



Päivitetty 11.3.2020

# Orbitaali 3 LOPS 2019 (KEHITTÄMISVERSIO)

Molekyylit ja mallit (KE3)



Olet sivulla roolissa: Ylläpitäjä

[Opp...](#) [e-O...](#) [Kehi...](#) [Lukio](#) [Kem...](#) [Orbitaali 3 L...](#) [4. AINEEN RA...](#) [UV-VIS-spektrosk...](#)

## UV-VIS-spektroskopia

Luo tähän: [Sivu](#) [Teksti](#) [Kuva](#) [Palautuskansio](#)  
[Muu työkalu...](#)

### UV-VIS-spektrometrin toimintaperiaate

UV-VIS-spektrometriassa hyödynnetään sähkömagneettisen spektrin ultravioletin ja näkyvän valon aallonpituuksia. Tutkittavaan liuoksen kohdistetaan tietyn aallonpituuden omaavaa säteilyä, joka saa atomit tai molekyylit elektronit virittymään. Laite mittaa, kuinka paljon tutkittavaan aineeseen absorboituu säteilyä ja ilmoittaa tuloksen näytteeseen tulevan säteilyn ja sen läpäisseen säteilyn voimakkuuden suhteena, **transmittanssina**.

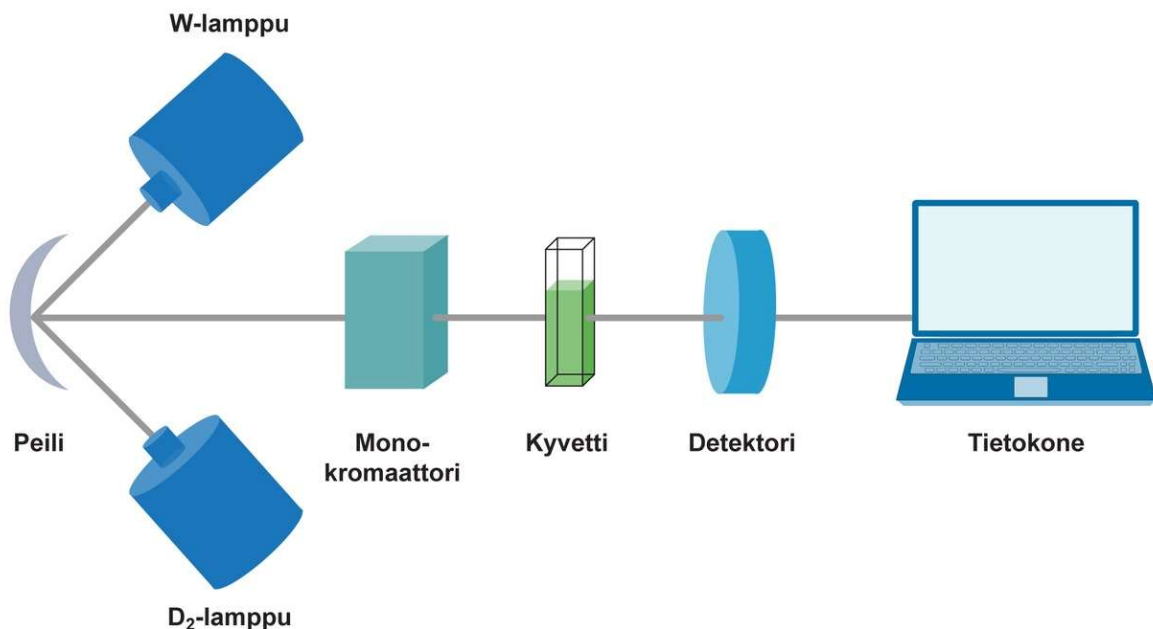
UV-VIS-spektrometrian yleisimmät tekniikat ovat yksi- ja kaksisädelaitteet. Yksisädelaitteessa mitataan ensin vertailuliuoksen transmittanssi kaikilla aallonpituuksilla, minkä jälkeen mitataan tutkittavan liuoksen transmittanssi. Kaksisädelaitteessa säde jaetaan kahteen osaan ja vertailuliuoksen ja tutkittavan liuoksen transmittanssi mitataan samaan aikaan. Yksisädelaitetekniikka on vanhempi, mutta silti edelleen laajasti käytössä oppi- ja tutkimuslaitoksissa. Tutkittavat aineet ovat yleensä liuosmuodossa, mutta transmittanssi voidaan määrittää myös kaasuille ja kiinteille näytteille.

