



Instituto de Física de São Carlos  
Laboratórios de Ensino de Física

LEF

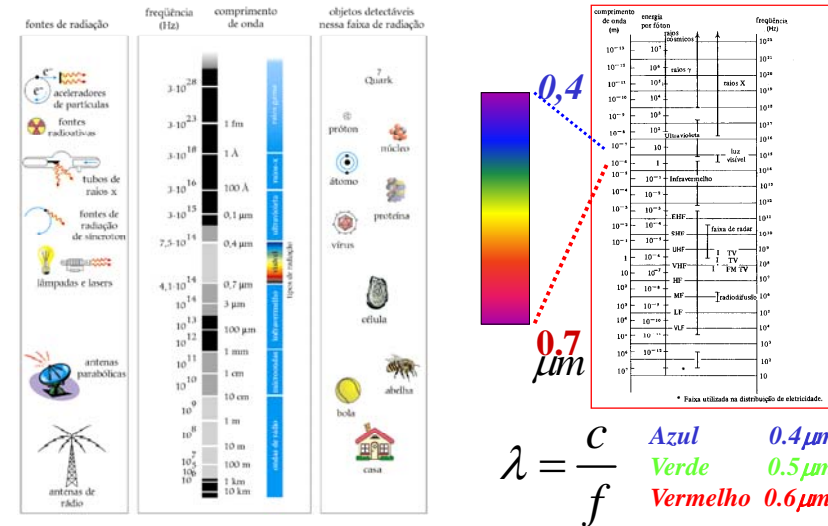
## Laboratório de Física IV Aulas 9 - Espectroscopia



Instituto de Física de São Carlos  
Laboratórios de Ensino de Física

LEF

## O ESPECTRO ELETROMAGNÉTICO



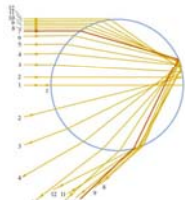
Instituto de Física de São Carlos  
Laboratórios de Ensino de Física

LEF

## DISPERSÃO DA LUZ POR DIFERENÇA DE ÍNDICE DE REFRAÇÃO

### O Arco Íris

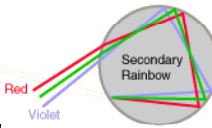
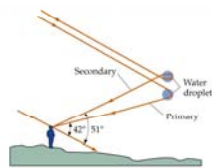
Concentração dos raios por reflexão interna total



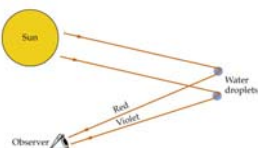
A aparente inversão de cores ocorre devido a visualização ocorrer para diferentes gotas



Arco Íris secundários



Dispersão por diferença de índice de refração

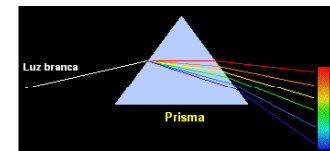


Instituto de Física de São Carlos  
Laboratórios de Ensino de Física

LEF

## DISPERSÃO DA LUZ POR DIFERENÇA DE ÍNDICE DE REFRAÇÃO

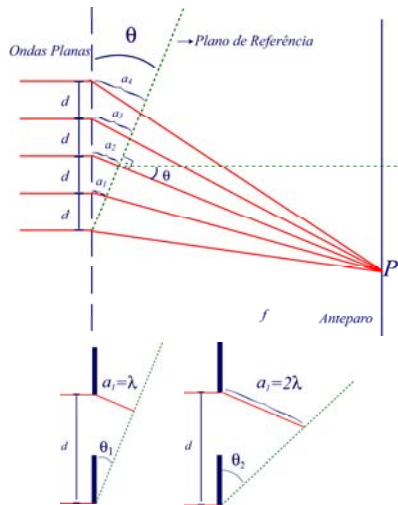
### Prismas:



Como o índice de refração depende do comprimento de onda da luz, "raios" com diferentes comprimentos de onda sofrem desvios diferentes quando atravessam um prisma



### GRADES ou REDES DE DIFRAÇÃO



(semelhança de triângulos)

$$\frac{a_1}{d} = \frac{a_2}{2d} = \frac{a_3}{3d} = \frac{a_4}{4d} \dots$$

(máximos de interferência)

$$\text{Se } a_1 = \lambda \Rightarrow a_2 = 2\lambda; a_3 = 3\lambda \dots$$

(posição dos máximos)

$$\left. \begin{aligned} \frac{\lambda}{d} &= \sin \theta_1 \\ \frac{2\lambda}{d} &= \sin \theta_2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{n\lambda}{d} = \sin \theta$$

