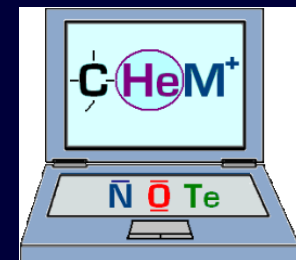


# 13. Spektroskopie základní pojmy

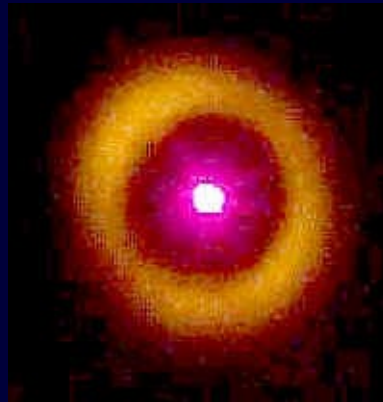
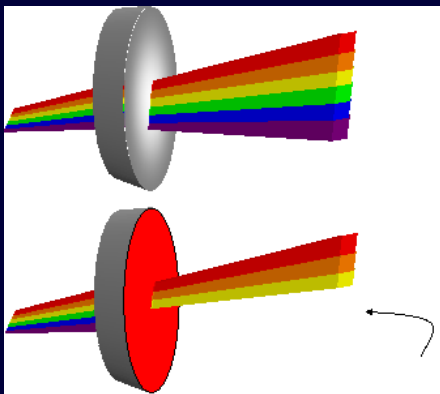
- Spektroskopicky významné OPTICKÉ JEVY
  - absorpce – absorpční spektrometrie
  - emise – emisní spektrometrie
  - rozptyl – rozptylové metody



Evropský sociální fond  
Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti

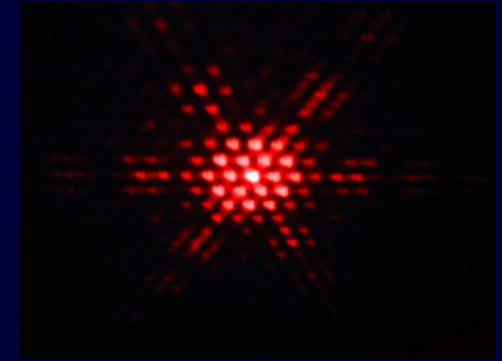
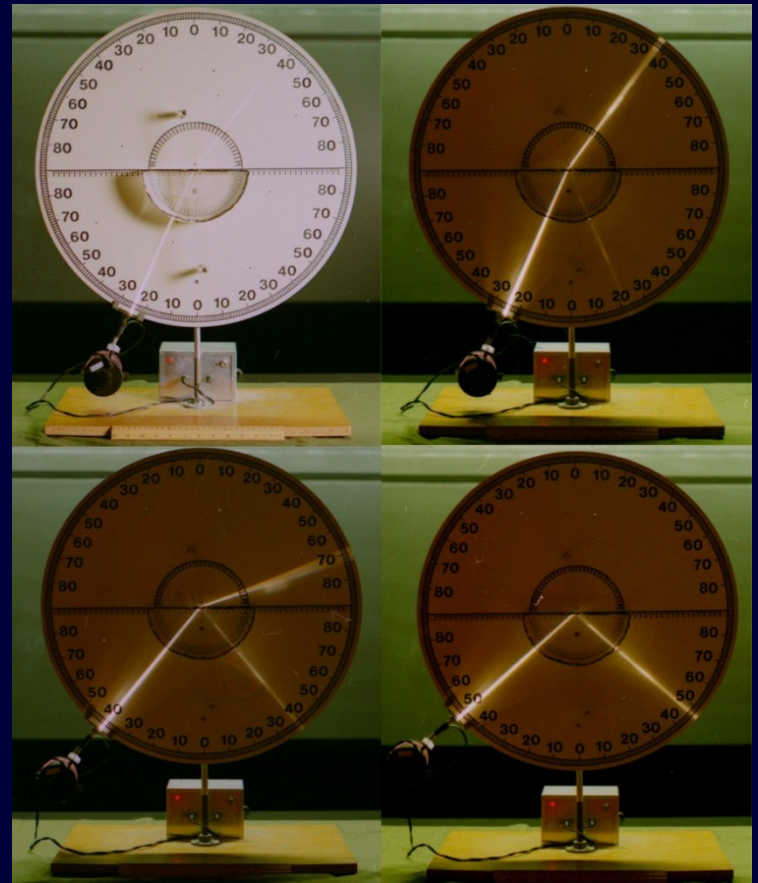
# 13. Spektroskopie základní pojmy

- OPTICKÉ JEVY
  - absorpce – absorpční spektrometrie
  - emise – emisní spektrometrie
  - rozptyl – rozptylové metody



