



Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

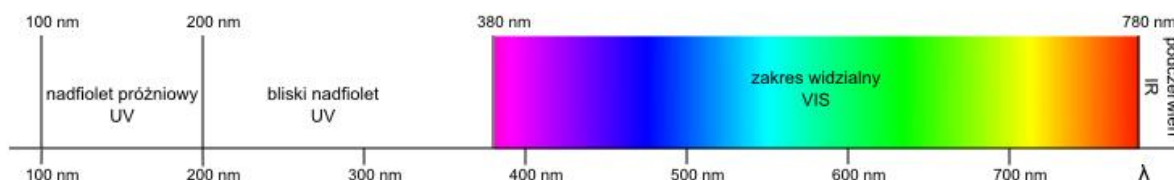
## Zastosowanie spektroskopii UV/VIS w określaniu struktury związków organicznych

Małgorzata Krasodomska

### 1.1. Wprowadzenie do spektroskopii UV/VIS

Spektroskopia w nadfiolecie, oraz światło widzialnym UV/VIS (Ultraviolet/ Visible Spectroscopy) jest jedną z metod stosowanych w badaniach struktury związków organicznych. Wykorzystywany do badań w tej spektroskopii jest obszar widma promieniowania elektromagnetycznego od 200 nm – 780 nm. Długość fali w tym obszarze podajemy najczęściej w nanometrach ( $1\text{nm} = 10^{-9}\text{ m}$ ).

Obszar promieniowania nadfioletowego UV rozciąga się od 100-380 nm (Rysunek 1). Wyróżnia się daleki ultrafiolet (długość fali 100-200 nm) oraz bliski ultrafiolet – (długość fali 200-380 nm). Dla chemika organika interesujący jest zakres bliskiego nadfioletu (bliski UV), natomiast daleki nadfiolet (próżniowy UV) dostępny jest dzięki zastosowaniu próżni (ze względu na absorpcje powietrza w tym obszarze). Stosuje się również podział ze względu na działanie na człowieka. Oznacza się, jako UV-A, promieniowanie o długości fali 320-380 nm. Promieniowanie UV-A przyspiesza procesy starzenia uszkodzając włókna kolagenowe w skórze. Długoletnia ekspozycja na duże dawki promieniowania UV-A może powodować zmętnienie soczewki, czyli zaćmę. Promieniowanie z zakresu 280-320 nm, tzw. UV-B, powoduje wytwarzanie witaminy D w skórze. Najbardziej niebezpieczne dla ludzkiego organizmu jest promieniowanie UV-C (długość fali 200-280 nm). Długa ekspozycja na działanie UV-C ma związek ze zwiększoną częstością występowania [nowotworów skóry](#) np. [czerniaka](#). Widzialna część widma rozciąga się od 380nm do 780nm.



Rysunek 1. Zakres promieniowania elektromagnetycznego charakterystyczny dla UV/VIS.

Energia pochłaniana w obszarze nadfioletu odpowiada przejściu elektronowemu ze stanu podstawowego, o niższej energii do stanu wzbudzonego o wyższej energii. Pochłaniana energia jest kwantowana tzn. odpowiada ściśle różnicy pomiędzy poziomami energetycznymi. Im mniejsza różnica energii pomiędzy poziomami tym większa długość fali promieniowania zaabsorbowanego:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

gdzie:

$h = 6,62 \times 10^{-34}$  [J × s] stała Plancka

$c = 3 \times 10^8$  [m/s] prędkość światła

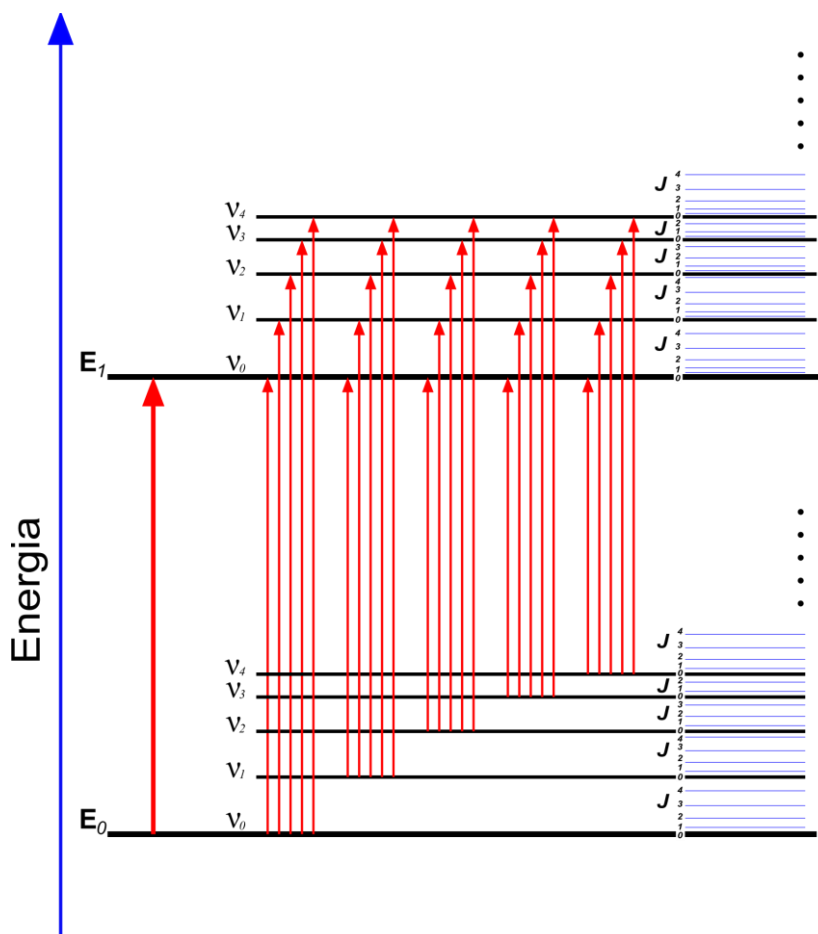
$\nu$  częstotliwość [ $\text{s}^{-1}$ ]

