

### 2.2.25. АБСОРБЦІЙНА СПЕКТРОФОТОМЕТРІЯ В УЛЬТРАФІОЛЕТОВОМУ Й ВИДИМОМУ ДІАПАЗОНІ

#### ПРИНЦИП

Спектроскопія (або спектрофотометрія) в ультрафіолетовому й видимому (УФ-ВИД) діапазоні ґрунтується на здатності атомів, молекул й іонів абсорбувати (поглинати) світло за певних довжин хвиль в ультрафіолетовому (приблизно 180–400 нм) і видимому (приблизно 400–800 нм) діапазоні. Це поглинання пов'язане зі зміною енергії атома за рахунок тимчасових переходів електронів у збуджений стан на електронні орбіталі з вищою енергією. Оскільки кожен енергетичний рівень молекули або молекулярного іона доповнюється коливальними й обертальними підрівнями, це призводить до багатьох дозволених переходів, які зазвичай неможливо розділити; так утворюються смуги поглинання, а не вузькі лінії. Ці смуги є характеристичними для функціональних груп і зв'язків у молекулі.

Вимірювання методом УФ-ВИД-спектроскопії складаються з опромінення зразка світлом і вимірювання загасання та/або розсіювання вихідного (пропущеного або відбитого) світла за певної довжини хвилі або в певному діапазоні довжин хвиль.

#### ЗАСТОСУВАННЯ

Спектроскопія в УФ-ВИД-діапазоні зазвичай використовується для кількісного та якісного аналізу рідких зразків, але також підходить для твердих і газоподібних аналітів і має інше застосування, таке як визначення фізичних або хімічних властивостей.

УФ-ВИД-спектроскопія, що описана в цій статті, може застосовуватися в різних аспектах:

- коли монографія чи загальна стаття посилається на цю статтю, вимоги, зазначені у відповідних параграфах цієї статті, є обов'язковими;
- коли використовується як метод детектування в хроматографічних системах, як зазначено в загальній статті 2.2.46, вимоги, перелічені у відповідних параграфах цієї статті, є обов'язковими;
- коли використовується як інструмент процесно-аналітичної технології (РАТ) для застосування в РАТ, подібних до застосувань, описаних у цій статті, користуються положеннями цієї статті; для інших застосувань в РАТ принципи такі самі, проте критерії встановлюються з урахуванням цілей аналізу, з використанням підходу оцінювання ризиків.

#### ОБЛАДНАННЯ

Спектрофотометри, що використовуються для вимірювань в УФ-ВИД-діапазоні, зазвичай складаються з:

- відповідного джерела світла (наприклад, дейтерієва лампа для УФ-діапазону, вольфрамово-галогенна лампа для видимого діапазону або ксенонова лампа для всього УФ-ВИД-діапазону);
- монохроматора, такого як дифракційна решітка;
- інших оптичних компонентів, таких як лінзи або дзеркала, які передають світло всередині приладу й які також можуть бути використані для генерування більш ніж одного променя світла, а саме у двопроменевих спектрофотометрах, на відміну від однопроменевих;
- контейнера для зразків, тримача або пристрою для відбирання проб; наприклад, це можуть бути звичайні кювети, оптико-волоконні зонди або занурювані комірки, що пропускають випромінювання (наприклад, високочистий кварц або сапфір, прозорі для УФ-ВИД-випромінювання); вибір залежить від передбачуваного застосування, особлива увага має приділятися придатності для певного типу випробовуваного зразка;
- детектора одноканального (наприклад, фотопомножувач, фотодіод) або багатоканального (наприклад, фотодіодна матриця (PDA) або пристрій із зарядним зв'язком (CCD));
- відповідних комп'ютеризованих систем обробки й оцінювання даних.

**Перевірка кювет.** Для лабораторних інструментів використовуються кювети або комірки з визначеною довжиною оптичного шляху. Вони можуть бути виготовлені з різних матеріалів, таких як кварц або скло. Допустиме відхилення довжини шляху кварцових і скляних кювет становить  $\pm 0.5\%$  (наприклад,  $\pm 0.005$  см для кювет з довжиною шляху 1 см). Також можуть використовуватися пластикові кювети, але допуски довжини шляху для них ширші; тому їх використання має бути ретельно обґрунтоване й базуватися на оцінюванні ризиків.

Для контролю чистоти оптичних вікон кювет та будь-яких суттєвих відмінностей в їх товщині або паралельності може бути застосований такий метод: заповнюють кювету водою  $P$  і вимірюють її умовну оптичну густину відносно повітря за 240 нм для кварцових кювет і 650 нм для скляних кювет; повертають кювету на  $180^\circ$  у тримачі й знову вимірюють умовну оптичну густину за тієї самої довжини хвилі.

У разі використання сканувальних інструментів рекомендується сканувати ширший оптичний діапазон, ніж той, що цікавить.

У разі використання двопроменевих спектрофотометрів слід вжити заходів (наприклад, підбір сумісних кювет), щоб гарантувати, що будь-яка різниця між поглинанням кювет не матиме значного впливу на аналіз, що виконується.