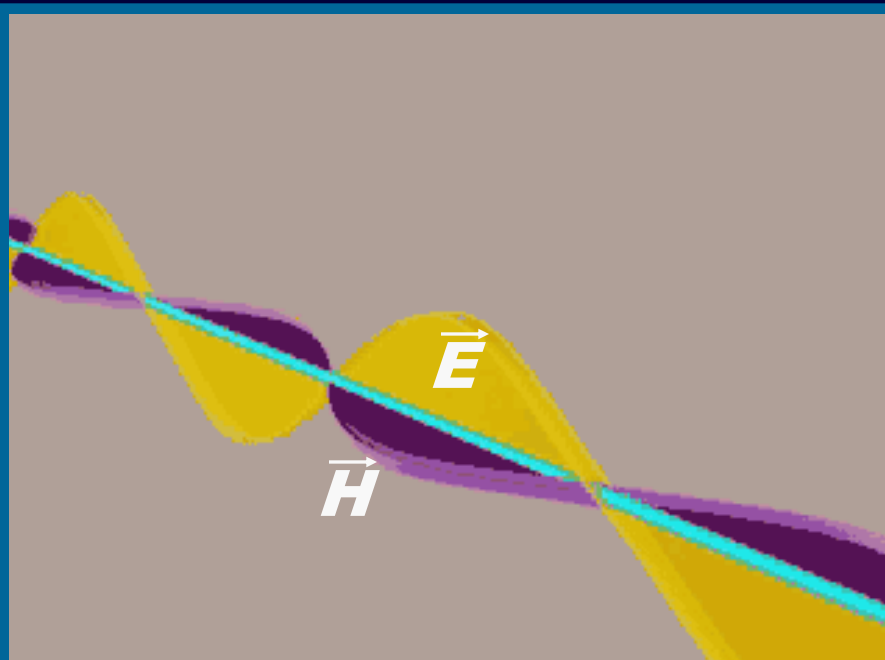
# 13. Spektroskopie základní pojmy

- OPTICKÉ JEVY
  - odraz – reflexe
    - (na fázovém rozhraní)
  - lom – refrakce
    - (na fázovém rozhraní)
  - ohyb – difrakce
    - štěrby, hrany
  - interference
    - skládání fázově posunutých vln

