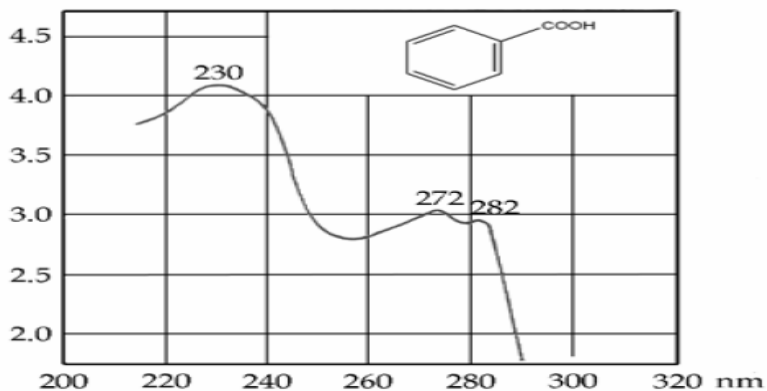
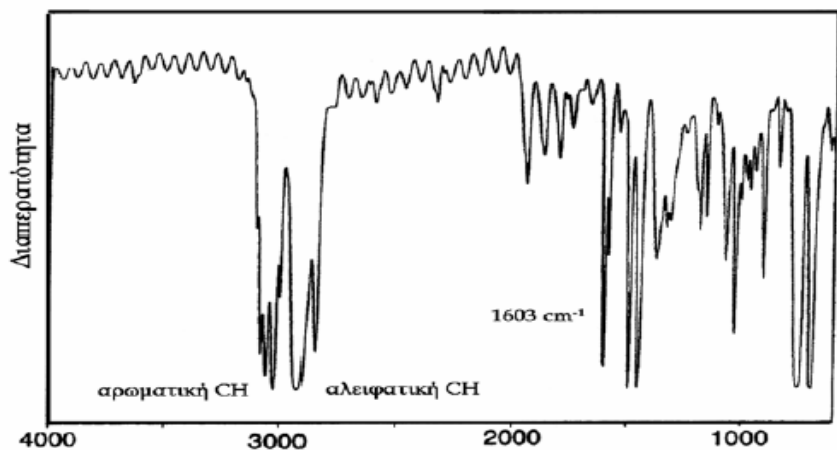


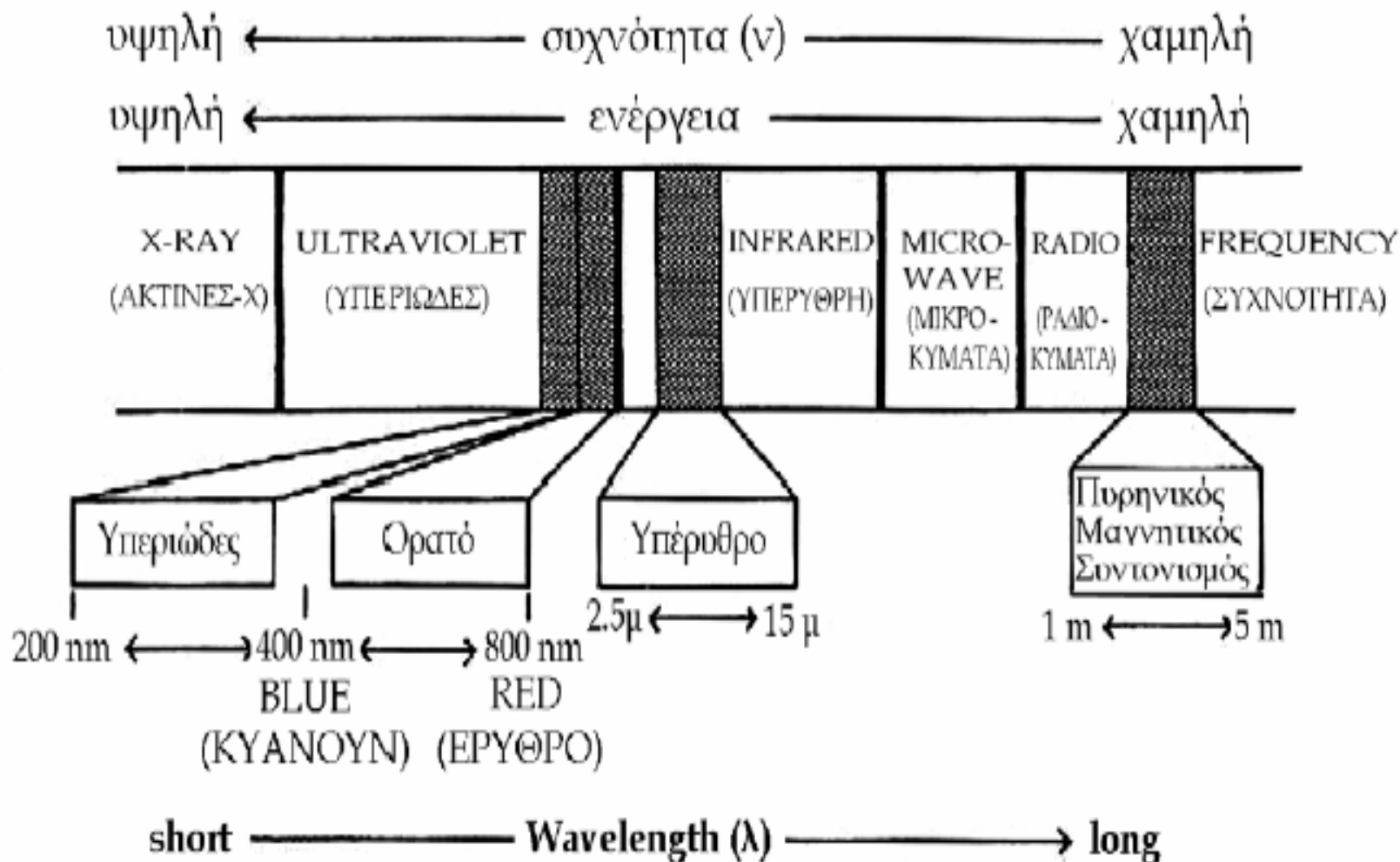
ΟΠΤΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ

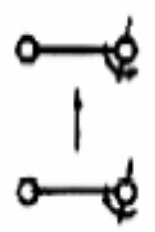





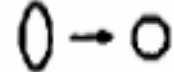


ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ

- Σύνολο τεχνικών με τις οποίες μετράτε η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία που πηγάζει από την ύλη (άτομα, μόρια ή ιόντα) ή αλληλεπιδρά με αυτήν.
- Απορρόφηση ακτινοβολίας έχουμε όταν μεταφέρεται ενέργεια (κβάντα) από τη δέσμη ακτινοβολίας στο δείγμα (άτομο ή μόριο).
- Εκπομπή ακτινοβολίας έχουμε όταν αποβάλλεται ενέργεια από το δείγμα που είναι σε διεγερμένη κατάσταση υπό τη μορφή φωτονίων, ώστε να επιστρέψει στη θεμελιώδη κατάσταση ή σε χαμηλότερης στάθμης ενέργεια.

ΠΕΡΙΟΧΕΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΟΥ ΦΑΣΜΑΤΟΣ



αλλαγές στο spin του πυρήνα	αλλαγή στην κατεύθυνση του μορίου	αλλαγή στη διαμόρφωση του μορίου	αλλαγή στην κατανομή των ηλεκτρονίων	αλλαγή στην πυρηνική διαμόρφωση		
NMR	EPR	ΜΙΚΡΟΚΥΜΑΤΑ	ΥΠΕΡΥΘΡΗ	UV-VIS	ΑΚΤΙΝΕΣ-Χ	ΑΚΤΙΝΕΣ-γ
						
10^{-2}	1	100	10^4	10^6	10^8	
	cm^{-1}	wavenumber				
10 m	100 cm	1 cm	100 μm	1 μm	10 nm	100 ppm
	wavelength					
3×10^6	3×10^8	3×10^{10}	3×10^{12}	3×10^{14}	3×10^{16}	3×10^{18}
	Hz	frequency				
10^{-3}	10^{-1}	10	10^3	10^5	10^7	10^9
	joules/mol	energy				

Ακτίνες γ \rightarrow πυρηνικές μεταπτώσεις \rightarrow ανάλυση με νετρονική ενεργοποίηση

Ακτίνες X \rightarrow μεταπτώσεις e εσωτερικών στιβάδων \rightarrow φθορισμομετρία με ακτίνες X

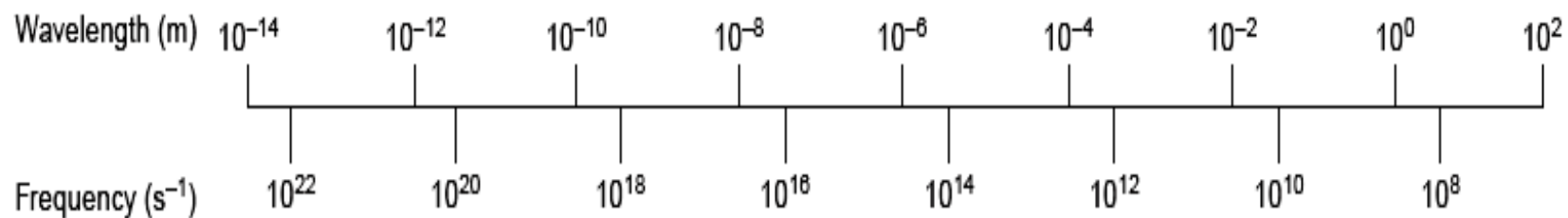
UV - Vis \rightarrow μεταπτώσεις e εξωτερικών στιβάδων \rightarrow φασματοσκοπία υπεριώδους, ορατού, Raman, φθορισμομετρία

εγγύς IR \rightarrow μοριακές δονήσεις,

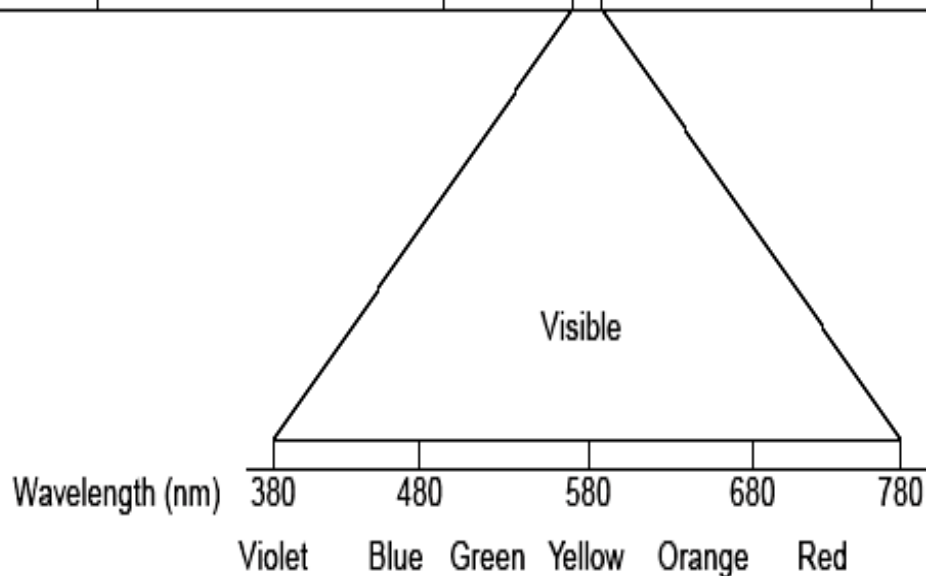
άπω IR \rightarrow μοριακές περιστροφές \rightarrow φασματοσκοπία υπερύθρου

Μικροκύματα \rightarrow μοριακές περιστροφές, μεταπτώσεις spin e \rightarrow φασματοσκοπία ηλεκτρονικού παραμαγνητικού συντονισμού (ESR)

Ραδιοκύματα \rightarrow μεταπτώσεις spin πυρήνων \rightarrow φασματοσκοπία πυρηνικού παραμαγνητικού συντονισμού (NMR).



