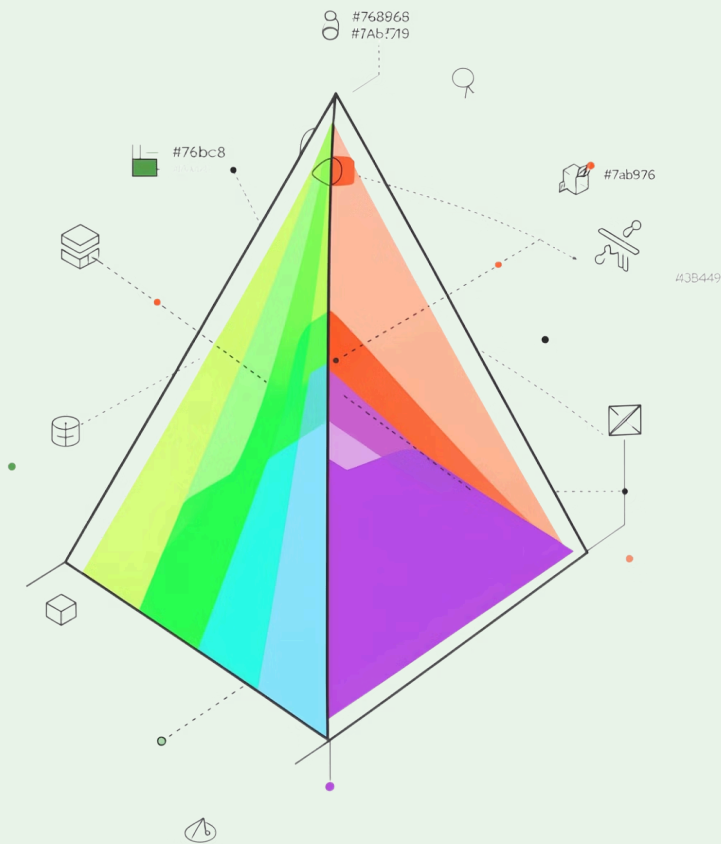
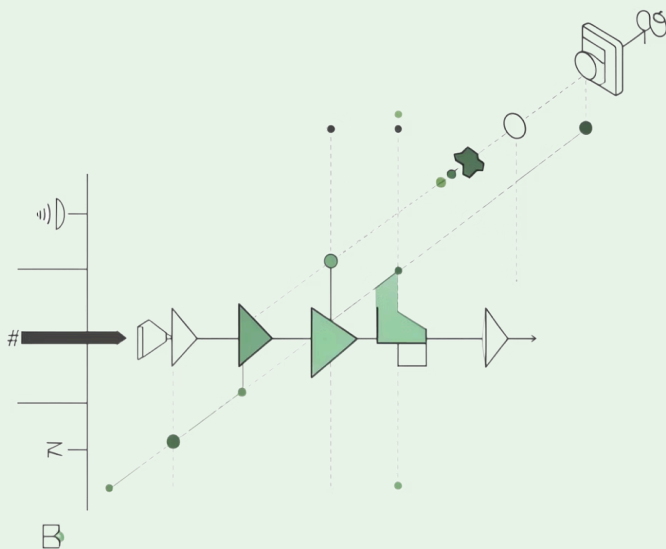




Электрондық абсорбциялық спектроскопия

Аналитикалық химияның іргелі әдісі – молекулалық құрылым пен концентрацияны жарық арқылы зерттеу.

Спектроскопияның теориялық негіздері



Электромагниттік сәулеленудің жұтылуы

Молекулалар сыртқы энергияны жұтып, төменгі энергетикалық күйден жоғарғы күйге ауысады.

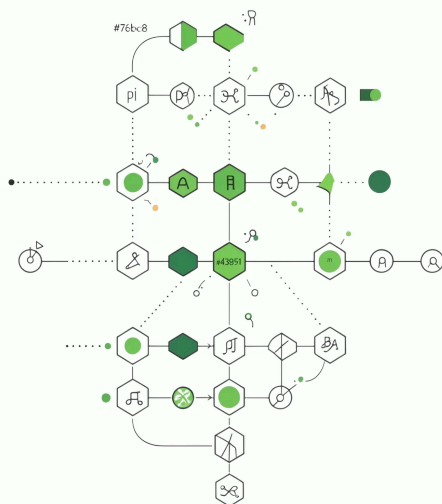
Электрондық ауысулар

Энергия деңгейлері арасындағы ауысулар нақты толқын ұзындықтарына сәйкес келеді.