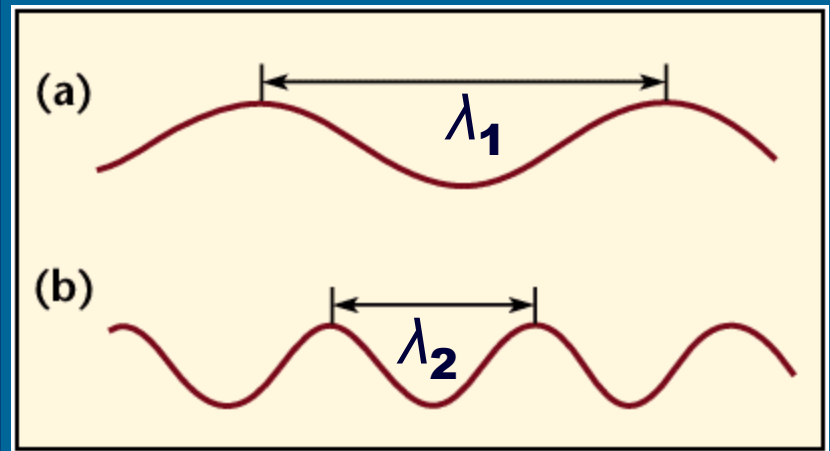


# 13. Spektroskopie základní pojmy

- elektromagnetické vlnění



elektrická a magnetická složka



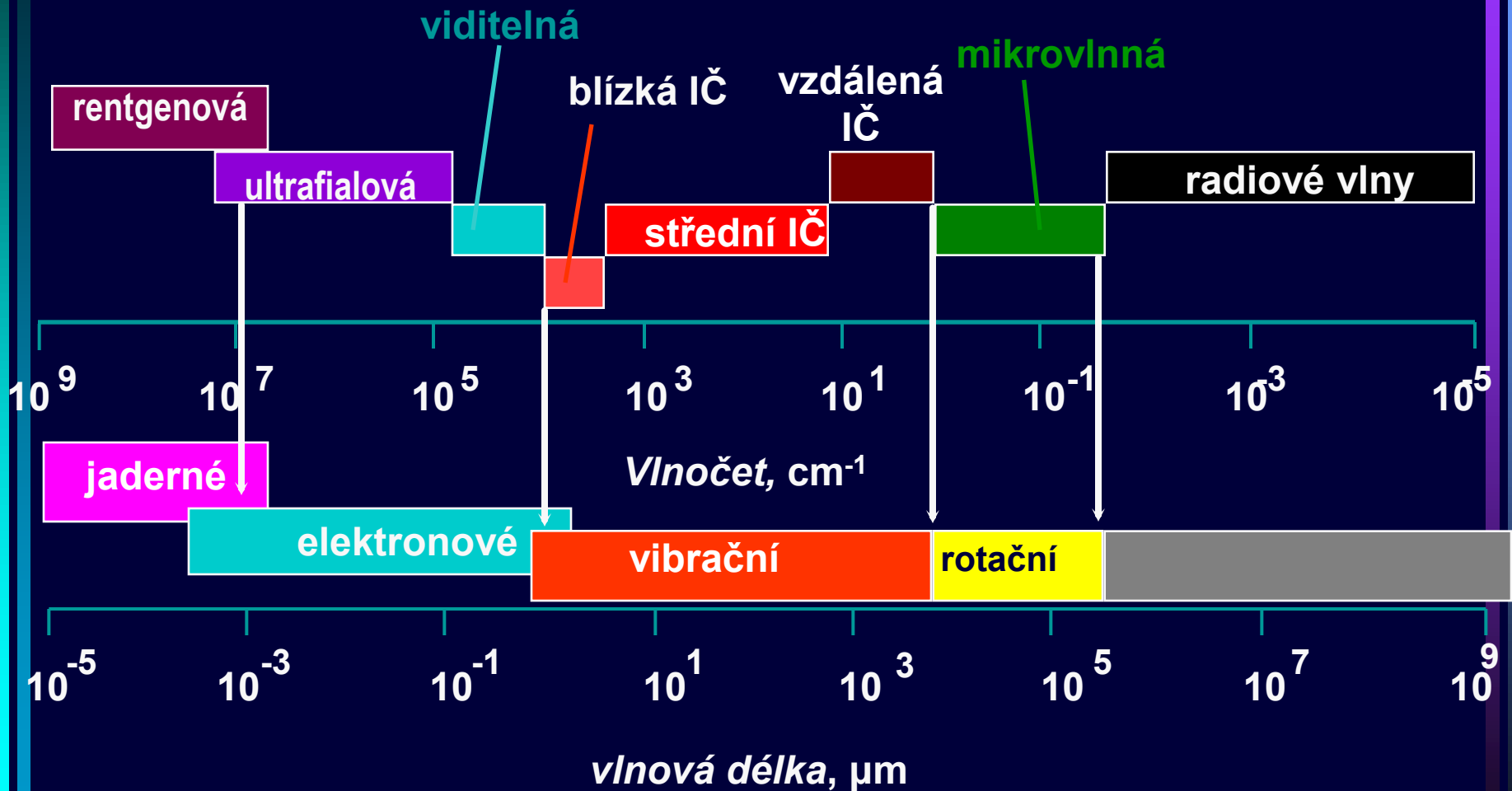
vlnová délka, vlnočet

# 13. Spektroskopie

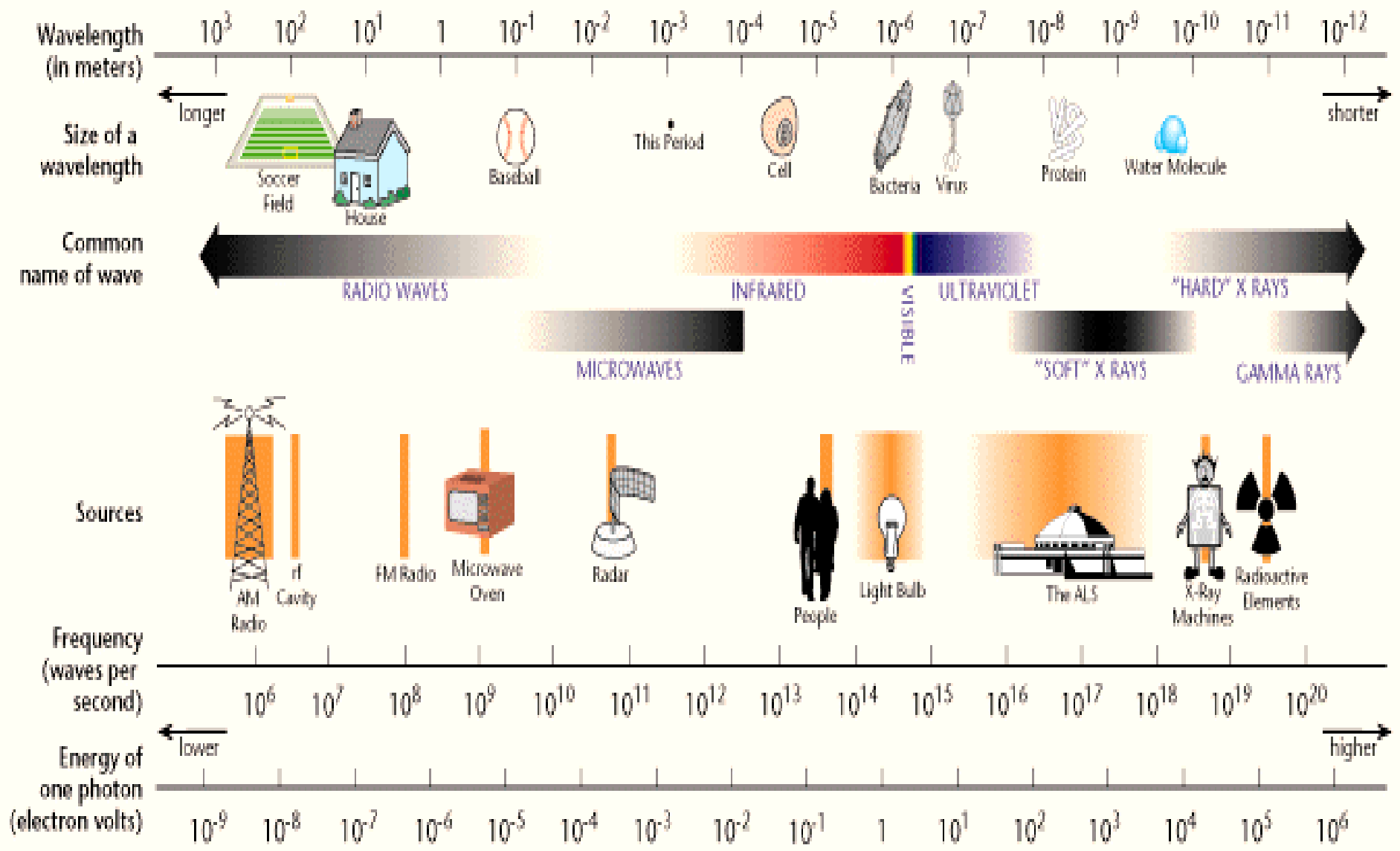
## základní pojmy

- **elektromagnetické vlnění**
  - **elektrická a magnetická složka**
    - **vlnová délka, frekvence, vlnočet**
    - **rychlost šíření** - ve vakuu,  
v homogenním prostředí  $n = \frac{c}{v}$
    - **intenzita** (zářivý tok)
    - **foton** - částice s nulovou KLIDOVOU  
hmotností
      - **energie fotonu**

# 13. Spektroskopie základní pojmy



# THE ELECTROMAGNETIC SPECTRUM



# 13. Spektroskopie

## • ABSORPČNÍ SPEKTROMETRIE

### – absorpce fotonu

- excitace atomu/molekuly – přechod z nižšího energetického stavu do vyššího

