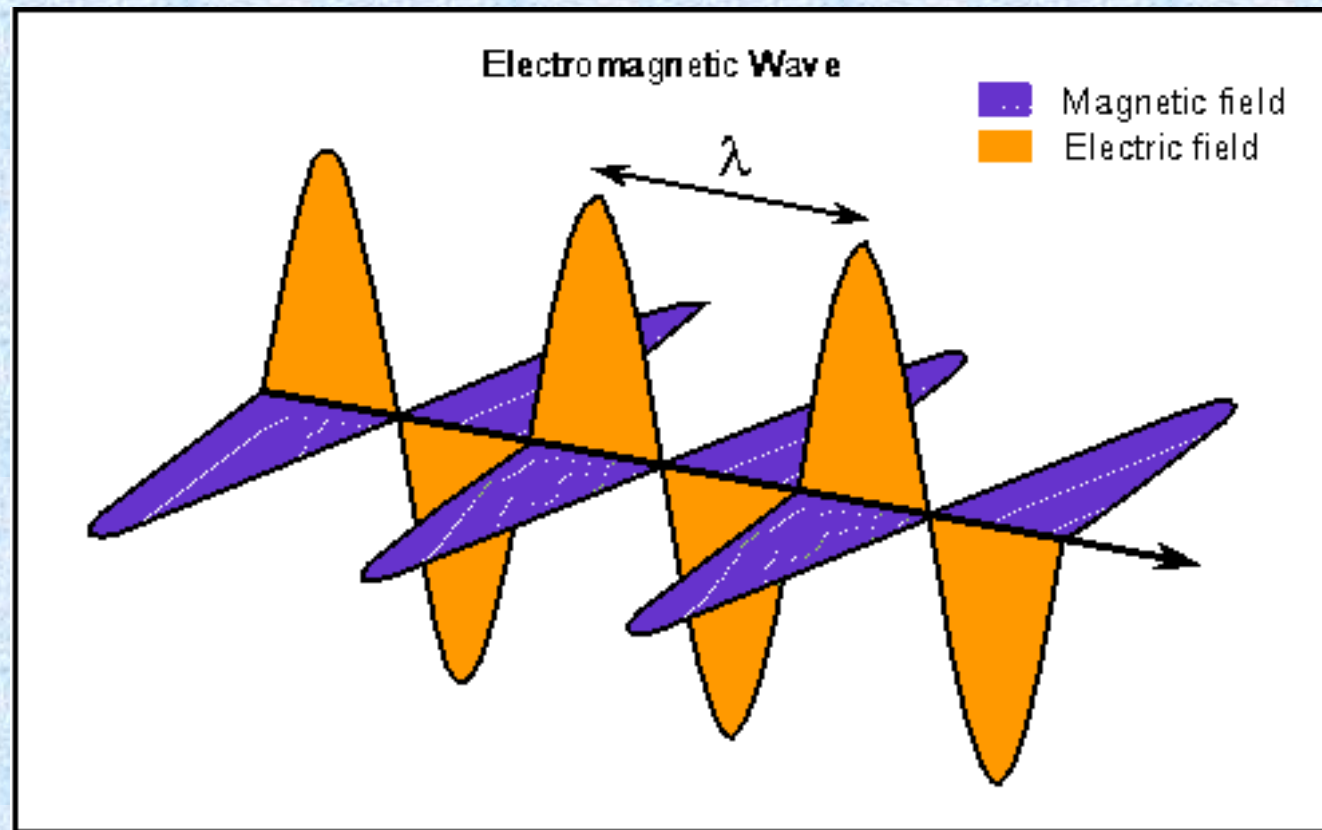


SPEKTROSKOPICKÉ VLASTNOSTI LÁTEK (ZÁKLADY SPEKTROSKOPIE)