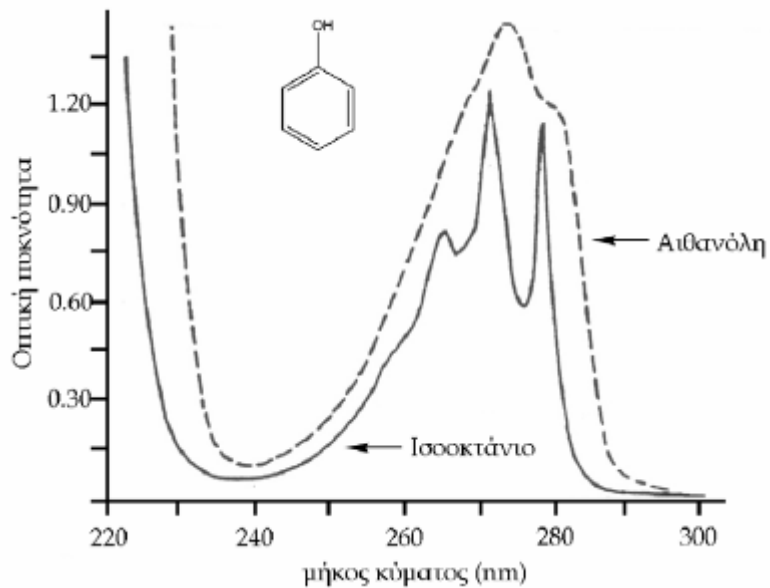
Type of transition	Nuclear	Core-level electrons	Valence electrons	Molecular vibrations	Molecular rotations; electron spin	Nuclear spin
Spectral region	γ -ray	X-ray	UV	IR	Microwave	Radio wave



ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ

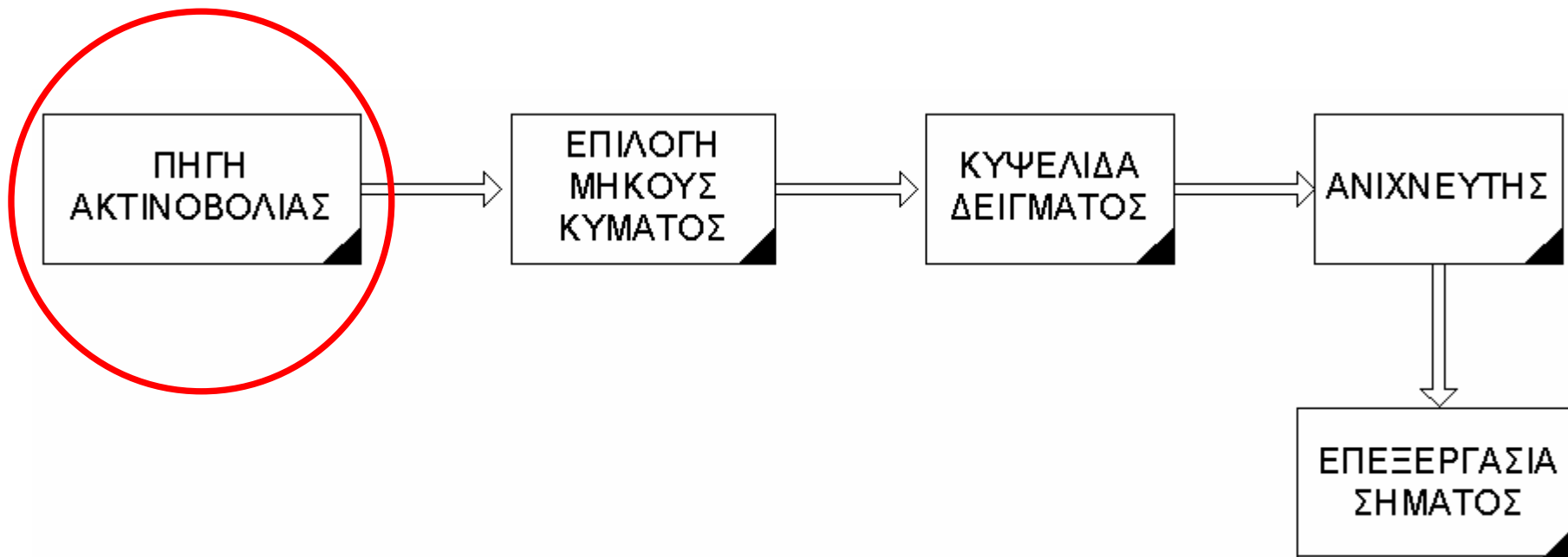
- ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ
- - Μεγάλη ευαισθησία
- - Εκλεκτικότητα
- - Ταχύτητα – απλότητα
- - Εύκολη αυτοματοποίηση
- - Μη καταστροφή δείγματος (μοριακή φασματοσκοπία)

ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ ΦΑΣΜΑΤΟΦΩΤΟΜΕΤΡΙΑ ΟΡΑΤΟΥ – ΥΠΕΡΙΩΔΟΥΣ (VIS-UV)



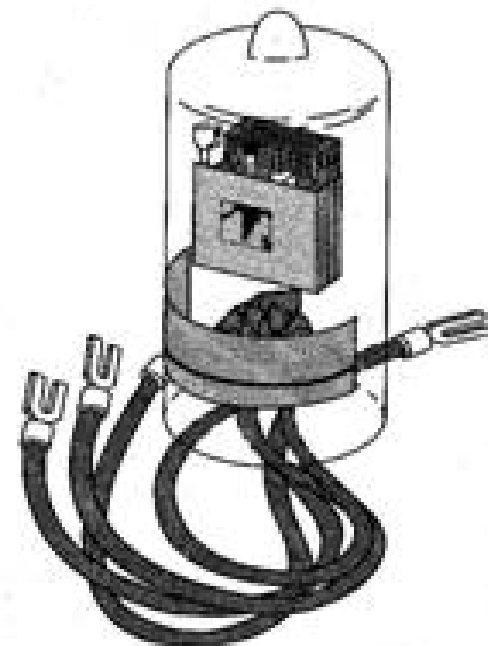
ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ UV/VIS

- Αναφέρεται στην απορρόφηση **μονοχρωματικής** ακτινοβολίας από το δείγμα στην περιοχή **UV** (190 - 400nm) και την **ορατή περιοχή-Vis** (400 – 780nm) (για 10^{-8} s).



ΛΥΧΝΙΕΣ- UV

Λυχνία εκκενώσεως **Υδρογόνου** (ή **Δευτερίου**) με περίβλημα χαλαζία ή υάλινο με παράθυρο χαλαζία. Εκπέμπει συνεχή (160-340nm) και γραμμική ακτινοβολία.

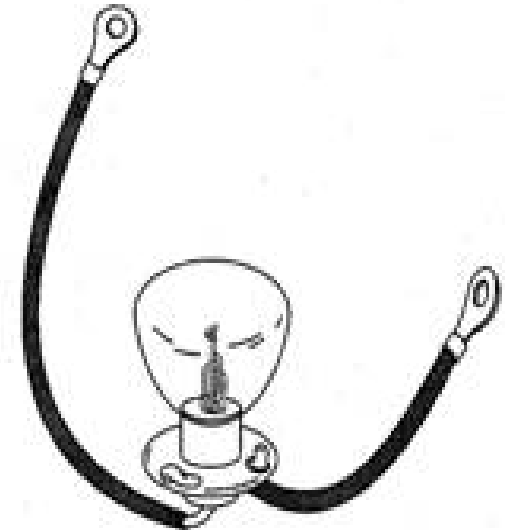


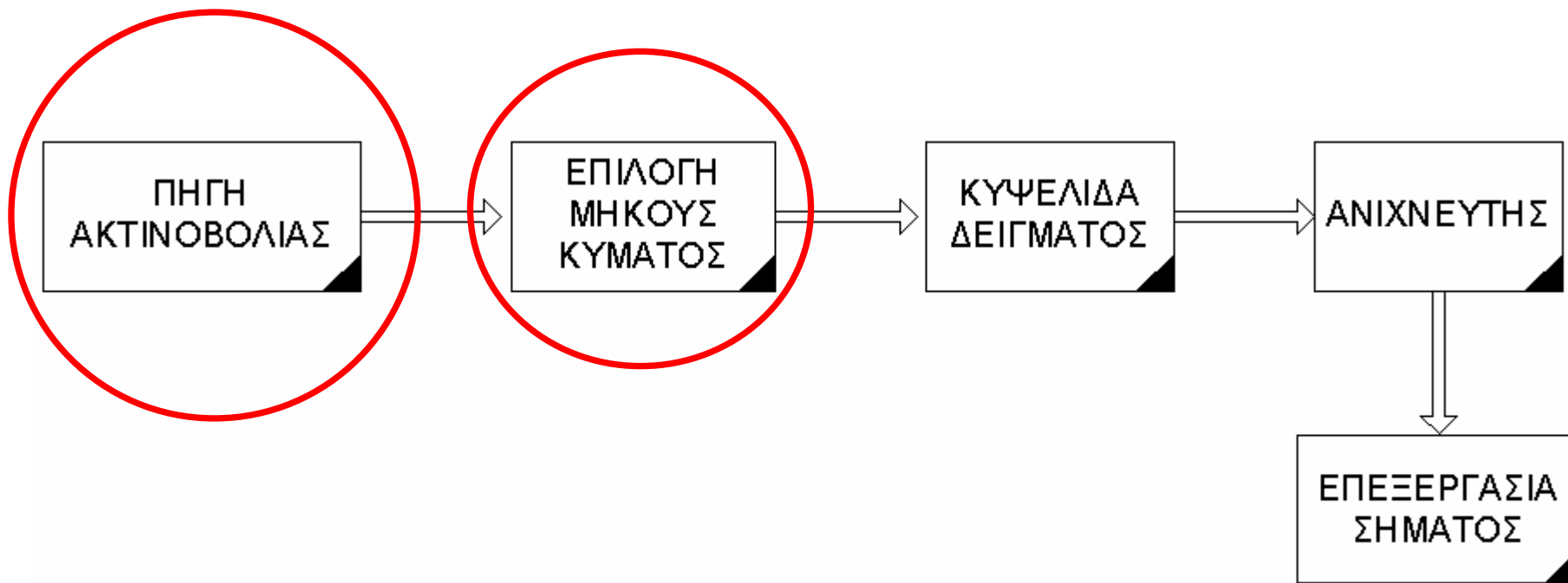
Λυχνία **Ξένου** (υψηλής πίεσης 10 atm) και είναι ισχυρότερη-Εκπέμπει συνεχή (200-1000nm).

ΛΥΧΝΙΕΣ- Ορατού

Λυχνία **ξένου** (200–1000 nm)

Λυχνία **βολφραμίου** (320–2400 nm)
σε υάλινο υπό κενό περίβλημα με
μικρή ποσότητα Ιωδίου.





ΕΠΙΛΟΓΗ ΜΗΚΟΥΣ ΚΥΜΑΤΟΣ

■ **Φίλτρα:** υάλινα πλακίδια τα οποία εμπεριέχουν έγχρωμες ουσίες (οξειδία μετάλλων).

Φωτόμετρο: Όργανο που χρησιμοποιείται για τη μέτρηση της ισχύος της ακτινοβολίας και χρησιμοποιεί φίλτρο για την απομόνωση στενής περιοχής του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος.

