

Análisis de espectroscopia Raman de materiales de construcción de carreteras

Se analizaron varios materiales sólidos utilizados en la construcción de carreteras utilizando un espectrómetro Raman de mano. Los materiales investigados son pigmentos y resinas de uso común como el CaCO_3 , TiO_2 y DEGALAN®. Los espectros

medidos diferían notablemente entre sí. Para evaluar las principales diferencias en las estructuras químicas, los picos de los diferentes espectros se asignaron a los grupos funcionales que los causan.

INTRODUCCIÓN

Diferentes materiales como pinturas, pigmentos (blancos) y resinas se utilizan comúnmente en la construcción de carreteras. Junto con perlas de vidrio (utilizadas para la señalización de carreteras visibles de noche) y varios otros materiales, nos ayudan a llegar de forma segura de A a B.

En este estudio, se analizaron diferentes materiales de

construcción de carreteras utilizando el analizador portátil Raman Mira M-1. Los espectros recopilados se compararon entre sí para ver las principales diferencias en los grupos funcionales. El análisis demostró que Mira M-1 es adecuado para la diferenciación de dichos materiales.

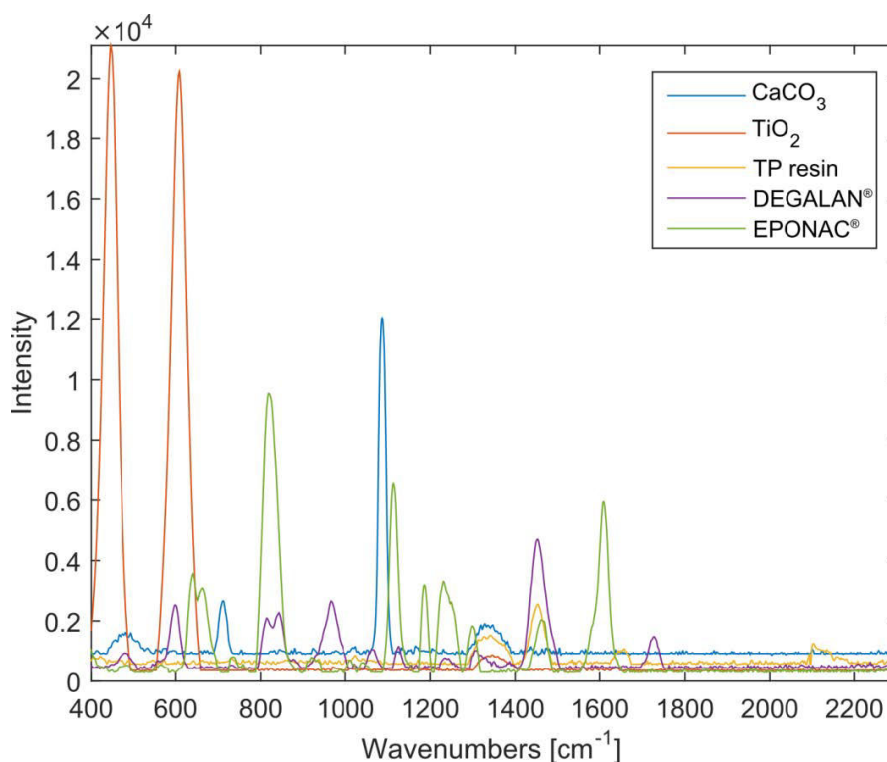


Figure 1. Superposición de espectros de diferentes materiales de construcción de carreteras

EXPERIMENTO

Todos los espectros se midieron usando el espectrómetro Mira M-1 Raman en modo de adquisición automática, es decir, los tiempos de integración se determinaron automáticamente. Se aplicó una longitud de onda láser de 785 nm y la técnica Orbital-Raster-Scan (ORS). Las mediciones se realizaron en pequeños viales de muestra con el adaptador de soporte de viales.