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$



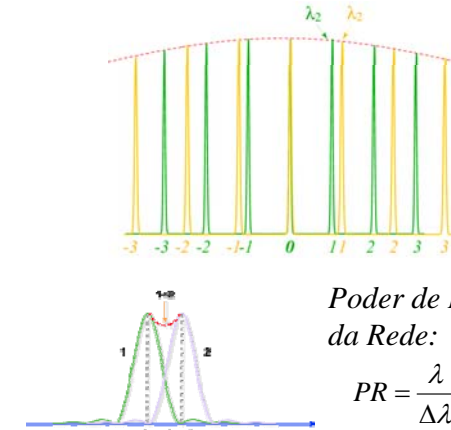
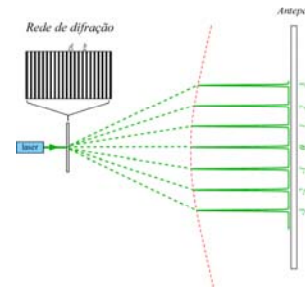
### GRADES ou REDES DE DIFRAÇÃO

$$I = N^2 I_0 \frac{\sin^2(\beta)}{\beta^2} \frac{\sin^2(N\gamma)}{\sin^2(\gamma)}$$

$$\beta = \frac{\pi b}{\lambda} \sin(\theta);$$

$$\gamma = \frac{\pi a}{\lambda} \sin(\theta)$$

Para diferentes comprimentos de onda

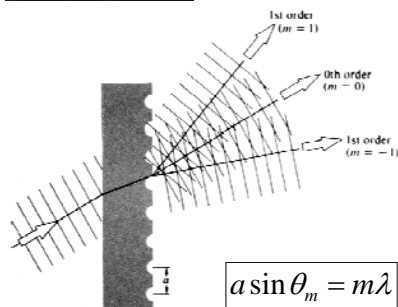


Poder de Resolução da Rede:

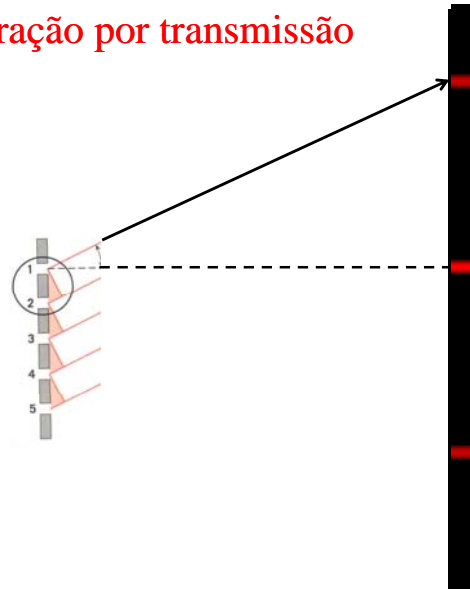
$$PR = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = mN$$



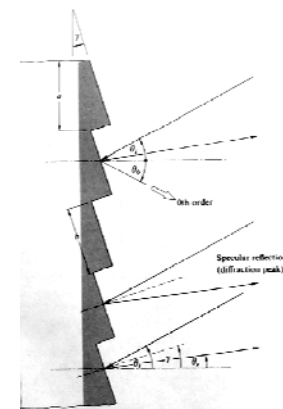
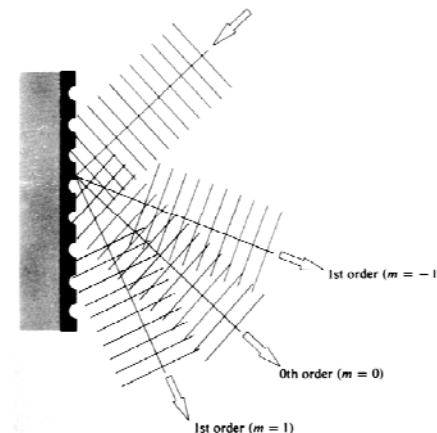
### Grades de difração por transmissão



$$a \sin \theta_m = m\lambda$$

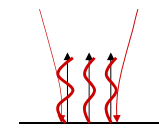
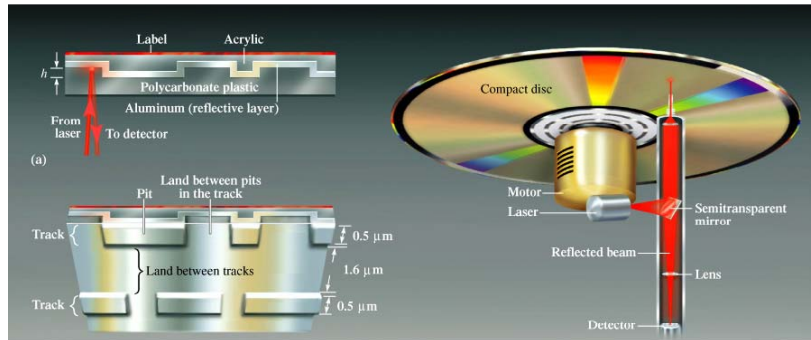