SVĚTLO

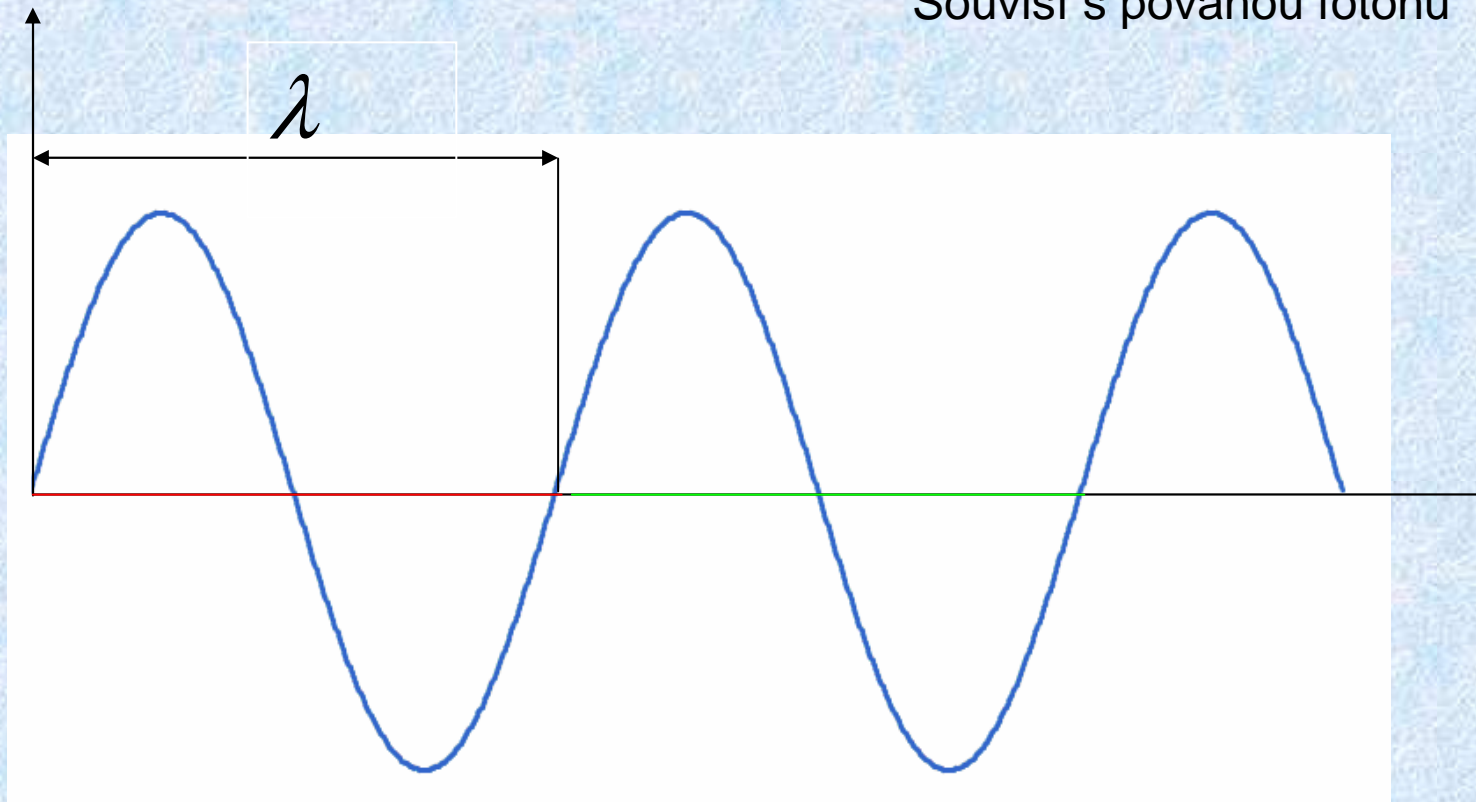
- Elektromagnetické vlnění



Charakterizace záření

- Vlnová délka - (λ) : jednotky: **m** (obvykle **nm**)

Souvisí s povahou fotonu



Charakterizace záření

- Zářivý tok (intenzita)

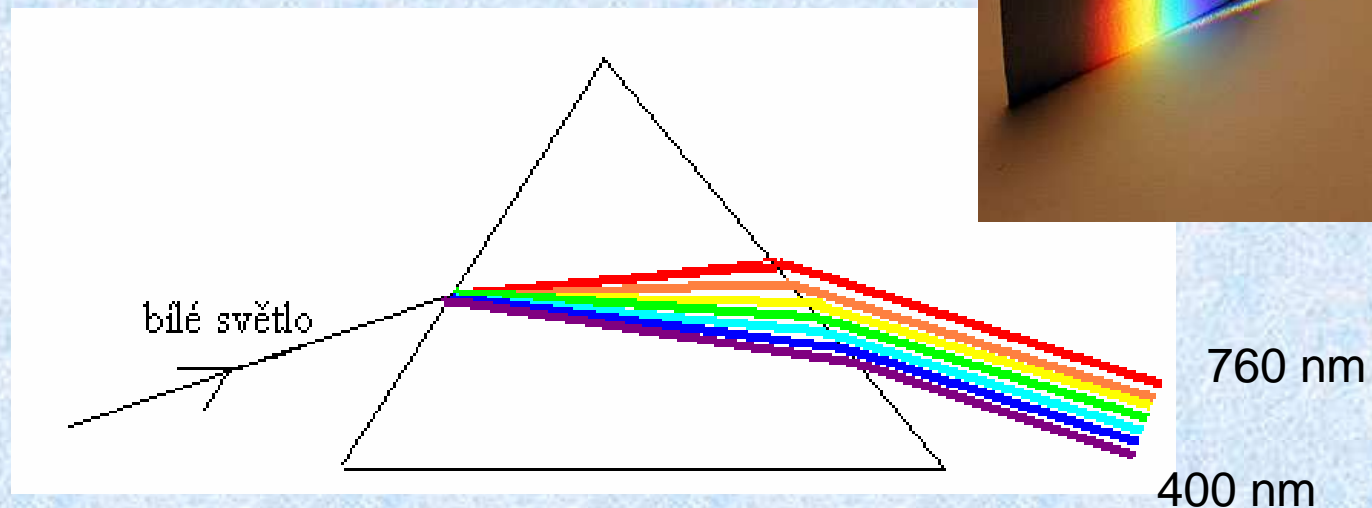
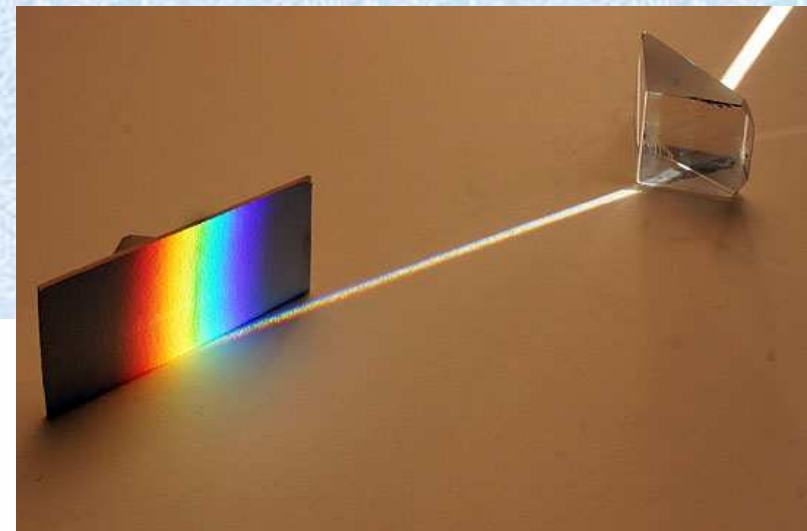
Energii přenášenou elektromagnetickým vlněním posuzujeme dle **fotometrických veličin** např. dle zářivého toku. Ten je definován jako podíl celkové energie záření (vlnění) prošlého zvolenou plochou za jednotku času. V literatuře je někdy tato veličina ztotožňována s **intenzitou záření**.

