

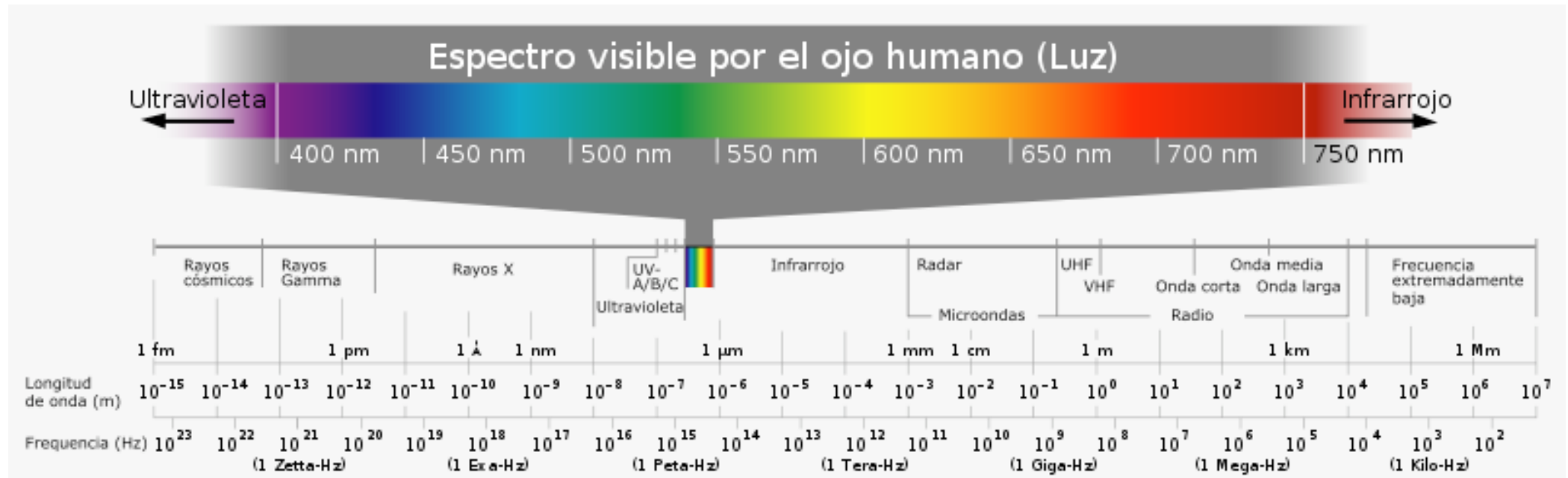
ESPECTROSCÒPIA

L'espectroscòpia estudia l'absorció i l'emissió de la radiació electromagnètica per la matèria.

La radiació electromagnètica té caràcter ondulatori i està formada per fotons, l'energia dels quals és donada per:

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

d'on h és la constant de Planck; ν , la freqüència i λ , la longitud d'onda. L'energia de la radiació és determinada per la seua freqüència o longitud d'ona: raigs còsmics, raigs gamma, raigs X, radiació ultraviolada visible, radiació infraroja, microones, etc.



Els àtoms i les molècules només absorbeixen i emeten radiació de determinades freqüències, i això implica la quantització dels seus nivells d'energia.

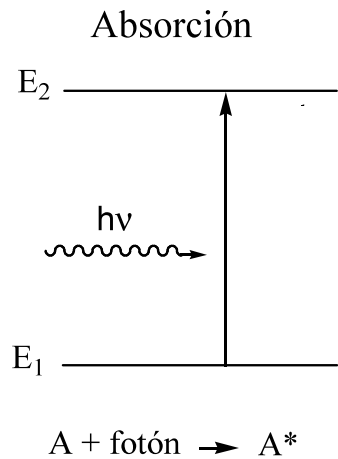
La separació entre els nivells electrònics d'una molècula es troba entre l'IR proper i el visible ultraviolat.

L'espectroscòpia ultraviolada visible estudia l'absorció de radiació ultraviolada visible per una molècula.

Quan fem incidir radiació UV visible d'energia adequada, les molècules passen de l'estat fonamental a un estat de major energia (excitat).

Si l'energia de la radiació coincideix amb la diferència d'energia entre l'últim estat ocupat i el primer estat buit es produeix la transició d'un electró a un estat d'energia superior.