### Grades de difração por reflexão

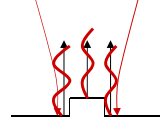




## Leitor de CD/DVD



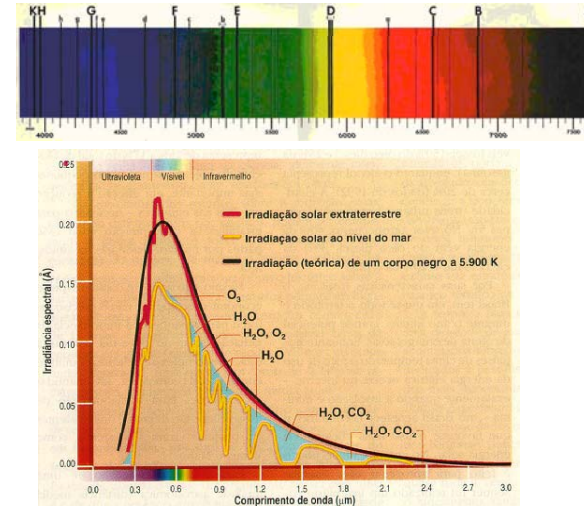
Vale : interferência construtiva



platô: interferência destrutiva



## O ESPECTRO SOLAR

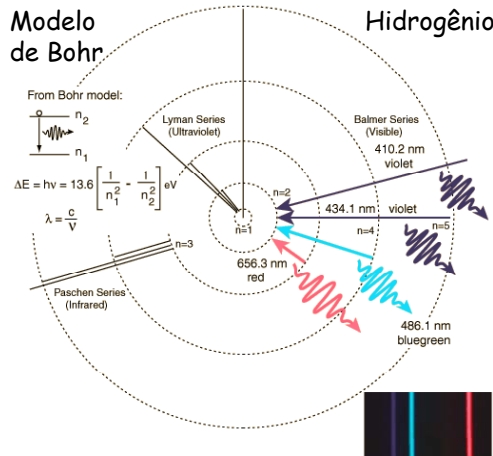


Alguns comprimentos de onda estão ausentes no espectro quando medido na terra, o que é atribuído à absorção de luz por moléculas e átomos da atmosfera.



## SISTEMAS ATÔMICOS

### Átomo de Hidrogênio:



Niels Bohr



$$E_n = -\frac{13,6\text{eV}}{n^2}$$

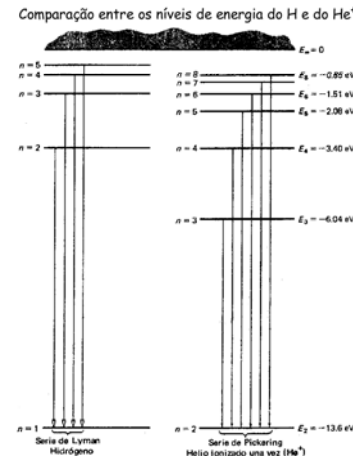
$$\lambda_n = \frac{hc}{E_n}$$

Raias de emissão e absorção são associadas com transições eletrônicas permitidas



## SISTEMAS ATÔMICOS

### Comparação do Átomo de Hidrogênio e o Átomo de He<sup>+</sup>:



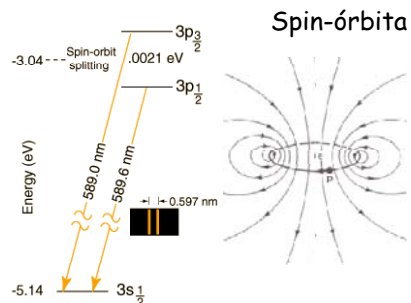
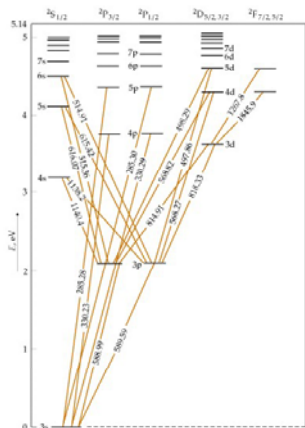
Raias de emissão são características de cada tipo de átomo



## SISTEMAS ATÔMICOS

### Complexidade do espectro e Estrutura Fina:

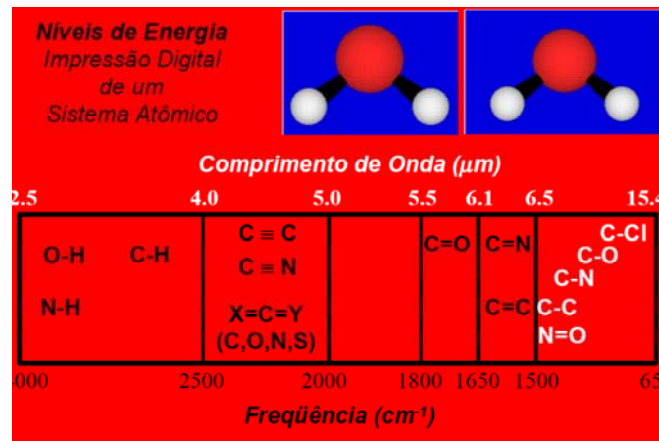
Transições no  
Átomo de  
Sódio



Espectros dos átomos  
tornam-se mais complexos  
se outras interações são  
relevantes



