



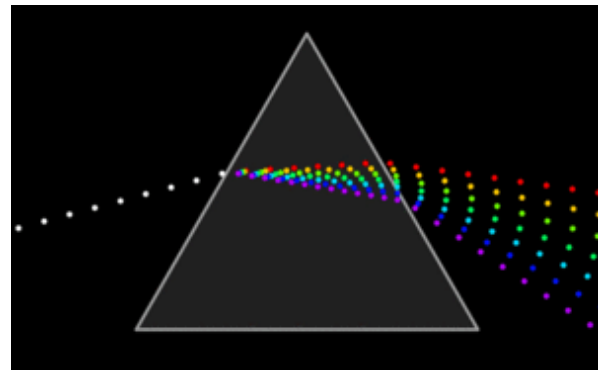
Интегрисане академске студије фармације  
Инструменталне методе- Б14

**П11. Основе UV-VIS спектроскопије.**

**Проф. др Недељко Манојловић**

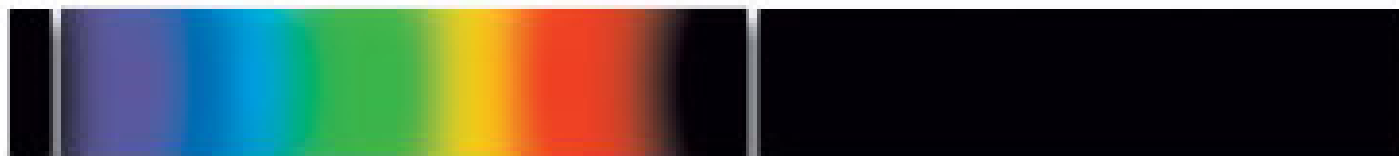
Ултравиолетни део спектра може се поделити и спектроскопски на:

- **далеку (вакуумску) област**  
200 – 300 nm
- **блиску област (тамно светло)**  
300 – 400 nm.



## A yellow pencil with a purple eraser and a purple band is shown drawing a wavy purple line. The pencil is oriented diagonally, and the line it is drawing is a simple, wavy, vertical stroke.

# Инфрацрвени



# ОСНОВЕ UV-VIS СПЕКТРОСКОПИЈЕ. ВРСТЕ ХРОМОФОРА

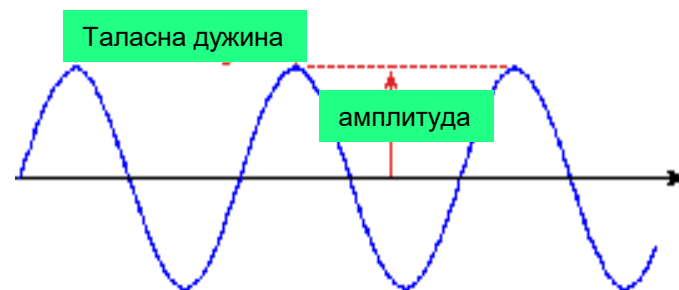
-**ЕЛЕКТРОНСКА СПЕКТРОСКОПИЈА**- зато што UV-VIS  
зрачење апсорбују електрони

Апсорпција ЕМЗ  $\lambda = 200\text{-}800\text{ nm}$  ( $E = 600\text{-}150\text{ kJ/mol}$ )

$E = h \nu$  Планков закон

$E$  = енергија  $h$  = Планкова константа

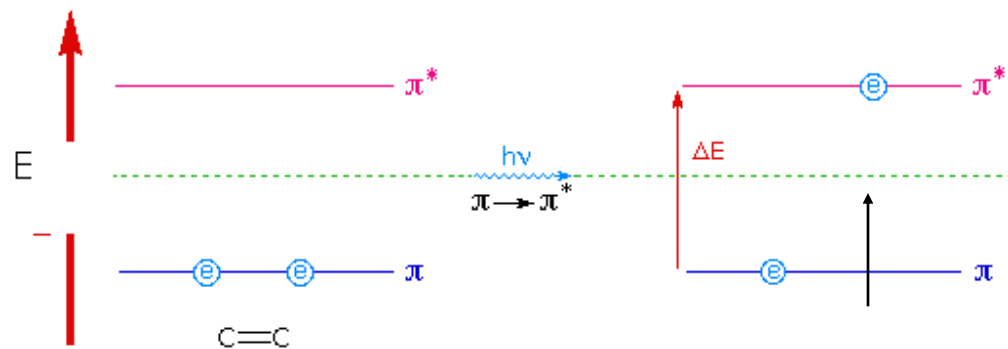
$\nu$  = фреквенција =  $c/\lambda$  [Hz]



