

Abrankó László

## Műszeres analitika

Molekulaspektroszkópia

---

---

---

---

---

---

---

### Minőségi elemzés

Kvalitatív

Cél:

Meghatározni, hogy egy adott mintában jelen vannak-e bizonyos **ismert** komponensek.

Vagy

**ismeretlen** komponensek azonosítása

### Mennyiségi elemzés

Kvantitatív

Cél:

Meghatározni, hogy a mintában lévő **ismert** komponensek milyen mennyiségben vannak jelen

---

---

---

---

---

---

---

## Kémiai élelmiszervizsgálati módszerek csoportosítása

### Klasszikus módszerek:

Gravimetriás

Térfogatós módszerek

### Műszeres analitikai vizsgálatok

Elektroanalitikai módszerek (potenciometria, vezetőképesség stb.)

Termikus módszerek (DSC, DTA)

Optikai (spektroszkópiás) módszerek

Tömegspektrometriás módszerek

Kromatográfiás módszerek

---

---

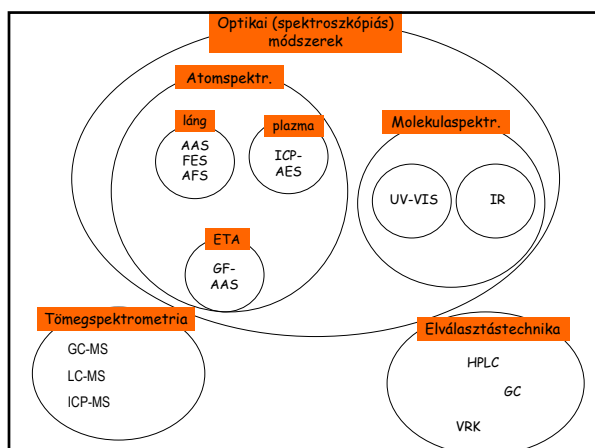
---

---

---

---

---




---

---

---

---

---

---

---

---

**Spektroszkópiás módszerek**

**Azon technikák összessége, melyek az elektromágneses sugárzás és az anyag kölcsönhatásakor létrejövő jelenségeken alapszanak.**

---

---

---

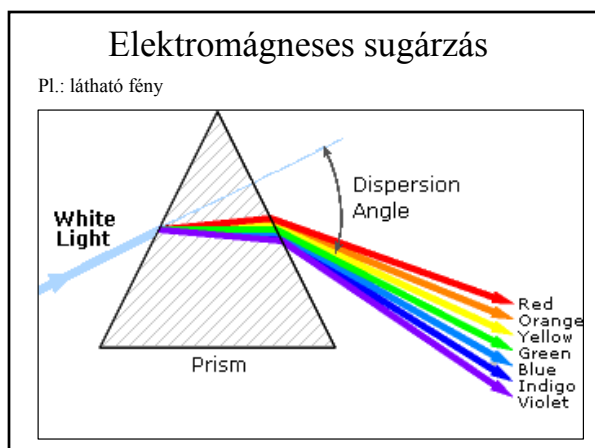
---

---

---

---

---




---

---

---

---

---

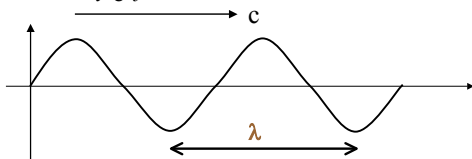
---

---

---

Az elektromágneses sugárzás:

Hullám és anyagi jellemzőkkel is rendelkezik.



$$E = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

Planck állandó (h) = 6,626 EXP-34 Js

---

---

---

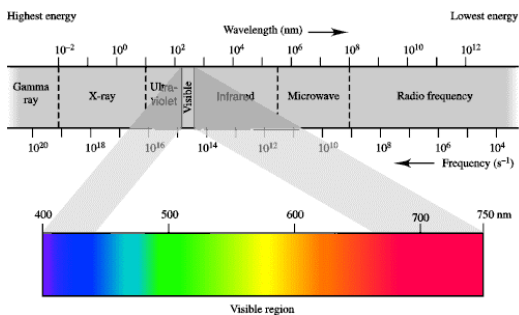
---

---

---

---

---




---

---

---

---

---

---

---

---

Mi történik a molekulával, ha energiát közlünk vele?