No Infra-vermelho temos impressão digital de moléculas

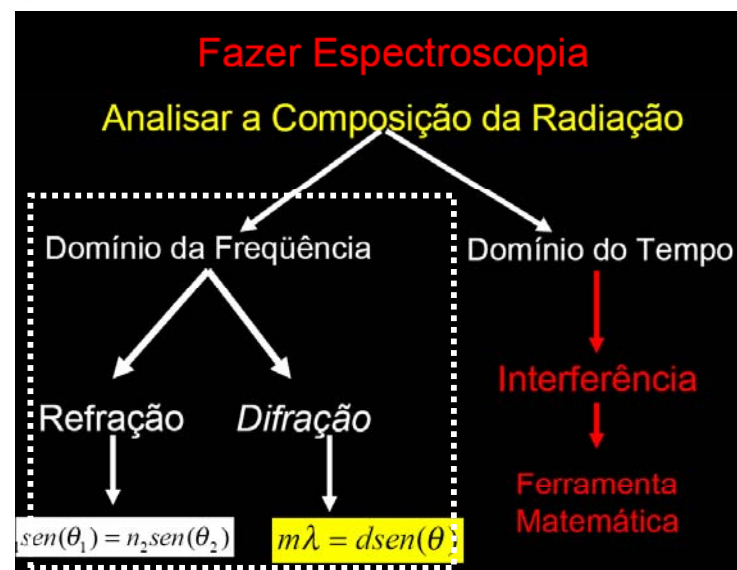
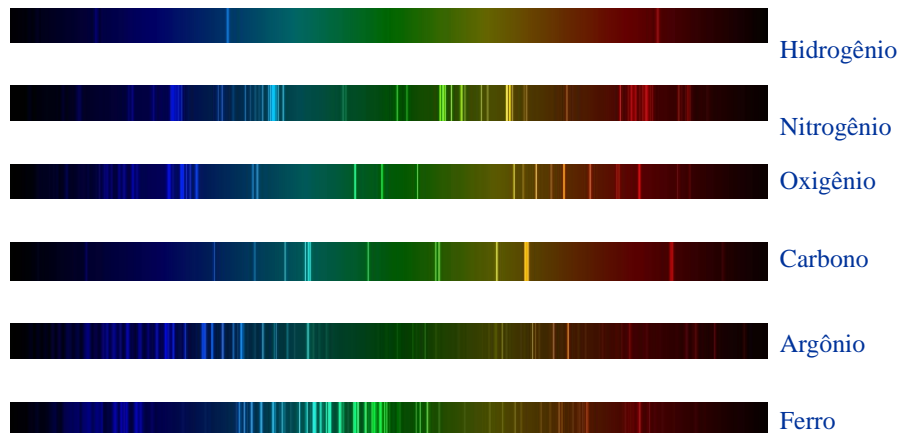


$$E = hf = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \text{Em um sistema de unidades onde } h=c=1 \text{ energia é dada em unidades de inverso de comprimento, ou seja, } \text{cm}^{-1}$$



## SISTEMAS ATÔMICOS

### Exemplos de Espectros atômicos:



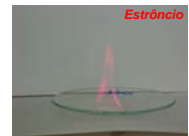
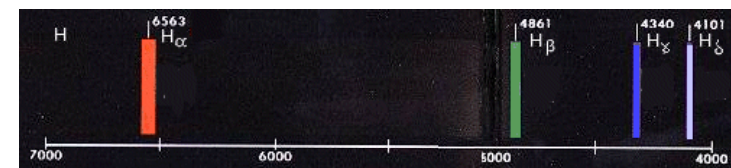
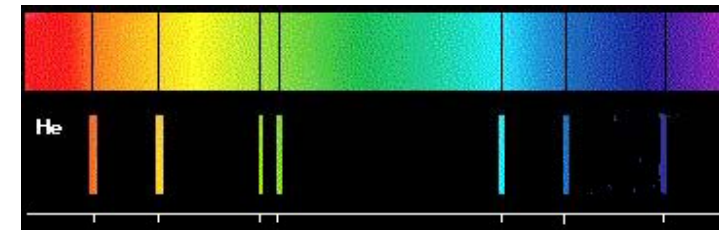
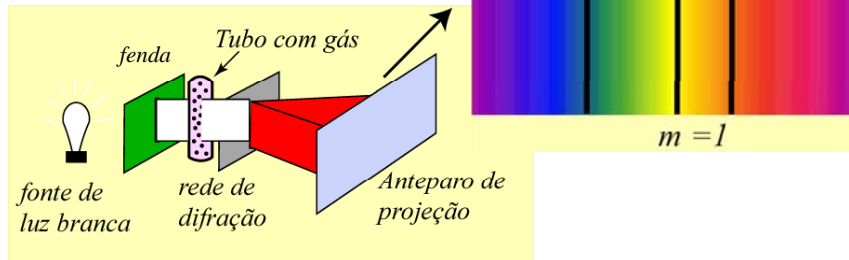




## PRINCÍPIOS DE ESPECTROSCOPIA ÓPTICA

### Espectroscopia por Absorção:

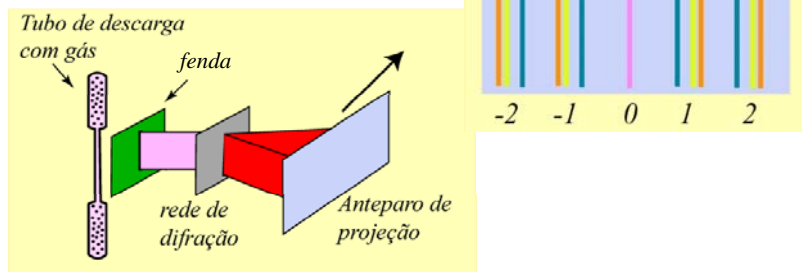
Raias de absorção são características de cada material