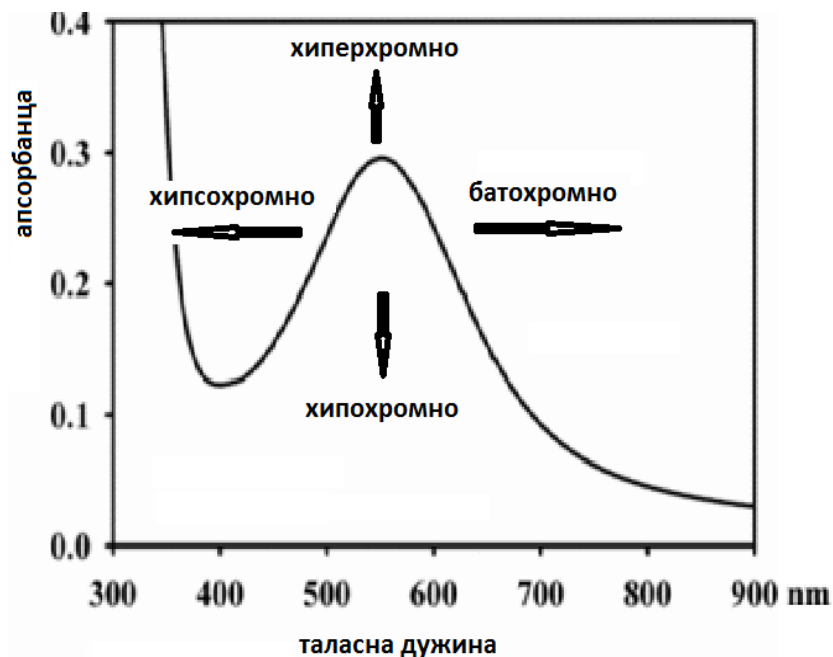
- **ХРОМОФОРЕ** – незасићене групе које апсорбују у UV/VIS области: двострука и трострука веза ( $C=C$ ,  $C=O$ ,  $C=N$ ,  $N=O$ ,  $N=N$ , нитрили,  $S=O$ ,  $C=S$ ) као и слободни електронски парови на атомима.
- Пример хромофорног система:  $Ar-N=N-Ar$

ХРОМОФОРЕ	ПРИМЕР	ПРЕЛАЗ
$C=C$	ЕТЕН	$\pi \rightarrow \pi^*$
$C=O$	ЕТАНАЛ	$n \rightarrow \pi^*$ $\pi \rightarrow \pi^*$
$N=O$	НИТРОМЕТАН	$n \rightarrow \pi^*$ $\pi \rightarrow \pi^*$
$C-X$ , $X=Br$ и $Cl$	МЕТИЛБРОМИД МЕТИЛЈОДИД	$n \rightarrow \sigma^*$

прелаз код C=C групе



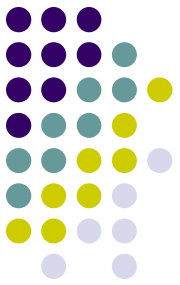
ПОМЕРАЊЕ  $\lambda_{\max}$



Померања апсорпционих максимума у UV спектру



# ИНТЕНЗИТЕТ АПСОРПЦИЈЕ



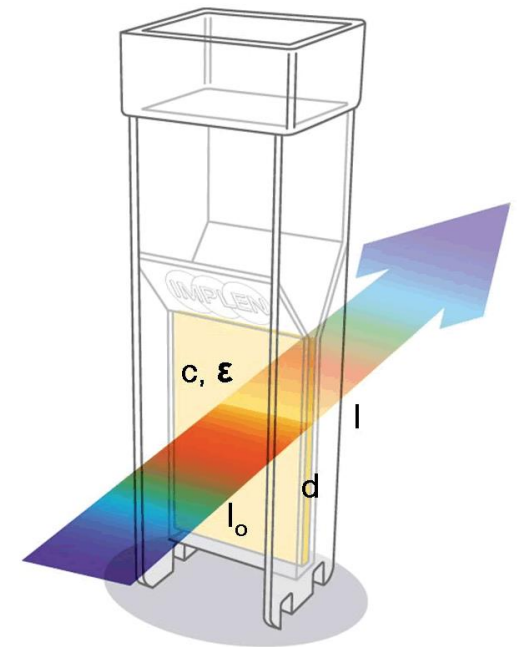
$$A = \epsilon c d \quad \text{Lambert-Beer-ов закон}$$

$A$  = апсорбанција

$c$  = концентрација ( $\text{mol/dm}^3$ )

$\epsilon$  = моларни екстинкциони коефицијент

$d$  = дужина путање зрака кроз узорак (cm)



IMPLEN DiluCell™

**UV Сунчеви зраци који доспевају на површину земље  
после проласка кроз атмосферу састављени су од:**

**98% UV-A**

**2% UV-B**

**UV-C (Занемарљиво)**

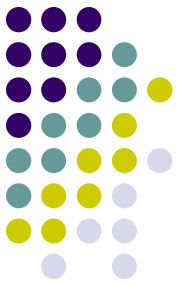


позитивно дејство UV зрака - подстичу стварање D витамина у човековој кожи, (за правилно формирање костију код деце), али и код старијих особа може ублажити болести као што су остеопороза (недостатак калцијума у костима).

