

# EKSAMEN - løsningsforslag

|  |   |
|--|---|
| <b>Emnekode:</b><br>IRK 21515  | <b>Emnenavn:</b><br>Instrumentell analyse 1   |
| <b>Dato:</b> 16.05.2019<br><b>Sensurfrist:</b> 06.06.2019  | <b>Eksamenstid:</b><br>09:00 – 13:00  |
| <b>Antall oppgavesider:</b> 5<br><br><b>Antall vedleggsider:</b> 5                                     | <b>Faglærer:</b><br>Birte J. Sjursnes – mobil: 472 62 307<br><br><b>Oppgaven er kontrollert:</b> Ja |
| <b>Hjelpemidler:</b><br>«Book of data» eller andre godkjente formelsamlinger<br>Godkjent kalkulator    |   |
| <b>Om eksamensoppgaven:</b><br><br><b>Alle hovedoppgaver teller likt</b><br><b>Svar skal begrunnes</b> |   |
| <b>Kandidaten må selv kontrollere at oppgavesettet er fullstendig</b>                                  |   |



## Vedlegg 1:    **Formler**

### **Oppgave 1**

- a) «Ekstern standard» og «Standard tilsetning» er kalibreringsmetoder. Angi hva som bestemmes ved en kalibrering for en analysemetode, og gi en beskrivelse av begge kalibreringsmetodene ovenfor. Ta med hvordan standarder/prøver lages, hva som analyseres, hva som plottes for å finne sammenheng mellom respons og konsentrasjon av analytt, og hvordan man bestemmer konsentrasjon av analytt i prøven.

-----

Når man utfører en kalibrering for en analysemetode så bestemmer man sammenheng mellom konsentrasjon av analytt og responsstyrke for metoden. Dette gjøres ved å analysere standardløsninger med kjente konsentrasjoner.

#### **Ekstern standard**

Ekstern standard er samme forbindelse som analytt, og man trenger denne i ren form. Det lages flere løsninger med kjente konsentrasjoner i passende konsentrasjonsområde (standardløsninger). Ved analyse av standardløsningene plottes responsstyrke mot konsentrasjon av analytt. Dette kalles en kalibreringskurve eller standardkurve. Dette bør gi en rett linje i aktuelt måleområde (men det går også an å bruke ikke-lineær regresjon for ikke-lineære kurver). Ligning som beskriver lineær sammenheng mellom respons og konsentrasjon er gitt i formelark. Etter at kalibreringskurven er kjørt, kjøres prøvene. Konsentrasjon av analytt i prøvene bestemmes ved hjelp av kalibreringskurven (ligning).

#### **Standard tilsetning**

Standard er samme forbindelse som analytt, og man trenger denne i ren form. Det lages en standardløsning med kjent konsentrasjon. Videre lages det en serie løsninger som inneholder et fast volum prøve, og økende mengde standardløsning (fra 0 og oppover). Løsningene fortynnes til et bestemt volum. Ved analyse plottes responsstyrke av analytt mot tilsatt volum standardløsning i hver løsning og dette bør gi en rett linje. Formel for rett linje benyttes ikke direkte for å beregne konsentrasjon av analytt i prøve. Ligninger for beregning av konsentrasjon er oppgitt i formelark og man benytter både konsentrasjon av standardløsning og tilsatt volum prøve i tillegg til stigningstall og skjæringspunkt for å beregne konsentrasjon av analytt i prøven.

-----

b) Selektivitet er en viktig egenskap for en analysemetode.

1) Forklar hva selektivitet er.

2) For følgende metoder:

Atomabsorpsjon i UV-Vis-området

Molekylær absorpsjon i UV-Vis-området

Angi om metodene er selektive eller ikke. Forklar hvorfor.

-----  
Selektivitet er metodens evne til å skille respons for analytt fra respons fra andre forbindelser i prøven.

Atomabsorpsjon i UV-Vis-området: Selektiv

Absorpsjonsbånd for atomabsorpsjon (og atomemisjon) er veldig smale (0,002 til 0,005 nm) og eksitasjonsenergi for ulike elektroniske overganger i atomer er unike for hvert element. Det er derfor sjelden at man har overlappende absorpsjonsbånd, og man kan måle spesifikt ett element i en blanding.