Belső energiája növekszik, mely a közölt energia nagyságától függően három tagból tevődik össze:

- Elektronenergia
- Rezgési vagy vibrációs energia
- Forgási, vagy rotációs energia

$$\Delta E = \Delta E_{\text{rotációs}} + \Delta E_{\text{vibrációs}} + \Delta E_{\text{elektron}}$$

---

---

---

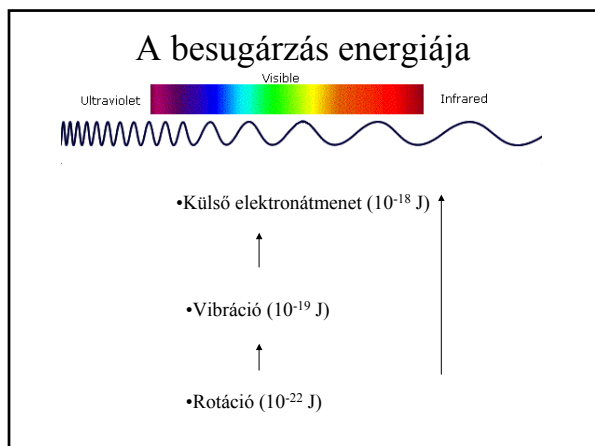
---

---

---

---

---




---

---

---

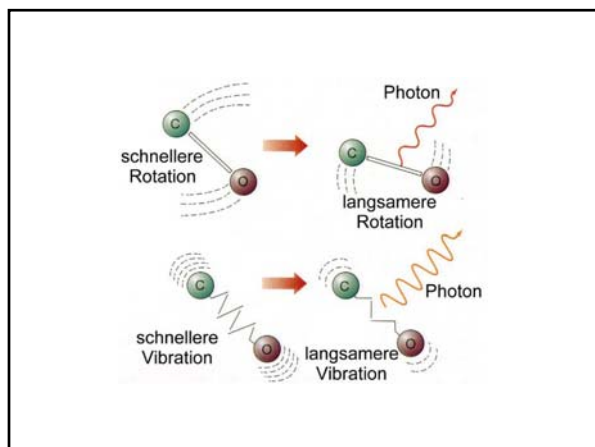
---

---

---

---

---




---

---

---

---

---

---

---

---

Hullámhossz-tartomány (Å)	Spektroszkópiai módszer	Energia [kJ/mol]	Folyamat
ultraibolya (UV) 150 - 400 nm	kiroptikai spektroszkópia (CD, ORD)	600 - 300	vegyértékelektron-átmenetek rezgési és forgási átmenetek
látható (VIS) 400 - 800 nm	molekulaabszorpció (UV, VIS)	300 - 150	
közeli infravörös (NIR) 800 - 1000 nm	molekulaemissziós módszerek	150 - 120	
infravörös (IR) 1 - 30 µm	infravörös és Raman spektroszkópia	120 - 4	rezgési és forgási átmenetek
távoli infravörös (FIR) 30 - 300 µm	távoli infravörös spektroszkópia	4 - 0.4	forgási átmenetek
mikrohullámok 0.3 mm - 1 m	mikrohullámú spektroszkópia elektronspin-rezonancia sp. (ESR)	$0.4 - 1.2 \cdot 10^{-4}$	forgási átmenetek elektronspin átmenetek
rádióhullámok 1 - 300 m	mágneses magrezonancia spektroszkópia (NMR)	$1.2 \cdot 10^{-4} - 4 \cdot 10^{-7}$	magspin átmenetek

---

---

---

---

---

---

---

---

## Abszorpció

az elektromágneses sugárzást és egyúttal annak energiáját az anyag (atom, vagy molekula) elnyeli, melynek következtében az anyag belső energiája megváltozik. Az atom, vagy molekula **gerjesztett** állapotba kerül.

Majd a többletenergiáját hő és/vagy mozgási energia formájában adja le. Ha az abszorbeált elektromágneses energia egy része elektromágneses energia formájában távozik akkor **fluoreszcencia** jelenségről beszélünk.