**Према биолошком дејству UV зрачење се дели на:**

- UVC област од 180 до 290 nm
- UVB област од 290 до 320 nm
- UVA област од 320 до 400 nm

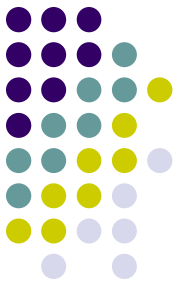




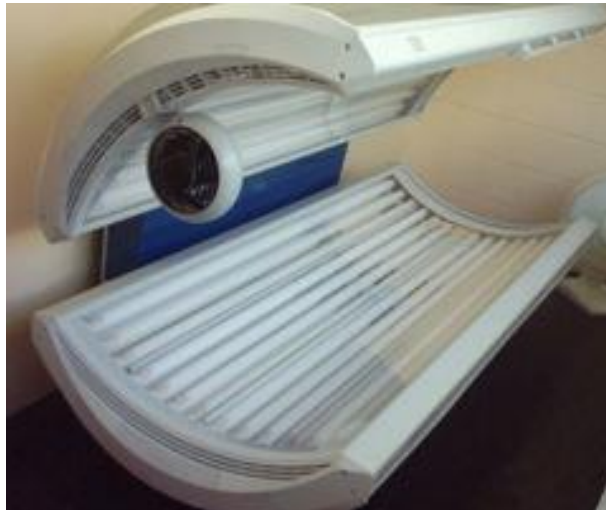
**препарати за заштиту од Сунчевог зрачења.**

У састав ових препарата улазе **физички или хемијски филтри** који имају способност апсорпције штетних UV зрака .

**-Орална средства заштите од UV зрачења су препарати који делују на организам „изнутра”. Ови препарати нису показали задовољавајуће заштитне ефекте.**



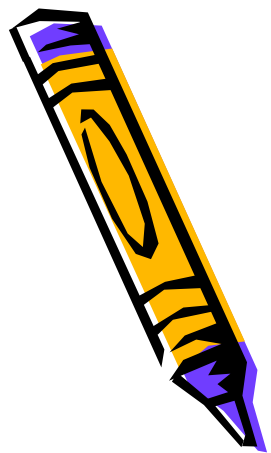
-У ту сврху користе се препарати на бази комбинација витамина Е, витамина С, минерала као што су  $S_e$ ,  $Z_n$ ,  $C_u$ ,  $F_e$ ,  $\beta$ -каротен и други.



Соларијум углавном користи UVa зраке

Лосиони за сунчање користе се за заштиту коже од потенцијално канцерогеног ултраљубичастог зрачења високе енергије.

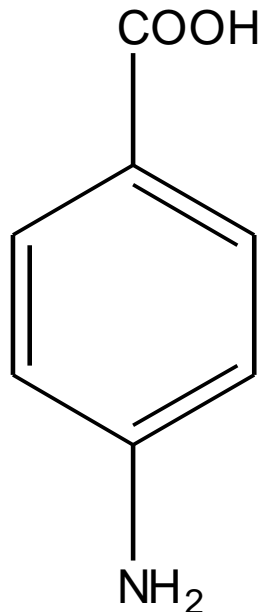
Садрже супстанце , као што је РАВА које апсорбују светлост у овој области електромагнетног спектра.





**p-аминобензойева киселина** (РАВА) има  $\lambda_{\max} = 289 \text{ nm}$  и додаје се лосионима за сунчање у којима служи као филтер за заустављање опасних сунчевих UV зрака.

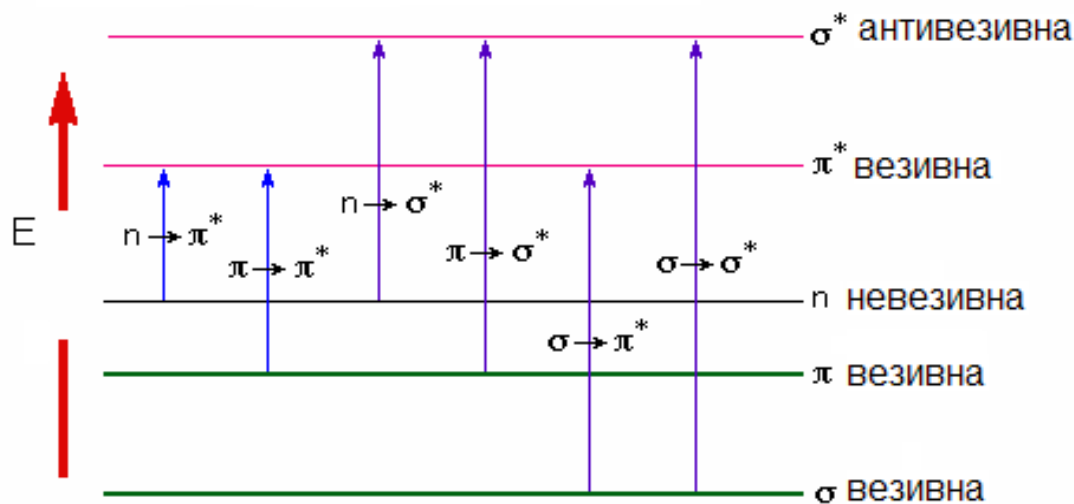
Ова супстанца међутим код неких особа изазива алергију па је у многим лосионим замењена другим супстанцама и на њима пише лосион “без РАВА”