$\lambda$  długość fali [nm]



Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

Widmo w obszarze UV/VIS nazywane jest elektronowym widmem absorpcyjnym, jednakże ściśle biorąc jest ono widmem **elektronowo-oscyłacyjno-rotacyjnym**. Energia cząsteczki jest sumą energii elektronowej, oscyłacyjnej i rotacyjnej. Poziomy energetyczne odpowiadające poszczególnym stanom przedstawiono na Rysunku 2.



Rysunek 2. Diagram poziomów energetycznych w cząsteczce.  $E$  poziomy elektronowe cząsteczki,  $v$  poziomy oscyłacyjne poszczególnych stanów elektronowych,  $J$  poziomy rotacyjne poszczególnych stanów elektronowo- oscylacyjnych

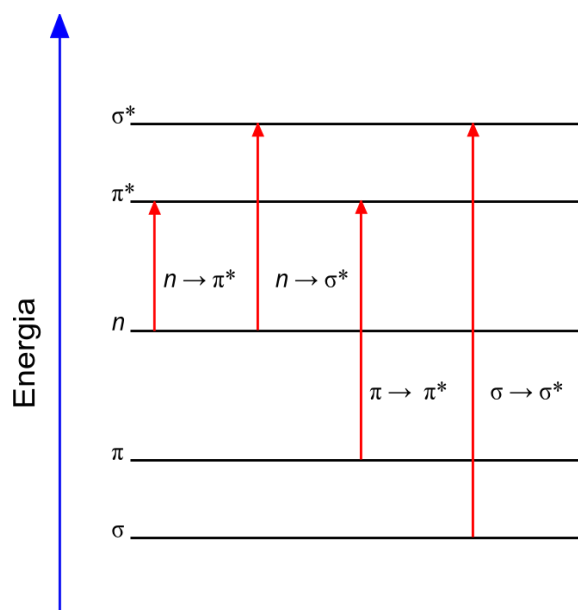
Ponieważ przejściu elektronowemu towarzyszą przejścia z określonej sekwencji podpoziomów oscyłacyjnych i rotacyjnych do odpowiedniej ich kombinacji w stanie wzbudzonym, widmo składa się z pasm absorpcyjnych, a nie pojedynczych linii.



### Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

W związkach organicznych absorpcja promieniowania w obszarze UV/VIS wywołuje zmiany stanów energetycznych elektronów walencyjnych (spektroskopia widm elektronowych), powoduje ona przeniesienie elektronu z jednego orbitalu na inny o wyższej energii (Rysunek 3). Możemy wyróżnić tu przejścia związane z przeniesieniem elektronów wiązań pojedynczych  $\sigma$ , wielokrotnych  $\pi$  oraz elektrony wolnych par elektronowych  $n$ . Elektrony te mogą ulegać wzbudzeniu przechodząc na orbitale antywiązace  $\sigma^*$  lub  $\pi^*$  (orbital antywiązący oznacza się gwiazdką) o wyższej energii.

Widmo w nadfiolecie obserwuje się, gdy energia promieniowania elektromagnetycznego odpowiada energii odpowiedniego przejścia elektronowego. Pobudzenie elektronów  $\sigma$  wymaga największej energii, odpowiadającej światłu ultrafioletowemu o krótkiej długości fali (daleki ultrafiolet). Najczęściej obserwujemy przejścia związane z przeniesieniem elektronów  $\pi$  oraz  $n$ , związane z absorpcją promieniowania z obszaru bliskiego nadfioletu. W praktyce spektroskopia UV/VIS ogranicza się do układów sprzężonych, których przejścia elektronowe związane są z absorpcją promieniowania z zakresu 200 – 380 nm.