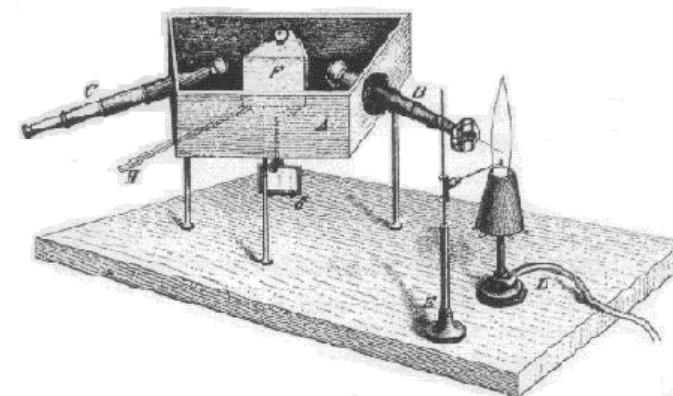
## PRINCÍPIOS DE ESPECTROSCOPIA ÓPTICA

### 6-) Espectroscopia de Emissão:

Raias de emissão são características de cada material



### Primeiro espectrógrafo



Bunsen



Kirchoff





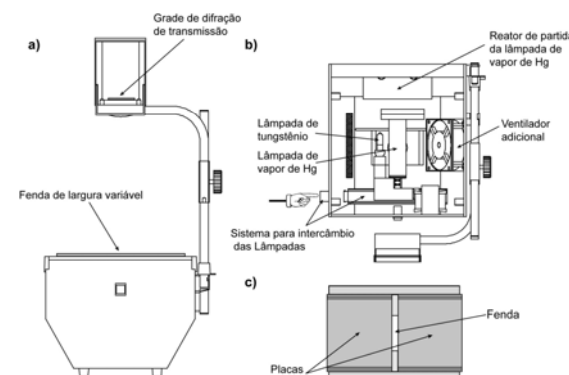
Quim. Nova, Vol. 31, No. 8, 2199-2204, 2008

# CONSTRUÇÃO DE UM ESPECTRÓGRAFO DE PROJEÇÃO E SUA UTILIZAÇÃO EM DEMONSTRAÇÕES DE ESPECTROSCÓPIA ÓPTICA

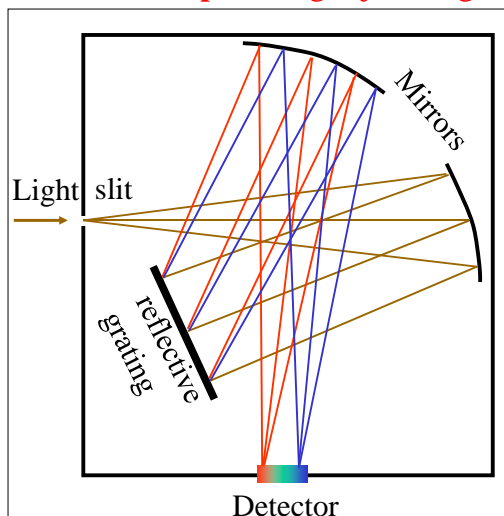
Eduardo Ribeiro de Azevedo\* e Luiz Antônio de Oliveira Nunes  
Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, CP 369, 13560-970 São Carlos - SP, Brasil