– energie přechodu → poloha pásu  $\Delta E = E_n - E_m$

- vlnová funkce počátečního stavu

- vlnová funkce koncového stavu

- operátor přechodu – časté dipolové přechody

– tranzitní moment – vztah k intenzitě (ploše) pásu

– VÝBĚROVÁ PRAVIDLA

$$M_{nm} = \int \Psi_n^* \hat{D} \Psi_m d\tau$$

$$M_{nm} = \langle \Psi_n^* | \hat{D} | \Psi_m \rangle$$

### – atomová absorpční spektrometrie – AAS

- elektronové přechody - UV-VIS oblast

### – molekulová absorpční spektrometrie

- elektronové přechody - UV-VIS oblast

- vibrační přechody – IR oblast

- rotační přechody – mikrovlnná oblast



# 13. Spektroskopie



## • ABSORPČNÍ SPEKTROMETRIE

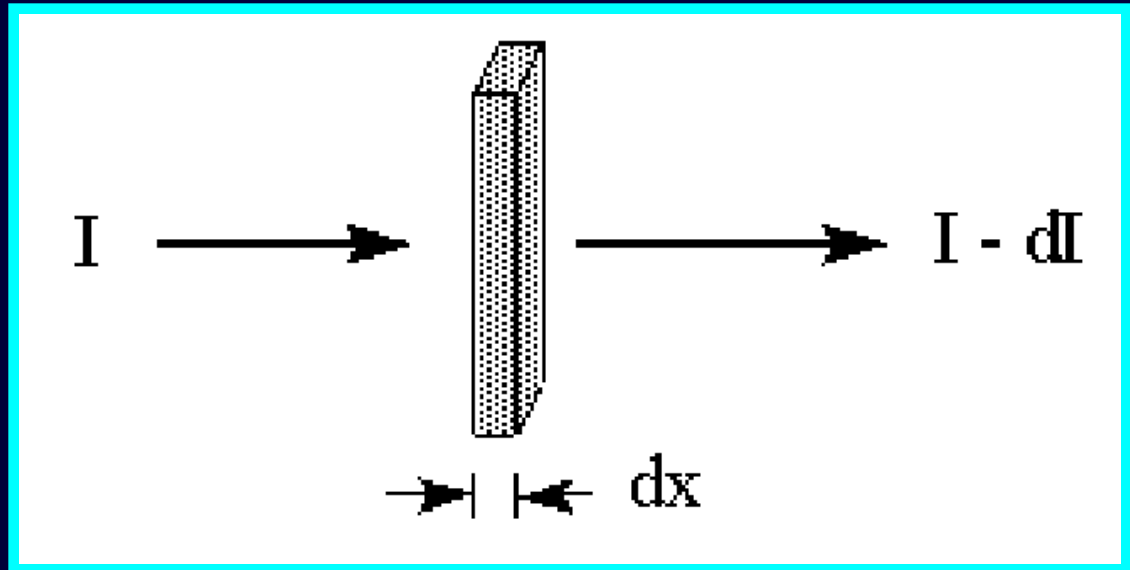
- otázka tloušťky vrstvy - Bouguer (1729), Lambert (1760)
  - pokles intenzity – míra poklesu – transmittance -  $T$