$$\phi = \frac{\left(\frac{\Delta E}{\Delta t} \right)}{\Delta S}$$

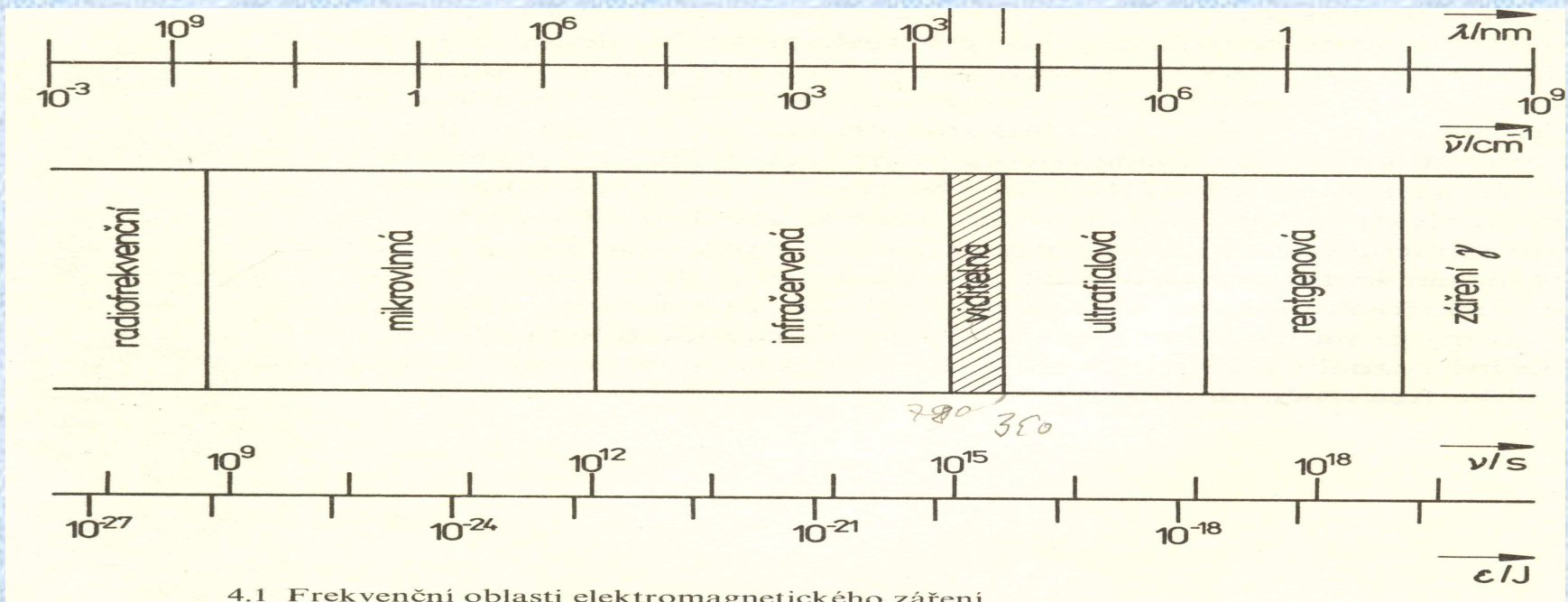
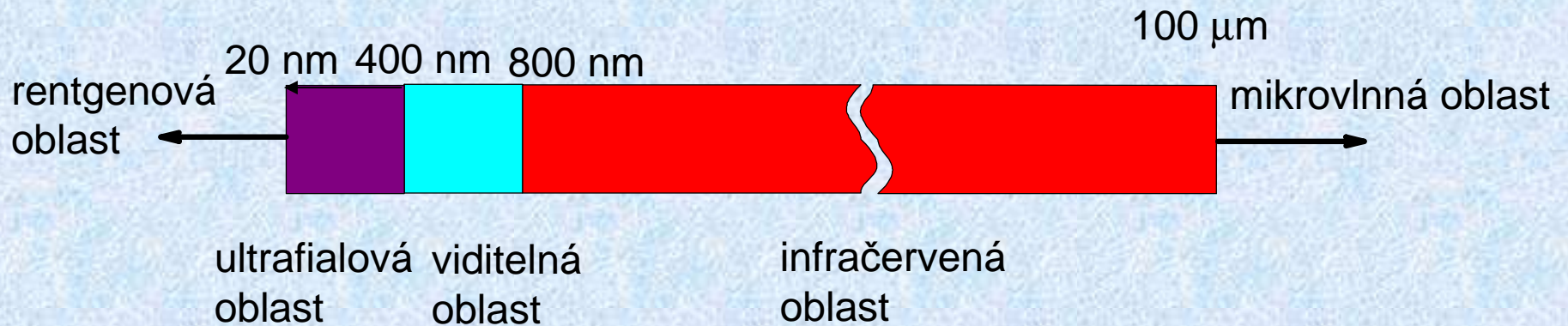
Souvisí s množstvím
(počtem) fotonů

Co je to světlo?

- bílé světlo můžeme rozložit pomocí hranolu na jednotlivé spektrální barvy



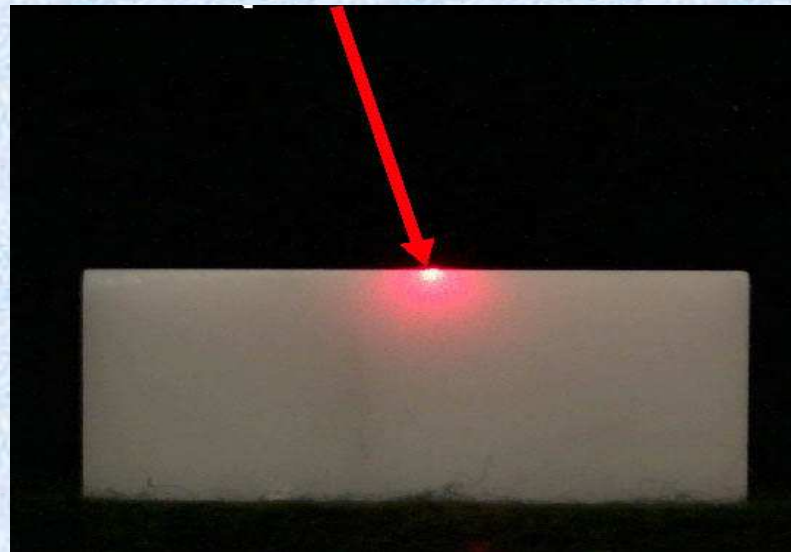
ROZDĚLENÍ OBLASTÍ ZÁŘENÍ



4.1 Frekvenční oblasti elektromagnetického záření

SPEKTROSKOPIE

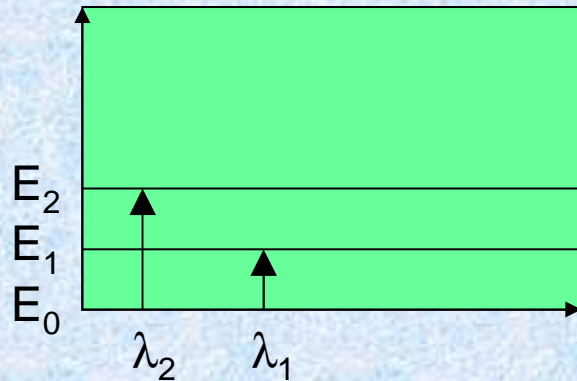
- je založena na **vzájemném působení elektromagnetického záření se zkoumanou látkou**, při kterém dochází k **výměně energie**



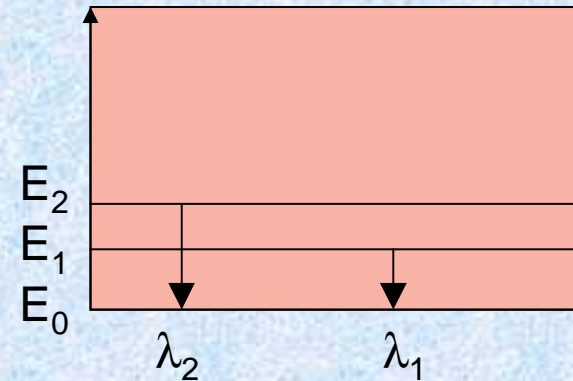
CO SE MŮŽE DÍT?