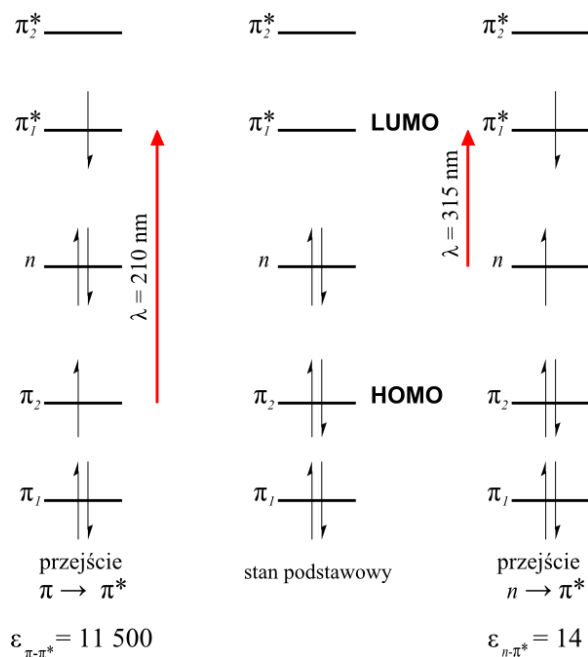


Rysunek 3. Klasyfikacja przejść elektronowych

Analizując diagram orbitali akroleiny (Rysunek 4), która jest przykładem związku o sprzężonym układzie wiązań C=C i C=O można zauważyć, że oprócz elektronów wiązań podwójnych  $\pi$ , cząsteczka dysponuje wolną parą elektronów atomu tlenu. Orbital niewiązący obsadzony elektronami  $n$  ma wyższą energię, niż najwyższy obsadzony orbital molekularny wiążący (**HOMO**, ang. **H**ighest **O**ccupied **M**olecular **O**rbital) typu  $\pi$ . Podczas absorpcji promieniowania elektromagnetycznego o długości fali  $\lambda = 315$  nm jeden z elektronów  $n$  zostaje przeniesiony z orbitalu niewiązących  $n$  na najniższy nieobsadzony orbital molekularny (**LUMO** ang. **L**owest **U**noccupied **M**olecular **O**rbital) typu  $\pi^*$ . Przy krótszej długości fali (większej energii)  $\lambda = 210$  nm obserwujemy drugie przejście związane z przeniesieniem elektronu z orbitalu **HOMO** typu  $\pi$  na orbital **LUMO** typu  $\pi^*$ .



Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego  
Propenal (akroleina)



Rysunek 4. Diagram przejść elektronowych dla cząsteczki propenalu (akroleiny)

Widmo UV/VIS przedstawiane jest w postaci zależności **absorbancji A** od długości **fali promieniowania  $\lambda$  (nm)**. Absorbancja wiązki promieniowania monochromatycznego przechodzącej przez jednorodny roztwór substancji jest wprost proporcjonalna do stężenia roztworu  $c$  i do grubości warstwy absorbującej (długości kuwety)  $l$  (prawo Lamberta-Beera):

$$A = \log \frac{I_0}{I} = \epsilon \times c \times l$$

gdzie:

- $I_0$  – natężenie promieniowania padającego na próbkę,
- $I$  – natężenie promieniowania po przejściu przez próbkę
- $\epsilon$  – współczynnik absorpcji
- $l$  – długość drogi optycznej
- $c$  – stężenie roztworu

**Absorbancja** w starszej literaturze nazywana była **absorpcją** lub **ekstynkcją**.

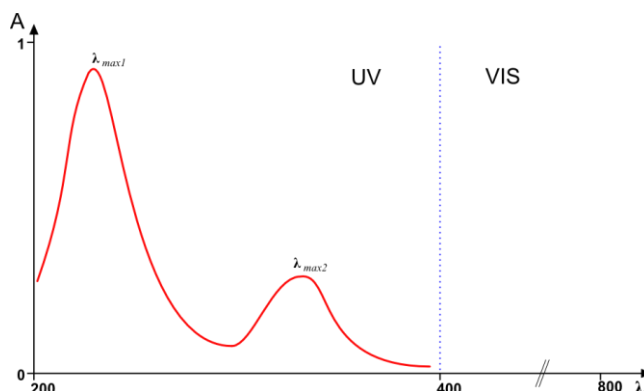


### Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

Przy stosowaniu wyżej podanego wzoru wartości mogą być podawane w dowolnych jednostkach. Jeżeli jednak stężenie podawane jest w jednostkach mol/l, a grubość warstwy w centymetrach cm, to współczynnik absorpcji nazywamy **molowym współczynnikiem absorpcji  $\varepsilon$**  lub **współczynnikiem ekstynkcji** (ekstynkcją)  $\varepsilon$ .

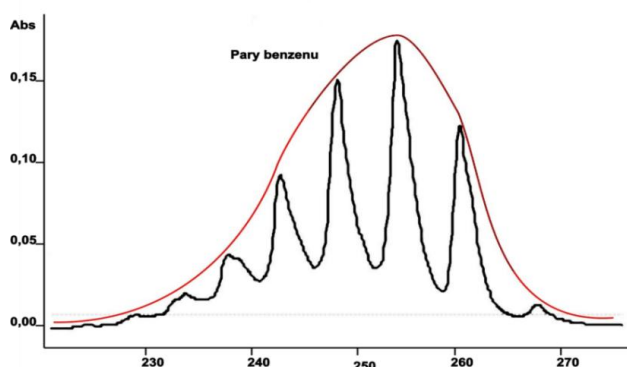
$$\varepsilon = \frac{A}{c \times l}$$

Widmo prezentowane jest w ten sposób, że linia podstawowa znajduje się na dole wykresu, absorpcji promieniowania odpowiada pasmo skierowane do góry wykresu (Rysunek 5). Widma UV/VIS rejestrowane są przeważnie dla związków w postaci gazowej lub w roztworze.