Recebido em 13/2/08; aceito em 11/4/08; publicado na web em 8/10/08

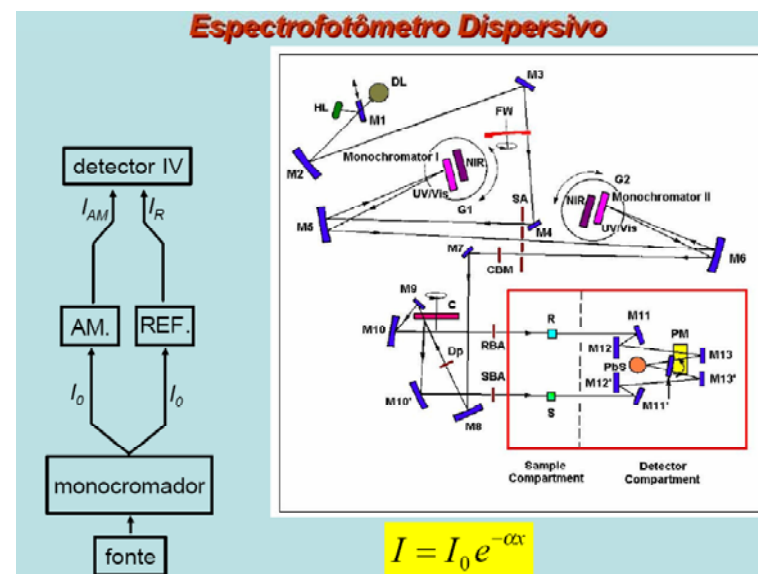
Educação

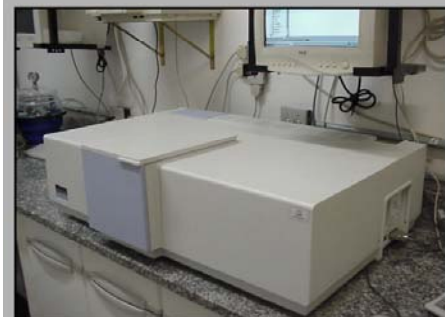


## Espectrógrafo de grade de difração



## Espectrofotômetro Dispersivo

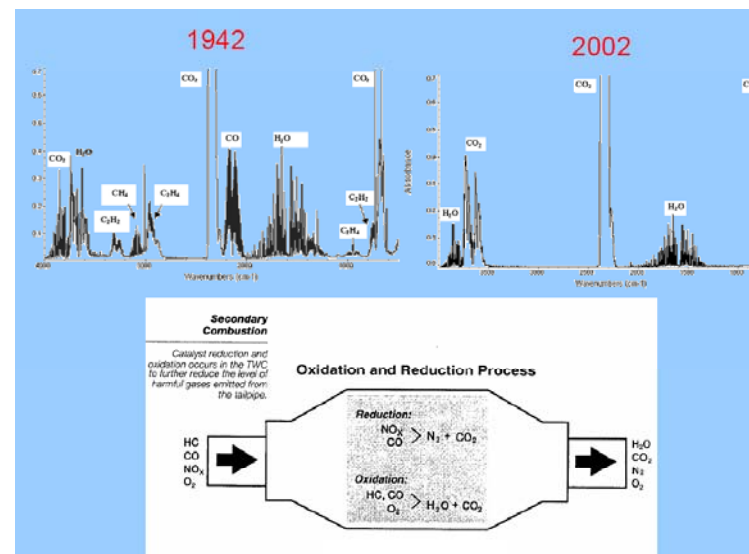




*Espectrofotômetro  
Perkin Elmer UV/VIS  
Lambda 900  
(185 – 3300 nm)*



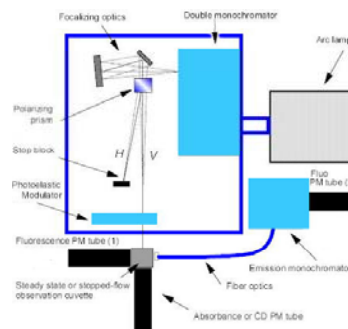
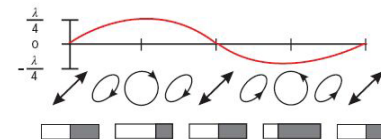
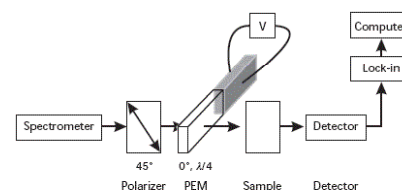
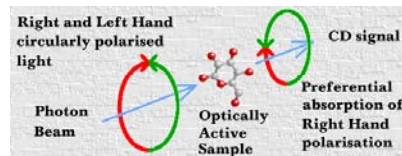
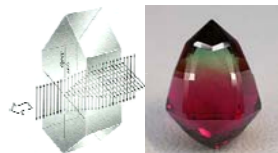
*Compartimento  
de amostras*



**Dicroísmo:** Materiais anisotrópicos em que uma direção de polarização é mais absorvida que a outra.

*Dicroísmo Linear (Ex. Tourmalina) Dicroísmo Circular (Ex. Tourmalina)*  
(orientação macroscópica) (anisotropia molecular)

$$\Delta\epsilon = \epsilon_x - \epsilon_y$$



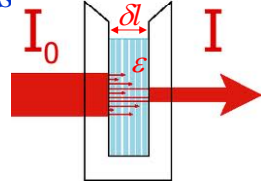




• CD é uma espectroscopia de absorção. baseia-se na Lei de Beer-Lambert

$$\frac{dI}{I} = -C \cdot \epsilon' \cdot \delta l$$

I: intensidade da radiação em ergs/cm<sup>2</sup> s  
C: concentração em mol/L  
ε': coeficiente de extinção  
δl: espessura da camada em cm



• Absorbância:

$$A = \log(I_0 / I) = \frac{\ln(I_0 / I)}{\ln(10)} = \frac{C \cdot \epsilon' \cdot \delta l}{\ln(10)} = C \cdot \epsilon' \cdot \delta l$$

• Se:

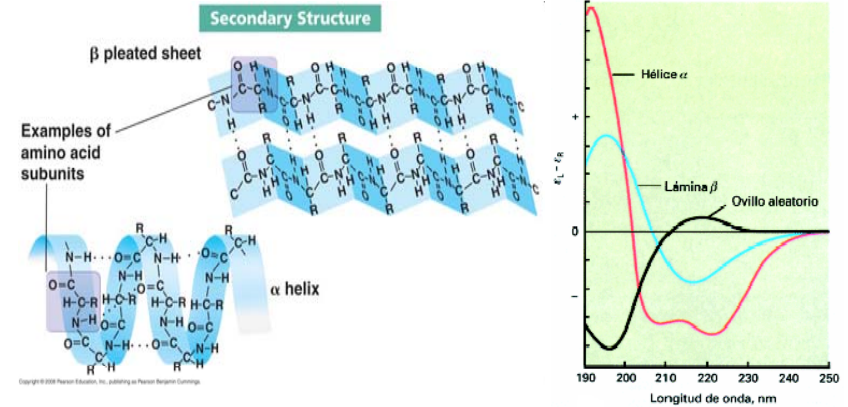
δN: Número de moléculas na camada de amostra. Coeficiente de absorção