■ Μονοχρωμάτορες

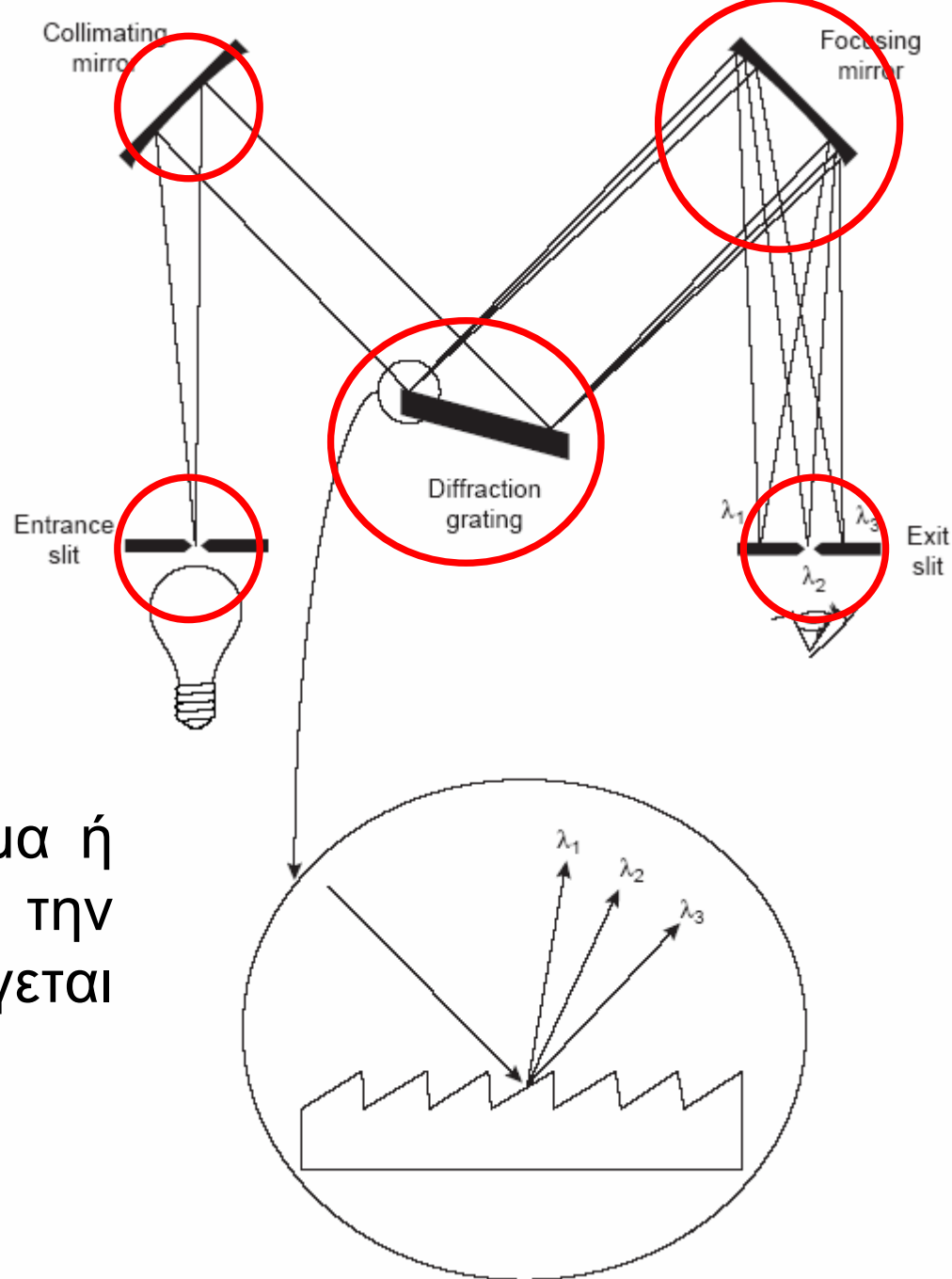
■ Επιλέγεται δέσμη **μονοχρωματικής ακτινοβολίας** (εύρος μέχρι **0.1nm**) σε ευρεία περιοχή μηκών κύματος, με τη δυνατότητα **συνεχούς μεταβολής του μήκους κύματος** (σάρωση).

Φασματοφωτόμετρο: Η απομόνωση της ‘μονοχρωματικής δέσμης’ γίνεται με μονοχρωμάτωρα (πρίσματος ή φράγματος).

- Ορατού (340 – 800nm)
- Υπεριώδους ορατού (190 – 800nm)
- Υπερύθρου (2 – 15μm)

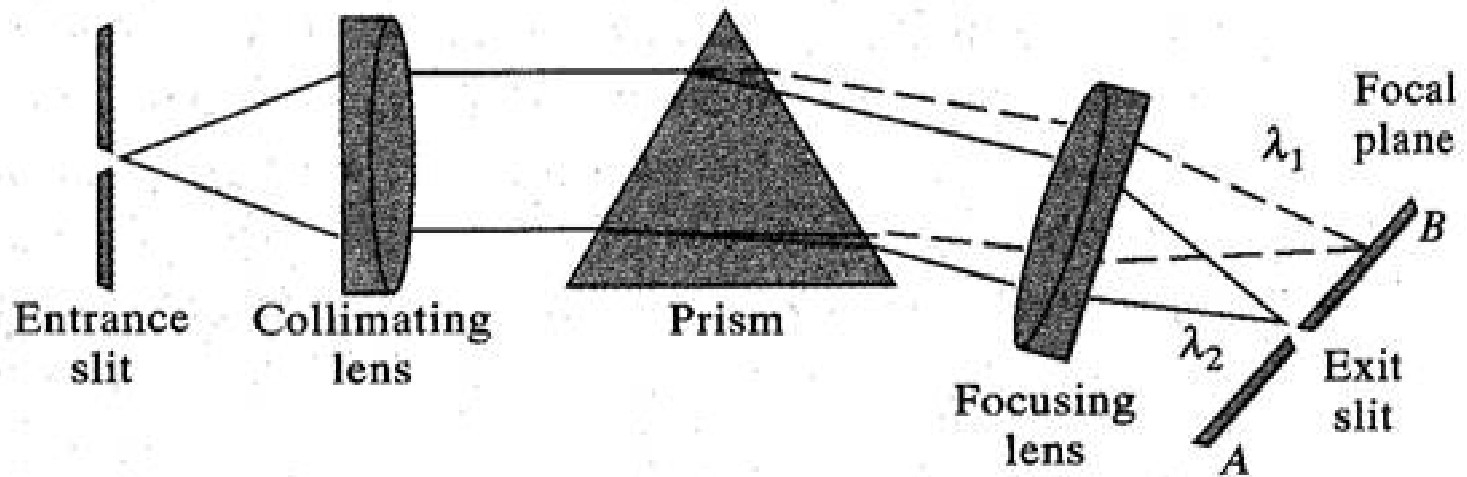
Μονοχρώματα

1. Σχισμή εισόδου που καθορίζει την ισχύ της ακτινοβολίας που εισέρχεται στον μονοχρωμάτορα.
2. Κατευθυντήρα (φακός η κάτοπτρο) με τον οποίο η δέσμη γίνεται παράλληλη.
3. Στοιχείο διασποράς (πρίσμα ή φράγμα περιθλάσεως) με την περιστροφή του οποίου επιλέγεται το επιθυμητό μήκος κύματος.
4. Συγκεντρωτικός φακός.
5. Σχισμή εξόδου.



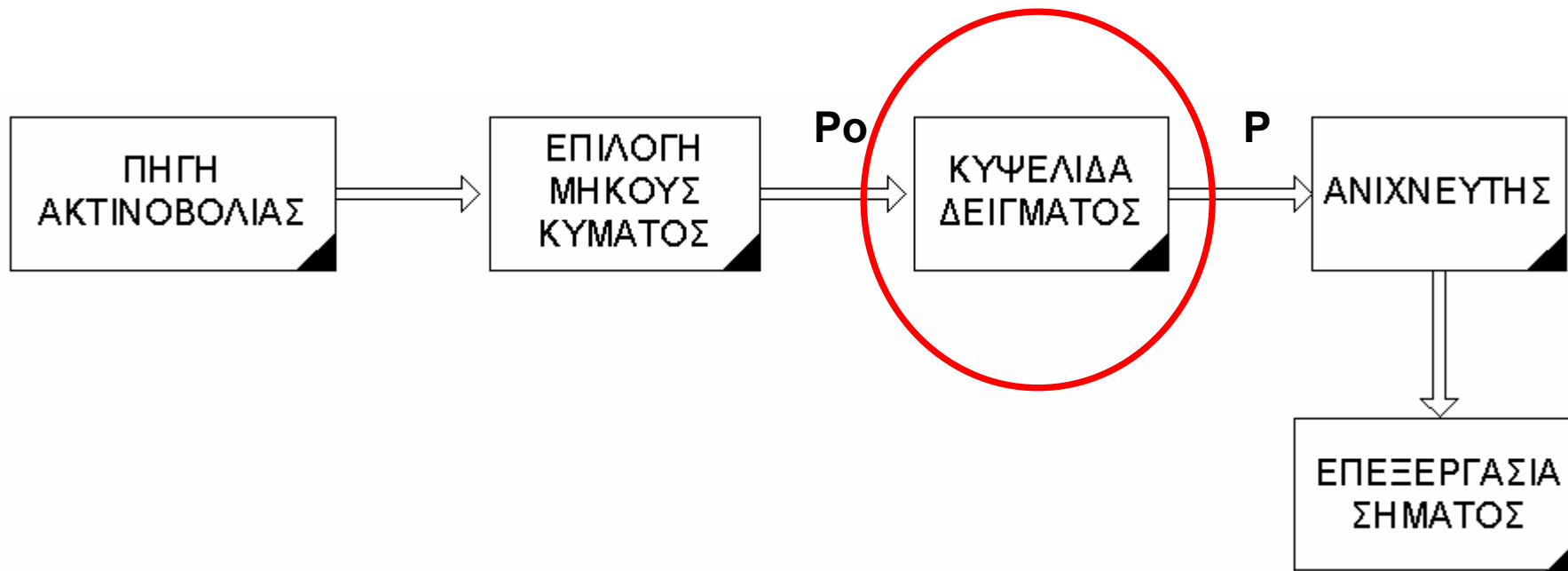
Μονοχρωμάτορες πρίσματος

Το πρίσμα (χαλαζίας, κρυσταλλικό πυρίτιο) αναλύει μια πολυχρωματική ακτινοβολία στα συστατικά της επειδή ο δείκτης διαθλάσεως του n μεταβάλλεται με το μήκος κύματος.



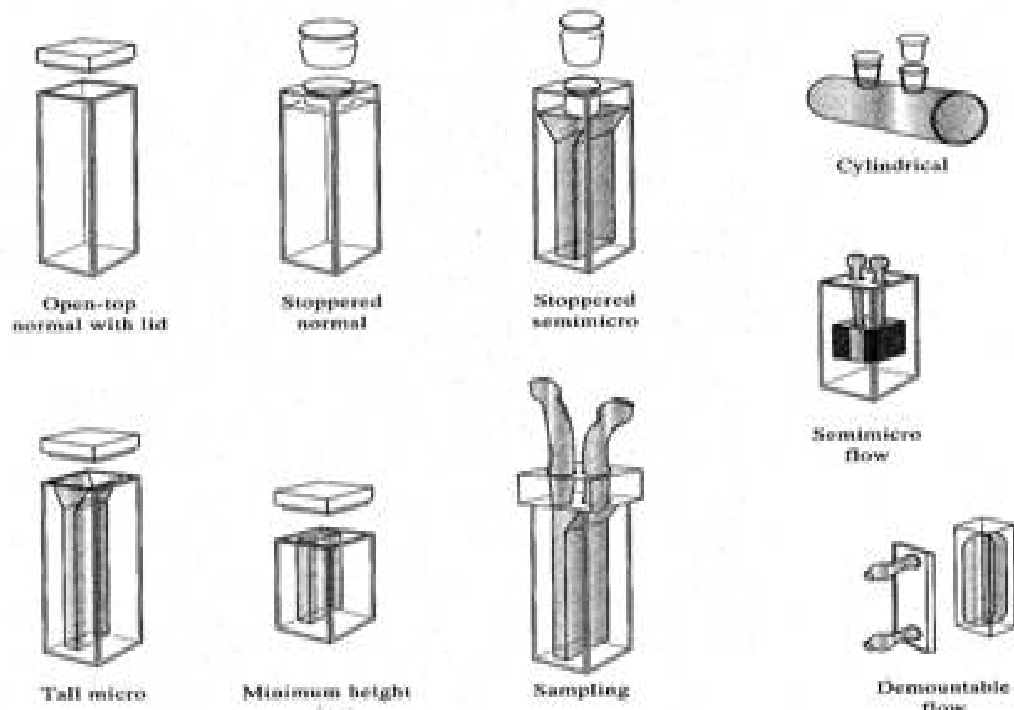
Πλεονεκτήματα Μονοχρωμάτορα Φράγματος

- Είναι φθηνοί
- Σταθερό βαθμό μονοχρωματικότητας.
- Η ισχύς της ακτινοβολίας δεν επηρεάζεται από το υλικό κατασκευής του φράγματος
- Μεγαλύτερη διαχωριστική ικανότητα.