Rysunek 5. Przykładowe widmo UV/VIS

Pasma absorpcyjne par substancji często wykazują złożoną strukturę subtelną. W widmie benzenu w postaci gazowej wyraźnie widoczna jest struktura oscylacyjna (Rysunek 6 krzywa narysowana czarnym kolorem). Duża liczba podpoziomów i małe odstępki powodują, że wąskie pasma zlewają się tworząc szerokie pasma absorpcyjne lub „obwiednie pasm” (Rysunek 6 krzywa narysowana czerwonym kolorem). Obserwujemy to zjawisko zwłaszcza dla widm związków zarejestrowanych w roztworach.

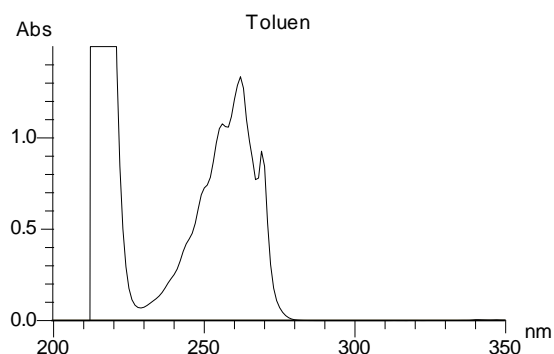


Rysunek 6. Widmo UV/VIS benzenu (pary)



### Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

Pasma w widmach UV/VIS definiuje się, określając **długość fali ( $\lambda_{\max}$ )**, która odpowiada **maksimum absorpcji**. Drugim charakterystycznym parametrem widma UV/VIS jest intensywność absorpcji promieniowania, którą określamy podając wartość **molowego współczynnika absorpcji  $\epsilon$** , dla długości fali  $\lambda_{\max}$ . Widmo UV toluenu (w roztworze izooktanowym) można zatem opisać następująco:  $\lambda_{\max} = 261\text{nm}$  ( $\lambda_{\max}$  najwyższego wierzchołka w paśmie o strukturze subtelnej),  $\epsilon = 300$ .



Rysunek 7. Widmo UV/VIS toluenu (w roztworze izooktanowym)

W omawianiu widm posługujemy się **pojęciami**:

**Chromofor** – grupa atomów odpowiedzialna za selektywną absorpcję elektronową w zakresie 180-800 nm

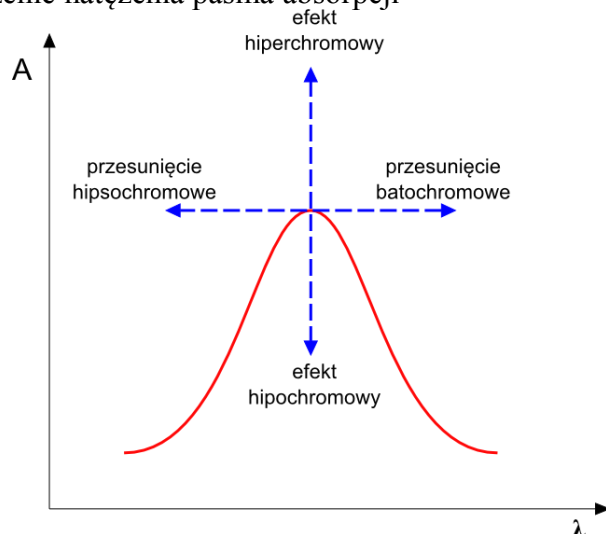
**Auksochrom** – grupa atomów, podstawnik, która przyłączona do chromoforu wpływa na położenie, a także na natężenie maksimum absorpcji

**Przesunięcie batochromowe** – przesunięcie pasma absorpcyjnego w kierunku fal dłuższych

**Przesunięcie hipsochromowe** – przesunięcie pasma absorpcyjnego w kierunku fal krótszych

**Efekt hiperchromowy** – podwyższenie natężenia pasma absorpcji

**Efekt hipochromowy** – obniżenie natężenia pasma absorpcji



Rysunek 8.



Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

## 1.2. Zastosowanie spektroskopii do ustalania struktury związków organicznych

Strukturę związków organicznych ustala się wykorzystując różne rodzaje spektroskopii, głównie spektroskopię IR oraz NMR. Natomiast widma UV/VIS zwykle pomocniczo służą do potwierdzenia, bądź wykluczenia obecności chromoforów w cząsteczce. Spektroskopia UV/VIS jest również wykorzystywana do określania wzajemnego położenia tych grup. Brak pasm absorpcyjnych odpowiadających danemu chromoforowi wyklucza jego obecność w związku. Natomiast obserwacja pasm charakterystycznych dla danego chromoforu nie przesądza o jego obecności w cząsteczce.

Zdolność związku organicznego do pochłaniania promieniowania nadfioletowego zależy od jego struktury elektronowej. Właściwie wszystkie związki organiczne absorbują promieniowanie z zakresu UV. Jednakże do badań użyteczne są związki, dla których częstość promieniowania zaabsorbowanego leży w bliskim nadfiolecie, co w praktyce sprowadza się do układów zawierających wiązania wielokrotne, zwykle w układzie sprzężonych.