Бер-Ламберт заңы

$A = \epsilon bc$ – абсорбция, молярлық коэффициент, концентрация және оптикалық жол ұзындығының байланысы.

Электрондық ауысулар және энергия



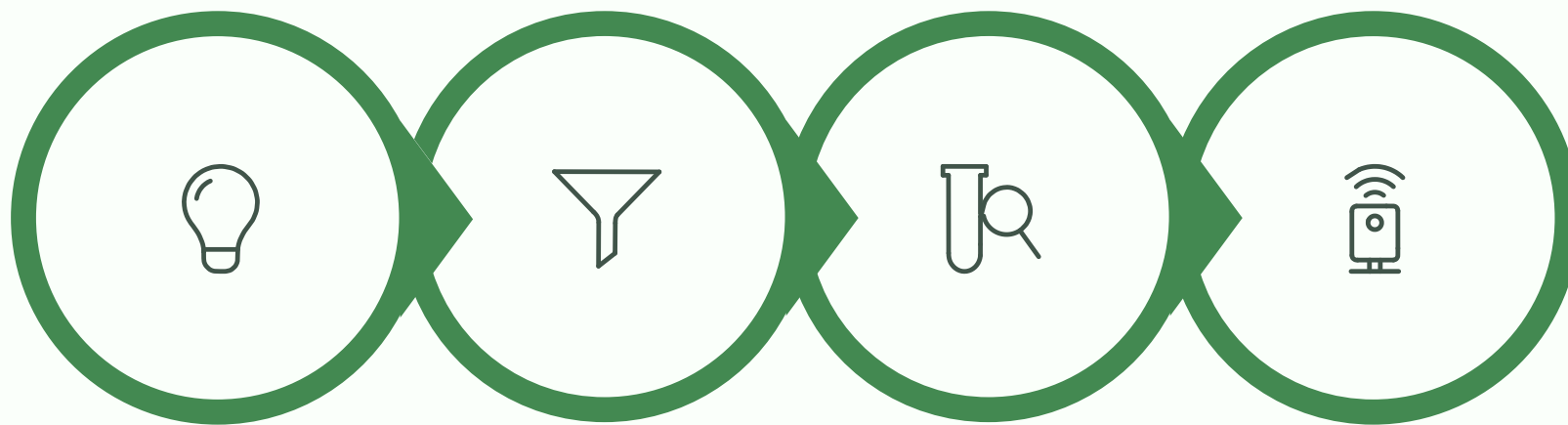
Негізгі ауысу түрлері

- $\sigma \rightarrow \sigma^*$ – қаныққан байланыстарда, жоғары энергия талап етеді (вакуумдық УК)
- $n \rightarrow \pi^*$ – жалғыз электрон жұптары мен π^* орбиталь арасында, ең жиі кездесетін
- $\pi \rightarrow \pi^*$ – конъюгирленген жүйелерде, жоғары молярлық коэффициент

Хромофорлар

Сәулеленуді жұтатын органикалық топтар: карбонил, нитро, азо топтары. Жұтылу толқын ұзындығы молекулалық құрылымға тікелей байланысты.

Аппаратты құрылымы және компоненттері



Сәуле көзі

**Монохрома
тор**

Кювета

Детектор

Заманауи спектрофотометрдің төрт негізгі блогы – сәулелену көзінен бастап детекторға дейінгі тізбек – өлшеудің дәлдігін қамтамасыз етеді.



Әдістемелік принциптері

1 Сынаманы дайындау

Анализденетін затты таңдалған еріткіште ерітіп, қажетті концентрацияға дейін сұйылтады.

2 Бланк пен калибрлеу

Фондық өлшеу нүліге теңестіріледі; калибрлеу қисығы концентрация диапазонын анықтайды.

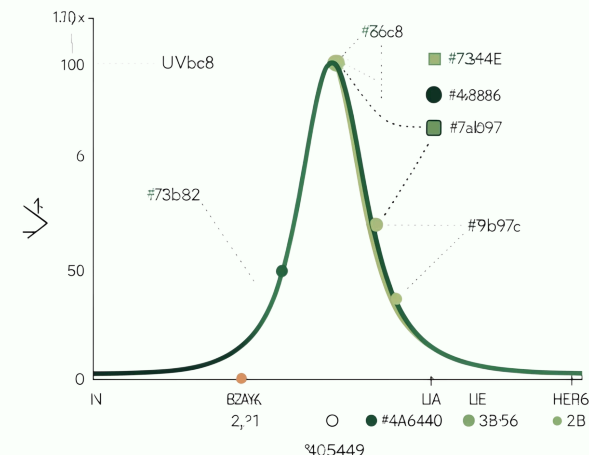
3 Спектр жазу

λ_{max} таңдалып, толық спектр немесе нүктелік өлшеу жүргізіледі; қайталанатындық тексеріледі.