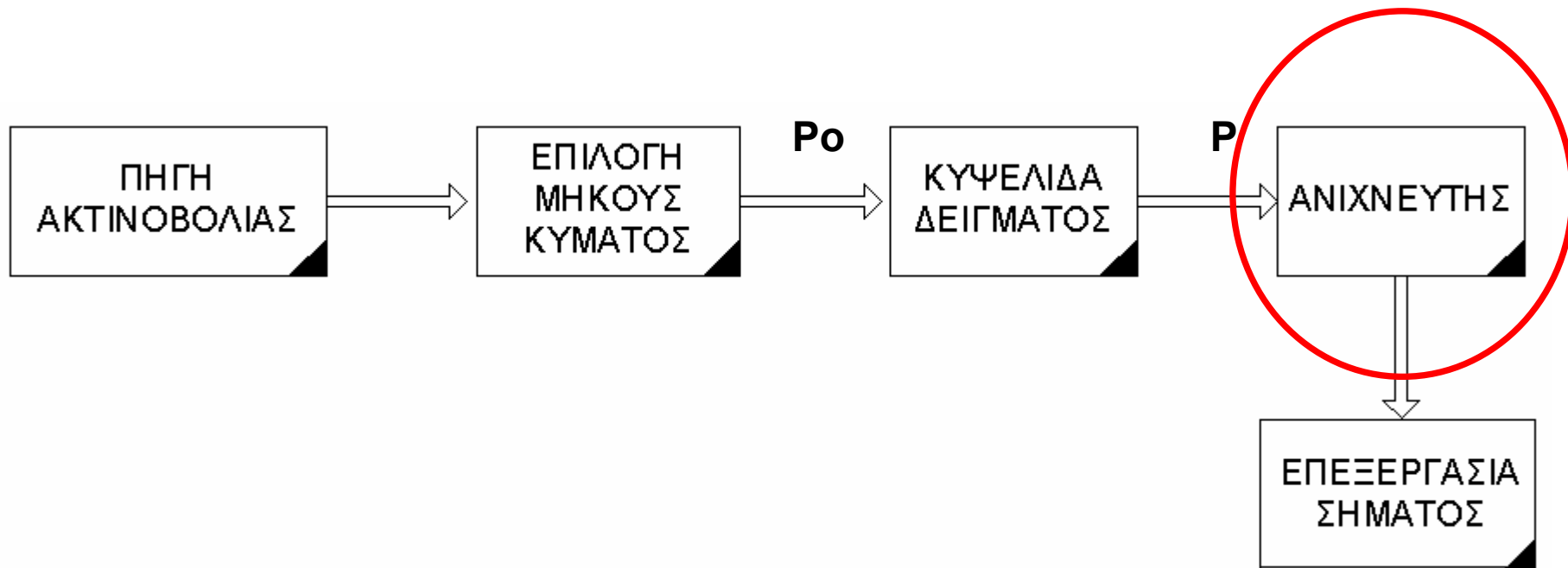
ΚΥΨΕΛΙΔΕΣ

Οι κυψελίδες του δείγματος για το ορατό φάσμα κατασκευάζονται από γυαλί, ενώ για την περιοχή του υπεριώδους, χρησιμοποιούνται κυψελίδες κατασκευασμένες από κρυσταλλικό πυρίτιο (χαλαζία).



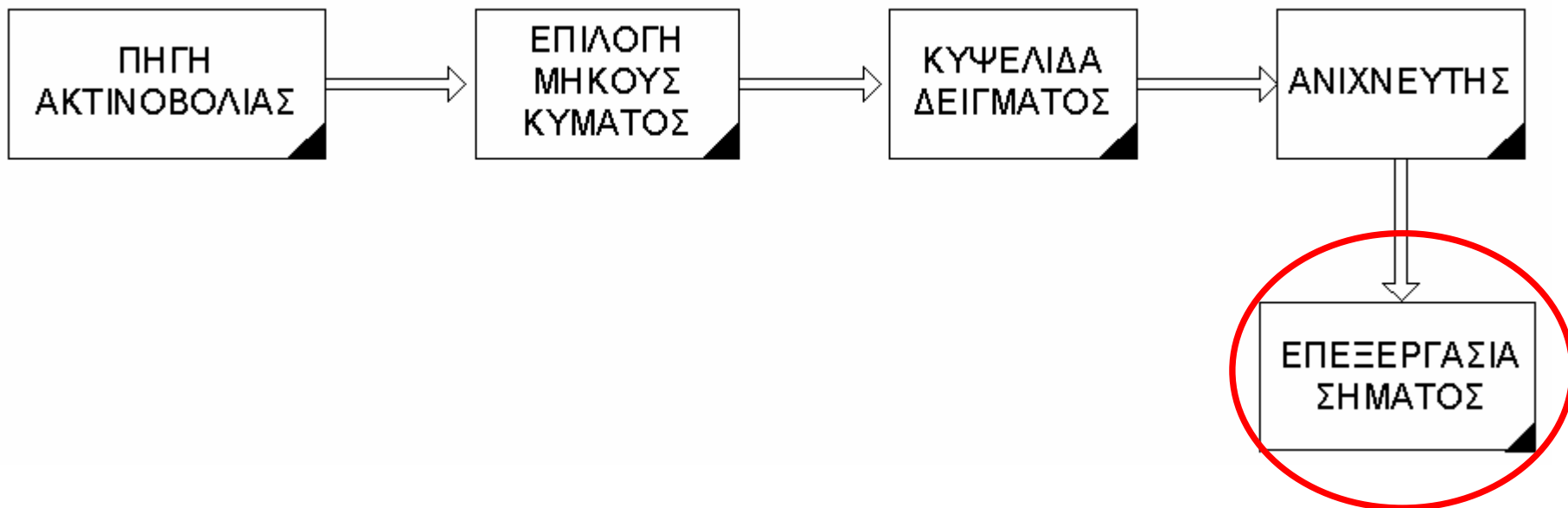
Λόγω της ακριβής τιμής των κυψελίδων αυτών πρέπει να πλένονται τακτικά (απεσταγμένο νερό, ακετόνη, αιθανόλη, διχλωρομεθάνιο) και να διατηρούνται σε στεγνό μέρος (ξηραντήρας με Silica Gel).

- Αναφέρεται στην απορρόφηση **μονοχρωματικής** ακτινοβολίας από το δείγμα στην περιοχή **UV** (190 - 400nm) και την **ορατή περιοχή-Vis** (400 – 780nm) (για 10^{-8} s).

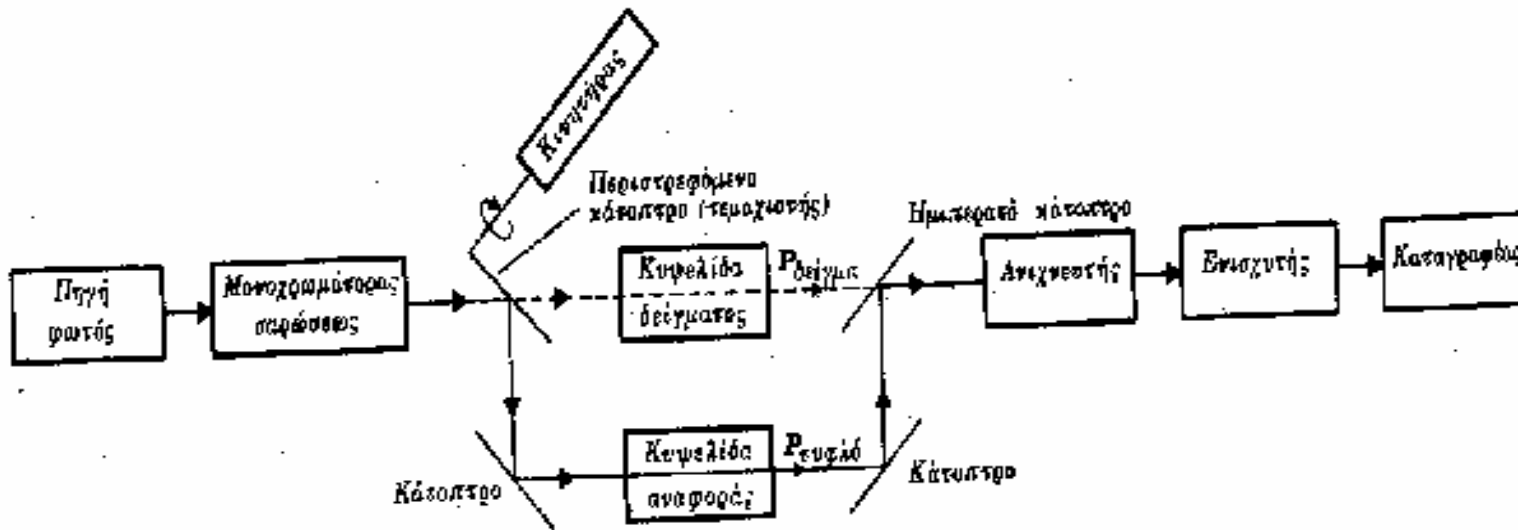
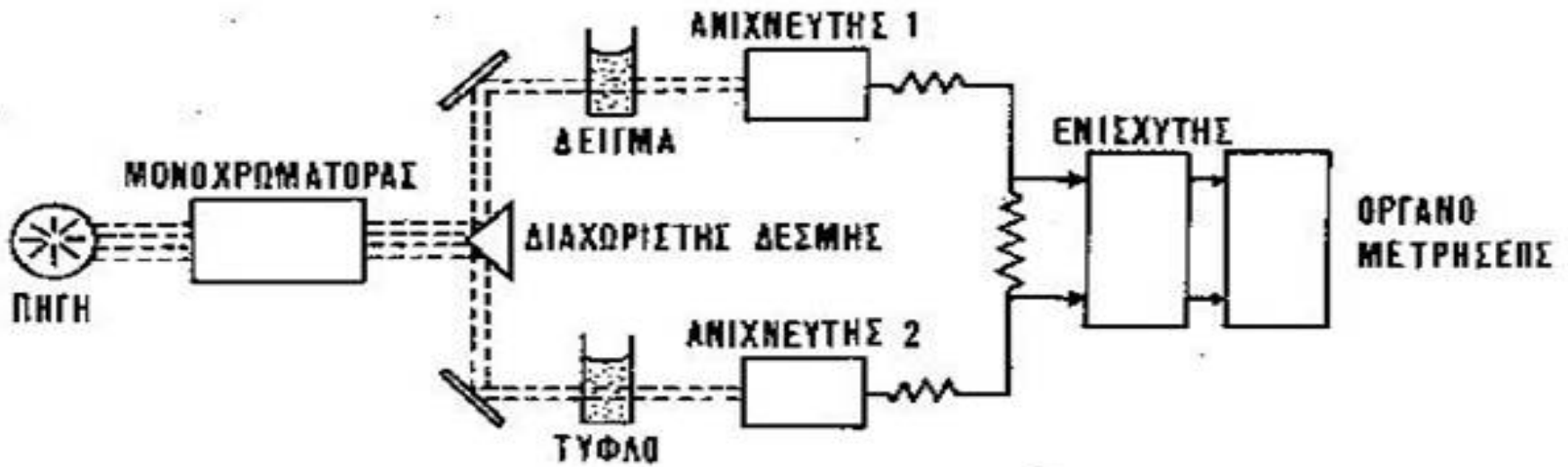


Ανιχνευτές

- Κατάλληλα συστήματα τα οποία μετατρέπουν το σήμα των φωτονίων της ακτινοβολίας σε ηλεκτρικό σήμα
- Συστήματα
- Φωτολυχνίες (phototubes),
Φωτοπολλαπλασιαστές (photomultiplier tybes) και
Φωτοδίοδοι (photodiode arrays)
- Φωτόνια προσκρούουν σε επιφάνειες
κατεργασμένες με ειδικές ενώσεις →
Απελευθέρωση e → ηλεκτρικό ρεύμα.