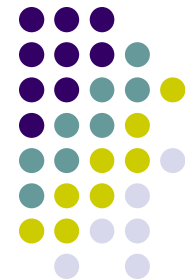


# ЕЛЕКТРОНСКИ ПРЕЛАЗИ

$\sigma \rightarrow \sigma^*$  прелаз - прати га велика Е. Јавља се код С-С и С-Н група.



**МЕТАН** (који има само С-Н и С-С везе, може имати само  $\sigma \rightarrow \sigma^*$  прелазе) показује апсорпциони максимум на 125 nm. Ови апс. максимуми нису видљиви у типичном UV-VIS спектру (200 - 800 nm).



## $n \rightarrow \sigma^*$ прелаз

Јавља се код засићених једињења која садрже атоме са слободним е. паровима (невезивни е.) који су способни за  $n \rightarrow \sigma^*$  прелазе. Овим прелазима је обично потребна мања Е од  $\sigma \rightarrow \sigma^*$  прелаза. Они могу настати помоћу светлости чије су таласне дужине 150 - 250 nm. Пример су C-O, C-N, C-S групе.

## $n \rightarrow \pi^*$ и $\pi \rightarrow \pi^*$ прелази

Апсорпциони максимуми се налазе у области 200 - 700 nm. Потичу од незасићених група као што су C=C и ( $\pi \rightarrow \pi^*$ ), C=O, NO<sub>2</sub>, C=S ( $n \rightarrow \pi^*$  и  $\pi \rightarrow \pi^*$ )

Моларна апсорптивност за  $n \rightarrow \pi^*$  прелазе је релативно мала, од 10 до 100 l mol<sup>-1</sup> cm<sup>-1</sup>, док  $\pi \rightarrow \pi^*$  прелази нормално дају  $\epsilon$  од 1000 до 10,000 l mol<sup>-1</sup> cm<sup>-1</sup>.

**АУКСОХРОМЕ** – групе са слободним електронским паром  
-OH, -OR, -NH<sub>2</sub>, Cl, -SH ...

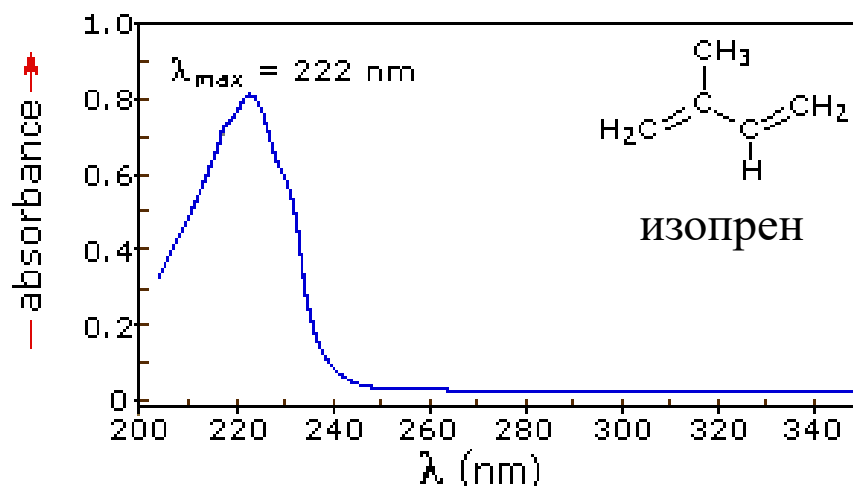
- доводе до батохромног померања



## КОЊУГОВАНЕ ХРОМОФОРЕ

$[-C=C-C=C-]_n$  (продужавањем хромофоре настају нове особине,  
различите у односу на C=C)

- доводе до **батохромног и хиперхромног**  
померања, а некада и до повећања броја  
апсорпционих максимума