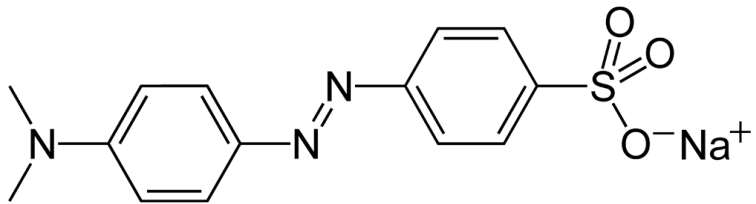
$$\text{Si } E(\text{fotó}) = \Delta E(\text{molècula}) = E_2 - E_1$$



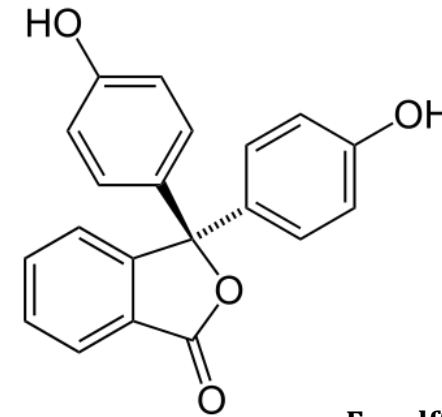
La llum visible o UV és absorbida pels electrons de valència i aquests són promoguts a estats excitats (d'energia major).

En absorbir radiació electromagnètica d'una freqüència adequada, té lloc una transició de l'estat fonamental a un estat excitat.

Algunes molècules, com és ara el cas del β -carotè, taronja de metil, fenolftaleïna, etc., absorbeixen energia en el visible i també en el UV, la qual cosa fa que tinguin color (visible). Aquestes molècules se solen caracteritzar per tenir un sistema d'enllaços π .



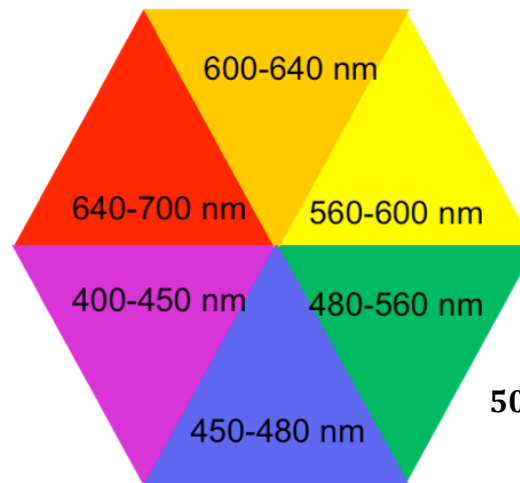
Taronja de metil



Fenolftaleïna

La longitud d'ona a què absorbeixen en determina el color.

La porció de la radiació UV visible que és absorbida implica que una porció de radiació electromagnètica no és absorbida per la mostra i que, per tant, és transmesa a través seu i pot ser captada per l'ull humà. És el color de la substància.



Un sistema que absorbeix a 500-520 nm es veu roig

En la taula següent, la columna del "color" indica la porció de l'espectre que és absorbida, mentre que la corresponent al "color complementari" indica la porció de radiació electromagnètica que no absorbeix la mostra i que, per tant, és transmesa a través seu i pot ser captada per l'ull humà (color de la dissolució).

λ (nm)	Color	Color complementari
380-435	Violeta	verd groc
435-480	Blau	Groc
480-490	Blau verdós	Ataronjat
490-500	Verd blavós	Roig
500-560	Verd	Porpra
560-580	Verd groc	Violeta
580-595	Roig	Blau
595-650	Ataronjat	Blau verdós
650-780	Roig	Verd blavós

Espectrofotometria

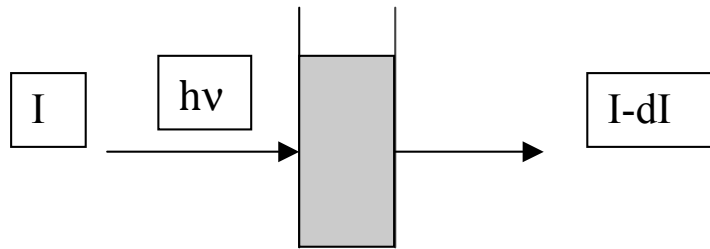
Técnica quantitativa que permet relacionar la quantitat d'una substància amb la quantitat de llum absorbida.

Llei de Lambert-Beer

La quantitat de llum absorbida depèn de:

- L'energia de la radiació (intensitat) i la freqüència de la radiació utilitzada.**
- La naturalesa de la mostra.**
- El nombre de molècules sobre el que incideix la radiació.**

Llei de Lambert-Beer (relació empírica)



La disminució d'intensitat que té lloc quan la radiació travessa una mostra de gruix $d\ell$ que conté espècies absorbents de concentració $[C]$, és proporcional al gruix, a la concentració i a la intensitat.

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

$$-dI = cte [C] I d\ell \quad \rightarrow \quad \int_{I_0}^I -\frac{dI}{I} = \alpha [C] \int_0^\ell d\ell \quad \rightarrow \quad (-\ln I)_{I_0}^I = \ln \frac{I_0}{I} = \alpha [C] \ell$$

$$\lg \frac{I_0}{I} = \frac{\alpha}{\ln 10} [C] \ell = Ab = \varepsilon [C] \ell \quad \rightarrow \quad Ab = \varepsilon [C] \ell \quad \rightarrow \quad T = \frac{I}{I_0} \quad A = -\lg T$$

El quocient $\frac{I_f}{I_0} \rightarrow$ transmissància, ens indica la proporció de radiació transmesa i normalment s'expressa en %.

