

**Figure 8.1** A snapshot of a linearly polarized beam of monochromatic light. The direction of propagation is in the  $+x$  direction and the picture slides to the right with time.

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos 2\pi(\nu t - x/\lambda)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 \cos 2\pi(\nu t - x/\lambda)$$

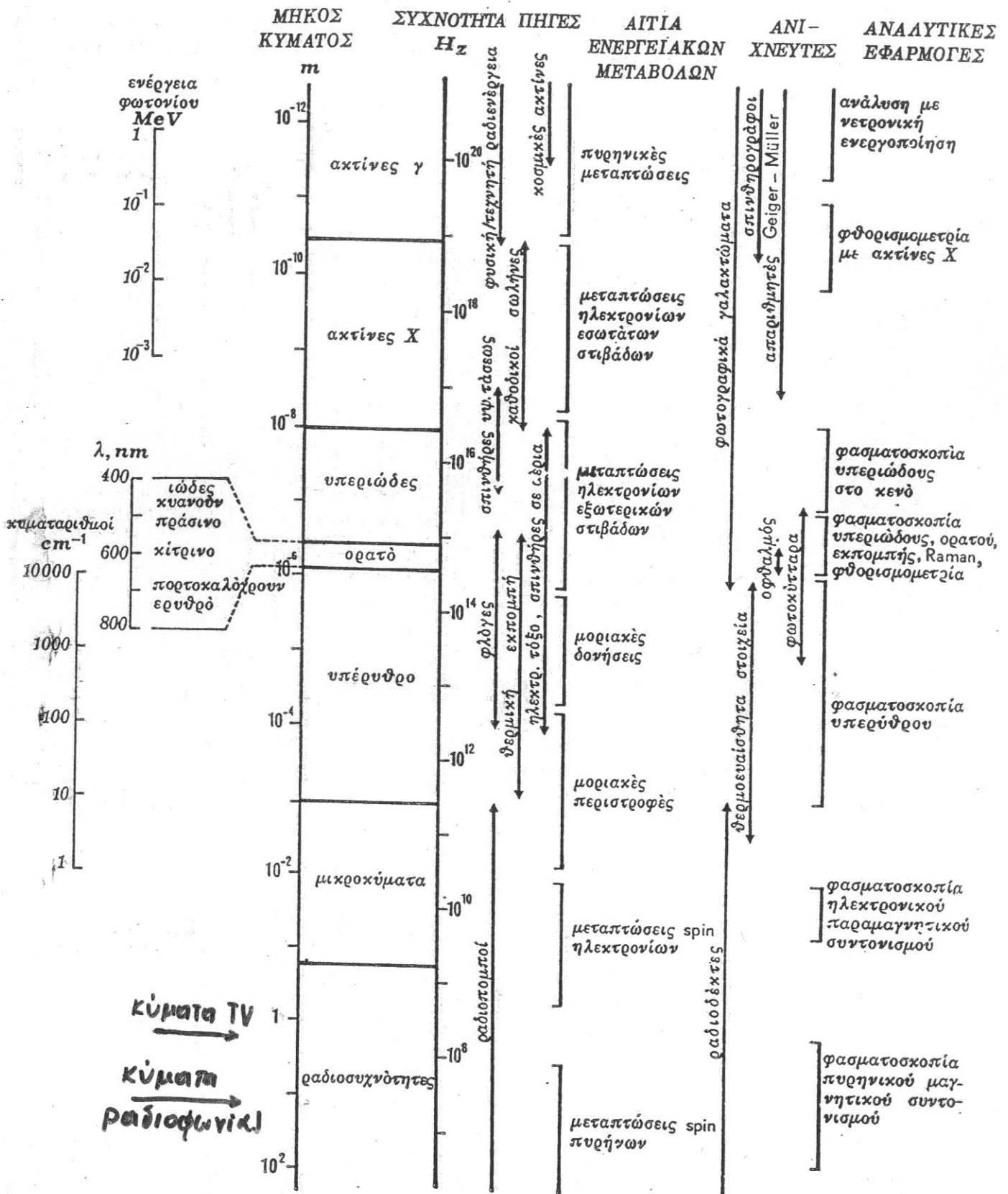
$$\nu\lambda = c$$

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

Planck's constant  $h$  is  $6.63 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$ .

