campionamento ATR in diamante a riflessione singola.

Fonte: [Molecular Spectroscopy Compendium - Ensure food quality, production, and safety](#)

Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier

Funzionalità

La spettroscopia a infrarossi è una tecnica efficiente e versatile che può essere utilizzata per analizzare gas, liquidi e solidi.

Spesso viene impiegata per identificare strutture specifiche, dal momento che i gruppi funzionali danno vita a bande caratteristiche sia in termini di intensità sia di posizione (frequenza).

Si tratta di una tecnica semplice e affidabile, ampiamente utilizzata nel settore della ricerca.

Spettroscopia a fluorescenza

Vantaggi

- Di facile utilizzo
- Analisi rapide e precise
- Può gestire numerosi tipi di campioni di diverse dimensioni
- Può essere qualitativa e quantitativa
- La preparazione del campione è spesso minima o assente
- Non distruttiva

Limiti

- La molecola deve interagire con la luce infrarossa
- Informazioni sull'elemento minime



Abbreviazioni

Abbreviazione	Definizione
A	assorbanza
b	lunghezza del percorso (cm)
c	velocità della luce ($3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$)
ε	coefficiente di estinzione o assorbimento molare ($\text{l mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$)
E	campo elettrico oscillatorio
E	energia
FTIR	Spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier
h	costante di Planck ($6,62 \times 10^{-34} \text{ Js}$)
I	radiazione trasmessa
I_0	radiazione incidente
λ	lunghezza d'onda
T	trasmissione
UV-VIS	ultravioletta – visibile
ν	frequenza (s^{-1})