Zkoumaná látka záření
pohlcuje či vyzařuje

absorpce – obsazují se
vyšší energetické hladiny



emise – obsazují se nižší
energetické hladiny

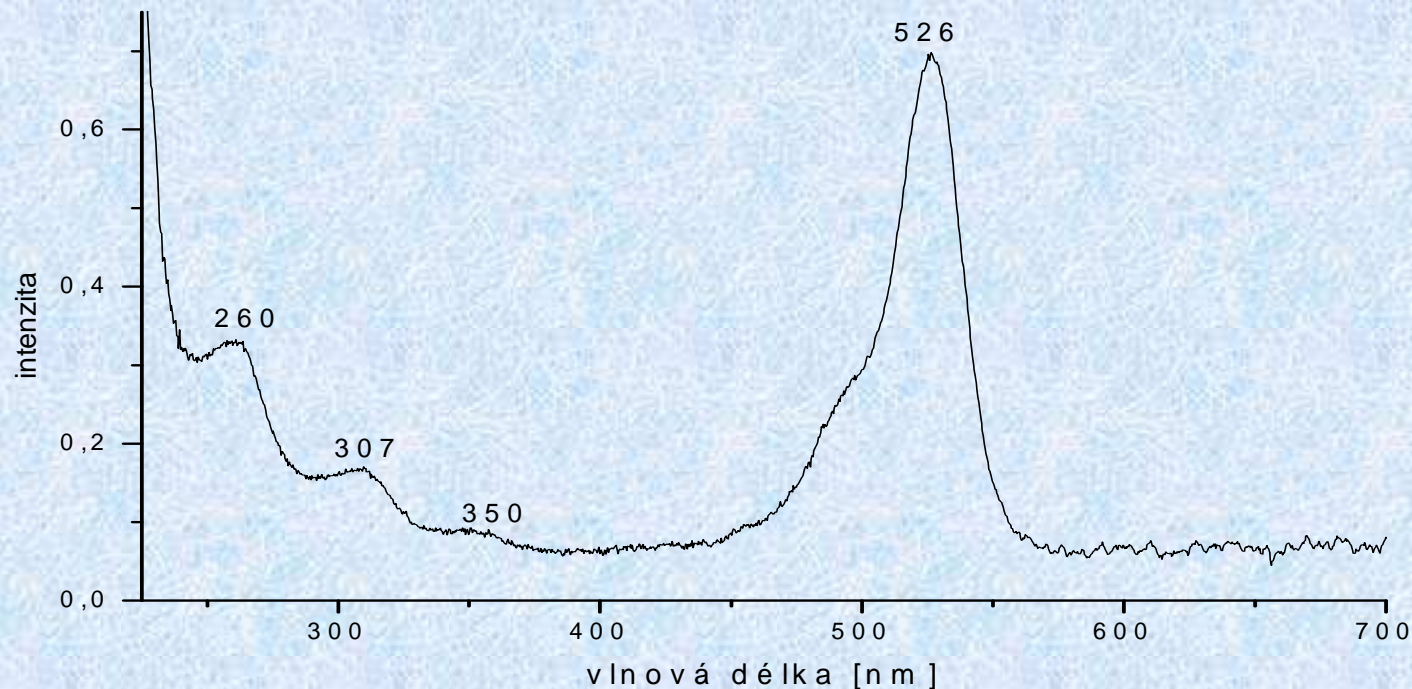


E_0 – základní energetická hladina; E_1 a E_2 – vyšší energetické hladiny

http://www.physics.uoguelph.ca/applets/Intro_physics/kisalev/java/atomphoton/index.html

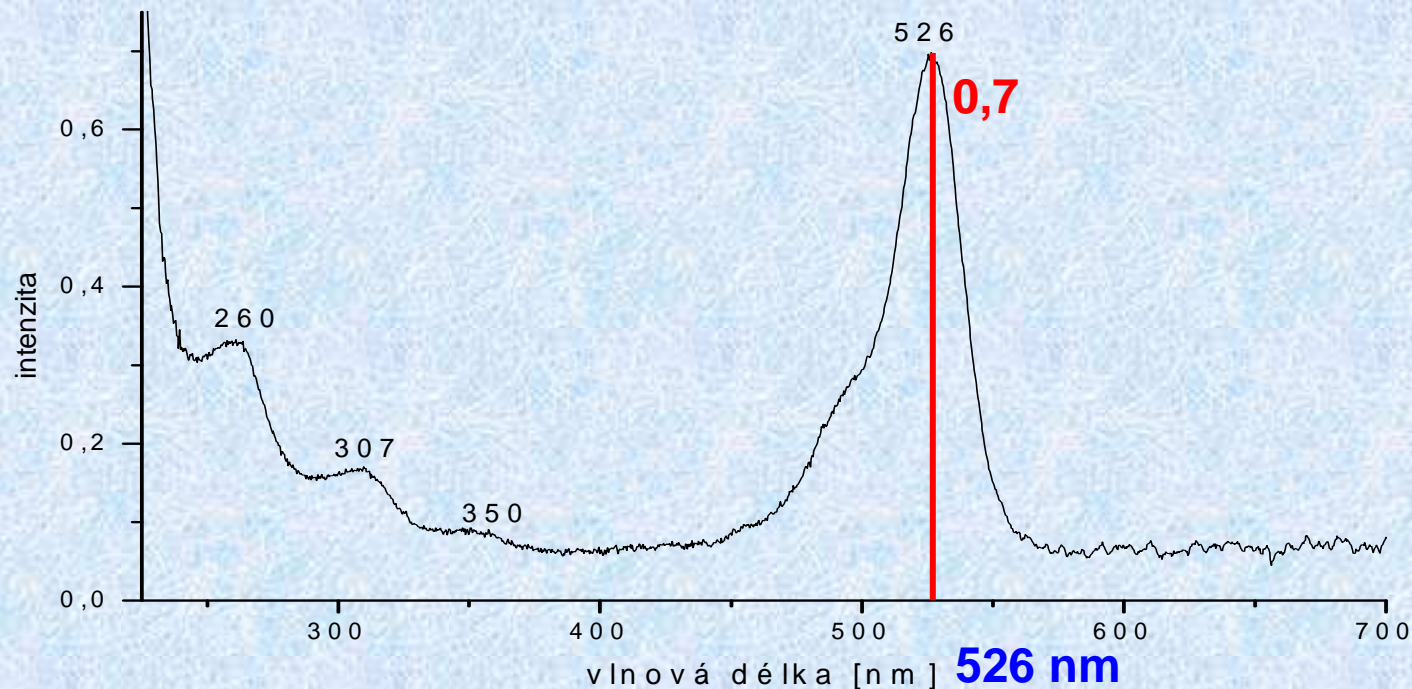
CO JE TO SPEKTRUM?