$$-dI = k I dx$$

$$-\frac{dI}{dx} = k I$$

$$-\frac{dI}{I} = k dx$$

$$-\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = k b$$



# 13. Spektroskopie



## • ABSORPČNÍ SPEKTROMETRIE

– vztah ke koncentraci - Beer (1852)

$$-\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = k b$$

napierovský  
absorpční koeficient

$$k = \kappa c$$

napierovský molární  
absorpční koeficient

$$-\log\left(\frac{I}{I_0}\right) = \left(\frac{k}{2.303}\right)b$$

$$\left(\frac{k}{2.303}\right) = a$$

dekadický absorpční  
koeficient

$$a = \varepsilon c$$

(dekadický) molární  
absorpční koeficient

$$-\log\left(\frac{I}{I_0}\right) = -\log T = A$$

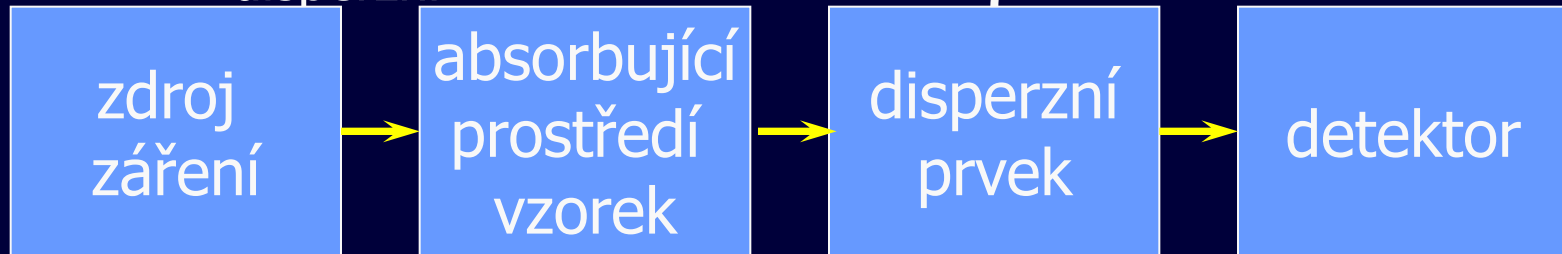
$$A = \varepsilon b c$$

# 13. Spektroskopie

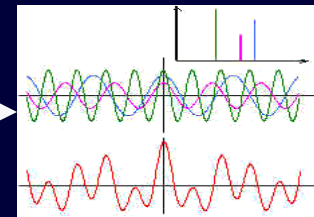
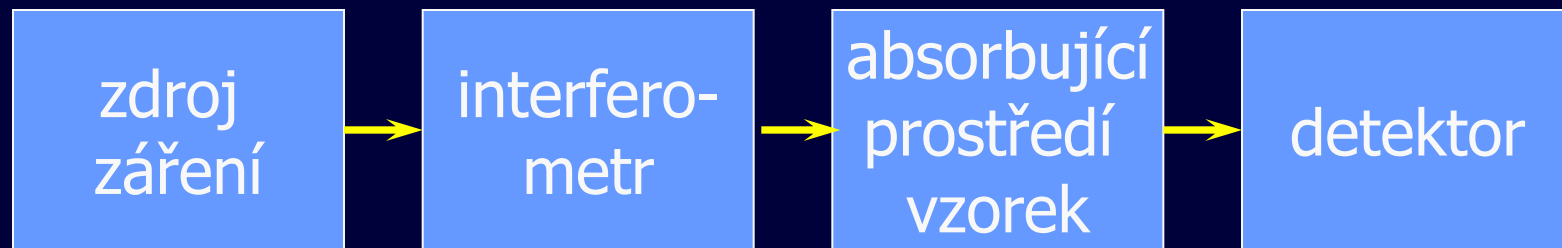
- ABSORPČNÍ SPEKTROMETRIE

