



# REVISITANDO LA ESPECTROSCOPIA DE REFLEXIÓN TOTAL ATENUADA

*Posted on 31 marzo, 2021*

La espectroscopia de reflexión total atenuada (ATR por sus siglas en inglés), fue propuesta hace sesenta años para investigar la respuesta de compuestos orgánicos en la región infrarroja del espectro electromagnético [1]. En esta técnica, la radiación incide a través de un cristal de índice de refracción mayor (diamante, ZnSe o germanio) que se encuentra en contacto con la muestra. Así, la reflectividad del 100% esperada para muestras no absorbentes (reflexión total interna), se verá disminuida en las frecuencias que corresponden a las vibraciones moleculares características de la muestra.

La similitud entre espectros de transmisión y espectros de reflectividad en ATR, conllevó a suponer una dependencia exponencial con el coeficiente de absorción de los espectros ATR en analogía con la dependencia observada en espectros de transmisión. Dado que en una medición en ATR el haz de prueba no recorre una distancia específica dentro del material, se introdujo el concepto de "espesor efectivo", como el espesor de una película del mismo material que daría la misma absorción en una medición por transmisión a incidencia normal [2]. Tal espesor efectivo fue construido en el denominado límite de baja absorción tomando en cuenta varios factores, entre ellos, la profundidad de penetración en reflexión total interna (absorción cero). De este modo, el cociente del logaritmo del inverso de la reflectividad ATR y el espesor efectivo se asemeja al coeficiente de absorción. A lo largo de los años, esta "corrección" de los espectros ATR ha resultado muy útil para investigar la estructura y composición de una gran variedad de compuestos orgánicos (proteínas, polímeros, lípidos, etcétera.), membranas biológicas, fármacos, tejidos, así como compuestos inorgánicos. Adicionalmente, las capacidades de la técnica ATR se han extendido para investigar la dependencia de la composición en profundidad a través de imágenes.

Recientemente, mi estudiante de doctorado José Gustavo Méndez Lara, la auxiliar de investigación Reina Araceli Mauricio Sánchez del Cinvestav-Querétaro y un servidor, en colaboración con los investigadores Kenneth Järrendahl y Hans Arwin de la Universidad de Linköping de Suecia, desarrollamos una descripción general de espectros ATR para absorción arbitraria [3]. En el límite de absorción cero, nuestra descripción recupera la dependencia exponencial supuesta hace décadas por Harrick y du Pré [2]. Alternativamente, la reflectividad en ATR se puede describir con una dependencia exponencial de un coeficiente efectivo de absorción y de la profundidad de penetración en medios absorbentes. Estos parámetros efectivos fueron analizados para las interfaces de diamante con agua, quitosano y vidrio como sistemas representativos de

líquidos, polímeros y materiales inorgánicos, respectivamente. El quitosano es de amplio interés en aplicaciones diversas; se obtiene por desacetilación de la quitina, biopolímero presente en el caparazón de artrópodos y otros organismos. Particularmente, en el caso de polímeros el espesor efectivo (o profundidad de penetración) resulta sobrevaluado o subvaluado dependiendo de si se toma en cuenta o no la dispersión del índice de refracción. Este resultado ofrece una cuantificación más precisa de la concentración de los compuestos presentes a diferentes profundidades en la muestra.

## Referencias

1. Fahrenfort, Spectrochim. Acta 17, 698 (1961). [https://doi.org/10.1016/0371-1951\(61\)80136-7](https://doi.org/10.1016/0371-1951(61)80136-7)
2. J. Harrick and F. K. du Pré, Appl. Opt. 5, 1739 (1966). <https://doi.org/10.1364/AO.5.001739>
3. Mendoza-Galván, J. G. Méndez-Lara, R. A. Mauricio-Sánchez, K. Järrendahl, H. Arwin, Opt. Lett. 46(4), 872 (2021) <https://doi.org/10.1364/OL.418277>

Foto de [Amanda Martin](#)