- Závislost **intenzity** (zářivého toku) elektromagnetického záření (nebo s ní související veličiny) prošlého vzorkem (popř. intenzity emitovaného elektromagnetického záření) na **vlnové délce** λ , **frekvenci** ν nebo **vlnočtu** $\tilde{\nu}$



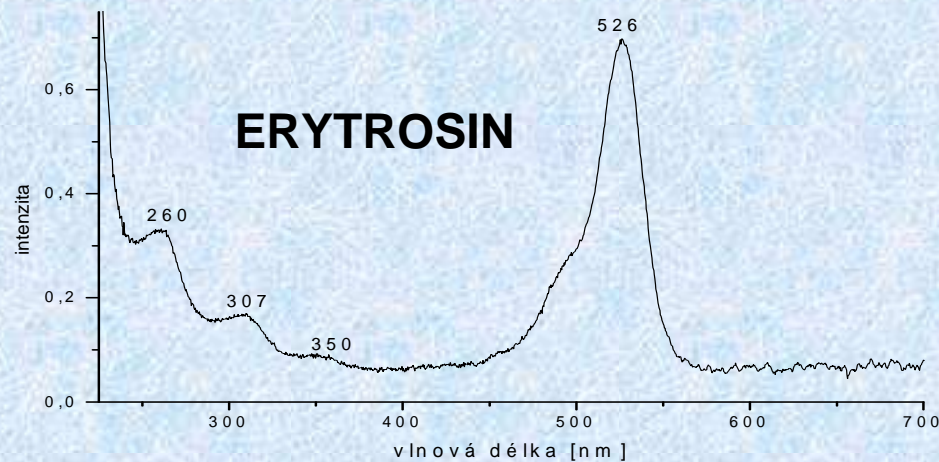
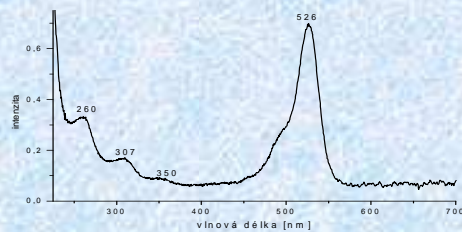
K ČEMU NÁM TO BUDE?

- Jde v podstatě o závislost toho **jak moc (intenzita)** jsou absorbovány **konkrétní fotony** (dané **vlnové délky, frekvence, vlnočtu**)



POLOHY A TVAR PÁSŮ (CHARAKTER SPEKTRA)

- Říkají (mohou říkat) něco o elektronové struktuře, struktuře molekuly apod.
- Jsou charakteristické pro danou látku a mohou být využity ke **kvalitativnímu stanovení**

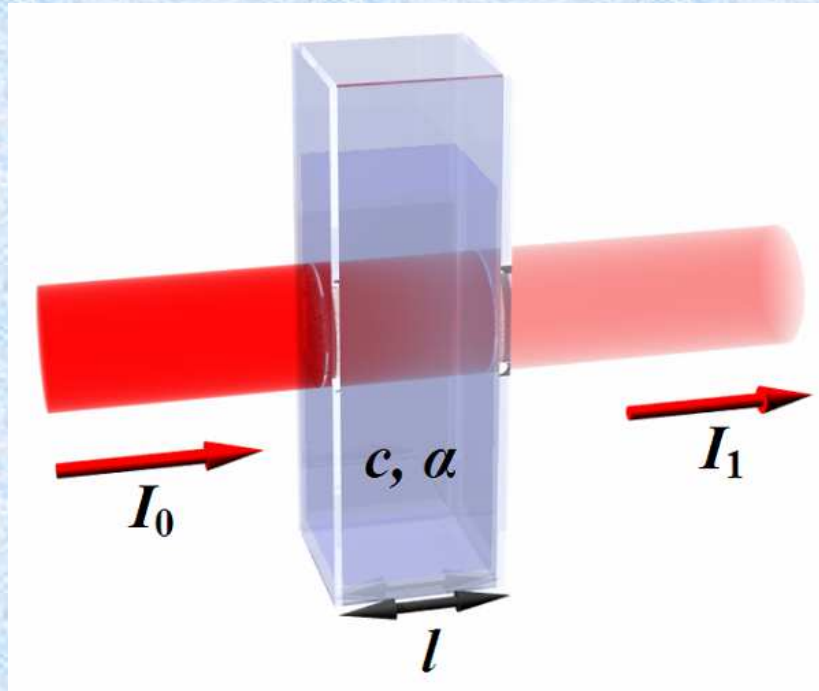


INTENZITA ABSORPCE

- Může být využita ke **kvantitativnímu** stanovení látek (např. v analytické chemii)

Jak?

Odvození Lambert-Beerova zákona



$$\frac{dI_z}{I_z} = -\alpha \cdot c \cdot dz$$

$$T = (I / I_0) \cdot 100 \text{ (v \%)}$$

Veličiny, které charakterizují velikost absorpce záření:

- absorbance (A) – udává v logaritmické stupnici, kolikrát se snížila intenzita původního záření po průchodu vzorkem

$$A = \log I_0 / I = - \log T$$

Absorbance nabývá hodnot od 0 do ∞ , pokud je absorbance nulová, žádné záření zkoumaná látka nepohltila.

Jak souvisí absorbance s koncentrací?