Se investigaron las siguientes muestras:

1. Tiza (CaCO_3)
2. Dióxido de titanio (TiO_2)
3. Resina EPONAC®
4. Resina TP
5. Pigmento amarillo
6. Pigmento azul
7. Pigmento rojo
8. Resina DEGALAN®

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La medición de carbonato de calcio proporcionó un espectro claro con dos picos principales a 712 cm^{-1}

(vibración de flexión O–C–O simétrica) y 1087 cm^{-1} (vibración de estiramiento simétrico).

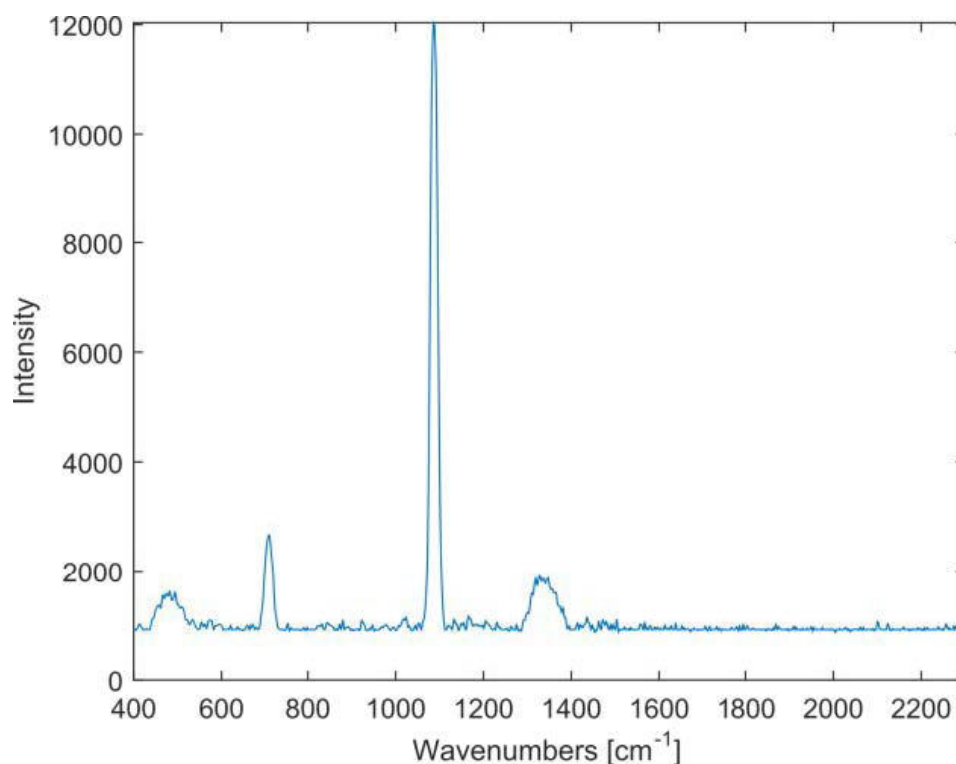


Figure 2. Espectro del carbonato de calcio.

Mirando el espectro del dióxido de titanio, se pueden ver dos picos principales que dan información sobre la modificación actual del cristal (rutilo o anatasa). Dos picos representan el rutilo, mientras que tres picos son típicos de la anatasa debido a su simetría cristalina.

Ambos picos son vibraciones de estiramiento simétricas y pertenecen a O–Ti–O (446 cm⁻¹) y Ti–O (609 cm⁻¹). En el caso de la anatasa, el pico a 446 cm⁻¹ se parte en dos. Esto facilita la diferenciación entre rutilo y anatasa.

