

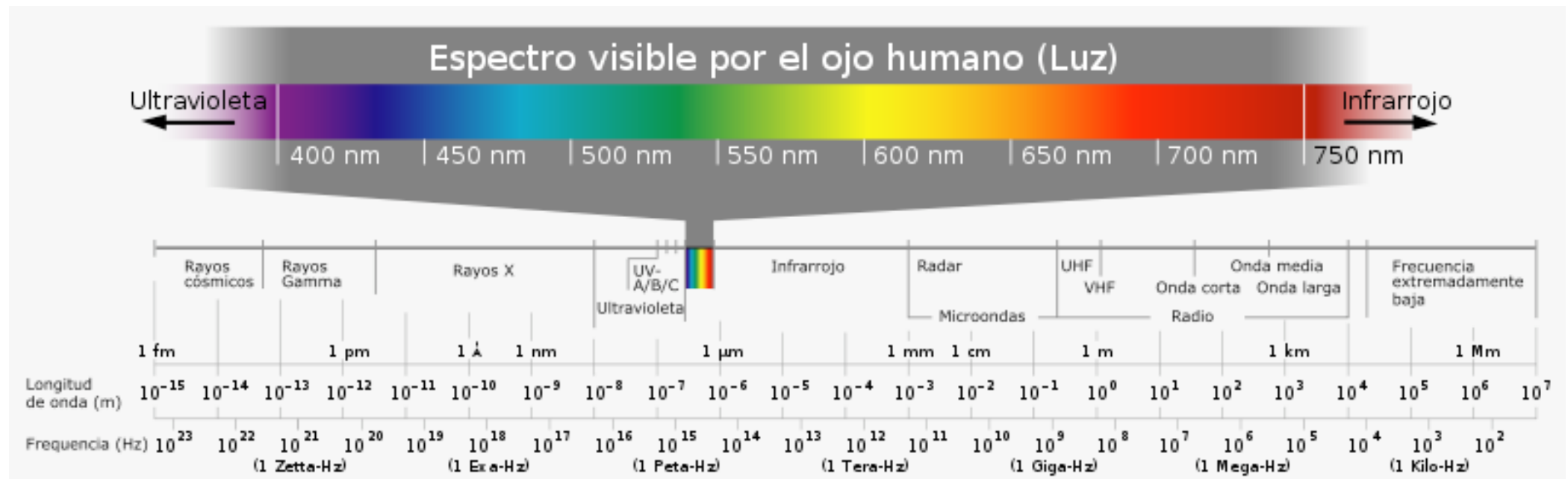
ESPECTROSCOPIA

La espectroscopia estudia la absorción y emisión de la radiación electromagnética por la materia.

La radiación electromagnética tiene carácter ondulatorio y esta formada por fotones, cuya energía viene dada por:

$$E = h\nu = hc / \lambda \quad \lambda\nu = c$$

Siendo h , la constante de Planck, ν , la frecuencia y λ , la longitud de onda. La energía de la radiación viene determinada por su frecuencia o longitud de onda: rayos cósmicos, rayos gamma, rayos X, radiación ultravioleta-visible, radiación infrarroja, microondas, ..



Los átomos y moléculas, sólo absorben y emiten radiación de determinadas frecuencias, lo que implica la cuantización de sus niveles de energía.

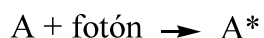
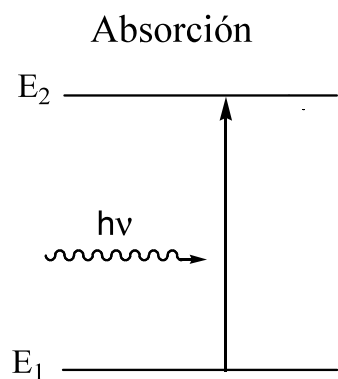
La separación entre los niveles electrónicos de una molécula se encuentran entre el IR cercano y el Visible-Ultravioleta.

La espectroscopia ultravioleta-visible estudia la absorción de radiación ultravioleta-visible por una molécula.

Al hacer incidir radiación UV-Visible de energía adecuada, las moléculas pasan del estado fundamental a un estado de mayor energía (excitado).

Si la energía de la radiación coincide con la diferencia de energía entre el último estado ocupado y el primer estado vacío se produce la transición de un electrón a un estado de energía superior.