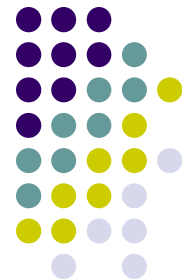




← **ЕНОНИ**









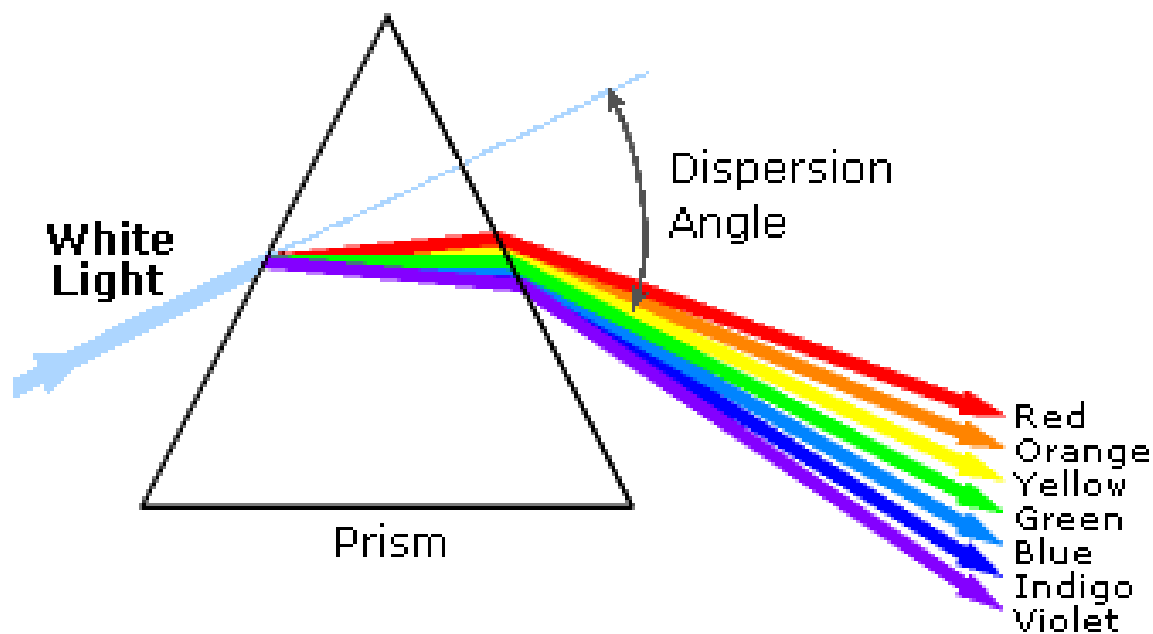
**СПЕКТРИ ОБОЈЕНИХ ЈЕДИЊЕЊА**



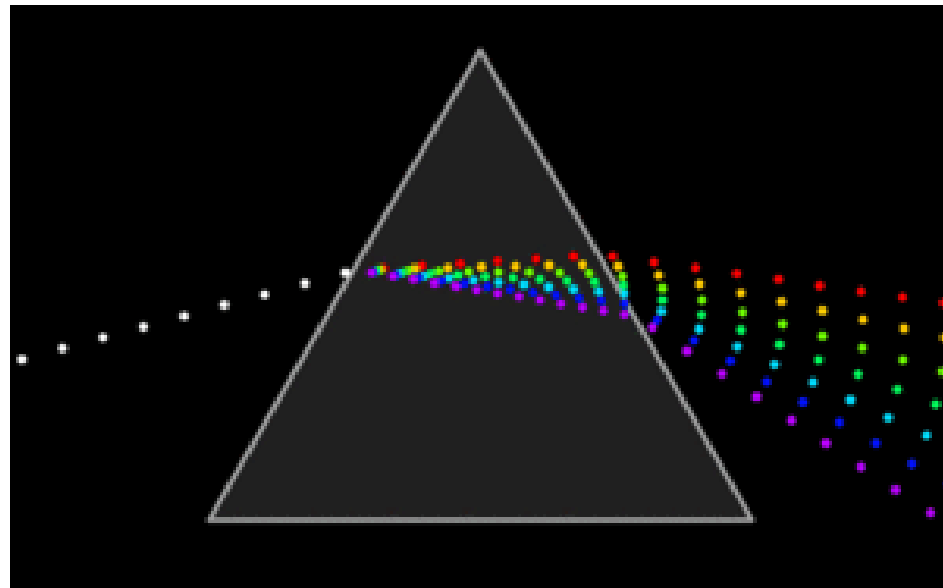
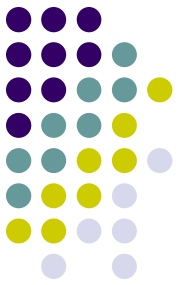


Оузоуд водопад, Мароко 2015.

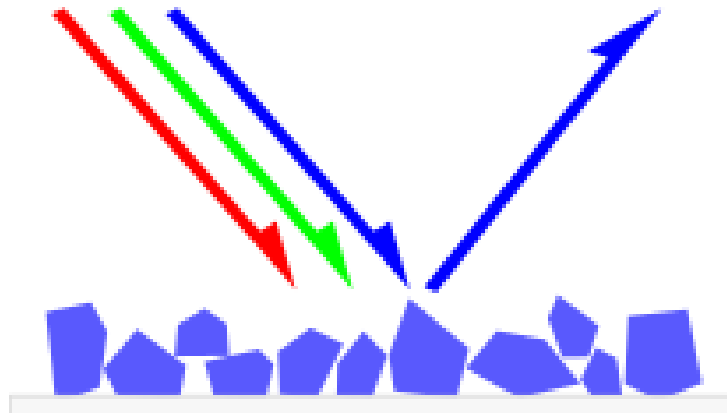
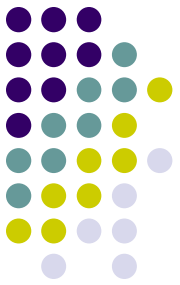
снимио: Недељко Манојловић