- při kvantitativním stanovení látek vycházíme z Lambert – Beerova zákona, který můžeme matematicky zapsat:

$$A = \varepsilon \cdot c \cdot l,$$

kde A je absorbance, ε je molární absorpční koeficient ($\text{l mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$), který je konstantní pro danou látku při konstantní vlnové délce, c je molární koncentrace (mol/l), l je délka kyvety (cm)

Omezení platnosti zákona:

- monochromatické záření (o konstantní vlnové délce)
- zředěné, čiré roztoky (koncentrace pod 10^{-2} mol/l)

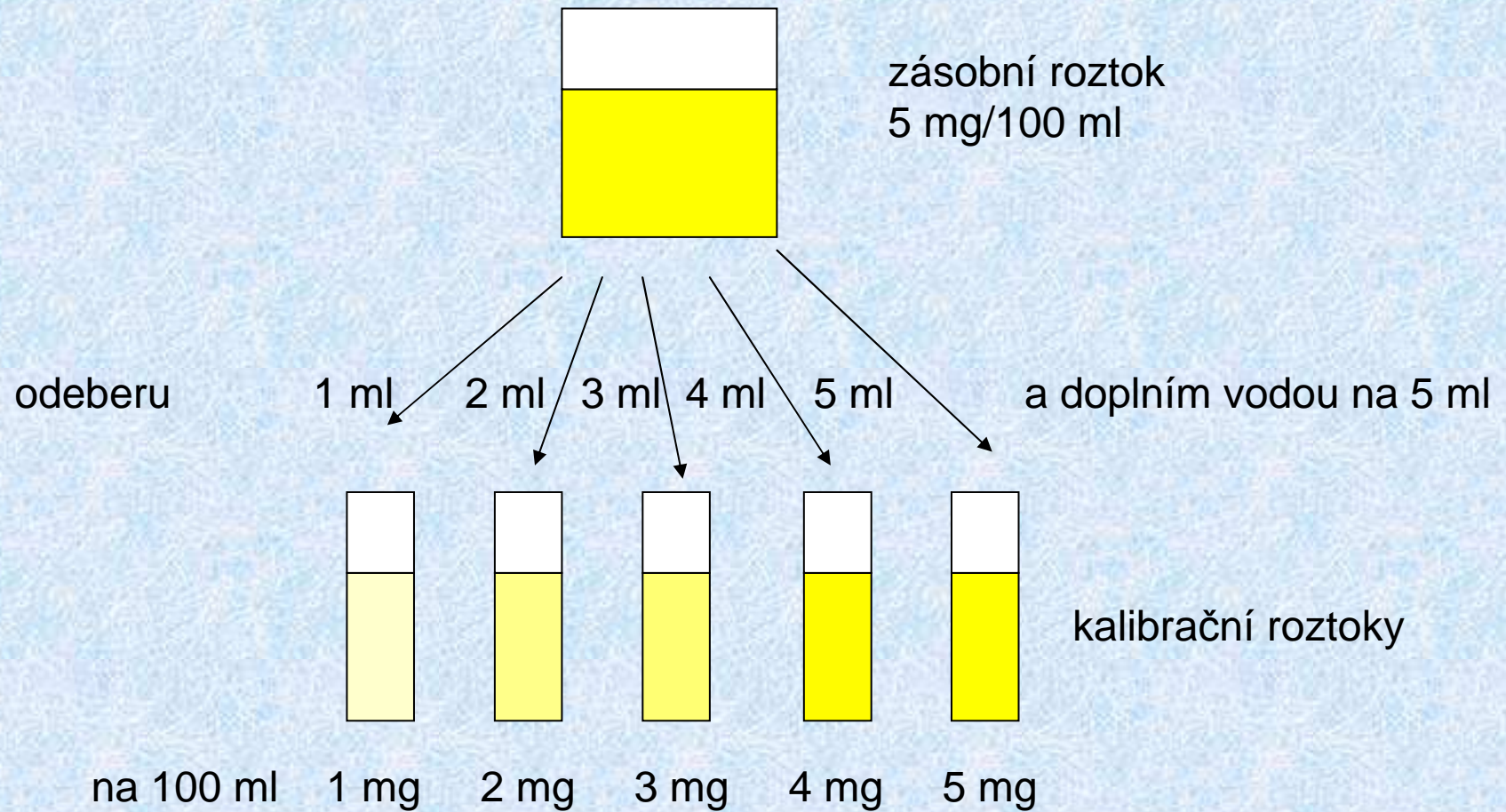
Stanovení koncentrace:

- při spektroskopických stanovení koncentrace látek využíváme nejčastěji metodu kalibrační přímky

Postup:

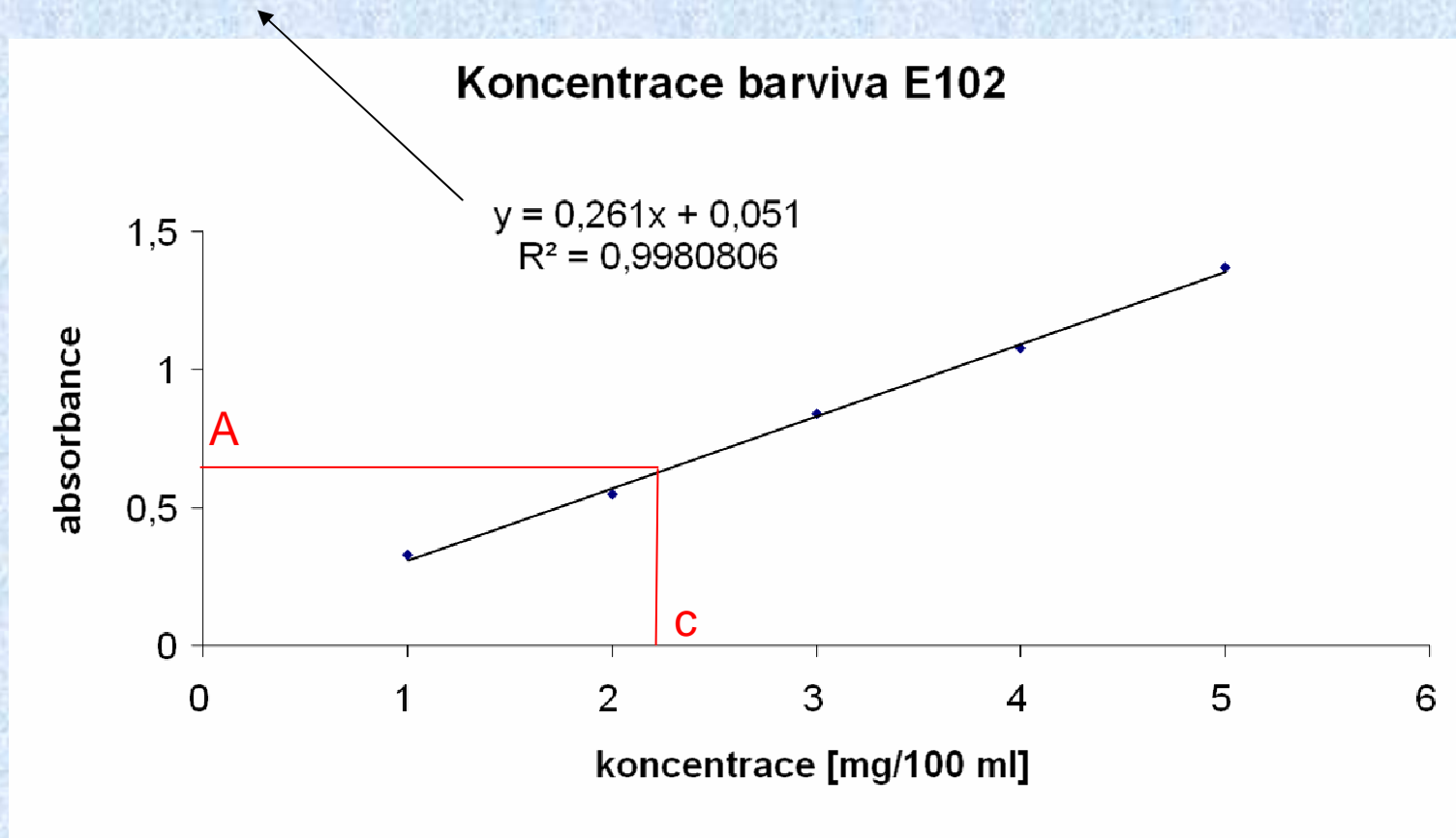
- příprava základního roztoku, jehož koncentrace je větší než mají vzorky
- ředěním základního roztoku se získají kalibrační roztoky o známé koncentraci
- zjistí se absorbance kalibračních roztoků, které obsahují stejná činidla jako vzorky
- sestrojí se graf závislosti absorbance na koncentraci