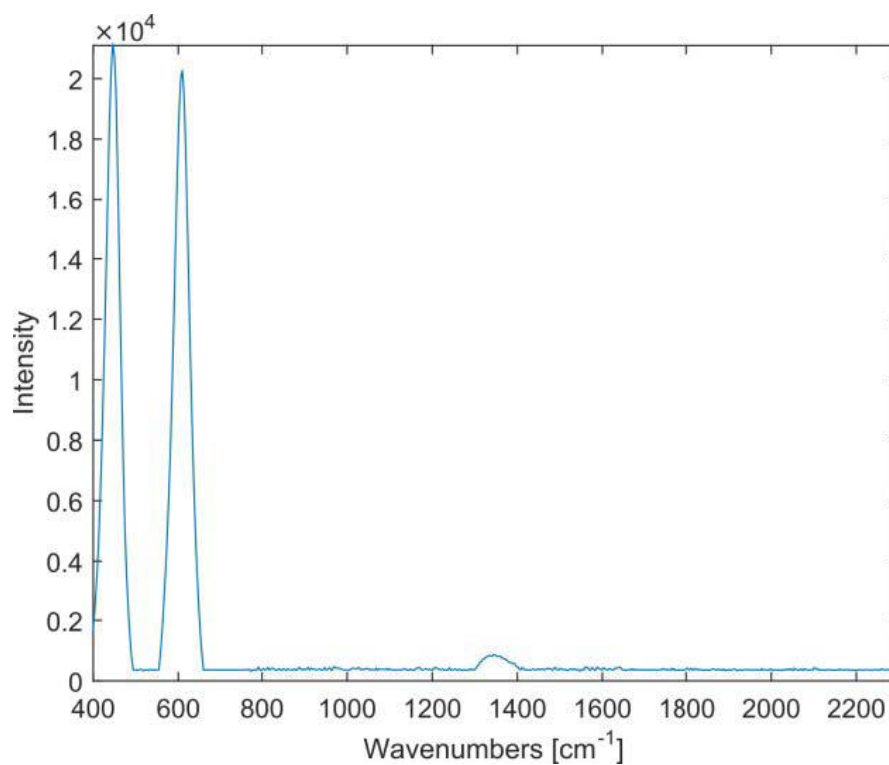


Figure 3. Espectro de TiO₂ (rutilo).

Un vistazo a los espectros de resinas típicas como EPONAC® o DEGALAN® revela picos bien separados

que se pueden asignar a sus grupos funcionales correspondientes (ver más abajo).

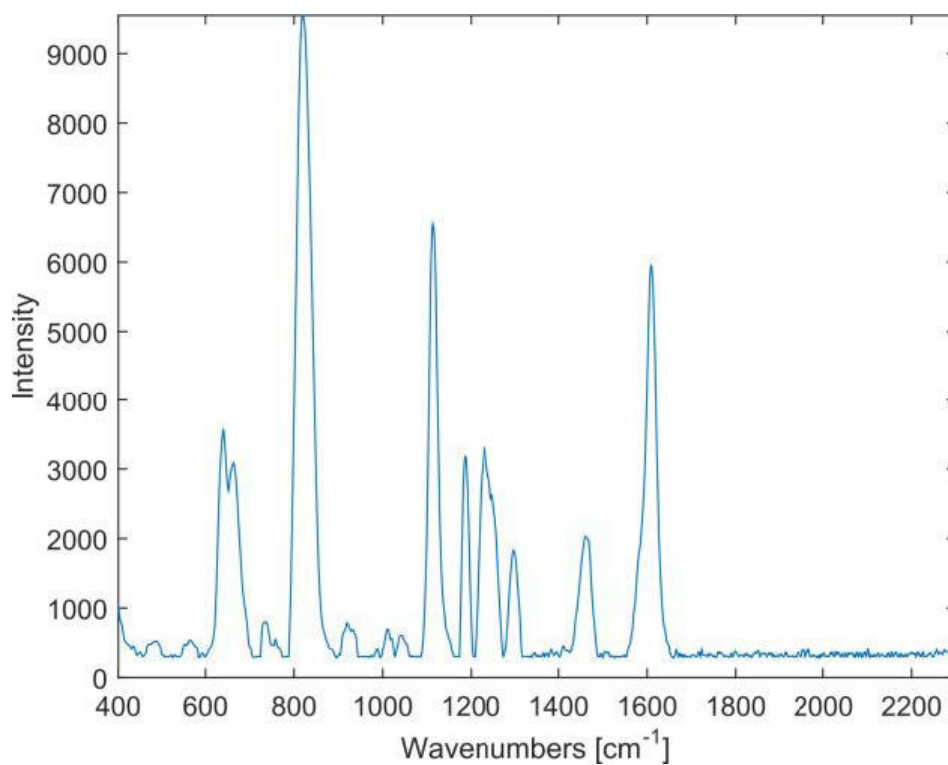


Figure 4. Espectro de la resina EPONAC®.