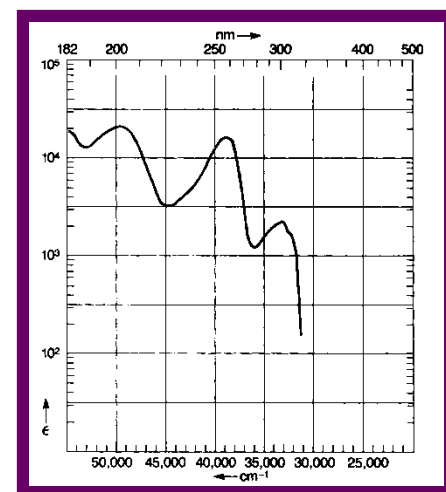
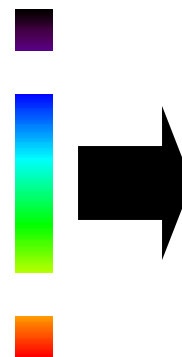
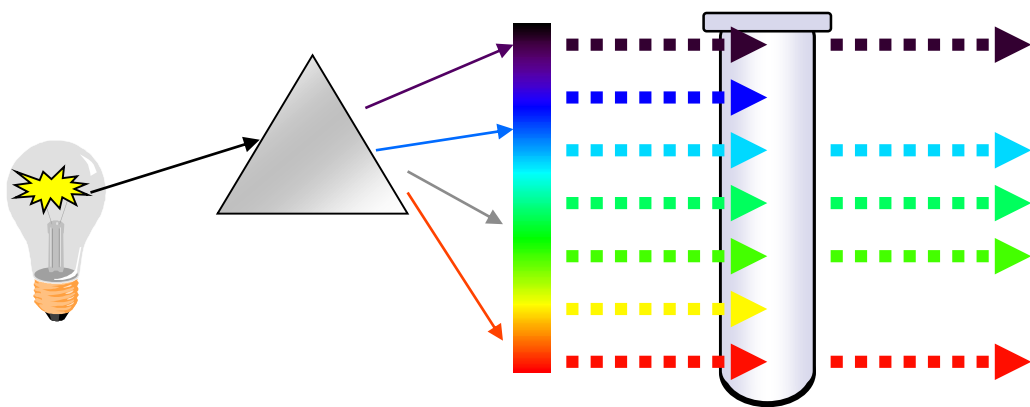


<b>Љубичаста:</b>	400 - 420 nm
<b>Индиго:</b>	420 - 440 nm
<b>Плава</b>	440 - 490 nm
<b>Зелена:</b>	490 - 570 nm
<b>Жута:</b>	570 - 585 nm
<b>Оранж:</b>	585 - 620 nm
<b>Црвена:</b>	620 - 780 nm



- Способност људи да може уочити хиљаде нијанси боја у вези је са способношћу молекула да апсорбује различите фреквенције видљиве светлости, односно у вези је са коњугацијом молекула.






Nc1ccc2c(c1)c(=O)[nH]c2=C3C(=O)c4ccc(N)cc4[nH]3

Indigo

$$Z = \text{Br}$$

Punicin or Tyrian Purple   
from mollusks of the genus *Murex*

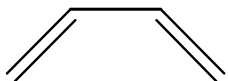




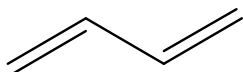
## УТИЦАЈ КОНФОРМАЦИЈЕ НА $\lambda_{\max}$



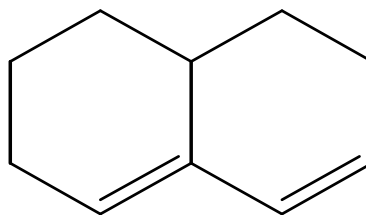
- код 1,3-диена могуће су цисоидне и трансоидне конформације
- цисоидни облик апсорбује на већој таласној дужини и има мању моларну апсорптивност