---

---

---

---

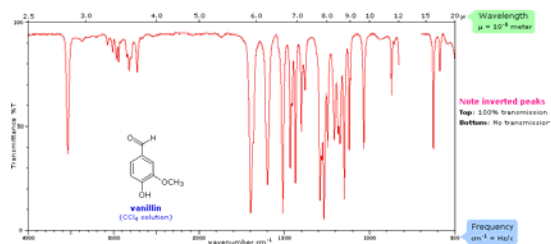
---

---

---

---

## Infravörös besugárzás



A megvilágító „fény” **spektrumából** hiányozni fognak az elnyelt energiához tartozó hullámhosszak.

---

---

---

---

---

---

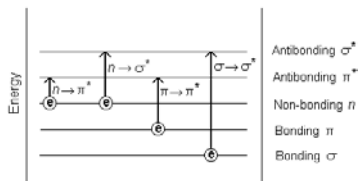
---

---

## UV-látható fény besugárzás

200-800 nm hullámhosszúságú elektromágneses sugárzás

Molekulapályákon található elektronok **elnyelik az energiát**, ezáltal magasabb energiaszintre, ún. **gerjesztett állapotba** kerülnek.



A polikromatikus fényből hiányozni fognak az elnyelt energiához tartozó hullámhosszak (látható fény esetén: színek)