Grafický postup:



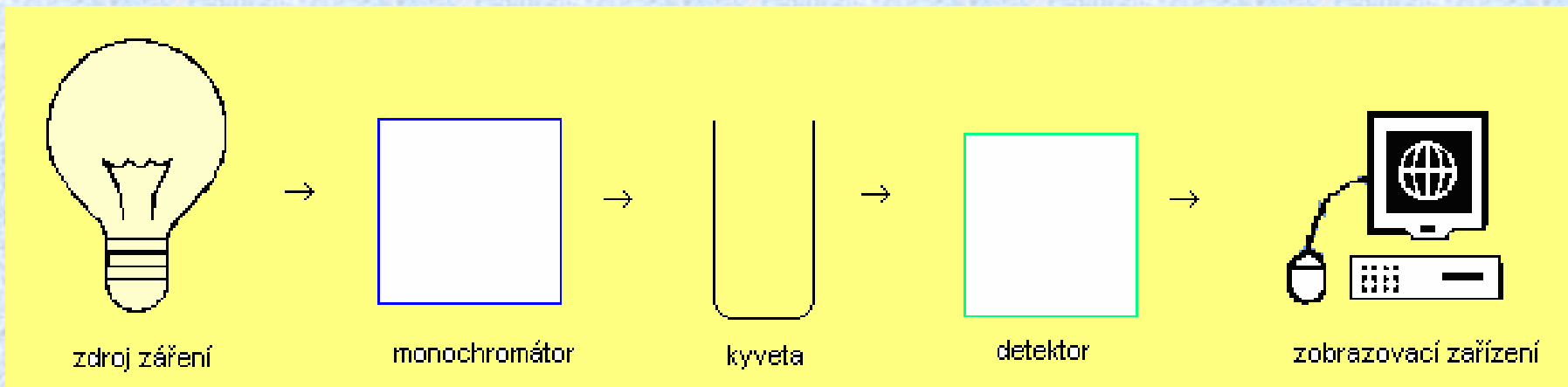
Výsledný graf:

z rovnice kalibrační přímky vypočítáme hodnotu koncentrace (x) neznámého vzorku, když za y dosadíme naměřenou absorbanci



Základní prvky měřících přístrojů:

- zdroj záření – v UV oblasti deuteriová výbojka a ve VIS oblasti wolframová nebo halogenová žárovka
- monochromátor – vymezí vlnovou déku (hranol, mřížka nebo filtr)
- kyvety se vzorkem – pro UV oblast křemenné a pro VIS oblast skleněné
- čidlo záření – detektor – převádí energii záření na jinou měřitelnou formu
- zobrazovací zařízení – obrazovka počítače



Přístroje k měření absorbance:

- fotometry – jako monochromátor mají barevné filtry
- spektrofotometry – jako monochromátor mají hranol nebo mřížku

V chemické laboratoři se můžeme setkat se staršími typy spektrofotometrů.



Spekol 10 - jednopaprskový výchylkový spektrofotometr



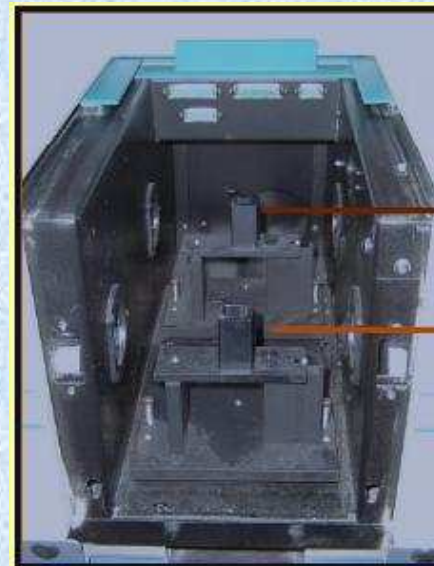
Spekol 11 - jednopaprskový digitální spektrofotometr

Spektrofotometr USB2000:



zobrazovací zařízení

tato malá krabička v sobě obsahuje
monochromátor a detektor



**SROVNÁVACÍ
PAPRSEK**

**MĚRNÝ
PAPRSEK**

Barevnost látek:

bezbarvé látky

- neabsorbují záření ve viditelné oblasti

barevné látky

- absorbují část viditelného záření
- barva pozorovaná okem je barvou **doplňkovou** k barvě pohlceného záření
- barva doplňková je zbytek neabsorbovaného záření

Absorbované záření a doplňková barva:

Absorbované záření
[nm]

Barva absorbovaného
záření

Barva doplňková (barva
roztoku)