UV-VIS-menetelmä sovelletaan metalli-ioneita sisältävien näytteiden kaksioisidoksia sisältävien

UV-VIS-menetelmä sovelletaan useisiin orgaanisiin yhdisteisiin, kaksisidoksista sisältäviin orgaanisten yhdisteiden ja biologisten makromolekyylien analysointiin. Molekyylin virittymisen edellytyksenä on, että yhdisteessä on pariton elektroni tai pii-sidoselektroneja. Riittävän pitkä konjugoitujen kaksoissidosten ketju aiheuttaa absorptioon näkyvän valon aallonpituusalueella. Porkkanalle tunnusomainen punertava väri johtuu siitä, että beetakaroteenimolekyylin ketjussa on konjugoituneita kaksoissidoksia, jotka aiheuttavat säteilyn absorptioon näkyvän valon aallonpituudella. Sopiva funktionaalinen ryhmä voi saada myös suoraketjuisen hiilivetymolekyylin absorboimaan säteilyä UV-alueella.

## UV-VIS-spektrometrin rakenne

UV-VIS-spektrometrin pääosat ovat valonlähde, monokromaattori, näytekyveti, detektori ja tietokone. Lamppuja on kaksi: toinen ultravioletin ja toinen näkyvän valon aallonpituusalueelle. UV-lamppu on tyypillisesti deuteriumlamppu ja näkyvän valon lamppu wolframilamppu. Lamppujen lähettämä säteily ohjataan monokromaattorin kautta kyvetiin. Monokromaattorin jälkeen säteilystä on jäljellä ainoastaan mittauksen kannalta olennainen aallonpituus, ja muut on suodatettu pois. Säteily absorboituu atomeihin tai molekyyliin. Kyvetin läpäisemän säteilyn määrä rekisteröidään detektorilla ja tieto lähetetään tietokoneelle. Mittaustuloksena saatu säteilyn läpäisevyys on verrannollinen aineen pitoisuuteen liuoksessa. Pitoisuus voidaan laskea **Lambert-Beerin lain** avulla.

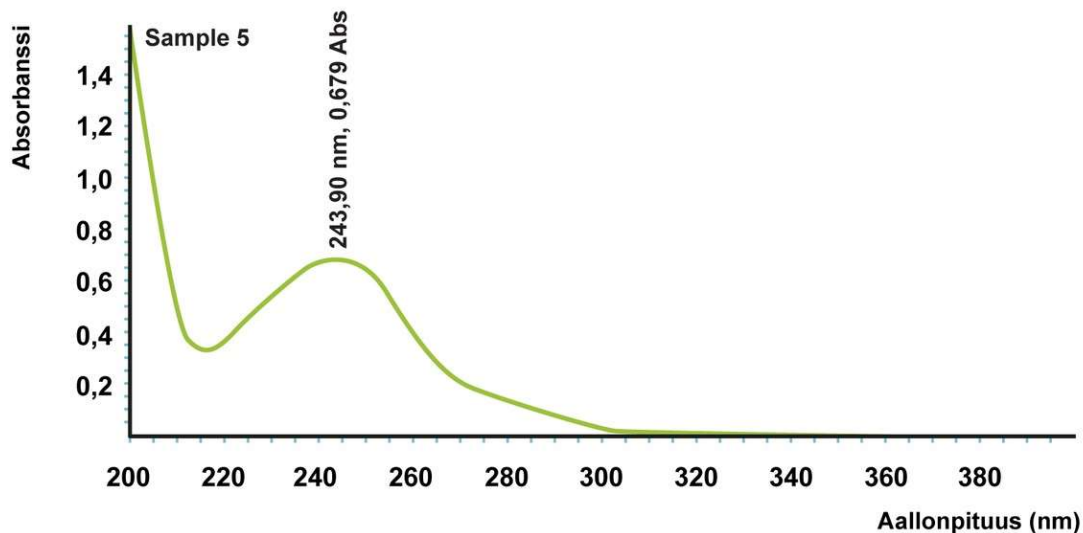


Lampuilta lähtevää säteilyä voidaan muokata erilaisilla linssi-, rako-, prisma- ja katkojajärjestelmillä. Esimerkiksi kaksisädetekniikassa katkojalla ohjataan lampuista saapuva säteily kahdelle eri reitille, joista toinen kulkee kyvetin läpi ja toinen ohittaa sen. Kyvetin ohittava säteily toimii vertailusäteenä. Kyveti on tyypillisesti suorakulmion muotoinen, halkaisijaltaan noin 1 cm:n paksuinen lasista tai muovista valmistettu astia tai koeputki, johon tutkittava liuos on asetettu. Lasi- ja muovikyvetit läpäisevät vain näkyvän valon aallonpituuksia, joten UV-alueen mittauksissa kvvetinä pitää käyttää kvartsisista valmistettua kvvetiä. Kvvetin läpäissvt säteily

ohjataan detektorille, joka vahvistaa säteilyn voimakkuutta ja muuntaa valon sähkösignaaliksi. Detektorina on laitetyypin mukaan joko valomonistinputki tai diodirividetektori. Vahvistettu signaali muokataan tietokoneohjelmalla mittausdataksi, joka esitetään numeroina tai graafisena kuviona.