Pojęcie chromoforu jest zdefiniowane (powyżej), jako grupa atomów odpowiedzialna za selektywną absorpcję elektronową w zakresie 200-800 nm. Izolowane chromofory mają swoją charakterystyczną absorpcję, która w małym stopniu zależy od pozostałych elementów cząsteczki, co ułatwia ich identyfikację. Do najważniejszych chromoforów należą chromofor etylenowy, acetylenowy, karbonylowy, oraz chromofory aromatyczne (patrz tabl. 17 lit).

Chromofor	Przykład	Wzbudzenie	$\lambda_{\max}$	$\log \epsilon$	Rozpuszczalnik
C=C	Eten	$\pi \rightarrow \pi^*$	162,5	4,2	heptan
C $\equiv$ C	Etyn	$n \rightarrow \pi^*$	173	3,8	gaz
C=O	Aceton	$n \rightarrow \pi^*$ $\pi \rightarrow \pi^*$	279 188	1,2 3,3	cykloheksan cykloheksan
N=O	Nitrometan	$n \rightarrow \pi^*$	278	1,3	eter
C-X X= Cl, Br	Bromek metylu	$n \rightarrow \sigma^*$	204	2,3	gaz

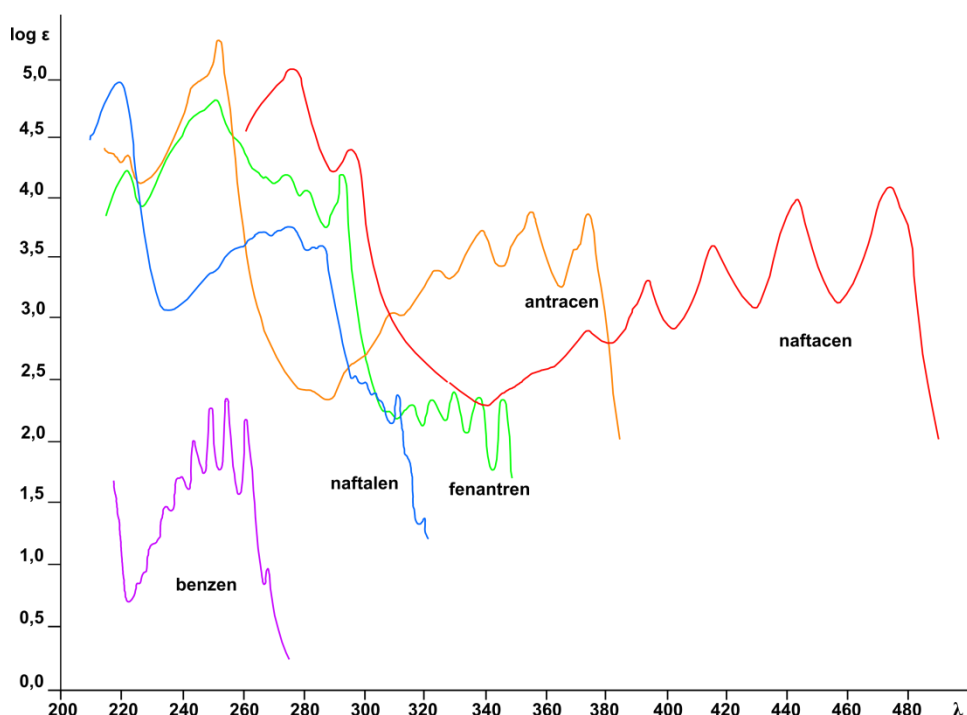
Tabela 1





### Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

Korzystając ze spektroskopii UV/VIS łatwo zidentyfikować związki zawierające sprzężony układ wiązań wielokrotnych, w tym związki aromatyczne (Rysunek 9).



Rysunek 9. Widma UV/VIS przykładowych związków aromatycznych

Widmo benzenu, charakteryzujące się wyraźną strukturą subtelną (Rysunek 6 i 9), składa się z trzech pasm absorpcyjnych 184 nm (pasmo E<sub>1</sub> wg Braudego), 204 nm (pasmo E<sub>2</sub> wg Braudego), 256 nm (pasmo B wg Braudego). Najbardziej charakterystyczne jest pasmo przy  $\lambda_{\max.} = 256$  nm, tzw. pasmo absorpcji benzenowej.

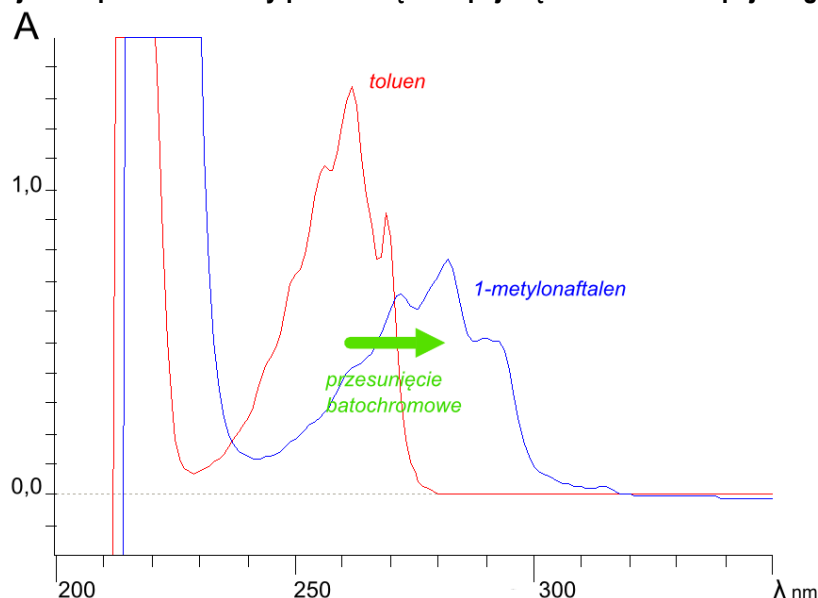
Wzrost liczby pierścieni w szeregu związków aromatycznych powoduje przesunięcie batochromowe wszystkich pasm absorpcyjnych, aż do zakresu widzialnego (Rysunek 9 i 10).