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$$

$$c = 3 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$$



Διαγραμματική παράσταση του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος και ταξινόμηση των φασματοσκοπικών τεχνικών ανάλυσεως.

## Διάφοροι τύποι Φασματοσκοπίας

Τύπος Ακτινοβολίας	Συχνότητα <sup>(α)</sup> (s <sup>-1</sup> )	Μήκος κύματος (cm)	Ενέργεια (eV)	Τύπος μοριακής ή ατομικής μεταβολής	Τύπος φασματοσκοπίας
Ραδιοκύματα	10 <sup>5</sup> - 10 <sup>9</sup>	10 <sup>5</sup> - 10 <sup>1</sup>	10 <sup>-9</sup> - 10 <sup>-5</sup>	Προσανατολισμός πυρηνικού spin σε μαγνητικό πεδίο	πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (NMR) <sup>(γ)</sup> Πυρηνικού τετραπολικού συντονισμού (NQR) <sup>(γ)</sup>
Μικροκύματα	10 <sup>9</sup> - 10 <sup>11</sup>	10 <sup>1</sup> - 10 <sup>-1</sup>	10 <sup>-5</sup> - 10 <sup>-3</sup>	Προσανατολισμός ηλεκτρονικού spin σε μαγνητικό πεδίο Περιστροφή βαρέων μορίων	Ηλεκτρονικού παραμαγνητικού συντονισμού (ESR) <sup>(δ)</sup> Άπω υπέρυθρου, Μικροκυμάτων
Άπω υπέρυθρο	10 <sup>11</sup> - 10 <sup>13</sup>	10 <sup>-1</sup> - 2 x 10 <sup>-3</sup>	10 <sup>-3</sup> - 10 <sup>-1</sup>	Περιστροφή ελαφρών μορίων Ταλαντώσεις βαρέων μορίων	Άπω υπέρυθρου
Υπέρυθρο	10 <sup>13</sup> - 10 <sup>14</sup>	2 x 10 <sup>-3</sup> - 7 x 10 <sup>-5</sup>	10 <sup>-1</sup> - 10 <sup>0</sup>	Ταλαντώσεις ελαφρών μορίων	Υπέρυθρου (IR) <sup>(ε)</sup>
Υπεριώδες Ορατό και Εγγύς υπέρυθρο	10 <sup>14</sup> - 10 <sup>16</sup>	7 x 10 <sup>-5</sup> - 2 x 10 <sup>-6</sup>	10 <sup>0</sup> - 10 <sup>1</sup>	Ταλάντωση-Περιστροφή Μεταπτώσεις ηλεκτρονίων σθένους Διάσπαση χημικών δεσμών	Ηλεκτρονική, Φθορισμός Ατομικής απορρόφησης, Raman <sup>(στ)</sup>
Υπεριώδες	10 <sup>15</sup> - 10 <sup>17</sup>	2 x 10 <sup>-5</sup> - 2 x 10 <sup>-7</sup>	10 <sup>1</sup> - 10 <sup>3</sup>	Ιονισμός ατόμων και μορίων Διάσπαση χημικών δεσμών	Φωτοηλεκτρονική Φασματοσκοπία ακτίνων X (XPS) <sup>(ζ)</sup> Περθλαση ακτίνων X
Ακτίνες X	10 <sup>17</sup> - 10 <sup>19</sup>	2 x 10 <sup>-7</sup> - 2 x 10 <sup>-9</sup>	10 <sup>3</sup> - 10 <sup>5</sup>	Απόσπαση εσωτερικών ηλεκτρονίων	
Ακτίνες γ	10 <sup>19</sup> - 10 <sup>21</sup>	10 <sup>-9</sup> - 10 <sup>-11</sup>	10 <sup>5</sup> - 10 <sup>7</sup>	Διάσπαση πυρήνων	Mössbauer