---

---

---

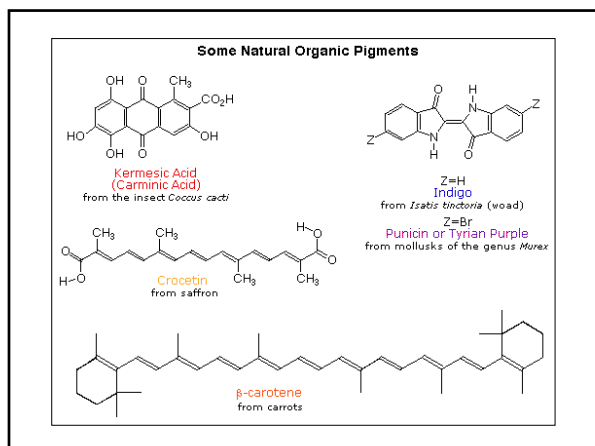
---

---

---

---

---




---

---

---

---

---

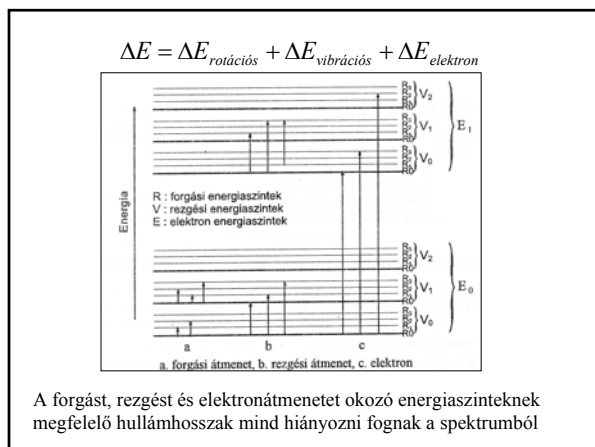
---

---

---

---

---




---

---

---

---

---

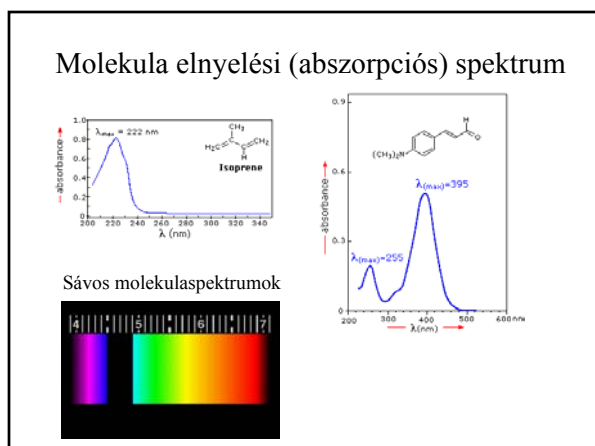
---

---

---

---

---




---

---

---

---

---

---

---

---

---

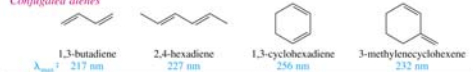
---

**TABLE 15-2** Ultraviolet Absorption Maxima of Some Representative Molecules

*Isolated*



*Conjugated dienes*

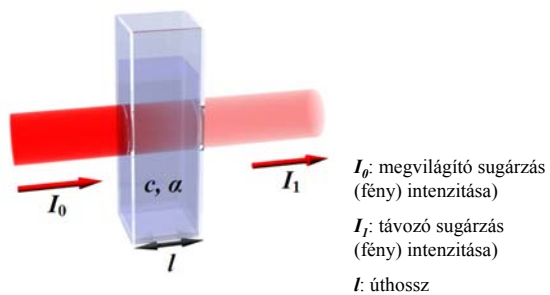


*Conjugated trienes*



*Conjugated tetraene*

Az elnyelés mértéke  
Lambert-Beer törvény



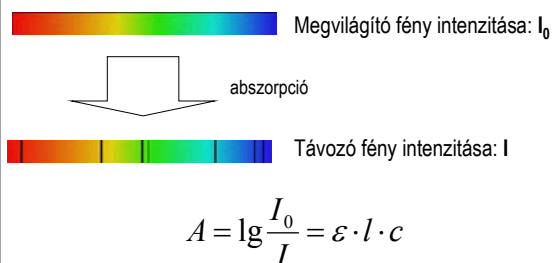
Mennyiségi elemzés

Lambert-Beer törvény:

$$A = \lg \frac{I_0}{I} = \epsilon \cdot l \cdot c$$

- A abszorbancia  
 $I_0$  belépő sugár intenzitása  
I kilépő sugár intenzitása  
 $\epsilon$  moláris abszorpciós koefficiens ( $\text{dm}^3 \text{mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$ )  
c az abszorbeáló komponens koncentrációja a mintában

### Folytonos vagy leszűkített tartományú besugárzás?




---

---

---

---

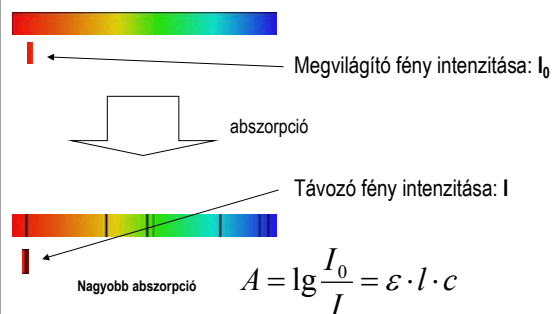
---

---

---

---

### Folytonos vagy leszűkített tartományú besugárzás?




---

---

---

---

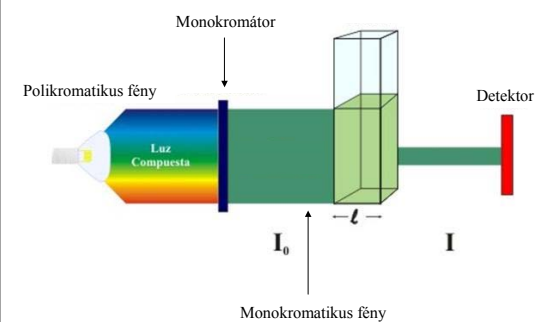
---

---

---

---

### Monokromatikus megvilágítás




---

---

---

---

---

---

---

---



## UV-Vis spektroszkópia megvalósítása

---

---

---

---

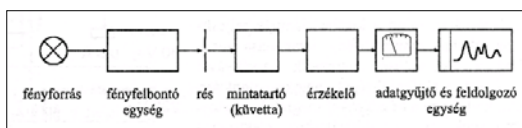
---

---

---

---

Spektrométer felépítése  
(monokromatikus megvilágítás esetén)



A megvilágító fény hullámhossza változtatható:  
lehetőség a teljes spektrum felvételére

---

---

---

---

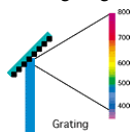
---

---

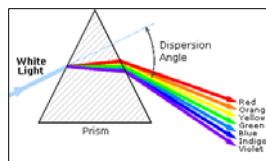
---

---

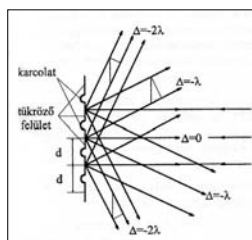
A megvilágító polikromatikus fény felbontása