Wprowadzenie do pierścienia aromatycznego podstawników zawierające wolne pary elektronowe (OH, OR, NH<sub>2</sub>, NR<sub>2</sub>) wywołuje silne przesunięcie batochromowe położenia pasm absorpcji z silnym efektem hiperchromowym. Natomiast podstawniki alkilowe wywołują nieznaczne przesunięcie pasm w stronę fal dłuższych. Tablice (Tablica 23 i 24) zawierające reguły obliczania pasm absorpcji pochodnych benzenu dotyczące można znaleźć w literaturze [2].





Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego



Rysunek 10. Widmo UV/VIS toluenu, oraz 1-metylnaftalenu.

Większość związków organicznych ma skomplikowaną budowę, zawiera kilka grup funkcyjnych. Widmo związku zawierającego kilka chromoforów zależy od ich wzajemnego położenia. W przypadku izolowanych chromoforów, widmo związku najczęściej składa się z sumy pasm poszczególnych chromoforów. Sprzężenie chromoforów powoduje powstanie innego układu orbitali, a tym samym nowego chromoforu.

Jako rozpuszczalników przy pomiarach widm UV/VIS stosuje się związki, które nie absorbują promieniowania w obszarze bliskiego nadfioletu. Takimi rozpuszczalnikami są węglowodory nasycone, woda alkohole lub chlorowce pochodne. Wpływ rozpuszczalnika na widmo UV zależy od rodzaju substancji i własności rozpuszczalnika (głównie od jego polarności). Największe przesunięcie maksimum absorpcji obserwuje się w przypadku polarnej substancji rozpuszczonej w polarnym rozpuszczalniku. Przy wzroście polarności rozpuszczalnika następuje przesunięcie batochromowe (Rys. 7) pasma  $\pi \rightarrow \pi^*$ , jednocześnie obserwujemy efekt hiperchromowy. Dla pasm  $n \rightarrow \pi^*$  obserwujemy przesunięcie hipsochromowe maksimum absorpcji. W przypadku niepolarnych substancji rozpuszczonych w rozpuszczalniku niepolarnym, widmo związku w roztworze zbliżone jest do jego widma w fazie gazowej.

Spektroskopia UV/VIS, jak wynika z przedstawionych faktów, nadaje się głównie do badania sprzężonych układów  $\pi$ -elektronowych a zatem dienów, polienów oraz nienasyconych związków karbonylowych. Zgromadzenie znacznego materiału doświadczalnego umożliwiło opracowanie empirycznych reguł obliczenia położenia pasm absorpcji wymienionych klas związków, zwanych regułami Woodwarda-Fiesera. Odnośne tablice (Tablica 19 dla dienów i Tablica 20 dla nienasyconych ketonów i aldehydów) zawierającymi dane liczbowe można znaleźć w literaturze [2].



KAPITAŁ LUDZKI  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI



UNIA EUROPEJSKA  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY

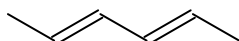


### Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

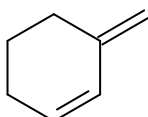
Analizując wartości położenia maksimum absorpcji  $\lambda_{\max}$  można określić strukturę wybranych układów. Korzystając z reguł addytywności można obliczyć położenie maksimum absorpcji  $\lambda_{\max}$  wybranych układów. Najprostsza taka reguła dotyczy pochodnych buta-1,3-dienu. Każdy podstawnik alkilowy wywołuje przesunięcie batochromowe o 5nm, w stosunku do pasma absorpcji buta-1,3-dienu (wartość bazowa 217 nm). Natomiast dodanie do układu podstawowego sprzężonego wiązania podwójnego przesuwa położenie maksimum absorpcji o 30-40 nm. Dla buta-1,3-dienu  $\lambda_{\max} = 217$  nm, a dla heksa-1,3,5-trienu obserwujemy  $\lambda_{\max} = 259$  nm. Energia przejść elektronowych układów sprzężonych zmniejsza się, im większy zasięg sprzężenia w cząsteczce tzn. im więcej wiązań podwójnych zawiera cząsteczka.

Dla ułatwienia korzystania z tych tablic podano poniżej rysunkowe ilustracje stosowanych w tablicach pojęć a także przykłady obliczeń:

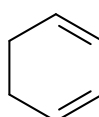
dien łańcuchowy:



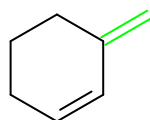
dien heteroanularny:



dien homoanularny:

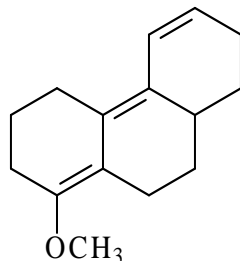


wiązanie podwójne **egzocykliczne**, czyli przylegające na zewnątrz pierścienia:



Uwaga: jeśli wiązanie podwójne łączy dwa pierścienie należy poprawkę na wiązanie egzocykliczne uwzględnić dwukrotnie.