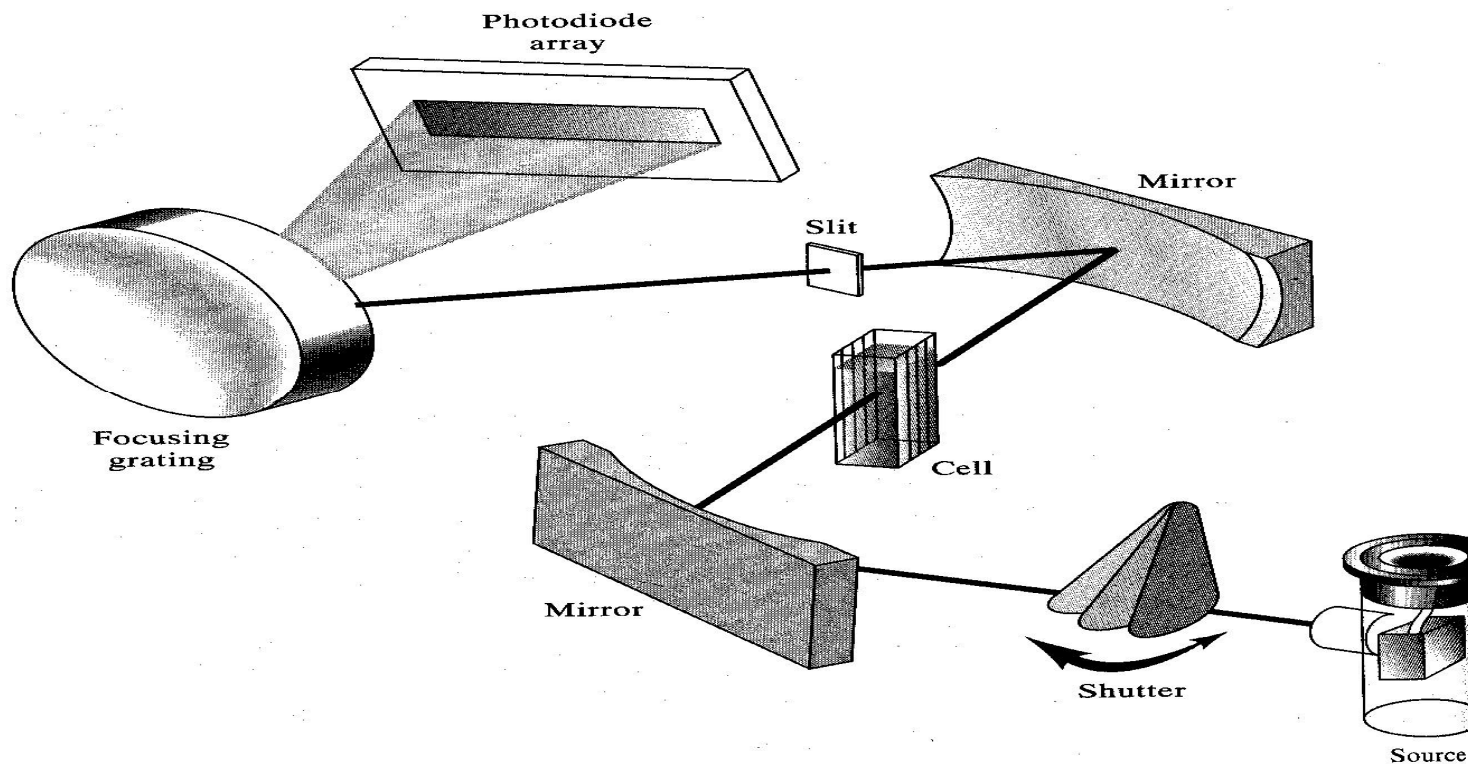


ΕΝΙΣΧΥΤΗΣ ΜΕΤΑΤΡΟΠΗ ΚΑΤΑΓΡΑΦΕΑΣ

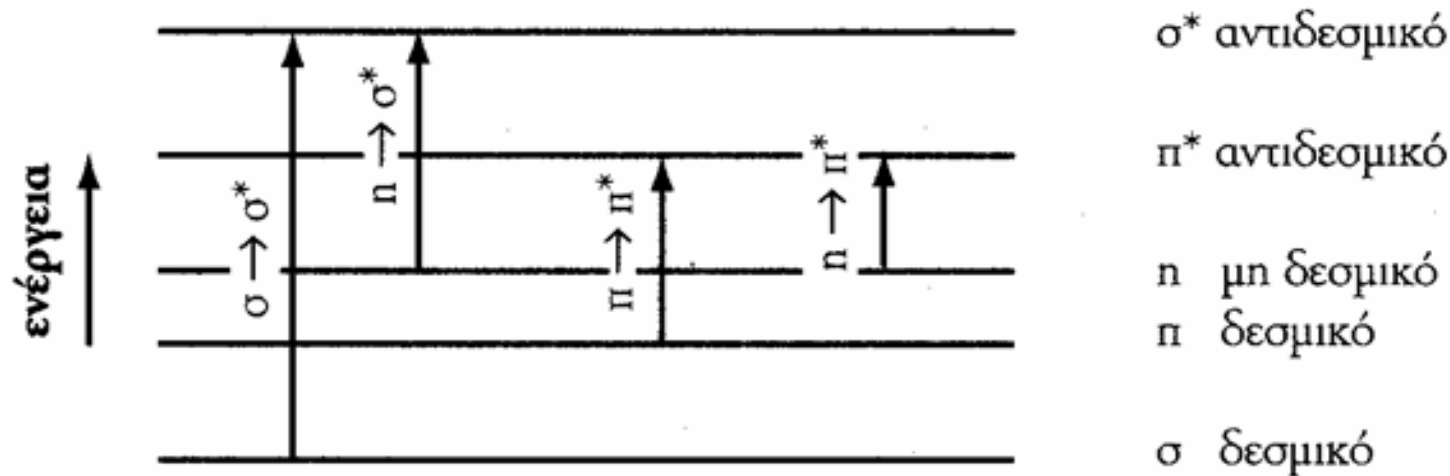


Η μέτρηση γίνεται αφαιρώντας τις δυο μετρήσεις που δίνει ο ανιχνευτής ψηφιακά ή αναλογικά, φιλτράροντας την DC τάση και μετρώντας το πλάτος της εναλλασσόμενης τάσης που παίρνουμε.

- Πρόσφατα χρησιμοποιούνται ως ανιχνευτές φασματοφωτομέτρων οπτικο-ηλεκτρονικές διατάξεις, που αποτελούνται από σειρές φωτοδιόδων και επιτρέπουν τη λήψη **ολοκλήρου** του φάσματος σε **κάθε χρονική στιγμή** (στα κλασικά φασματοφωτόμετρα κάθε χρονική στιγμή παρακολουθείται **ένα** μήκος κύματος).

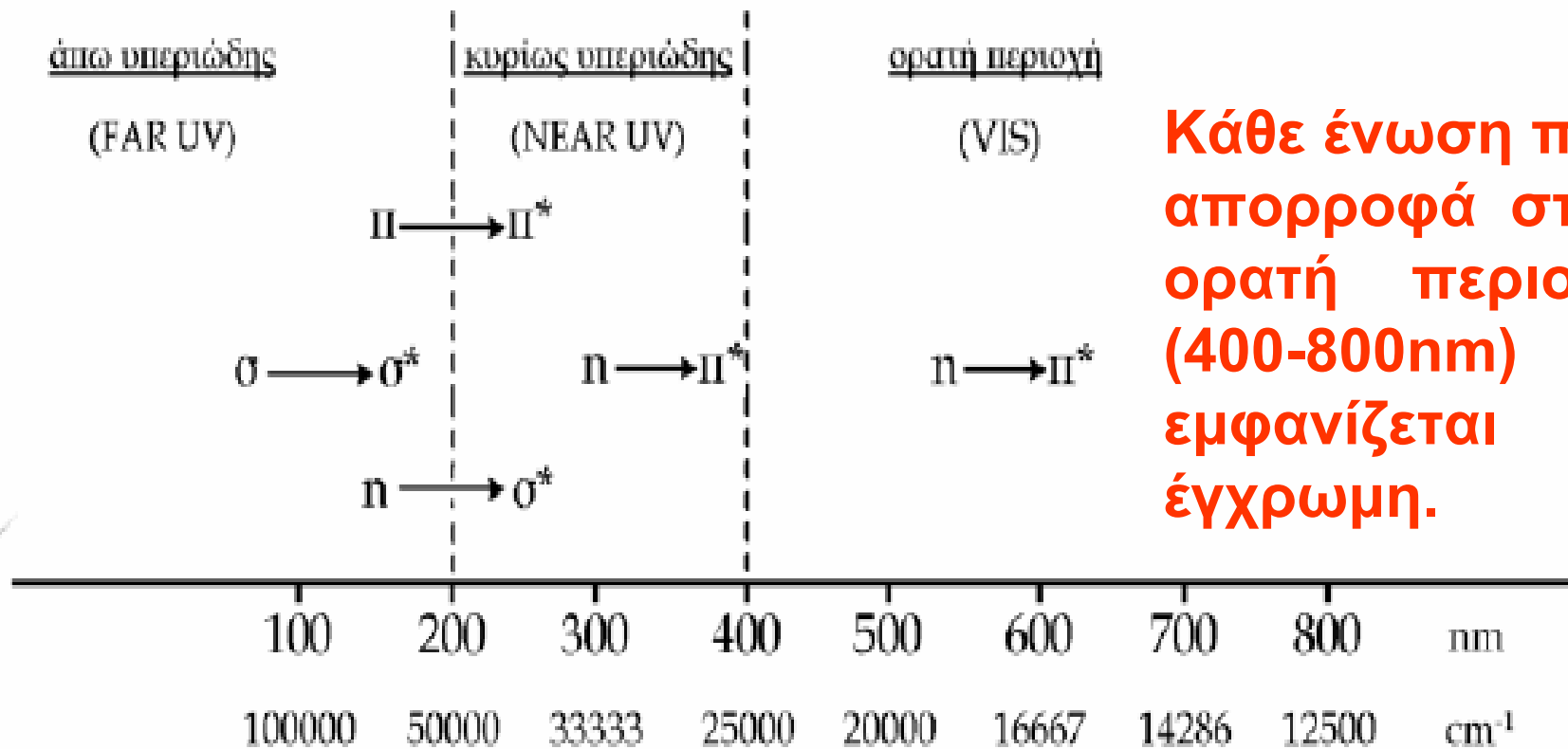


- Με την απορρόφηση υπεριώδους και ορατής ακτινοβολίας προκύπτουν ηλεκτρονιακές μεταπτώσεις των e της στιβάδας σθένους.