- absorpční spektrometr

- disperzní



- s Fourierovou transformací



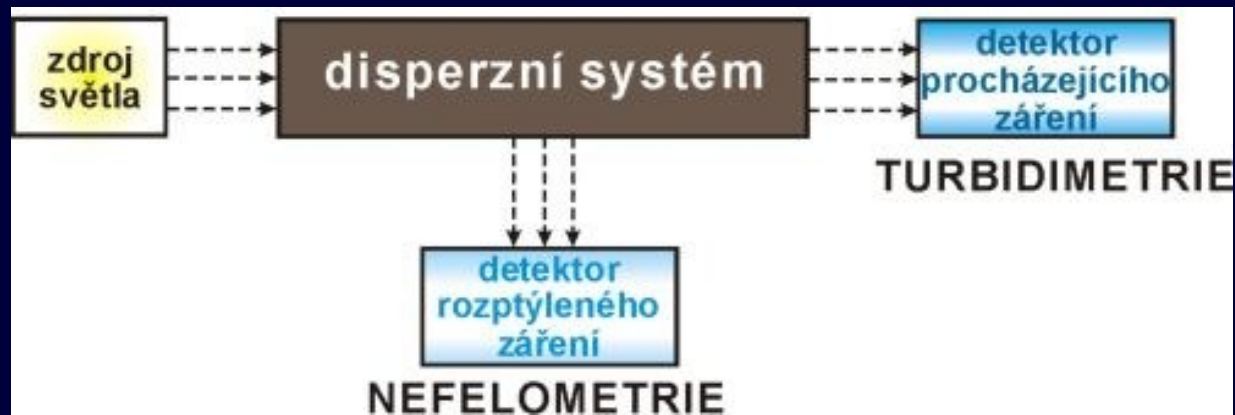
# 13. Spektroskopie

- EMISNÍ SPEKTROMETRIE
  - EMISE fotonu
    - přechod z vyššího energetického stavu do nižšího
    - doba života excitovaného stavu
      - dovolené přechody
      - zakázané přechody
    - NUTNÁ VHODNÁ CESTA PŘEDCHOZÍ EXCITACE
  - atomová emisní spektrometrie – AES (OES)
    - elektronové přechody - UV-VIS oblast
  - molekulová „emisní“ spektrometrie
    - elektronové přechody - UV-VIS oblast – luminiscence
      - fluorescence a fosforescence
    - NMR („pulzní“, s Fourierovou transformací)

# 13. Spektroskopie

## • ROZPTYLOVÁ SPEKTROMETRIE

- rozptyl fotonu (na nehomogenitách)
  - elastický – (pouze sledování intenzity rozptylu)
    - turbidimetrie a nefelometrie (sledování „zákalu“)
      - » analýza aerosolů
      - » analýza koloidních soustav
      - » laserová imunonefelometrie



- neelastický

# 13. Spektroskopie

## • ROZPTYLOVÁ SPEKTROMETRIE

– rozptyl fotonu

- neelastický – rozdílná energie rozptýleného a vstupního fotonu

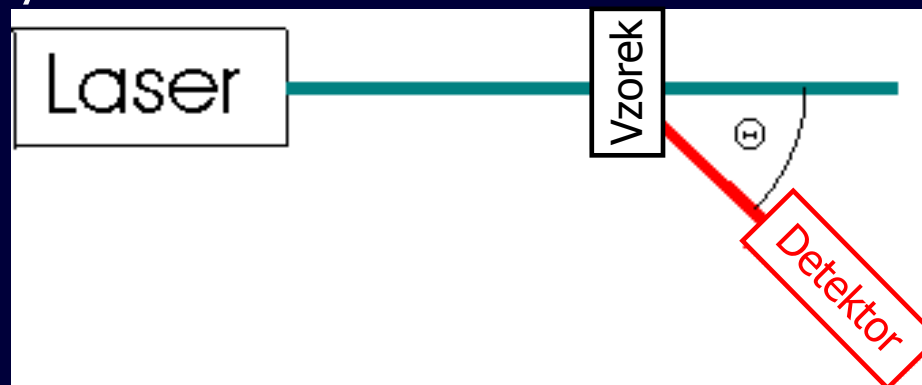
- spektroskopie kvazielastického rozptylu – QELS