Jaką długość fali można więc przewidzieć dla absorpcji UV/VIS następującego związku?





KAPITAŁ LUDZKI  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

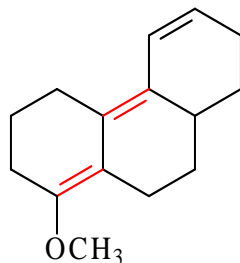


UNIA EUROPEJSKA  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY

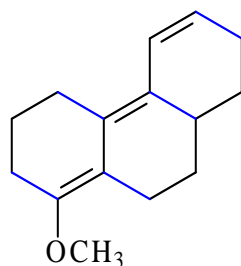


Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

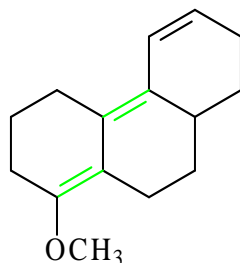
Wartość podstawowa dla dienu heteroanularnego: 217 nm



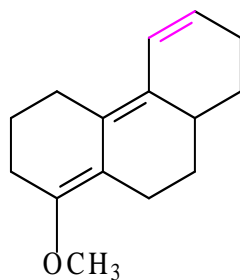
Grupy alkilowe lub fragmenty pierścienia: 5 x 5 nm 25 nm



Wiązania egzocykliczne: 3 x 5 nm 15 nm



Dodatkowe wiązanie sprzężone: 30 nm



Auksochrom -OCH<sub>3</sub> :

6 nm  
Razem: 293 nm



KAPITAŁ LUDZKI  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI



UNIA EUROPEJSKA  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY



Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

### 1.3. Przykłady zastosowania spektroskopii UV/VIS

Spektroskopia UV/VIS jest najstarszą z technik stosowanych w badaniach fizyko-chemicznych.

Nadal jednak pozostaje w użyciu ze względu na pewne pozytywne cechy:

- Aparaty UV/VIS należą do najtańszych w porównaniu z innymi technikami spektroskopowymi
- Spektroskopię UV/VIS stosuje się do badania zarówno typowych związków organicznych jak i związków o dużej masie cząsteczkowej w tym biomolekuł oraz związków nieorganicznych
- Pomiary wymagają niewielkich ilości substancji, które po pomiarze można odzyskać (stosuje się kilka mililitrów roztworu o stężeniach  $10^{-3}$  –  $10^{-5}$  mola/litr)
- Automatyczna rejestracja widm jest techniką szybką, więc na rezultaty badań nie trzeba czekać.

Wspomnieć jednak trzeba także o ograniczeniach tej techniki. To, że dotyczy ona rejestracji widm elektronowych, narzuca jedynie wybrane obszary zastosowań.

#### 1.3.1. Badania strukturalne

Jak już wspomniano spektroskopię UV/VIS stosujemy pomocniczo w określaniu struktury związków organicznych. Technika ta straciła na znaczeniu, w miarę rozwoju innych technik (IR, MS, X-ray) a zwłaszcza burzliwej ekspansji NMR.

W badaniach strukturalnych spektroskopia ta sprawdziła się w przypadku związków aromatycznych oraz polienów i nienasyconych związków karbonylowych zwłaszcza cyklicznych, w tym steroidów. Badania te dotyczą nie tylko wzajemnego położenia w cząsteczce wiązań wielokrotnych, lecz także ich konfiguracji. Bowiem przy porównaniu izomerów *E* i *Z* okazało się, że przy tej samej długości fali absorbancja izomeru *E* jest znacznie wyższa czyli wykazuje efekt hiperchromowy. Badania stereochemiczne dotyczą także pochodnych bifenyli, zwłaszcza podstawionych w obu pierścieniach benzenowych w pozycjach *orto*. Jeśli dotyczy to dużych podstawników, np. grup metylowych, wówczas obydwa pierścienie fenylowe bifenyli, który ze względu na delokalizację elektronów  $\pi$  jest płaski, z powodu zawady przestrzennej wywołanej podstawnikami ulegają odchyleniu od płaszczyzny. Skutkuje to przerwaniem sprzężenia pomiędzy elektronami  $\pi$  obu pierścieni, co wywołuje hipsochromowe przesunięcie maksimum absorpcji w widmie UV. Efektu tego nie obserwuje się, jeśli podstawniki zajmują położenie *para*.

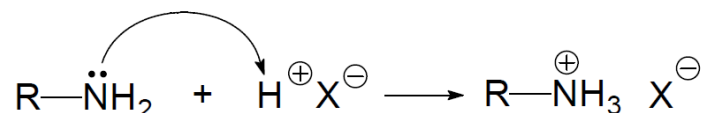
#### 1.3.2. Równowagi kwasowo-zasadowe

Spektroskopię UV/VIS można zastosować do badania równowag kwasowo-zasadowych i wyznaczenia  $pK_a$  kwasów. Dokładny opis stosowanej metody można znaleźć w literaturze [1]. Widma UV/VIS substancji wrażliwych na działanie kwasów lub zasad, są zależne od pH roztworu, dla którego dokonuje się pomiaru. Dotyczy to głównie związków o charakterze zasadowym a więc amin oraz kwasowym czyli kwasów organicznych, fenoli, enoli.