Tabla 1. Picos observados en el espectro EPONAC®.

Pico [cm ⁻¹]	Descripción
640	Vibración cíclica (benceno sustituido en para)
819	Vibración de flexión C-H (benceno sustituido en para)
1000	Varias vibraciones de estiramiento C-C
1113	Vibración de estiramiento C-OH
1189	C-(CH ₃) ₂ vibración de tensión
1231	CO
1248	C-H (benceno)
1298	-CH ₂ - vibración de torsión
1461	-CH ₂ - vibración de flexión
1609	C=C

Los picos son muy característicos del benceno sustituido en para y confirman que EPONAC® es un copolímero de bisfenol A (BPA) y otro componente. Al comparar el espectro EPONAC® con el espectro DEGALAN® (ver Figura 5), es obvio que el pico del benceno a 1600 cm^{-1} está perdido. El pico alrededor

de 1700 cm^{-1} , junto con los picos ligeramente por debajo y por encima de 1200 cm^{-1} , es característico de los grupos carbonilo. Además de eso, los picos C–C son más distintos para EPONAC® que para DEGALAN®.

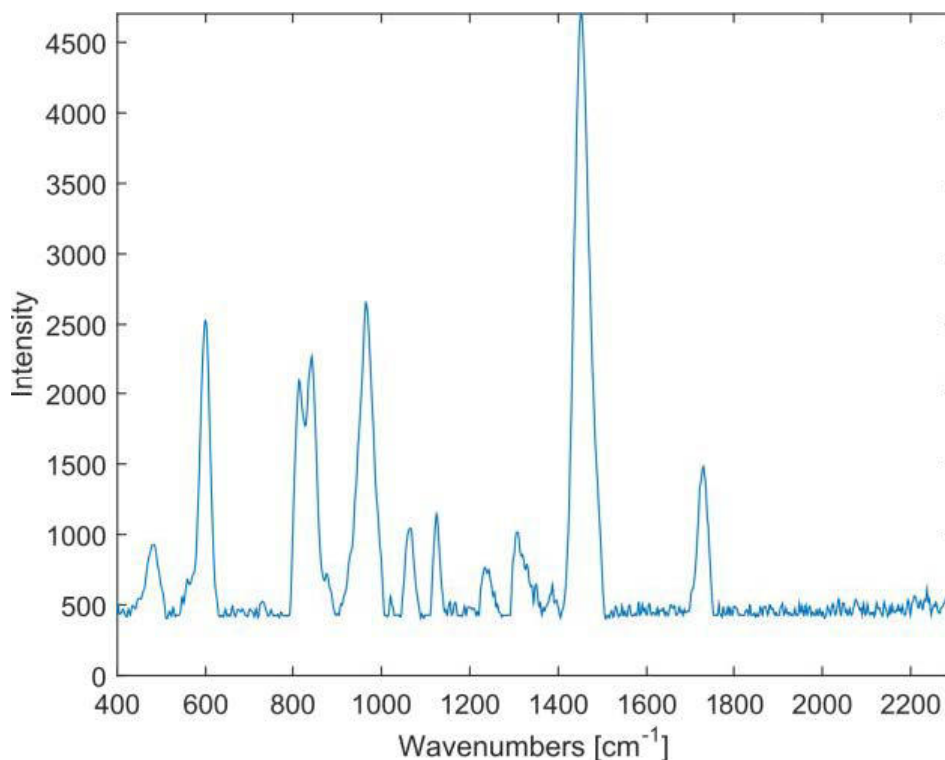


Figure 5. Espectro de la resina DEGALAN®

Tabla 2. Picos observados en el espectro DEGALAN®.