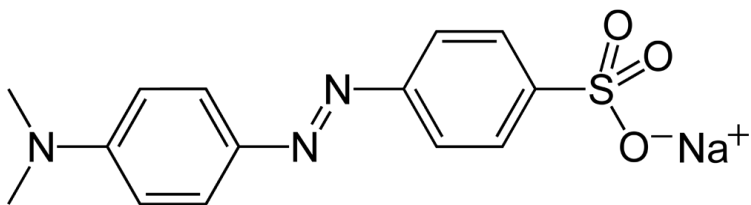
$$\text{Si } E(\text{fotón}) = \Delta E(\text{molécula}) = E_2 - E_1$$



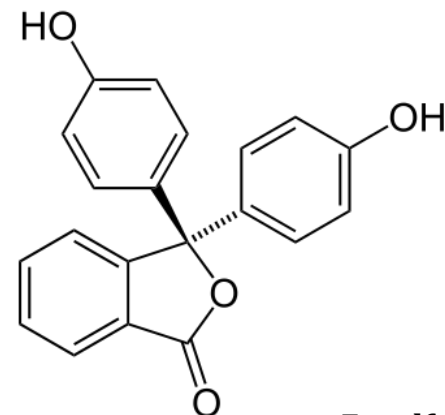
La luz visible o UV es absorbida por los electrones de valencia y éstos son promovidos a estados excitados (de energía mayor).

Al absorber radiación electromagnética de una frecuencia adecuada, ocurre una transición desde el estado fundamental a un estado excitado..

Algunas moléculas, como es el caso del β -caroteno, naranja de metilo, fenofltaleína,, absorben energía en el visible así como en el UV, lo que produce que tengan color (visible). Estas moléculas se suelen caracterizar, por tener un sistema de enlaces π .



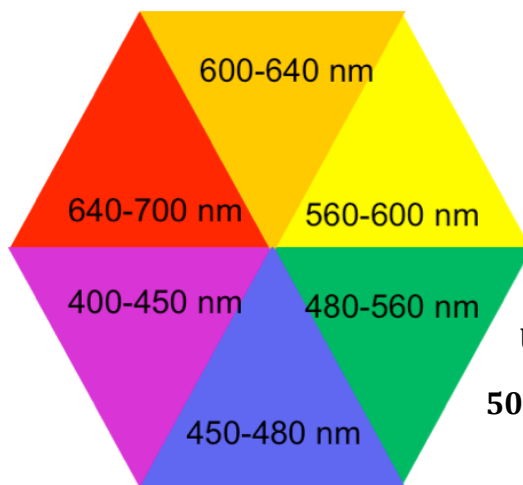
Naranja de metilo



Fenolftaleina

La longitud de onda a la que absorben determina el color.

La porción de la radiación UV-visible que es absorbida implica que una porción de radiación electromagnética no es absorbida por la muestra y que por tanto es transmitida a través de ella y puede ser captada por el ojo humano. Es el color de la sustancia.



**Un sistema que absorbe a
500-520 nm se ve rojo**

En la siguiente tabla, la columna del "color" indica la porción del espectro que es absorbida, mientras que la correspondiente al "color complementario" indica la porción de radiación electromagnética que no absorbe la muestra y que por tanto es transmitida a través de ella y puede ser captada por el ojo humano (color de la disolución).

λ (nm)	Color	Color Complementario
380-435	Violeta	Verde-amarillo
435-480	Azul	Amarillo
480-490	Azul-verdoso	Anaranjado
490-500	Verde-azulado	Rojo
500-560	Verde	Púrpura
560-580	Verde-amarillo	Violeta
580-595	Rojo	Azul
595-650	Anaranjado	Azul-verdoso
650-780	Rojo	Verde-azulado

Espectrofotometría

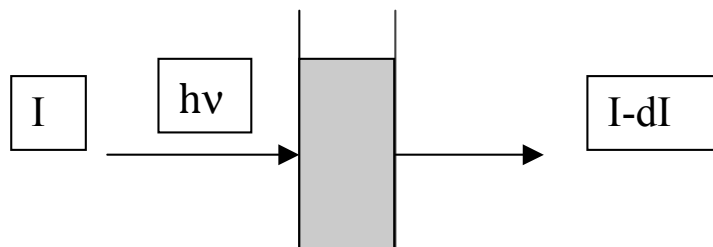
Técnica cuantitativa que permite relacionar la cantidad de una sustancia con la cantidad de luz absorbida.

Ley de Lambert-Beer

La cantidad de luz absorbida depende de:

- La energía de la radiación (Intensidad) y la frecuencia de la radiación utilizada.**
- La naturaleza de la muestra.**
- El número de moléculas sobre el que incide la radiación.**

Ley de Lambert-Beer (relación empírica)



La disminución de intensidad que tiene lugar cuando la radiación atraviesa una muestra de espesor $d\ell$ que contiene especies absorbentes de concentración $[C]$, es proporcional al espesor, a la concentración y a la intensidad.

$$-dI = cte [C] I d\ell$$

$$-dI = cte [C] I d\ell \quad \rightarrow \quad \int_{I_o}^I -\frac{dI}{I} = \alpha [C] \int_0^\ell d\ell \quad \rightarrow \quad (-\ln I)_{I_o}^I = \ln \frac{I_o}{I} = \alpha [C] \ell$$

$$\lg \frac{I_o}{I} = \frac{\alpha}{\ln 10} [C] \ell = Ab = \varepsilon [C] \ell \quad \rightarrow \quad Ab = \varepsilon [C] \ell \quad \rightarrow \quad T = \frac{I}{I_o} \quad A = -\lg T$$

El cociente $\frac{I_f}{I_o} \rightarrow$ Transmitancia, nos indica la proporción de radiación transmitida y normalmente se expresa en %.