- spektroskopie dynamického rozptylu - DLS

- „photon-correlation“ spectroscopy - PCS

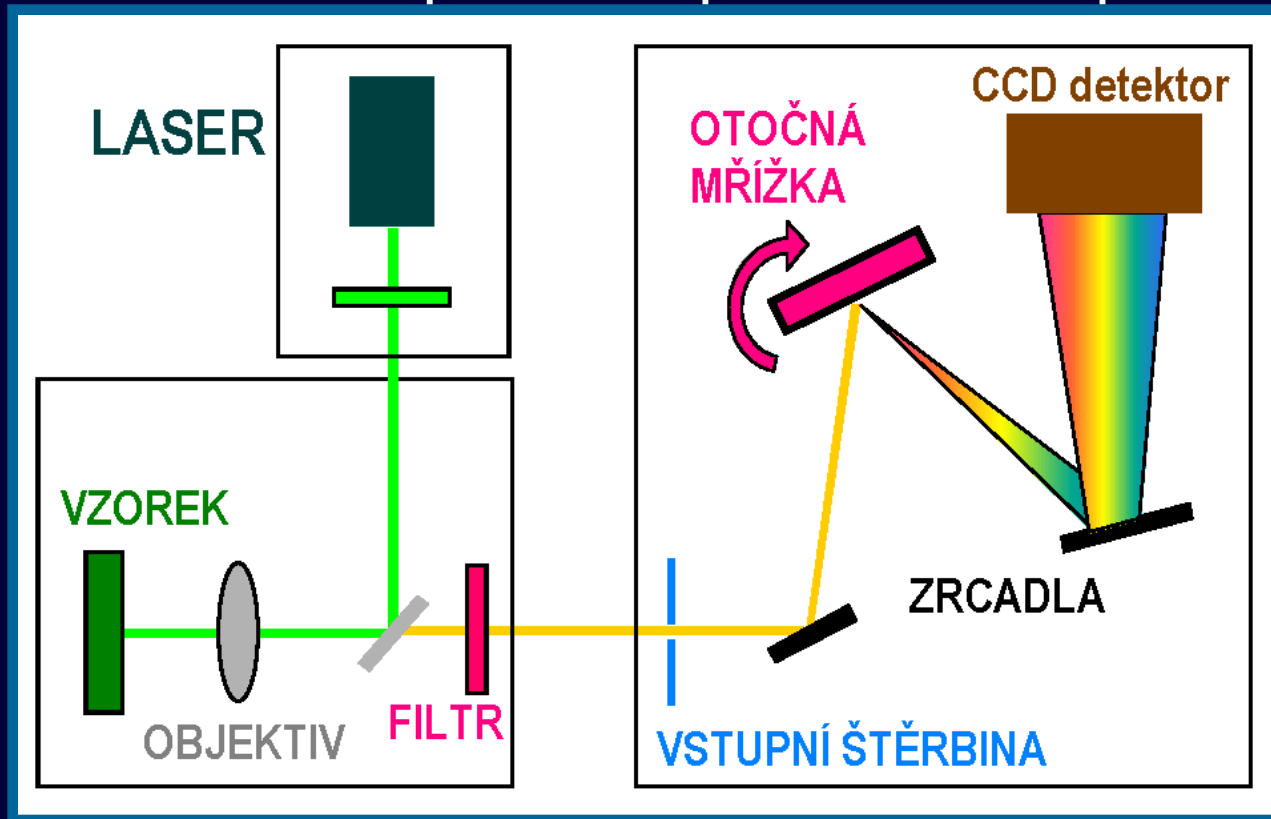
  - » analýza velikosti nanočástic

  - » rychlost difuze koloidních částic či makromolekul



# 13. Spektroskopie

- ROZPTYLOVÁ SPEKTROMETRIE
  - neelastický rozptyl
    - Ramanova spektroskopie – vibrační přechody



# 13. Spektroskopie

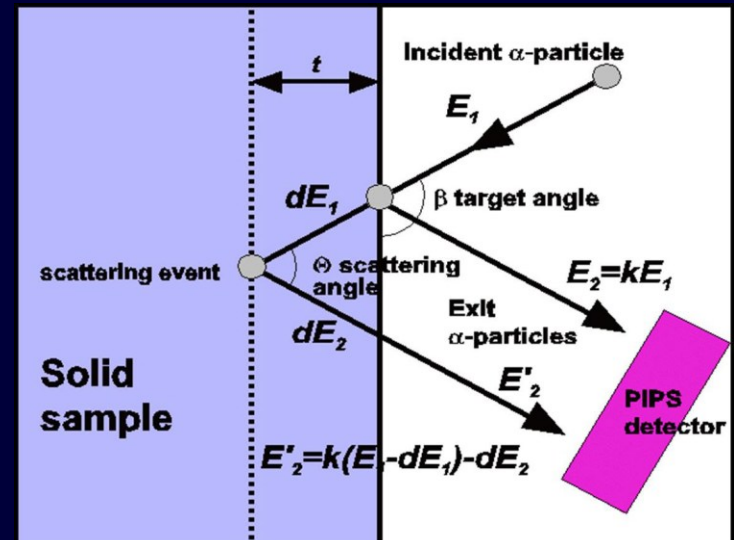
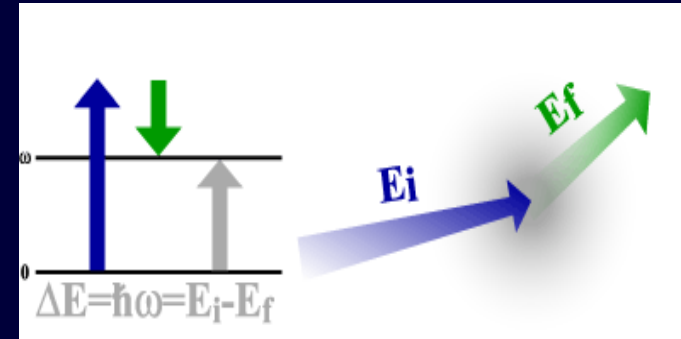
## • ROZPTYLOVÁ SPEKTROMETRIE

### • částic

- rozptyl neutronů
  - pružný
  - nepružný – např. na fononech
    - podobnosti s Ramanovou spektroskopií

### – rozptyl a částic

- Ruthefordův rozptyl
  - Ruthefordův zpětný rozptyl – RBS
  - prvková analýza
  - zákon zachování energie
  - zákon zachování hybnosti