Παραδείγματα ηλεκτρονιακών μεταπτώσεων που προκαλούνται με υπεριώδη ακτινοβολία.

- Για την πλειοψηφία των οργανικών μορίων τα ηλεκτρόνια κατατάσσονται σε 3 κατηγορίες:
- τα **σ-ηλεκτρόνια**
- τα **π-ηλεκτρόνια** και τα
- **n-ηλεκτρόνια** ή μη δεσμικά (non bonding)



Κάθε ένωση που απορροφά στην ορατή περιοχή (400-800nm) εμφανίζεται έγχρωμη.

Η ποσότητα ενέργειας που απαιτείται για τη διέγερση των ηλεκτρονίων ανταποκρίνεται στην εμφάνιση απορροφήσεων στην περιοχή UV και VIS. Έτσι η μετάβαση $\sigma \rightarrow \sigma^*$ απαιτεί ενέργεια της οποίας το μήκος κύματος πέφτει στην άπω υπεριώδη περιοχή, οι μεταβάσεις $\pi \rightarrow \pi^*$ και $\pi \rightarrow \sigma^*$ εμφανίζονται στη διαχωριστική γραμμή της άπω UV και κυρίως UV και η μετάβαση $\pi \rightarrow \pi^*$ στην υπεριώδη και ορατή περιοχή.

Η ποσότητα ενέργειας μιας μετάβασης και το μήκος κύματος της ακτινοβολίας που απορροφάται είναι χαρακτηριστική ιδιότητα των ατόμων μιας ομάδας και όχι μόνο των ηλεκτρονίων των δεσμών. Η ομάδα των ατόμων που συμβάλλει σε μια τέτοια απορρόφηση καλείται **χρωμοφόρος ομάδα** (chromophore).

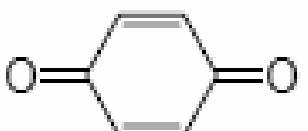
- Απλές χρωμοφόρες ομάδες με διπλούς και τριπλούς δεσμούς, όπως $>C=C<$, $-C\equiv C-$, $-C\equiv N-$, $>C=O$, $-N=N-$ κ.λ.π., υπόκεινται σε ενεργειακές μεταβάσεις $\pi \rightarrow \pi^*$ που απορροφούν σε μικρά μήκη κύματος της UV περιοχής.
- Άλλες ομάδες, όπως $-OH$, $-OR$ (R=αλκύλιο), $-NH_2$, $-SH$ και τα αλογόνα, έχουν ελεύθερα ζεύγη ηλεκτρονίων. Τα ηλεκτρόνια αυτά (μη δεσμικά) συγκρατούνται χαλαρά από τους πυρήνες και μπορούν να υποστούν μεταβάσεις σε μεγαλύτερα μήκη κύματος, δηλαδή άνω των 190 nm.
- Τέτοιες ομάδες καλούνται **αυξόχρωμες** (auxochromes) και με την παρουσία τους στις οργανικές ενώσεις επιδρούν στην απορρόφηση της κύριας χρωμοφόρου ομάδας, αυξάνοντας την ένταση και συχνά το μήκος κύματος της απορρόφησης,

χρωμοφόρος ομάδα	ηλεκτρονικές μεταπτώσεις	λ_{\max} / nm
- C - C -	$\sigma \rightarrow \sigma^*$	150
- O -	$n \rightarrow \sigma^*$	185
- N -	$n \rightarrow \sigma^*$	195
- S -	$n \rightarrow \sigma^*$	195
> C = O	$\pi \rightarrow \pi^*$	190
	$n \rightarrow \pi^*$	300
>C = C<	$\pi \rightarrow \pi^*$	190

Παράδειγμα 1: δεσμοί άνθρακα-άνθρακα και $\pi \longrightarrow \pi^*$ μετάβαση

Ένωση	λ_{\max} (nm)	ϵ
$-\text{C}=\text{C}-$	170	16000
$-\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C}-$	220	21000
$-\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C}-$	260	35000

Παράδειγμα 2:

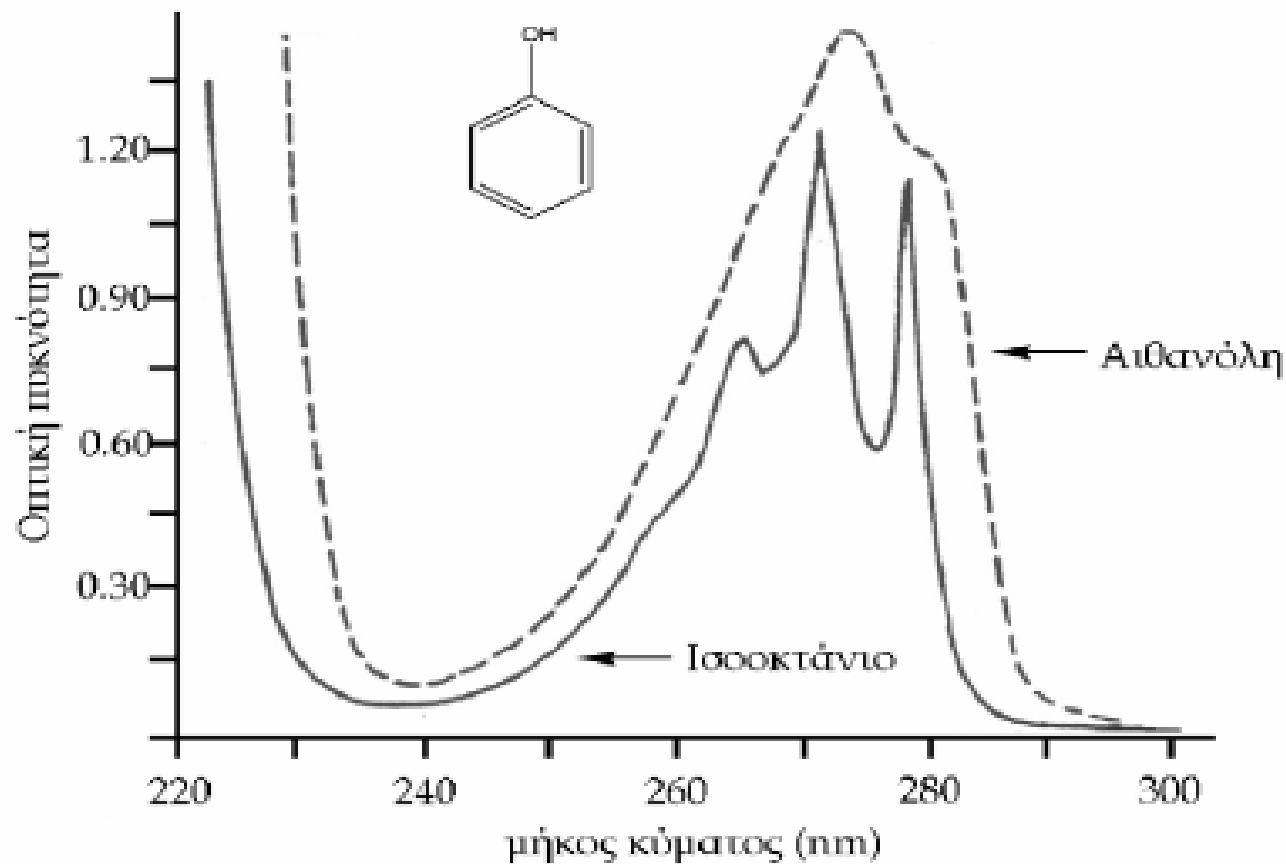
Ένωση	λ_{\max} π (nm)	π^*	λ_{\max} π (nm)	π^*
$-\text{C}=\text{O}$	166		280	
$-\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{O}$	240		320	
 (p-βενζοκινόνη)	245		435	

- Τα φάσματα UV δεν χαρακτηρίζουν συνολικά το μόριο αλλά δίνουν πληροφορίες για ορισμένες ομάδες (χρωμοφόρες) που απορροφούν ακτινοβολία.

ΦΑΣΜΑΤΑ UV-VIS

- Η παρουσίαση των φασμάτων UV-VIS των οργανικών και ανόργανων ενώσεων γίνεται σε κατάλληλα βαθμολογημένο χαρτί (ανάλογα με το όργανο ή σε οθόνη Η/Υ με γραφική παράσταση της ϵ ή $\log \epsilon$ στον άξονα των y (όπου ϵ ο μοριακός συντελεστής απόσβεσης), είτε της $\log P_0/P$ (**A**), γνωστής ως **ΟΠΤΙΚΗΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ** (optical density), ως προς το μήκος κύματος (στον άξονα των x).

Η απεικόνιση του **A** ή **T** σε συνάρτηση με το μήκος κύματος (λ) ονομάζεται φάσμα απορρόφησης και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για ταυτοποίηση (ποιοτική ανάλυση).

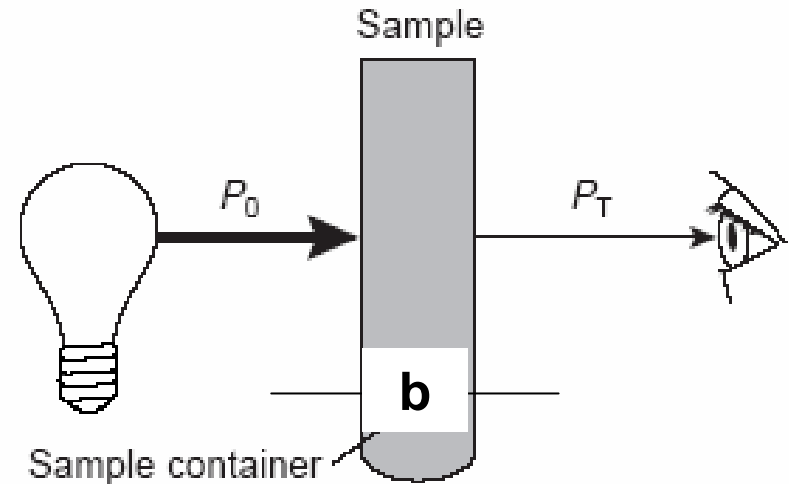


Φάσμα UV της φαινόλης σε δύο διαλύτες, ένας πολικός και ένας μη πολικός.

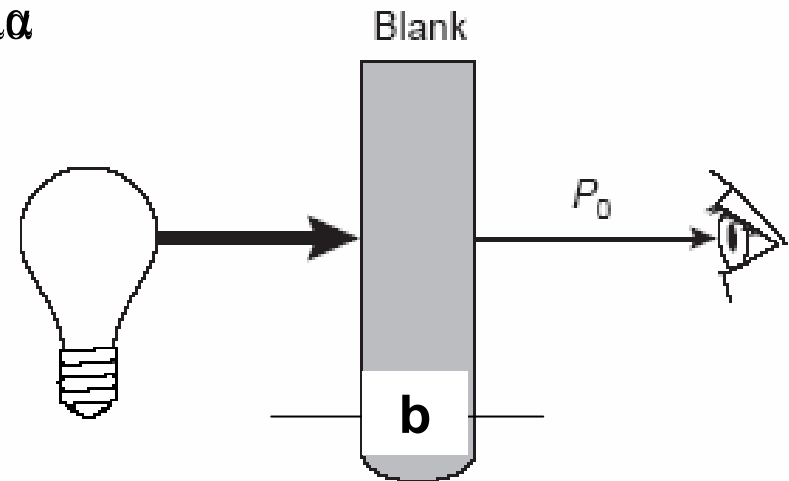
Lambert – Beer

$$\begin{aligned} A &= -\lg T = -\lg (P/P_0) = \\ &= \alpha \cdot b \text{ (cm)} \cdot c \text{ (g/l)} = \\ &= \epsilon \cdot b \text{ (cm)} \cdot c \text{ (mol/l)} \end{aligned}$$

- A** = απορρόφηση
T = η διαπερατότητα
P₀ = η ισχύς της μονοχρωματικής ακτινοβολίας που προσπίπτει στο διάλυμα
P = η ισχύς της ακτινοβολίας που εξέρχεται από το διάλυμα
b = το μήκος της διαδρομής της ακτινοβολίας στο διάλυμα
c = η συγκέντρωση της ουσίας που αναλύεται
α = απορροφητικότητα
ε = η μοριακή απορροφητικότητα της ουσίας ($\epsilon = \alpha \text{ MB}$)



(a)



(b)

ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

- Ένα δείγμα έχει $\%T=50\%$. Να βρεθεί η απορρόφηση του δείγματος.
- Ένα δ/μα αναλύτη ($MB= 67,6$) $5,00 \cdot 10^{-4}$ M τοποθετείται σε κυψελίδα μήκους 1,00 cm. Όταν μετρηθεί σε μήκος κύματος 490nm, η απορρόφηση του δ/τος βρίσκεται 0,338. Ποια είναι η απορροφητικότητα (α) του αναλύτη σε αυτό το μήκος κύματος.

ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

- Δείγμα μολυσμένου νερού περιέχει 0,1 ppm χρωμίου (AB = 52). Ο προσδιορισμός του Cr (VI) στηρίζεται στην απορρόφηση που δίνει το σύμπλοκο του χρωμίου με διφαινυλο-καρβαζίδιο ($\lambda_{\max}=540\text{nm}$, $\epsilon_{\max}=41700 \text{ L /mol cm}$). Να υπολογισθεί το μήκος της οπτικής διαδρομής ώστε η απορρόφηση να είναι 0,4.

Προϋποθέσεις Νόμου Lambert Beer

- Ο μόνος μηχανισμός αλληλεπιδράσεως ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και της διαλυμένης ουσίας είναι η απορρόφηση
- Η προσπίπτουσα ακτινοβολία είναι μονοχρωματική
- Η απορρόφηση λαμβάνει χώρα σε έναν όγκο διαλύματος ομοιόμορφης κατανομής
- Τα απορροφούντα σωματίδια δρουν ανεξάρτητα και άσχετα από τον αριθμό και το είδος αυτών

- Ανάλυση μείγματος ουσιών

- $$A_{\text{ολ},\lambda_1} = A_{1,\lambda_1} + A_{2,\lambda_1} + \dots + A_{n,\lambda_1} = \varepsilon_{1,\lambda_1} b c_1 + \varepsilon_{2,\lambda_1} b c_2 + \dots + \varepsilon_{n,\lambda_1} b c_n$$

Εφαρμογή

Οι συγκεντρώσεις Fe^{+3} και Cu^{+2} σε μίγμα μπορούν να προσδιοριστούν με την αντίδρασή τους με εξακυανορουβιδικά ανιόντα II $[\text{Ru}(\text{CN})_6^{-4}]$, τα οποία με τα ιόντα σιδήρου σχηματίζονται μοβ σύμπλοκα που απορροφούν στα 550nm και με τα ιόντα χαλκού σχηματίζονται απαλά πράσινα σύμπλοκα τα οποία απορροφούν στα 396nm. Οι μοριακές απορροφήσεις ($\text{M}^{-1} \text{cm}^{-1}$) για τα μεταλλικά σύμπλοκα στα δυο μήκη κύματος συνοψίζονται στον ακόλουθο πίνακα:

	ϵ_{550}	ϵ_{396}
Fe^{+3}	9970	84
Cu^{+2}	34	856

Δείγμα που περιείχε και τα δύο μεταλλοϊόντα αναλύθηκε με την παραπάνω μέθοδο και οι απορροφήσεις που βρέθηκαν ήταν $A_{396}=0,109$ και $A_{550}=0,183$. Η οπτική διαδρομή ήταν 1cm. Να υπολογιστούν οι μοριακές συγκεντρώσεις των ιόντων στο δ/μα.

ΠΟΣΟΤΙΚΟΣ ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΣ

- Στη πράξη, ο νόμος του Beer δεν είναι απευθείας εφαρμόσιμος

Τα τοιχώματα της κυψελίδας προκαλούν ελάττωση της ισχύος της ακτινοβολίας λόγω ανάκλασής της τελευταίας ή/και απορρόφησης αυτής εντός των τοιχωμάτων της. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιείται τυφλό δ/μα ($A = \log P_b/P_s = P_o/P = \epsilon bc$)

ϵ διαφέρει με τα διάφορα φασματοφωτόμετρα και ο βαθμός μονοχρωματικότητας ελαττώνεται αυξανομένου του εύρους της σχισμής.

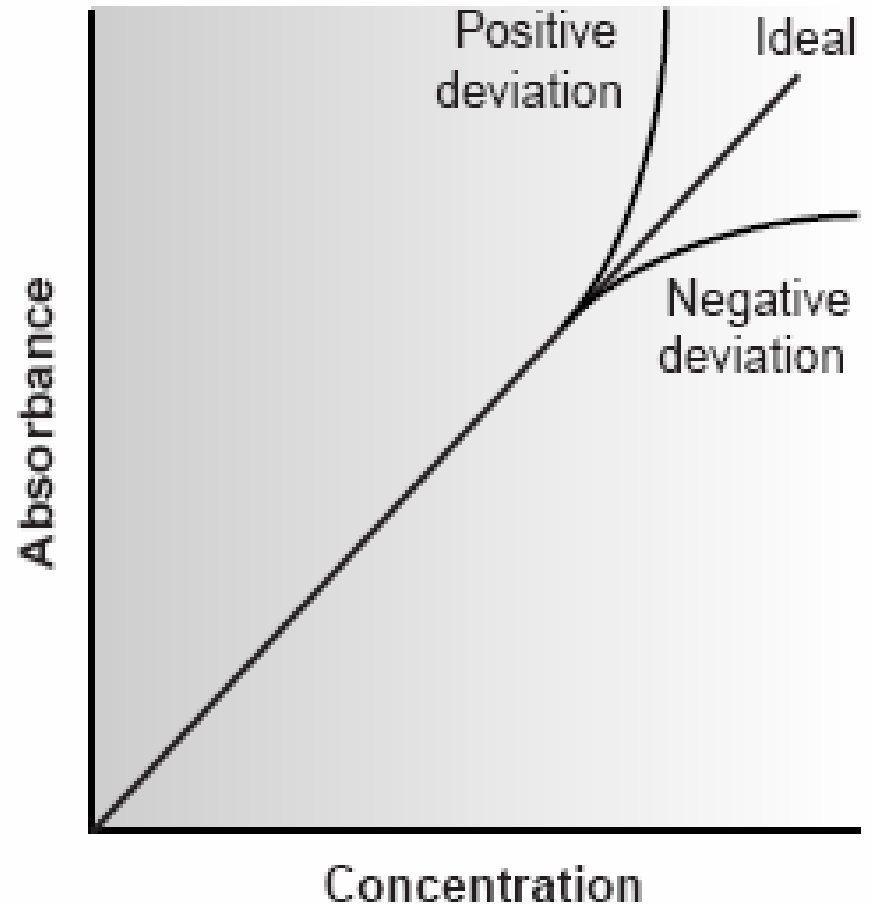
ΠΟΣΟΤΙΚΟΣ ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΣ

Ο ποσοτικός προσδιορισμός γίνεται στο γραμμικό μέρος της καμπύλης αναφοράς, **απορρόφηση – συγκέντρωση ουσίας** χρησιμοποιώντας μια σειρά προτύπων διαλυμάτων.

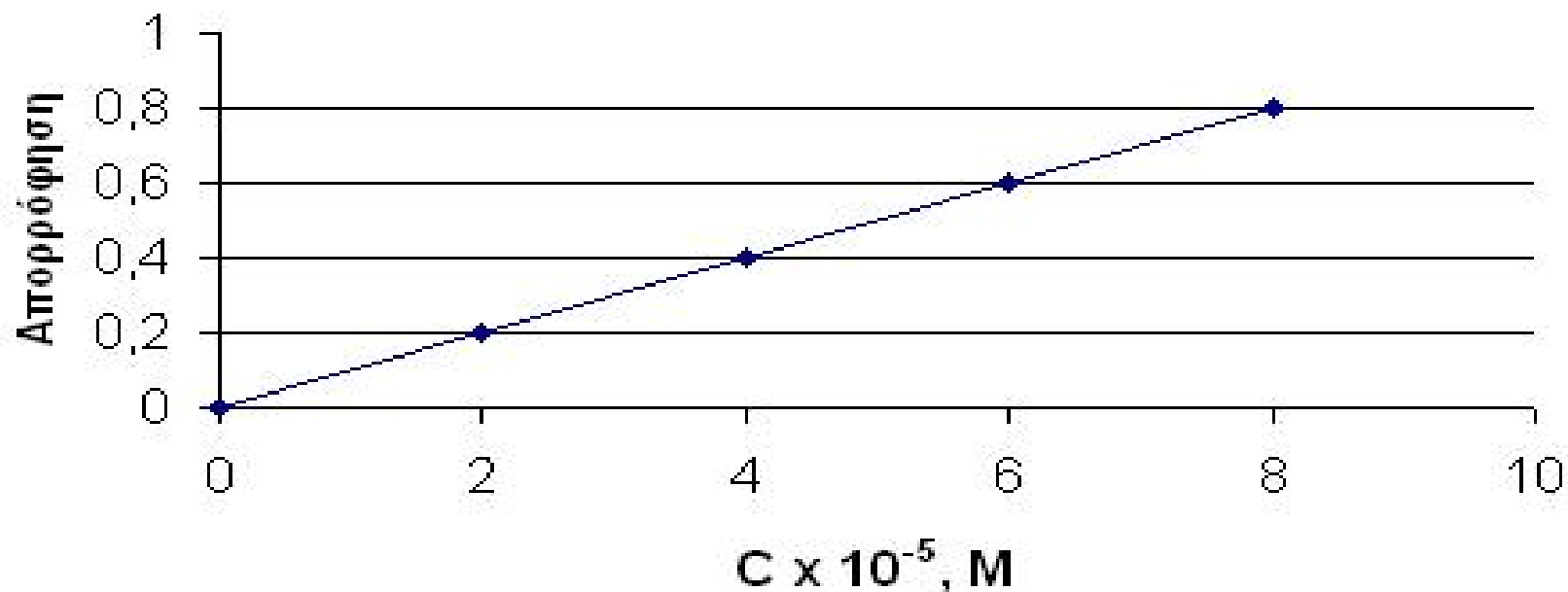
Ο ποσοτικός προσδιορισμός προτιμάται να γίνεται στην περιοχή λ_{max} γιατί εκεί μπορεί να εφαρμοσθεί ο νόμος Lambert – Beer, η τιμή της ϵ (α) παραμένει σταθερή ενώ επιτυγχάνονται χαμηλότερα όρια ανίχνευσης της προς προσδιορισμό ουσίας.

Η ακτινοβολία πρέπει να είναι μονοχρωματική.

Δεν ισχύει όταν $c > 0.01\text{M}$.