w: taxa de absorção molecular

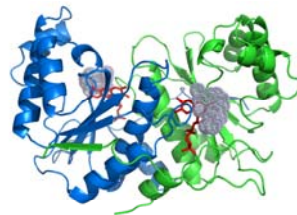
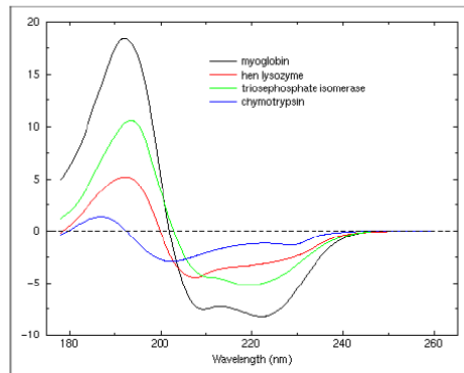
$$dI = \delta N \cdot w \quad \text{e} \quad \delta N = \frac{(N_a \cdot C \cdot \delta l)}{1000} \rightarrow \frac{dI}{I} = (N_a C / 1000) \frac{w}{I}$$

Concentração  
(em moles/l)

$$\epsilon = \frac{N_a w}{2303 I}$$



$$\theta(\lambda) = \chi_\alpha[\theta_\alpha(\lambda)] + \chi_\beta[\theta_\beta(\lambda)] + \chi_t[\theta_t(\lambda)] + \chi_r[\theta_r(\lambda)]$$



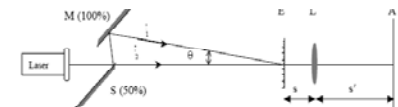
## Interferência



Jean Baptiste Joseph Fourier

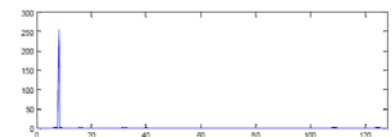
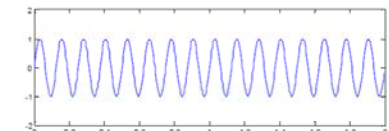


Johann Carl Friedrich Gauss  
(1777 – 1855)



$$E = A_1 \cos(\omega t - k_1 r) + A_2 \cos(\omega t - k_2 r)$$

$$I \propto \cos^2 \left[ k z \sin \left( \frac{\theta}{2} \right) \right]$$



J.W. Colley e J.W. Tukey  
1065 Algoritmo para calculo  
Rapito FT ⇒ FFT

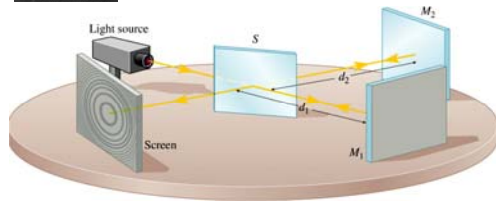




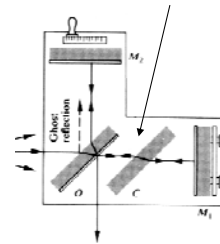
## Interferômetro de Michelson



Albert Abraham Michelson  
1852 - 1931



Placa compensadora



↓  $+\lambda/2$  - reflection

Se a diferença de caminho é  $2(d_1 - d_2) = m\lambda$  - mínimo, ponto escuro

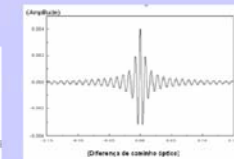
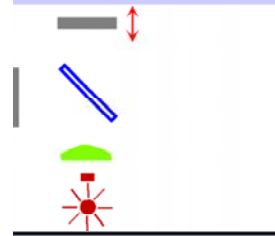
Se a diferença de caminho é  $2(d_1 - d_2) = m\lambda + \lambda/2$  - máximo, ponto brilhante

↑  $+\lambda/2$  - reflection



## Espectroscopia no Espaço do Tempo

### Interferência

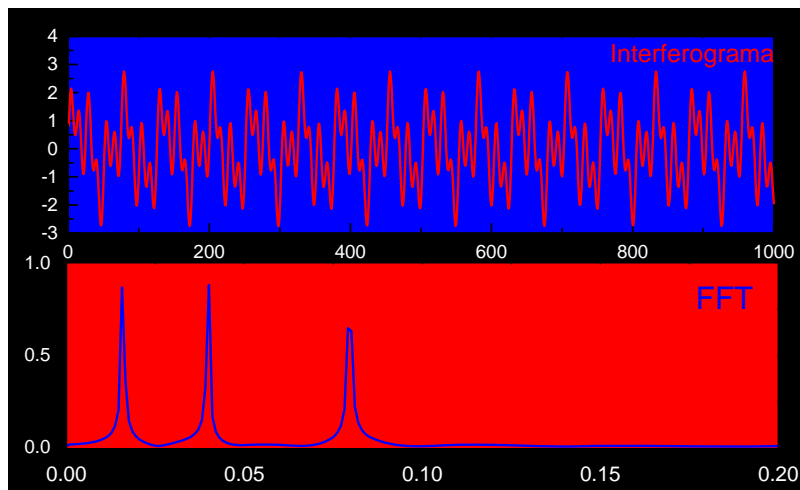


$$I(\delta) = \int B(\nu) \cos(2\pi\delta / \lambda) d\nu$$



$$I(\delta) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx))$$

- Algoritmo para o cálculo dos coeficientes  $a_k, b_k$
- Apenas Soma e Multiplicação
- Critérios de Apodização