(α) Υπενθυμίζεται ότι συχνότητα 10<sup>9</sup>s<sup>-1</sup> αντιστοιχεί σε 1MHz (μεγαζέρτζ) ή σε 3.3 x 10<sup>-8</sup> cm<sup>-1</sup> και ότι 1eV = 1.602 x 10<sup>-12</sup> erg/μόριο = 8067 cm<sup>-1</sup> = 23.05 kcal mol<sup>-1</sup> = 98.44 kJ mol<sup>-1</sup> = 2,418 x 10<sup>8</sup> MHz. Υπενθυμίζεται ακόμη, ότι η συχνότητα ν της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας συνδέεται με το μήκος κύματος λ με τη σχέση νλ = c, όπου c η ταχύτητα του φωτός.

(β) Για σύγκριση αναφέρεται ότι η θερμική ενέργεια των μορίων (το kT δηλαδή θερμοκρασία δωματίου είναι περίπου 0.03eV).

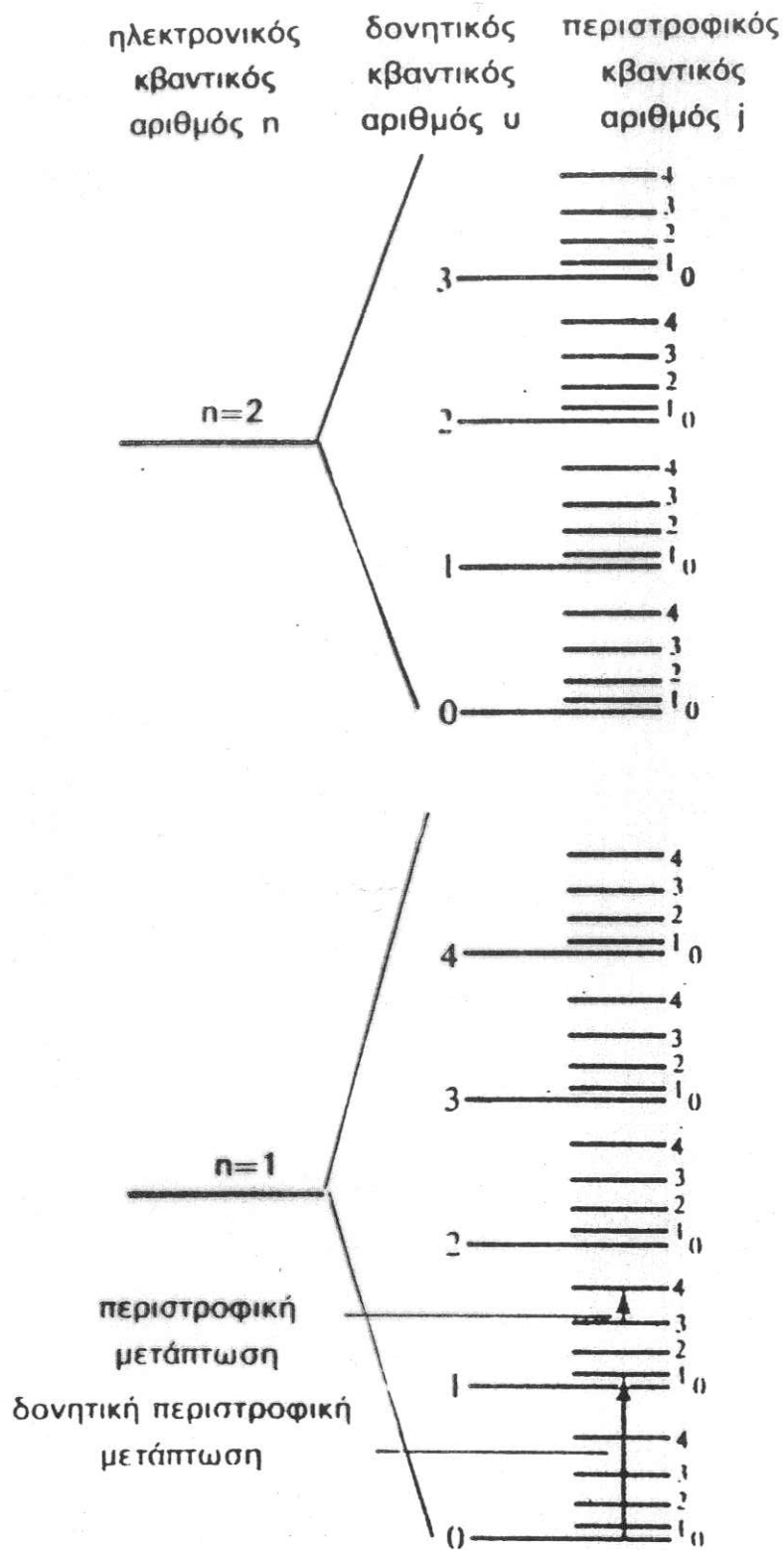
(γ) Nuclear Magnetic Resonance, Nuclear Quadrupole Resonance.