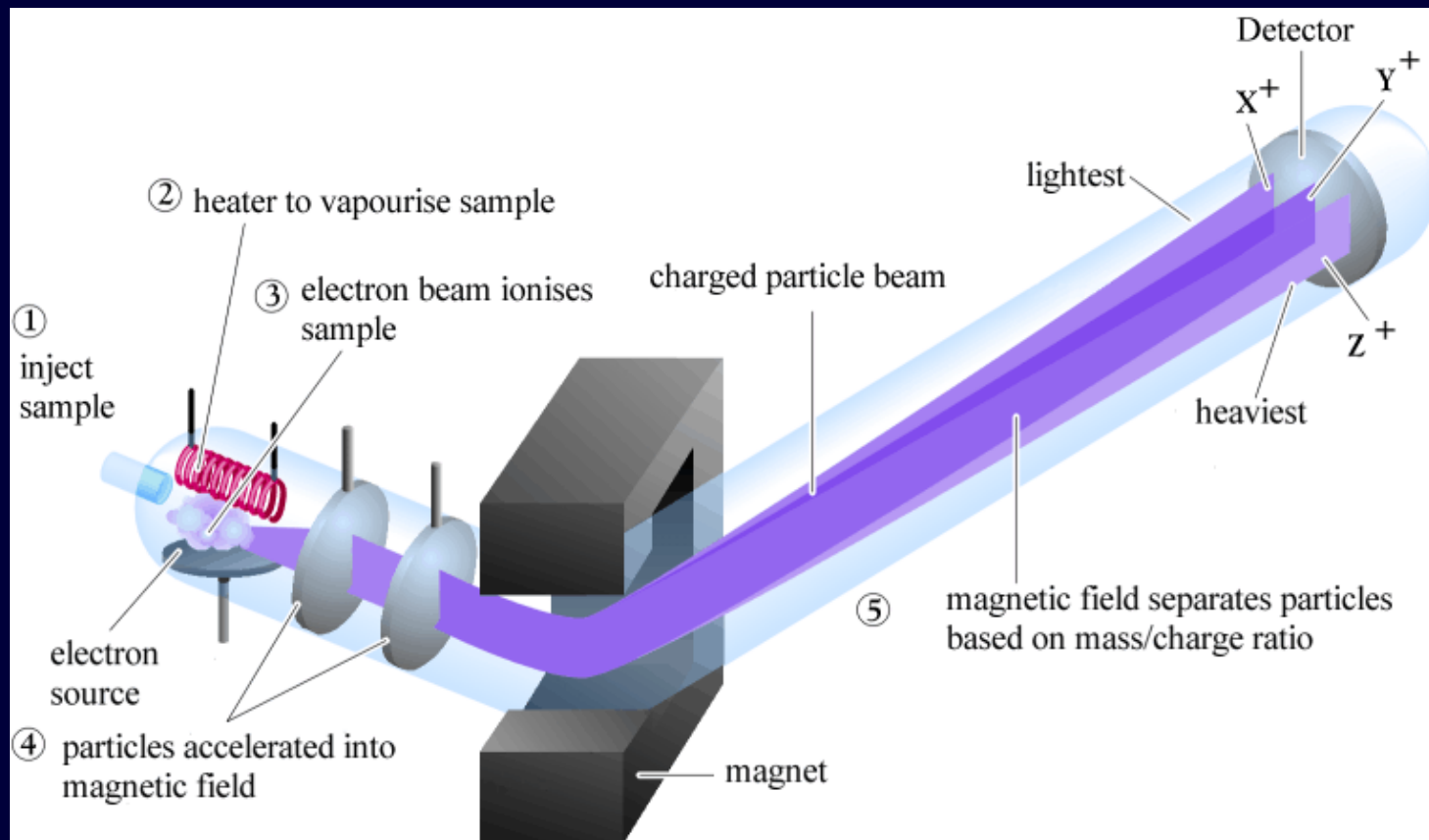


# 13. Spektroskopie

- SPEKTROMETRIE HMOTNOSTNÍ
  - SPEKTROMETR - iontově-optické zařízení
    - separace iontů podle  $m/z$
    - vstup - zavedení vzorku
    - iontový zdroj - ionizace
    - separátor (analyzátor) - separace iontů podle  $m/z$
    - detektor - četnost daného typu iontů
    - zpracování signálu - spektrální výstup
    - vakuový systém - vyloučení srážek iontů

# 13. Spektroskopie

- SPEKTROMETRIE HMOTNOSTNÍ
  - SPEKTROMETR - iontově-optické zařízení



# 13. Spektroskopie

- SPEKTROMETRIE HMOTNOSTNÍ
  - SPEKTROMETR - separace iontů podle  $m/z$



zakřivení dráhy  
letu

- dostředivá síla  
( $B e v$ )  
– úměrná  
magnetické indukci

- odstředivá síla -  
 $mv^2/r$