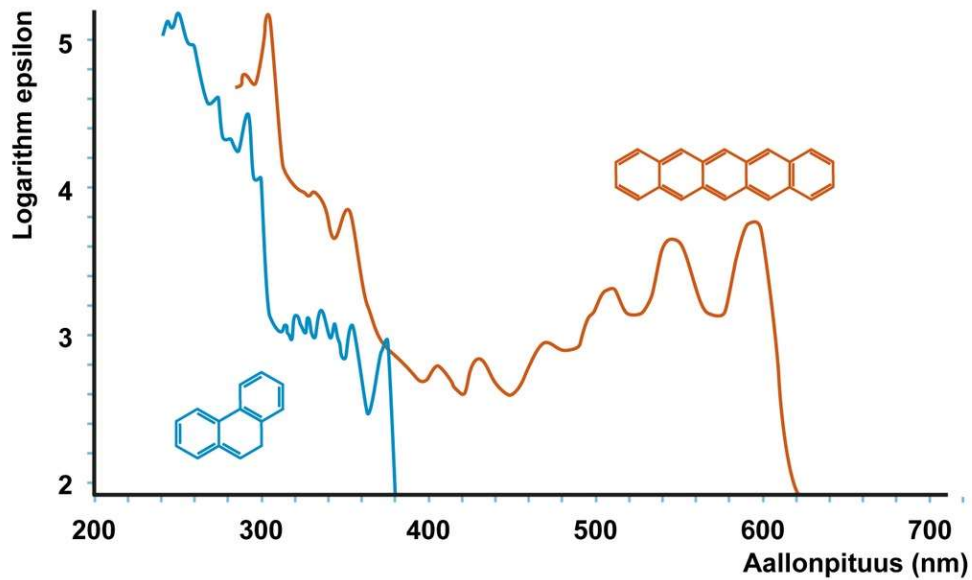
## UV-VIS-spektrin tulkinta

Detektorin mitaama transmittanssi tulkitaan tietokoneohjelman avulla. Transmittanssin ja absorbanssin välillä on logaritminen yhteys. Esimerkiksi kun 60 % valosta kulkee näytteen läpi, transmittanssi on 0,60 ja absorbanssi vastaavasti  $-\log 0,60 = 0,222$ . Mittausdata voidaan ilmoittaa transmittanssin sijaan absorboituneen säteilyn määrän ja aallonpituuden tai konsentraation funktiona.



Esimerkiksi vedessä olevan raudan pitoisuus voidaan määrittää UV-VIS-spektrofotometrillä. Ennen tutkimusta rautaionien annetaan reagoida jonkin sopivan orgaanisen yhdisteen kanssa, kuten 1,10-fenantroliinihydrokloridin tai 5-sulfosalisylihapon, jolloin muodostuu värillinen kompleksiyhdiste. Komplekseja vastaavat absorptiomaksimit ovat 424 nm:n ja 510 nm:n kohdalla.

UV-spektrin avulla voidaan saada selville, kuinka paljon yhdisteessä on kaksoissidoksia. Kaksoissidosten lukumäärä ja konjugoituneisuus aiheuttavat sekä absorptiovoimistumisen että sen siirtymisen pidemmille aallonpituuksille.



UV-VIS-spektrometriä voidaan soveltaa myös reaktion edistymisen seurantaan. Tämän edellytyksenä on, että lähtöaineiden ja tuotteiden spektrit poikkeavat toisistaan. Esimerkiksi joitakin entsyymikatalysoituja reaktioita tutkitaan tällä tekniikalla.

Eri yhdisteillä voi olla varsin saman tyyppiset UV-VIS-spektrit, joten niiden tunnistaminen ja erottaminen voi olla vaikeaa. Spektrin perusteella voidaan kuitenkin yleensä päätellä kohtuullisen luotettavasti yhdisteen puhtausaste ja eri yhdisteiden läsnä- tai poissaolo näytteessä. Kvantitatiivisissa analyysissä käytetään jotain tiettyä aallonpituutta, jolla tutkittavalla yhdisteellä tiedetään olevan absorptiomaksimi.