$\alpha \rightarrow$ cte de proporcionalitat que depèn de l'espècie absorbent i de la freqüència de la radiació utilitzada.

$$\varepsilon = \frac{\alpha}{\ln 10} \rightarrow \text{coeficient d'absorció molar} \rightarrow \varepsilon(\nu)$$

La intensitat de la radiació disminueix exponencialment amb el gruix de la mostra i la concentració de l'espècie absorbent.

I = intensitat

c = concentració molar (M)

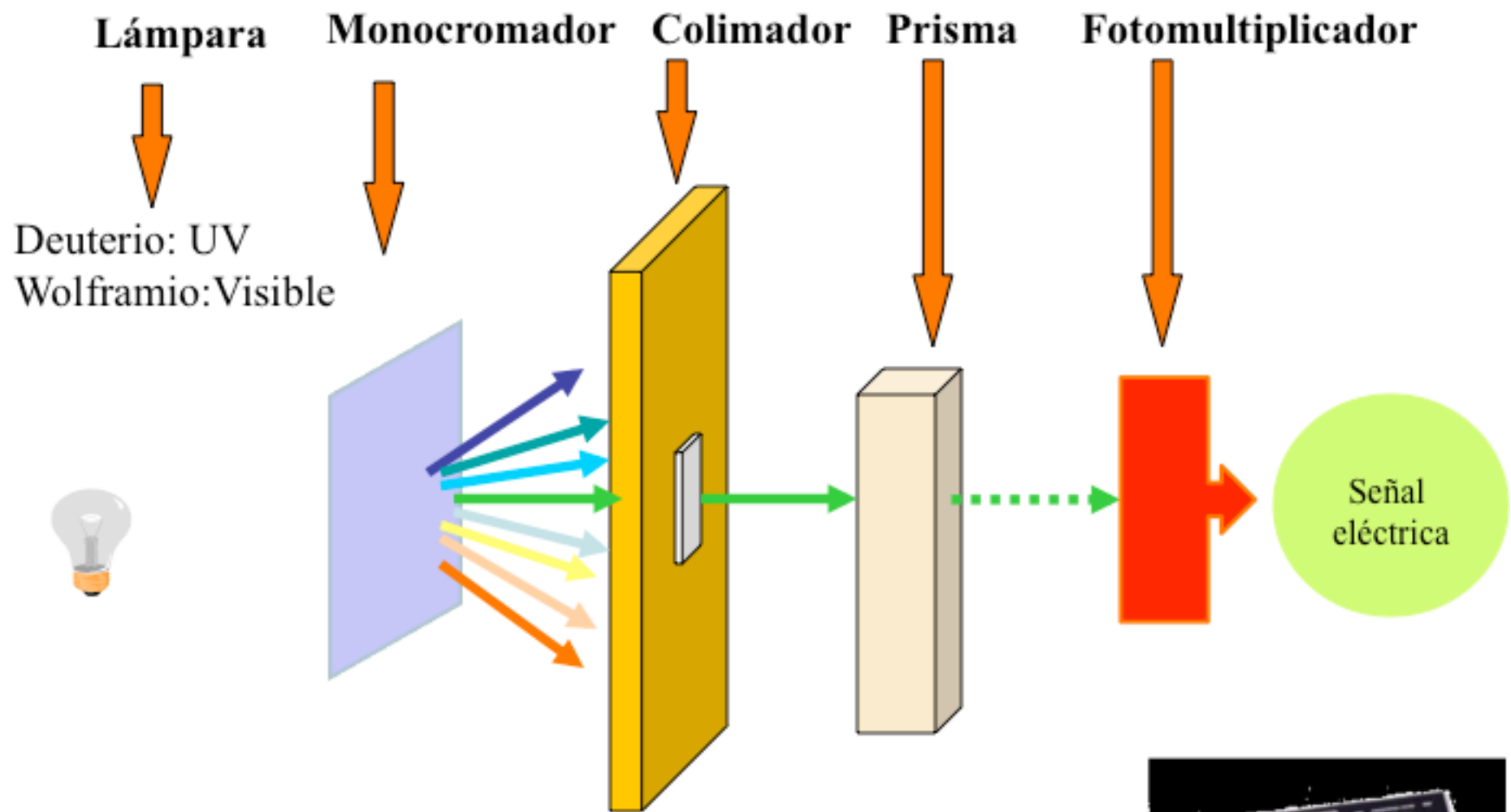
l = camí òptic (cm)

T = transmitància

A = absorbància

ϵ = coeficient d'absorció molar ($M^{-1}cm^{-1}$). Depèn de $\lambda(\nu)$

El màxim d'absorbància obtingut en l'espectre d'absorció, ens donarà la longitud d'ona que proporciona la major sensibilitat possible i, per tant, serà la que es farà servir en l'anàlisi espectrofotomètrica d'aquest compost.



**ESQUEMA GENERAL DE UN EQUIPO
MONO HAZ**