цисоидна

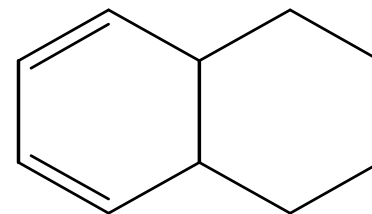


трансоидна



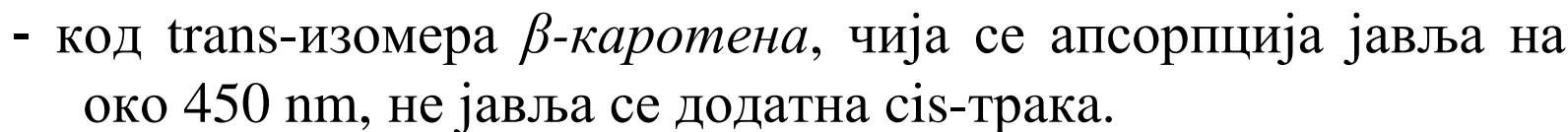
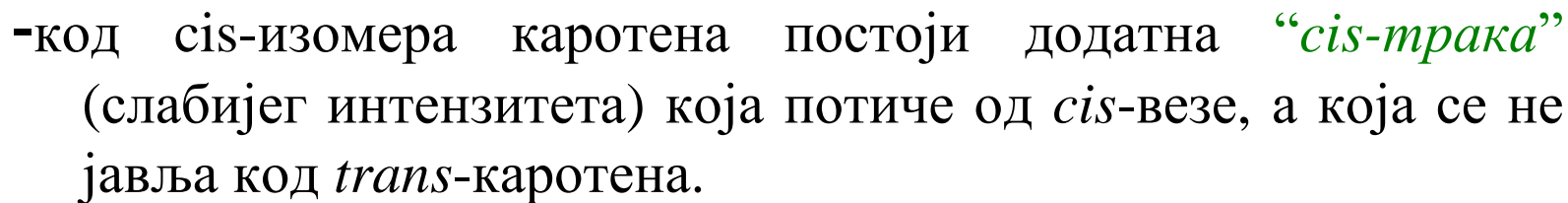
хетероануларни диен

$$\lambda_{\max} = 234 \text{ nm}$$
$$\varepsilon = 8000-20000$$

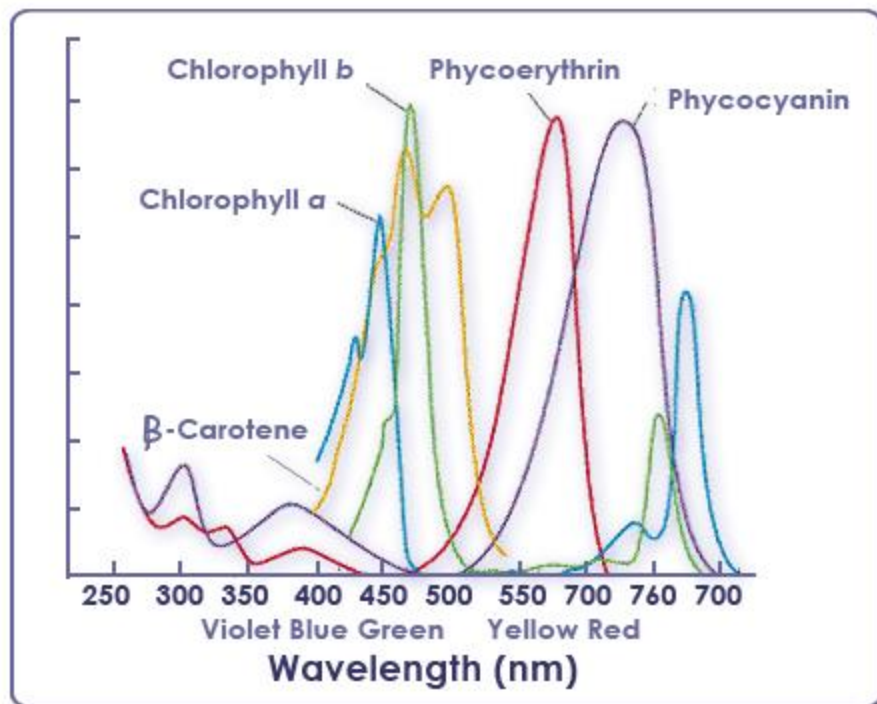


хомоануларни диен

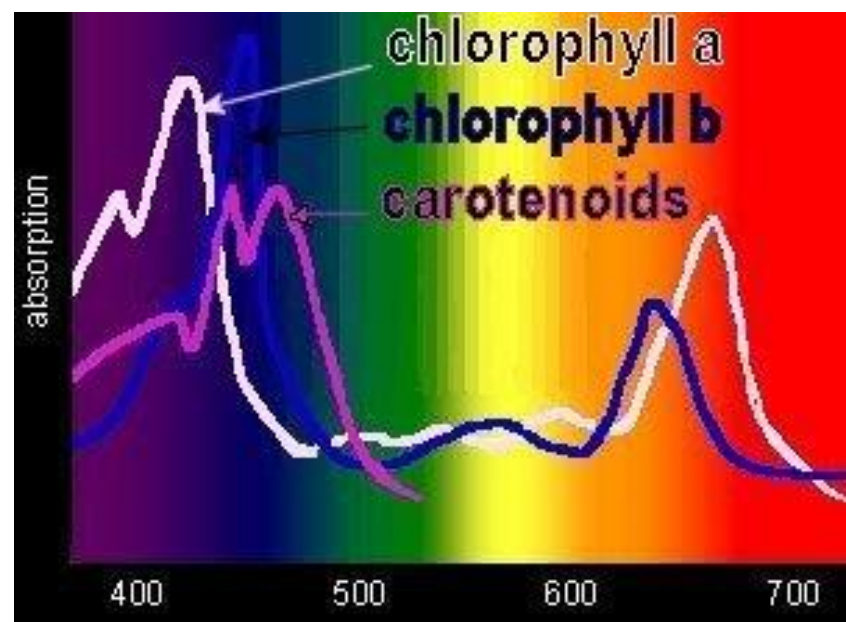
$$\lambda_{\max} = 273 \text{ nm}$$
$$\varepsilon = 5000-8000$$