## ESPECTROSCOPIA DE INFRAVERMELHO



$$I = I_0 \exp(-\alpha x)$$

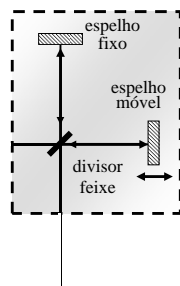
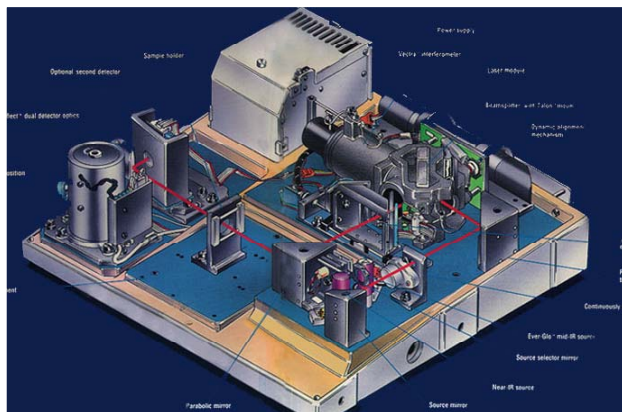
$$\%T = \frac{I}{I_0}$$



Instituto de Física de São Carlos  
Laboratórios de Ensino de Física

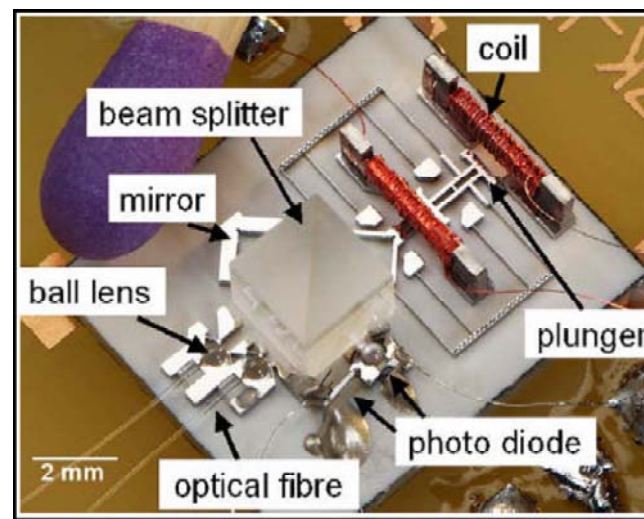
LEF

*Experimental - Medida interferométrica*



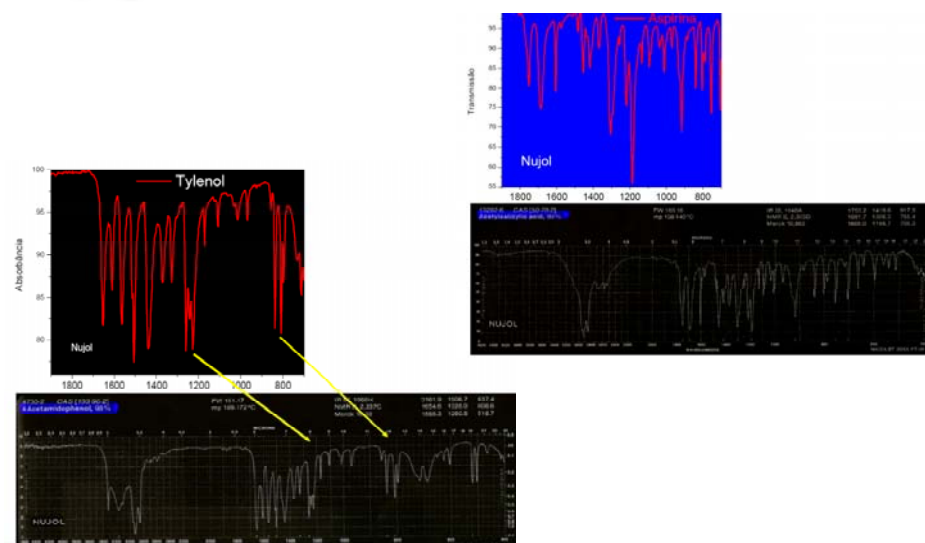
Instituto de Física de São Carlos  
Laboratórios de Ensino de Física

LEF



Instituto de Física de São Carlos  
Laboratórios de Ensino de Física

LEF



Instituto de Física de São Carlos  
Laboratórios de Ensino de Física

LEF