Prizma



Optikai rács




---

---

---

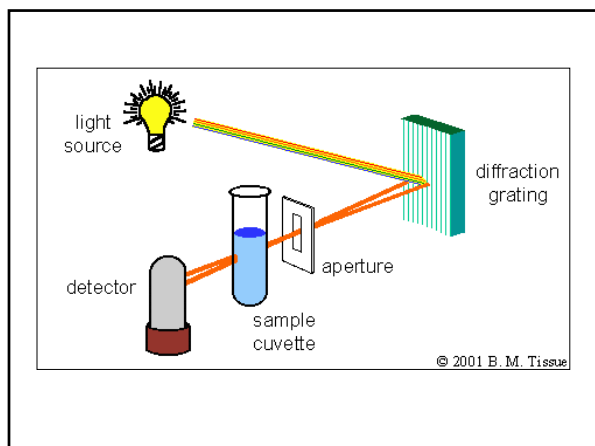
---

---

---

---

---




---

---

---

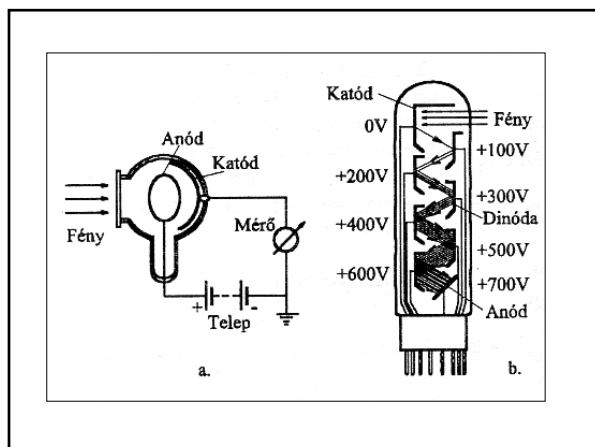
---

---

---

---

---




---

---

---

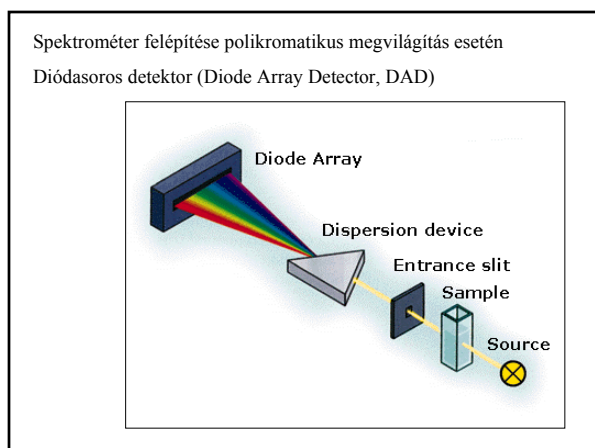
---

---

---

---

---




---

---

---

---

---

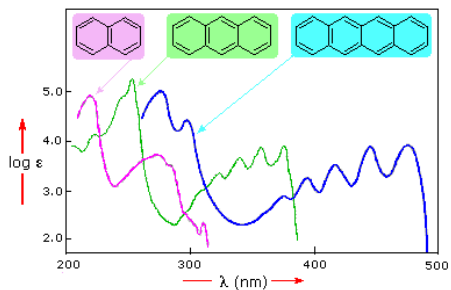
---

---

---

DAD – lehetőség gyors spektrális elemzésre

(átfolyó kuvetták esetén is)




---

---

---

---

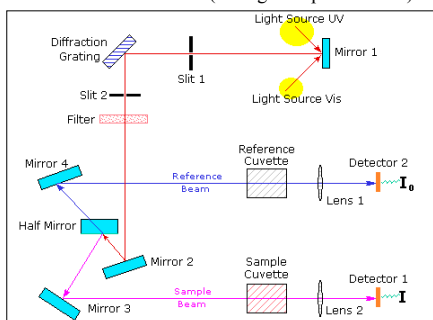
---

---

---

---

A referencia hullámhossz (kétsugaras spektrométer)




---

---

---

---

---

---

---

---