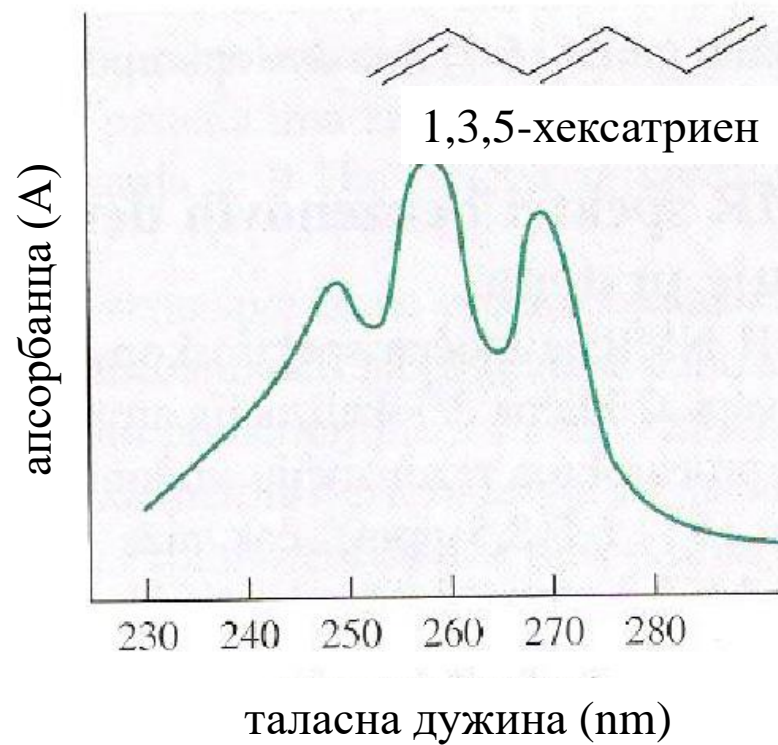
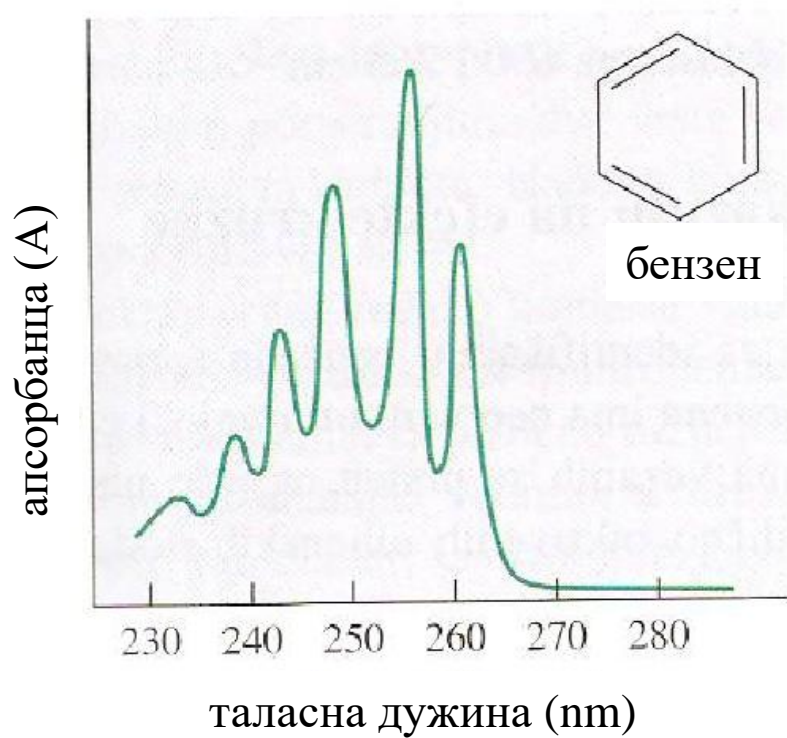


**Прочена  $\lambda_{\max}$ :** Woodward-Fieser-ова правила за диене и еноне  
и Fieser-Kuhn-ова правила за полиене



Колориметријско одређивање









Које таласне дужине су највише рефлектоване на следећој слици?  
Одговор: 490 - 570 nm