Спектрлық сипаттамалар

Негізгі параметрлер

Спектрлық сызықтарының **ені мен пішіні** молекулааралық өзара әрекеттесуді, еріткіш табиғатын және молекулалық икемділікті сипаттаиды.



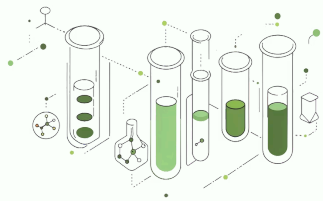
λ_{max}

Максималды абсорбция толқын ұзындығы – молекулаға тән бірегей шама

ϵ — молярлық коэффициент

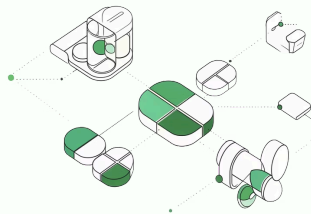
Молекулалық құрылымға байланысты; жоғары ϵ – күшті хромофор белгісі

Практикалық қолданбалары



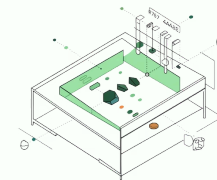
Қосындыларды анықтау

Органикалық және неорганикалық заттардың сапалық пен сандық анализі.



Фармацевтика

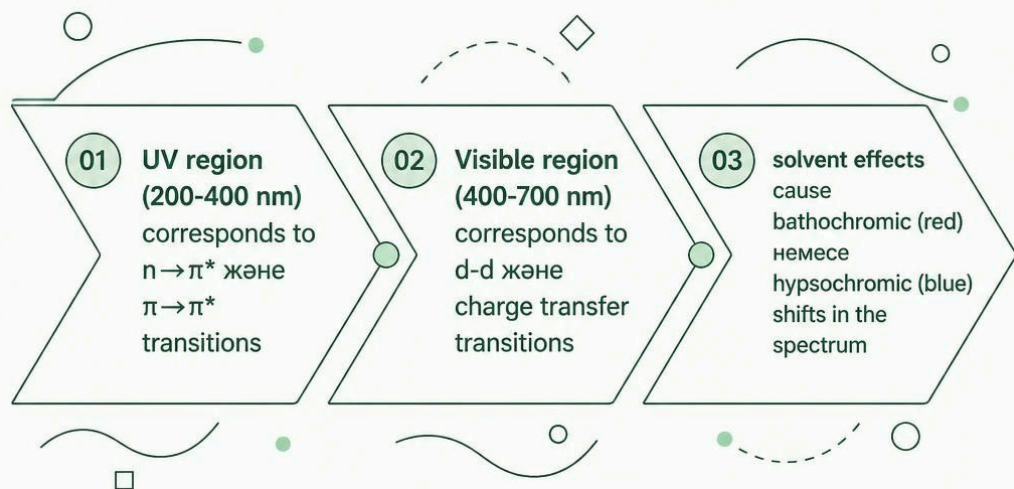
Дәрі-дәрмектердің тазалығы мен концентрациясын бақылау.



Биохимия

Ферменттік реакциялар кинетикасы, ДНҚ мен ақуыздарды анықтау.

Деректерді интерпретациялау



Негізгі интерпретация принциптері

- Абсорбция спектрлері молекулалық құрылымның «саусақ ізі» болып табылады
- σ , π , n ауысулары әртүрлі спектрлық аймақтарда пайда болады
- **Батохромды ығысу** (қызыл): конъюгация немесе полярлы еріткіш әсері
- **Гипсохромды ығысу** (көк): структуралық өзгерістер немесе полярсыз еріткіш

Қорытындысы және перспективалары

Іргелі әдіс

Аналитикалық химияның негізгі құралы – универсалды, жылдам және дәл.

Жоғары дәлдік

Заманауи зертханаларда нанограмм деңгейіндегі концентрацияларды анықтауға мүмкіндік береді.

Автоматтандыру

Қазіргі спектрофотометрлер компьютерлік басқарумен жұмыс жасаиды – нәтижелер тез, деректер қауіпсіз.