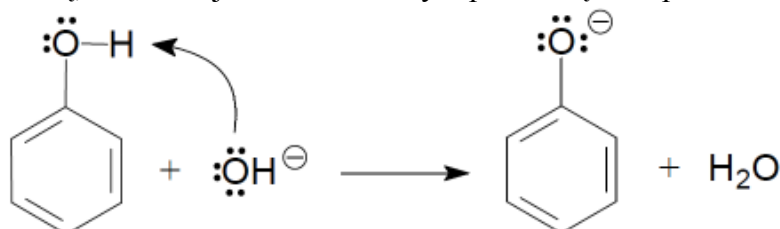


### Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

Jeśli bowiem np. widmo UV aminy zawiera pasmo przejścia  $n \rightarrow \pi^*$  związane z obecnością wolnej pary elektronów atomu azotu, to w roztworze kwaśnym para ta wiąże proton z kwasu, co prowadzi do powstania soli tej aminy i pasmo to zanika.

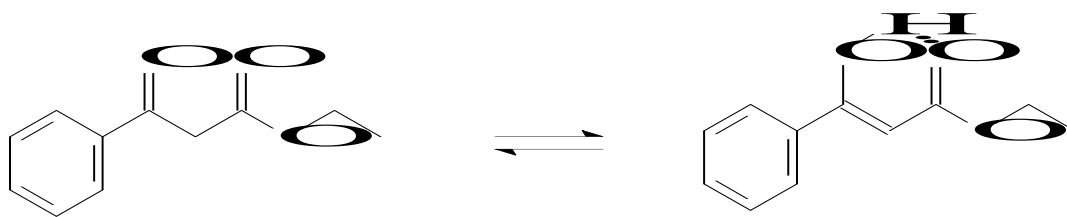


Natomiast np. w roztworze zasadowym fenolu jego grupa hydroksylowa traci proton uwalniając dodatkową parę elektronową, co skutkuje bathochromowym przesunięciem pasma  $n \rightarrow \pi^*$ .



#### 1.3.3. Równowagi tautomeryczne

Kolejnym zastosowaniem spektroskopii UV/VIS jest badanie równowag tautomerycznych. Na przykład badanie równowagi keto-enolowej w benzoilooctanie etylu, gdzie obie formy tautomeryczne różnią się zawartością chromoforów, co umożliwia ilościowe oznaczenie stosunku obu struktur obecnych w roztworach.



#### 1.3.4. Analiza ilościowa

W analizie ilościowej stosuje się UV/VIS do wyznaczania składu mieszanin. Wybiera się wtedy pasma charakterystyczne dla każdego ze składników mieszaniny w taki sposób, by nie nachodziły one na siebie a następnie po sporządzeniu krzywych kalibracji posługując się wartościami molowego współczynnika ekstynkcji  $\epsilon$  dla poszczególnych pasm w mieszaninie i oznacza się procentowy jej skład.



**KAPITAŁ LUDZKI**  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI



UNIA EUROPEJSKA  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY



**Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego**

### **1.3.5 Inne zastosowania**

Skoro warunkiem absorpcji w zakresie UV/VIS jest obecność chromoforów w cząsteczce, spektroskopia z tego zakresu fal elektromagnetycznych może służyć do wykrywania w cząsteczkach związków organicznych chromoforów, zwłaszcza układów sprzężonych w tym szczególnie fragmentów aromatycznych. Spektroskopia ta ma więc znaczenie analityczne i to zarówno jakościowe jak i ze względu na czułość metody, także ilościowe. Służy więc do potwierdzania tożsamości związków oraz stosowana jest do kontroli jakości różnych produktów np. tłuszczów i innej żywności, leków, barwników. Można jej także użyć do oznaczania ilościowego, nawet zawartości śladowych np. węglowodorów czy też fenoli w wodach, ściekach itp. Znalazła zastosowanie także w analizie toksykologicznej, w chemii sądowej oraz w petrochemii oraz w chemii nieorganicznej do badania kompleksów metali z ligandami organicznymi. Nie bez znaczenia jest także śledzenie przebiegu reakcji o ile substrat(y) i produkt(y) różnią się zawartością chromoforów lub ich wzajemnym położeniem w cząsteczkach. Na mocy prawa Lamberta-Beera można także wyznaczać masę cząsteczkową związków.

### **Literatura**

1. Praca zbiorowa pod redakcją W. Zielińskiego i A. Rajcy; Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne Warszawa 2000
2. Określanie struktury związków organicznych metodami spektroskopowymi. Tablice i ćwiczenia. Red. M. Szafran i Z. Dega –Szafran, PWN 1988
3. Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych ; R. M. Silverstein, G.C. Bassler, PWN, Warszawa 1970
4. Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych ;R. M. Silverstein, F.X. Webster, D. J. Kiemle, PWN, Warszawa 2007
5. Metody spektroskopowe wyznaczania struktur związków organicznych; L. A. Kazicyna, N. B. Kupletskaja, PWN 1976.