Pico [cm^{-1}]	Descripción
599	–COO vibración de flexión
814	Vibración de flexión de propionato
843	C–CH ₃ vibración de tensión
965	Vibración de estiramiento C–C
1065	Vibración de estiramiento C–COO
1125	CO
1234	CO
1308	–CH ₂ – vibración de torsión
1452	–CH ₂ – vibración de flexión
1728	C=O grupo carbonilo, éster

Usando estas diferencias, es fácil discriminar entre las resinas y también entre resinas y pigmentos (ver

Figura 6).

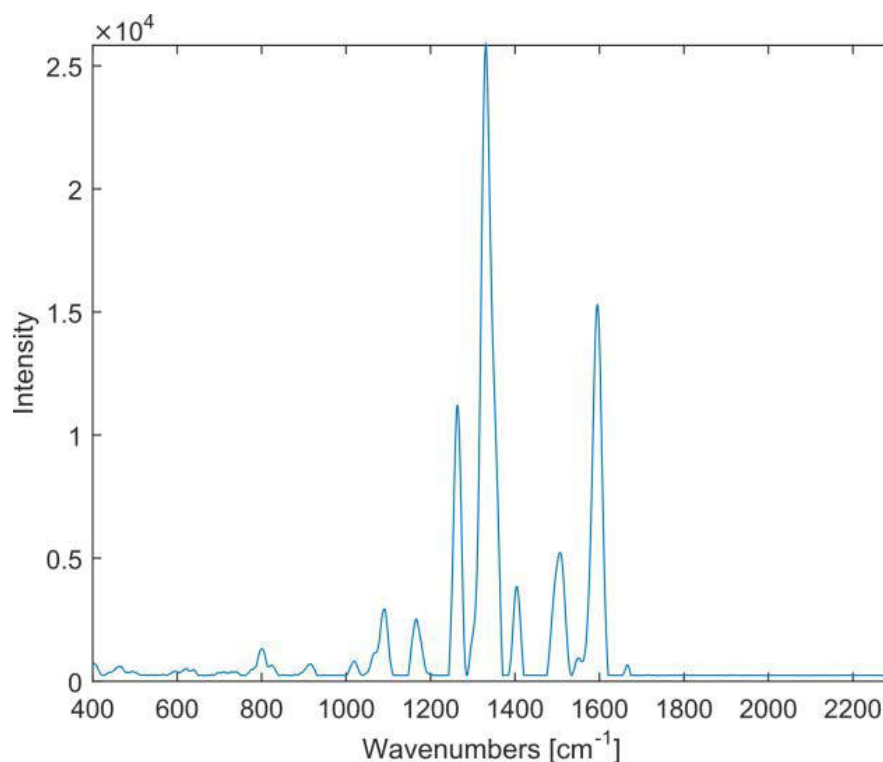


Figure 6. Espectro del pigmento amarillo «Hansa®-Brilliantgelb»

CONCLUSIONES

Debido a las grandes diferencias en sus espectros, la espectroscopia Raman portátil es ideal para el análisis de materiales utilizados en la construcción de carreteras. La investigación de los espectros mostró

que existen diferencias significativas en los grupos funcionales de los materiales, lo que permite la identificación con sistemas portátiles Raman como Mira M-1.

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es

CONFIGURACIÓN



MIRA P Advanced

El Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) P es un potente espectrómetro Raman portátil que se puede utilizar para determinar y verificar de forma rápida y no destructiva los más diversos materiales como, por ejemplo, principios activos y excipientes de uso farmacéutico. Pese a su pequeño tamaño, el MIRA P es muy robusto y cuenta con un espectrógrafo de diseño muy eficiente, que está equipado con nuestra extraordinaria tecnología Orbital Raster Scan (ORS). El MIRA P cumple la normativa FDA 21 CFR Parte 11.

El paquete Advanced incluye una lente adicional con la que los materiales se pueden analizar directamente o en sus recipientes (láser de clase 3b) y un accesorio de soporte de vial para analizar las muestras que se encuentran en viales de vidrio (láser de clase 1).