Τυπικό Διάγραμμα βαθμονόμησης Απορρόφησης - Συγκέντρωσης



Η κλίση της καμπύλης αναφοράς ισούται με ϵb (b γνωστό)

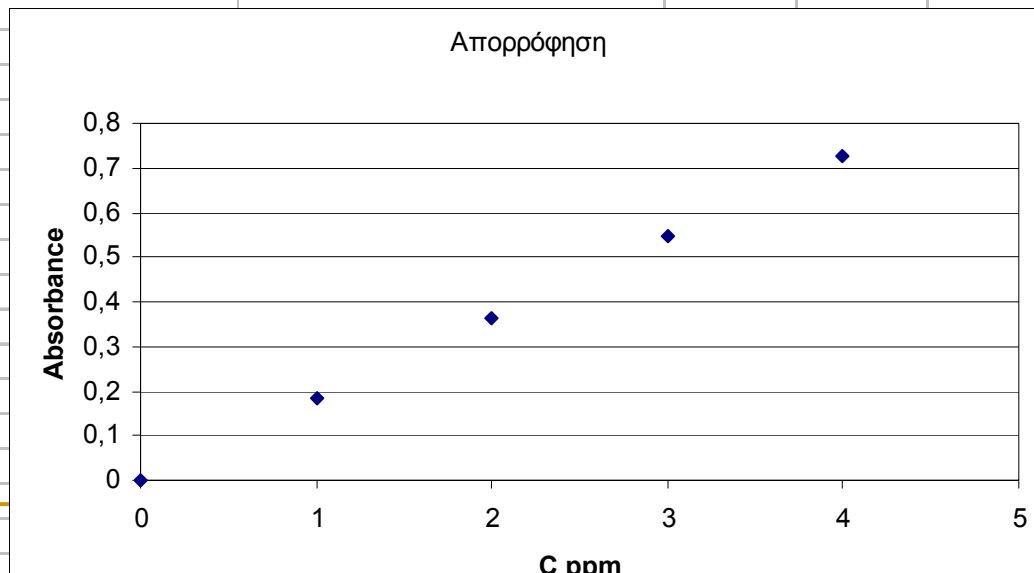
ΕΦΑΡΜΟΓΗ

Ο προσδιορισμός του Fe σε υδατικά βιομηχανικά απόβλητα πραγματοποιήθηκε με την μέθοδο σχηματισμού συμπλόκου με ο-φαινανθρολίνη και η συγκέντρωση του δ/τος προσδιορίστηκε στα 510nm. Χρησιμοποιώντας τα παρακάτω πειραματικά δεδομένα να προσδιοριστεί η συγκέντρωση του Fe στο άγνωστο δ/μα.

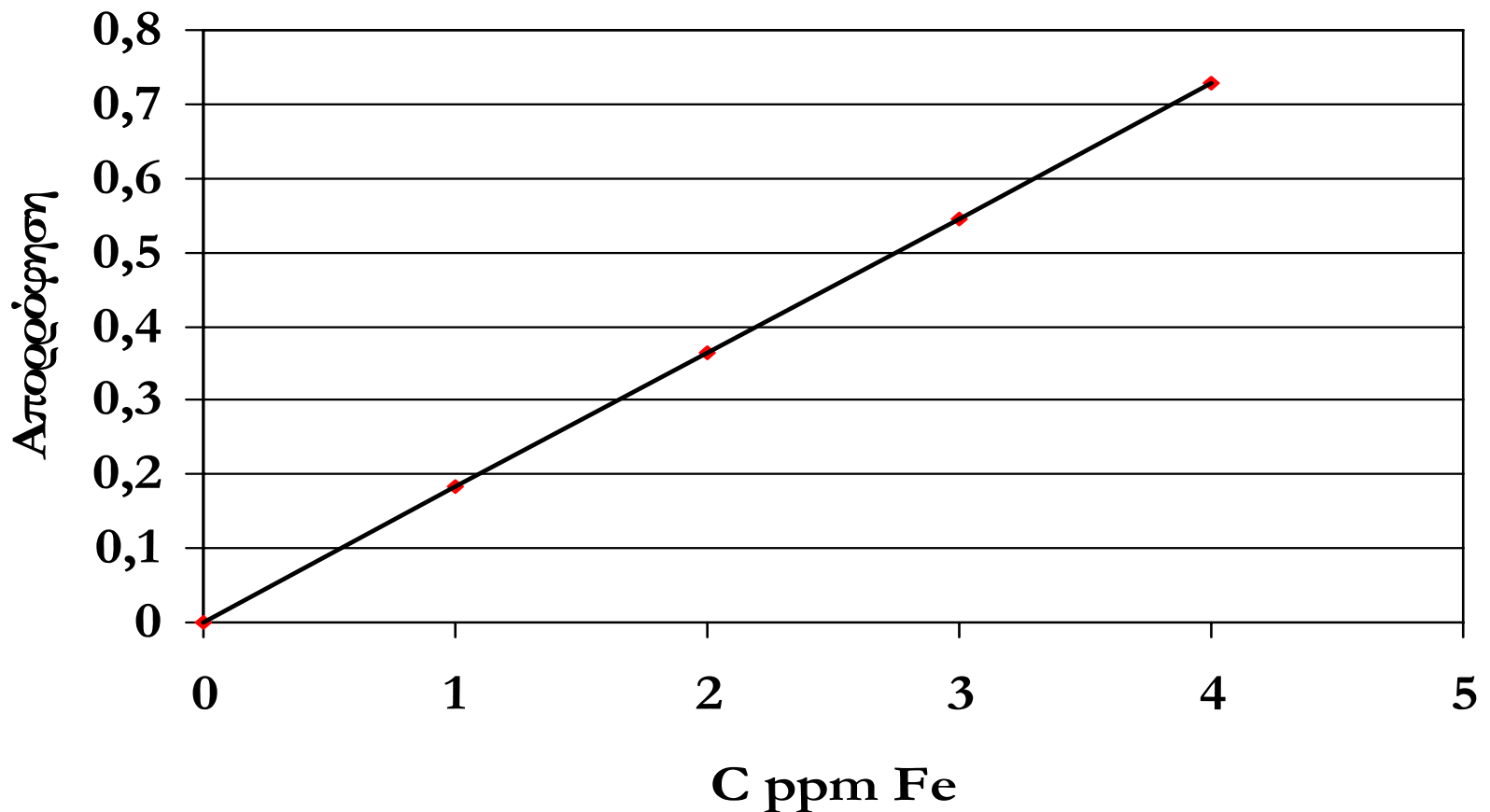
ppm Fe	Απορρόφηση
0,000	0,000
1,000	0,183
2,000	0,364
3,000	0,546
4,000	0,727
Άγνωστο	0,269

1. Τοποθετούμε τα σημεία σε βαθμονομημένο χαρτί

ppm Fe	Απορρόφηση
0	0
1	0,183
2	0,364
3	0,546
4	0,727
Άγνωστο	0,269



2. ΕΦΟΣΟΝ ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΕΦΑΡΜΟΖΟΥΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΥΡΕΣΗ ΤΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ ΤΗΣ ΕΥΘΕΙΑΣ



ΜΕΘΟΔΟΣ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ

n	x_i	y_i	x_i^2	y_i^2	$x_i y_i$
1	0,000	0,000	0,000	0,000000	0,000
2	1,000	0,183	1,000	0,033489	0,183
3	2,000	0,364	4,000	0,132496	0,728
4	3,000	0,546	9,000	0,298116	1,638
5	4,000	0,727	16,000	0,528529	2,908
	Σx_i	Σy_i	Σx_i^2	Σy_i^2	$\Sigma x_i y_i$
	10,000	1,820	30,000	0,99263	5,457

$$\text{κλίση} = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} = \frac{(5 \times 5,457) - (10,000 \times 1,820)}{5 \times 30,000 - (10,000)^2} = \frac{9,085}{150 - 100} = 0,1817$$

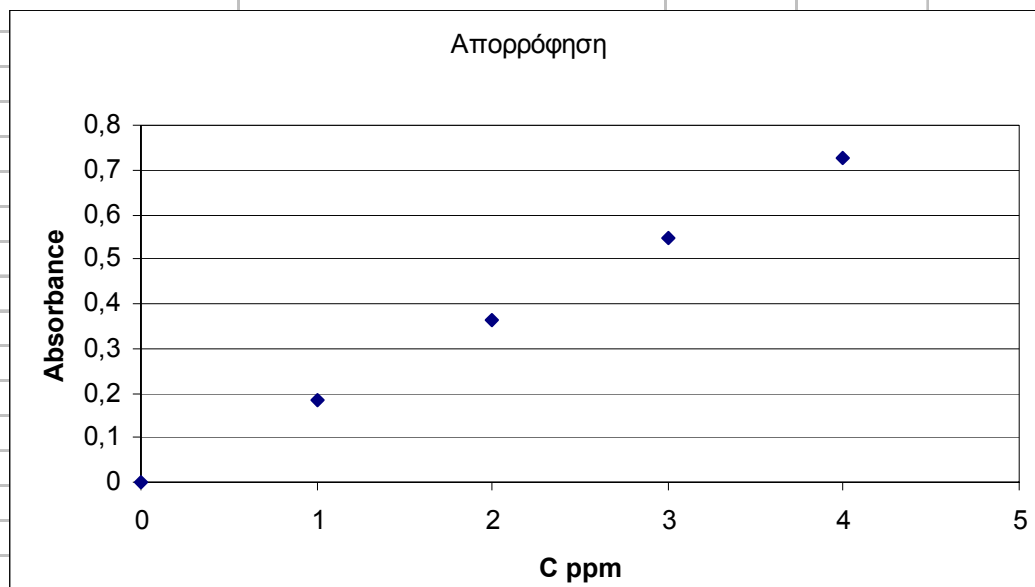
$$\text{τομή} = \frac{\sum x_i^2 \times \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} = \frac{(30 \times 1,820) - 10 \times 5,457}{5 \times 30 - (10)^2} = \frac{0,03}{50} = 0,0006$$

ΜΕΘΟΔΟΣ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ

n	x_i	y_i	x_i^2	y_i^2	$x_i y_i$
1	0,000	0,000	0,000	0,000000	0,000
2	1,000	0,183	1,000	0,033489	0,183
3	2,000	0,364	4,000	0,132496	0,728
4	3,000	0,546	9,000	0,298116	1,638
5	4,000	0,727	16,000	0,528529	2,908
	Σx_i	Σy_i	Σx_i^2	Σy_i^2	$\Sigma x_i y_i$
	10,000	1,820	30,000	0,99263	5,457

$$r = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \times \sum y_i}{\sqrt{(n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2)(n \sum y_i^2 - (\sum y_i)^2)}} = \frac{(5 \times 5,457) - (10 \times 1,820)}{\sqrt{((5 \times 30) - 100)(5 \times 0,99263 - (1,820)^2)}} = 1$$

ppm Fe	Απορρόφηση
0	0
1	0,183
2	0,364
3	0,546
4	0,727
Άγνωστο	0,269



ΑΠΟ ΤΗΝ ΕΞΙΣΩΣΗ ΤΗΣ ΕΥΘΕΙΑΣ
ΤΗΣ ΠΡΟΤΥΠΗΣ ΚΑΜΠΥΛΗΣ
ΑΝΑΦΟΡΑΣ ΥΠΟΛΟΓΙΖΟΥΜΕ ΤΗΝ
ΑΓΝΩΣΤΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗ ΤΟΥ
ΔΙΑΛΥΜΑΤΟΣ ΤΟΥ ΣΙΔΗΡΟΥ

$$y = 0,1817x - 0,0006 \Rightarrow x = \frac{y + 0,0006}{0,1817} \Rightarrow x = \frac{0,269 + 0,0006}{0,1817} = 1,4838 \text{ ppm}$$

ΓΕΝΙΚΗ ΠΟΡΕΙΑ

ΦΑΣΜΑΤΟΦΩΤΟΜΕΤΡΙΚΗΣ ΑΝΑΛΥΣΕΩΣ

1. Λήψη του φάσματος απορρόφησης της προς προσδιορισμό ουσίας (αναλύτης)
2. Η επιλογή του καταλληλότερου μήκους κύματος
3. Η κατασκευή της καμπύλης αναφοράς
4. Η μέτρηση της απορρόφησης του άγνωστου δείγματος