(δ) Electron Spin Resonance.

(ε) Infra Red.

(στ) Στη φασματοσκοπία Raman η διεγείρουσα ακτινοβολία βρίσκεται στο ορατό ή στο υπεριώδες, αλλά οι απορροφήσεις αντιστοιχούν σε δονήσεις και περιστροφές, όπως στη φασματοσκοπία IR.

(ζ) X-ray Photoelectron Spectroscopy.



Ηλεκτρονικές, δονητικές και περιστροφικές στάθμες ενεργείας ενός μορίου.



Τα φάσματα UV-Vis εμφανίζονται εάν μεταβολές της Απορρόφησης  $A$  ή της Μοριακής Απορροφητικότητας  $\epsilon$ , σε συνάρτηση του μήκους κύματος  $\lambda$

### Εξίσωση Lambert-Beer



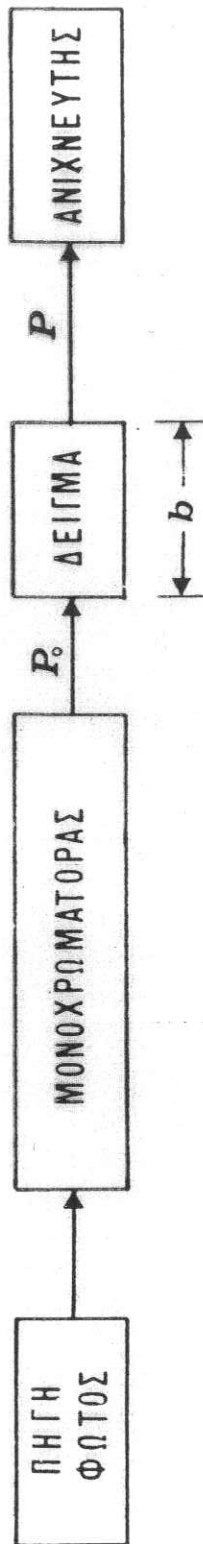
$I_0, I \Rightarrow$  ένταση  
προσπίπτουσας,  
εξερχομένης  
ακτινοβολίας.

$d \Rightarrow$  πάχος επιβάδα, δια  
της οποίας διέρχεται η ακτι-  
νοβολία. (cm)