$\alpha \rightarrow$ cte de proporcionalidad que depende de la especie absorbente y de la frecuencia de la radiación utilizada.

$$\varepsilon = \frac{\alpha}{\ln 10} \rightarrow \text{coeficiente de absorción molar} \rightarrow \varepsilon(\nu)$$

La intensidad de la radiación disminuye exponencialmente con el espesor de la muestra y la concentración de la especie absorbente.

I = Intensidad

c = concentración molar (M)

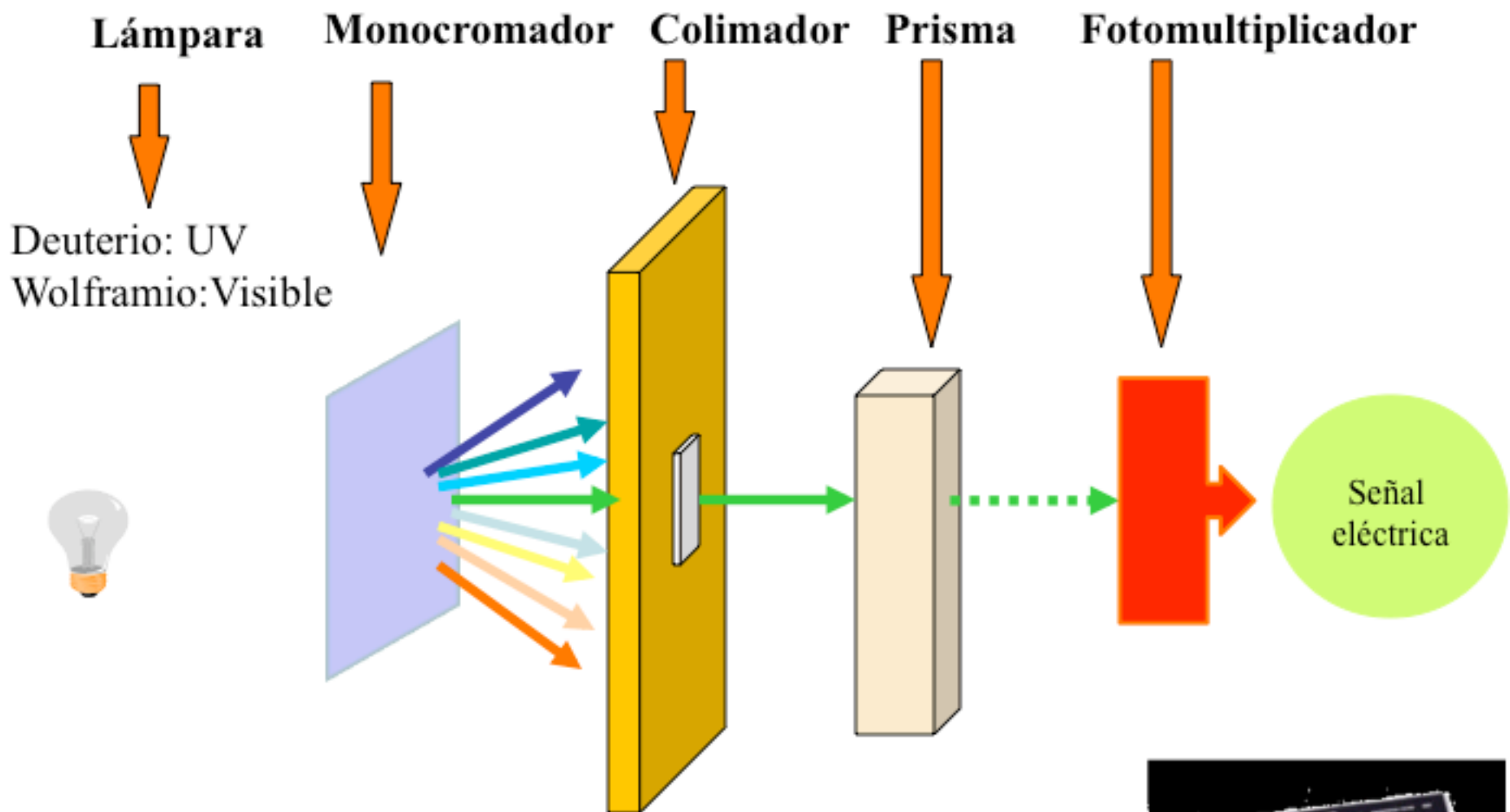
l = camino óptico (cm)

T = Transmitancia

A = Absorbancia

ϵ = coeficiente de absorción molar ($M^{-1}cm^{-1}$). Depende de $\lambda(\nu)$

El máximo de absorbancia obtenido en el espectro de absorción, nos dará la longitud de onda que proporciona la mayor sensibilidad posible, y por tanto será la que se utilizará en el análisis espectrofotométrico de dicho compuesto.



ESQUEMA GENERAL DE UN EQUIPO
MONO HAZ