400 – 435

435 – 480

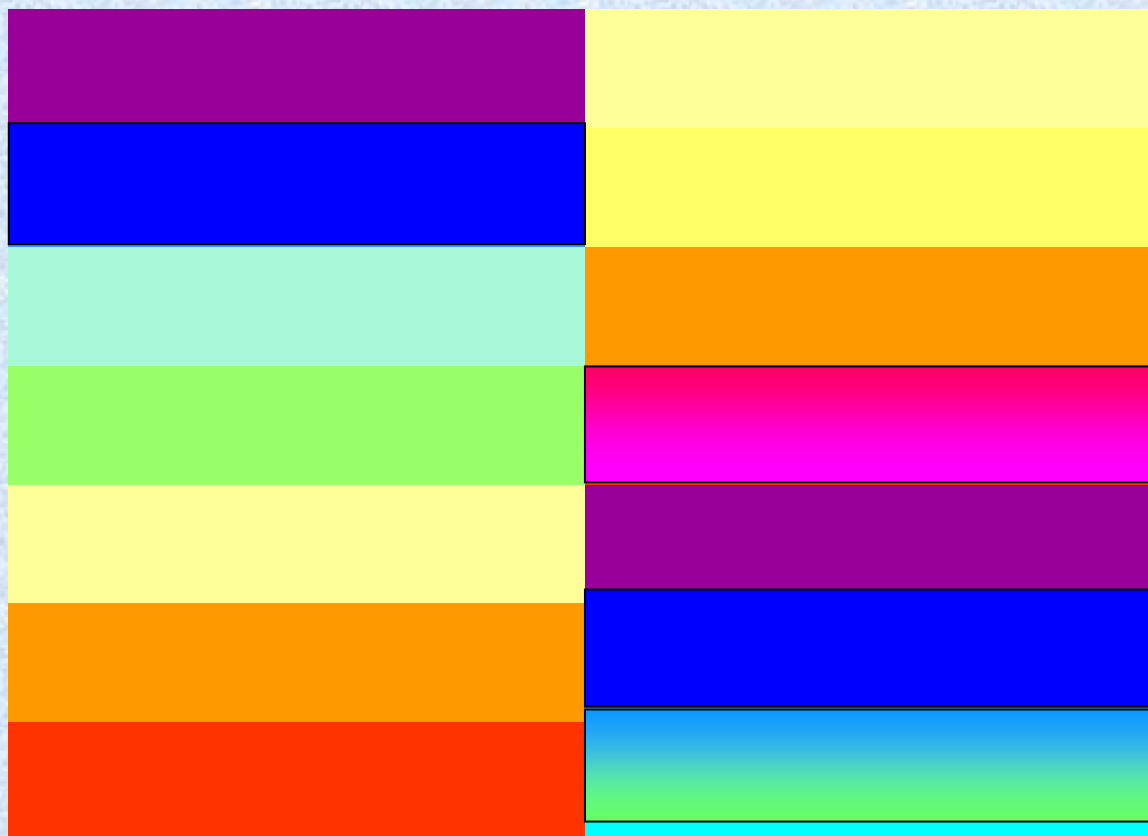
480 – 500

500 – 560

560 – 580

580 – 595

595 - 760

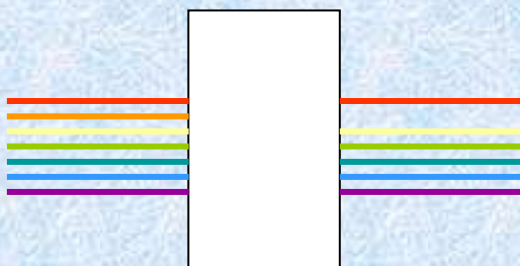




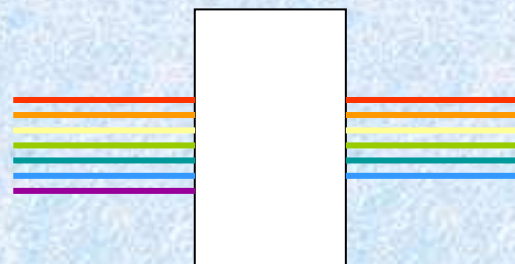
Pokus se vyřešit následující úkol:

Na následujících obrázcích jsou v kyvetě zašifrované barevné roztoky látek. Vaším úkolem je odhadnout barvu roztoku a absorpční maximum této látky.

a)



b)

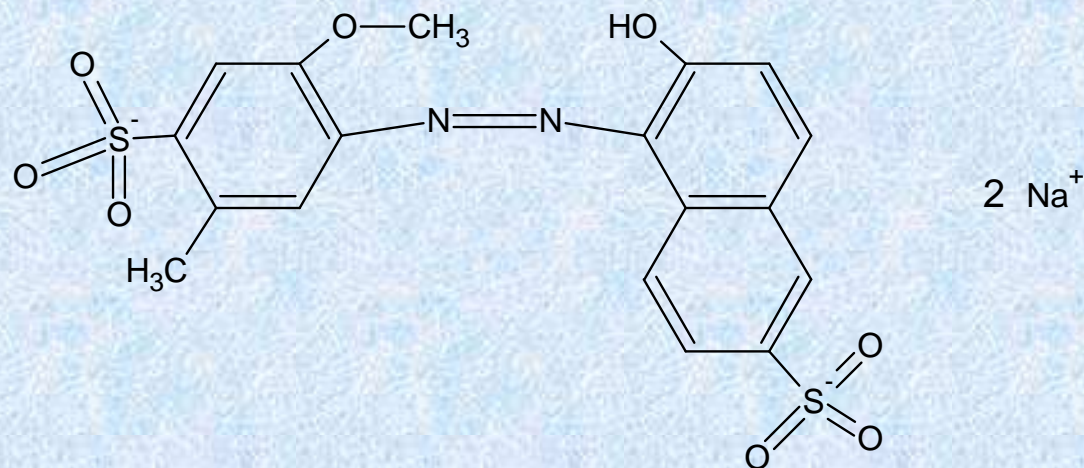


Chromofory:

- charakteristická funkční seskupení zodpovědná za barevnost sloučeniny – často se jedná o konjugovaný systém násobných vazeb



Na následujícím obrázku je vzorec červeného potravinářského barviva. Pokuste se určit, která funkční skupina bude zodpovědná za barevnost sloučeniny.





Následující obrázky zobrazují dvě spektra roztoků, jejichž výsledná barva je stejná. Zkuste tuto barvu odhalit. První spektrum charakterizuje jednu látku zodpovědnou za dané zbarvení. V druhém případě se jedná o směs dvou různých barviv. Z pomoci tohoto spektra zjistěte, jaké barvy byly smíchaný.