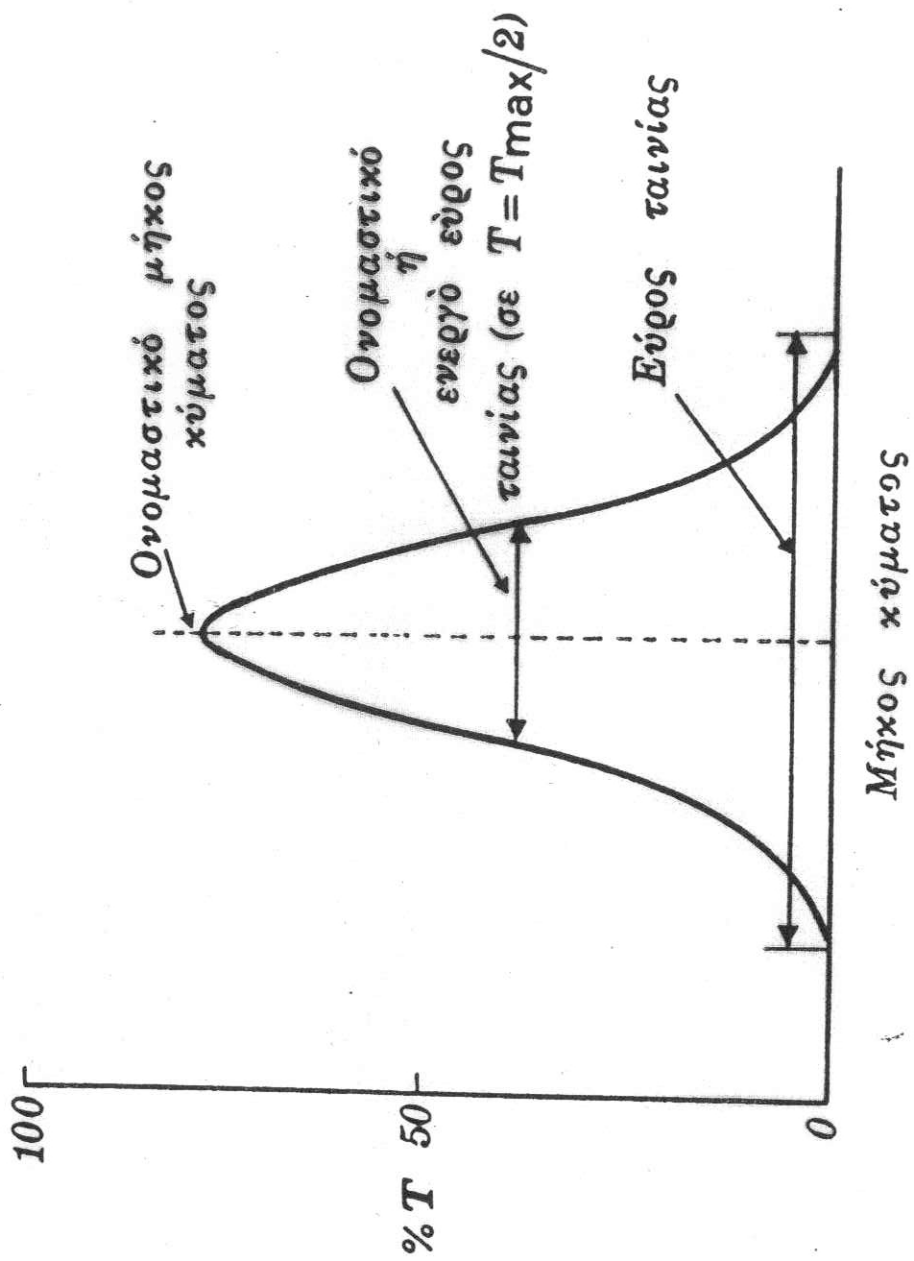
$c \Rightarrow$  συμμεντρωση διαλύμα-  
τος (mol. L<sup>-1</sup>)

$$A = \log \frac{I_0}{I} = \epsilon \cdot c \cdot d$$

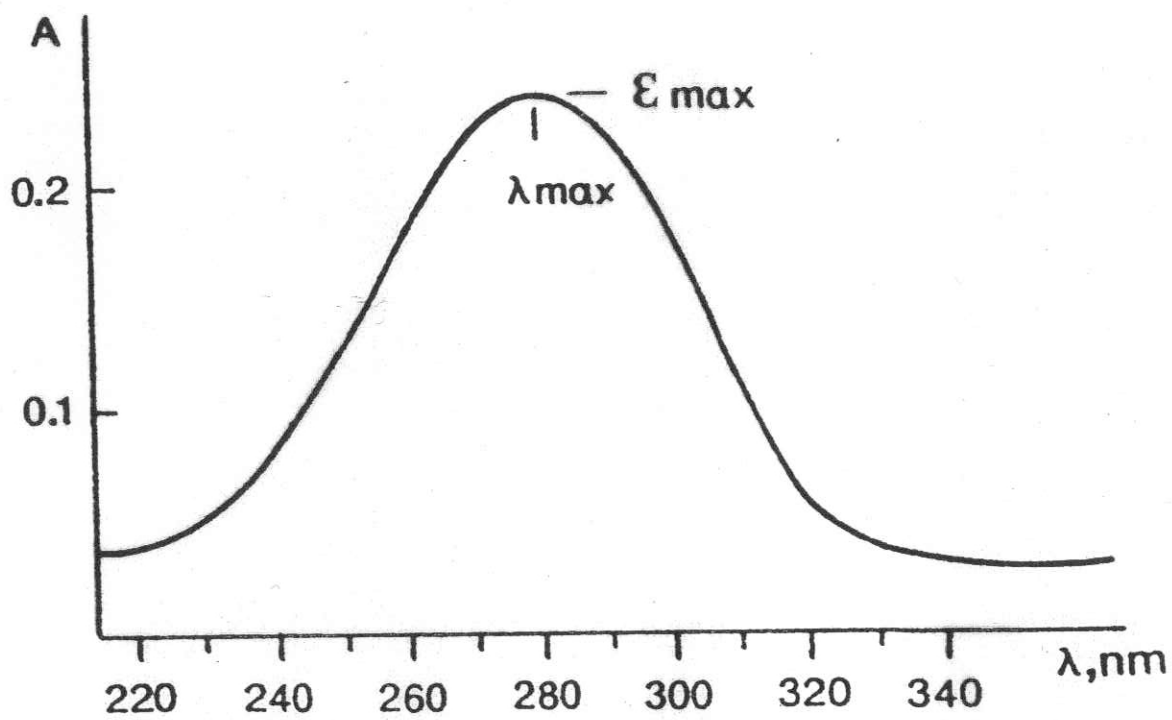
$$T = \frac{I}{I_0} \Rightarrow \text{διαπερατότητας } T\%$$



Σχηματικό διάγραμμα ποσοτικής φασματοφωτομετρίας.

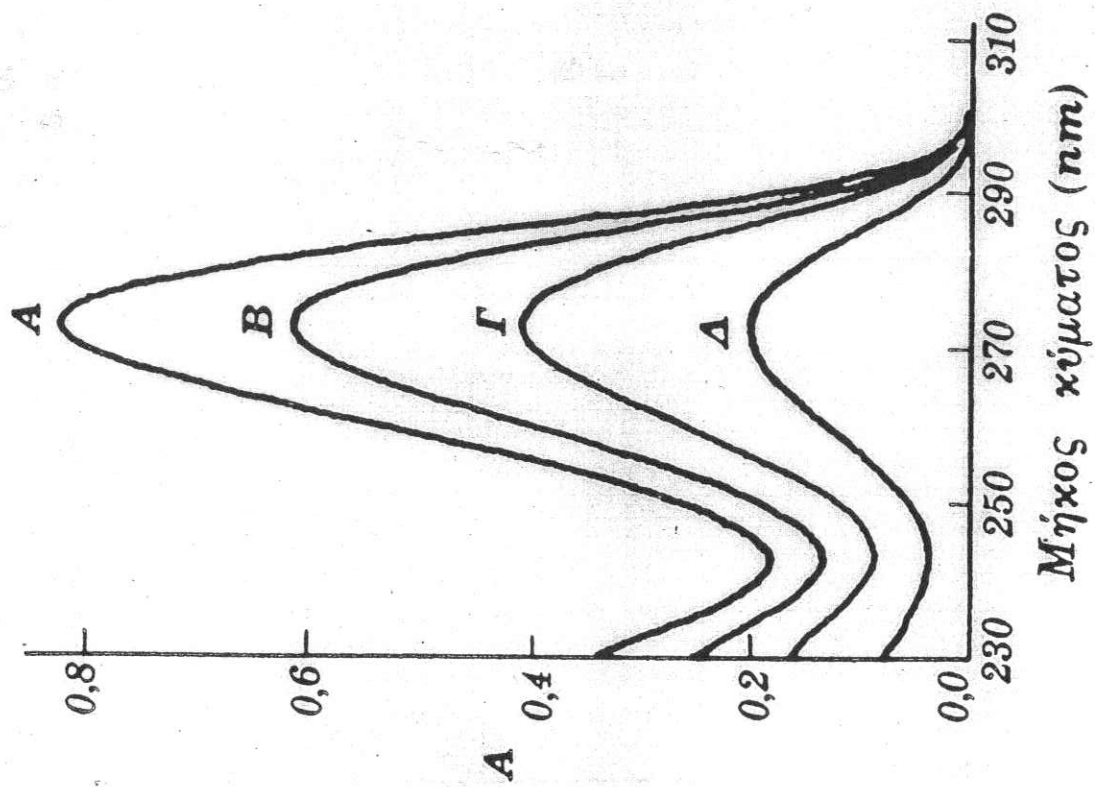


Κατανομή μηκών κύματος που διέρχονται από το φίλτρο.

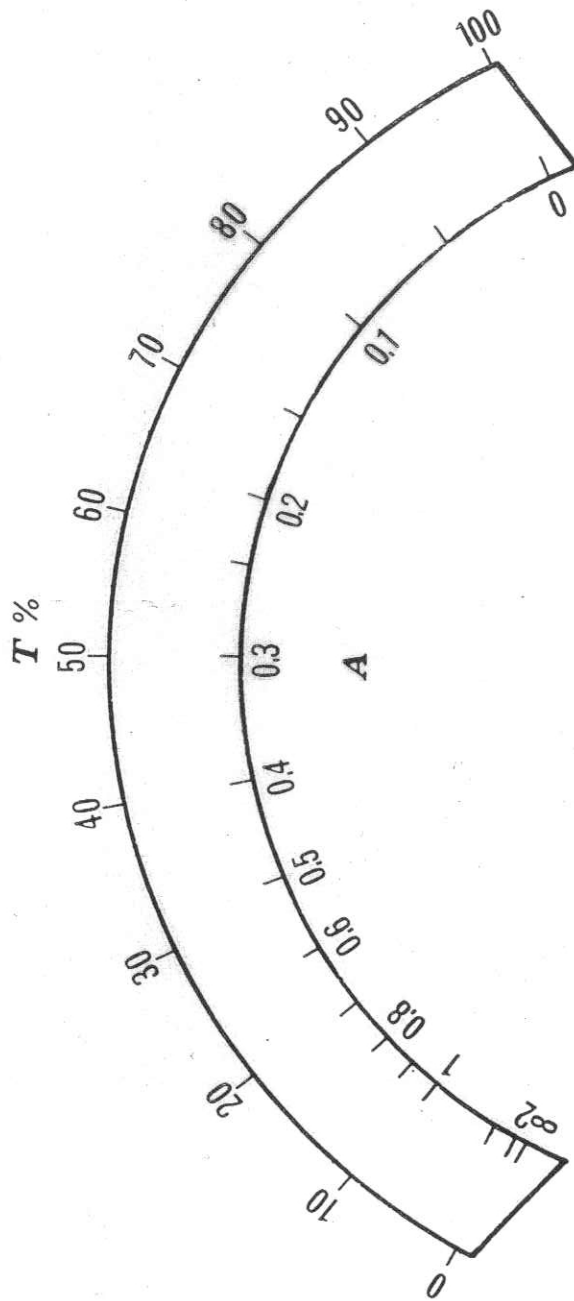


Φάσμα υπεριώδους της κυκλοεξανόνης





Φάσμα απορρόφησης υδατικών διαλυμάτων θεοφυλλίνης, σε κυψελίδα πάχους 1,000 cm. A:  $8,00 \times 10^{-5} M$ , B:  $6,00 \times 10^{-5} M$ , Γ:  $4,00 \times 10^{-5} M$ , Δ:  $2,00 \times 10^{-5} M$ .



Κλίμακες φασματοφωτομέτρου.