Molekylær absorpsjon i UV-Vis-området: Ikke selektiv

Absorpsjonsbånd for molekyler i UV-Vis er veldig brede (gjerner 100 nm eller mer), og overlapp er vanlig. Det er derfor ikke vanlig å måle på blandinger, men på rene stoffer.

-----  
c) For å analysere enantiomere forbindelser så har vi målt optisk rotasjon. Forklar hva denne metoden går ut på (prinsipp) og angi hva vi kan måle.

-----  
Optisk rotasjon er rotasjon av planet for planpolarisert lys (stråling) når denne går gjennom en løsning som inneholder kirale forbindelser.

En egenskap for kirale forbindelser er at de dreier planpolarisert lys. For et enantiomerpar har man at de to enantiomerene dreier lyset like mye, men i motsatt retning (dextrorotatory (høyredreie, +) eller levorotatory (venstredreie, -)).

Ved måling av optisk rotasjon kan man identifisere forbindelser ved å bestemme spesifikk rotasjon (når man vet konsentrasjon), bestemme blandingsforhold for enantiomere (vet konsentrasjon og spesifikk rotasjon) og bestemme konsentrasjon (når man vet identitet og kan lage en kalibreringskurve av dreining vs. kons.).

-----

## Oppgave 2

a) I løpet av emnet har blant annet følgende strålingskilder blitt brukt:

|                         |                               |
|-------------------------|-------------------------------|
| Deuteriumlampe          | Hulkatodelampe                |
| Wolframlampe (tungsten) | Dagslys/lampelys              |
| Natriumlampe            | Nichrome (Ni + Cr) metalltråd |

- 1) Angi for hvilke analysemetoder strålingskildene har blitt brukt.
- 2) Angi om de er linje- eller kontinuerlige strålingskilder, og i hvilket bølgelengdeområde de brukes.

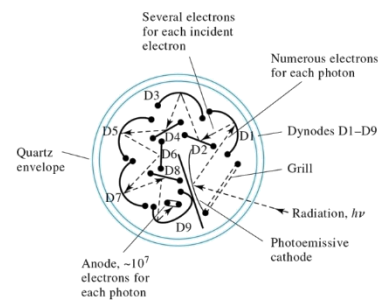
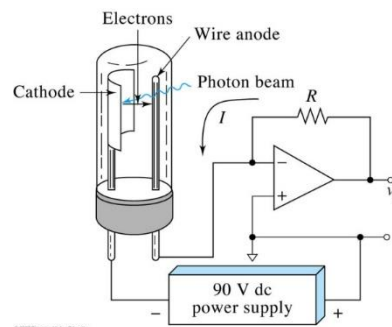
---

|                                |   |
|--------------------------------|---|
| Deuteriumlampe:                | Molekylær absorpsjon<br>Kontinuerlig strålingskilde i UV-området (190 til 350 nm)   |
| Hulkatodelampe:                | Atomabsorpsjon<br>Linje strålingskilde i UV-Vis området   |
| Wolframlampe (tungsten):       | Molekylær absorpsjon<br>Kontinuerlig strålingskilde i Vis-området   |
| Dagslys/lampelys:              | Brytningsindeks<br>Kontinuerlig strålingskilde hovedsakelig i Vis-området. For brytningsindeks korrigeres alle bølgelengder til D-linje for natrium, dvs. 589 nm. |
| Natriumlampe:                  | Polarimetri<br>Linje strålingskilde, 589 nm (natrium D-linje).  |
| Nichrome (Ni + Cr) metalltråd: | Molekylær absorpsjon<br>Kontinuerlig strålingskilde for IR (midt IR)  |

---

- b) En mye brukt og følsom omformer er «photomultiplier tube» (fotomultiplikator).
- 1) Gi en kort beskrivelse av oppbygging og virkemåte.
  - 2) Hvorfor er den så følsom?
  - 3) Angi i hvilket område av det elektromagnetiske spekteret denne brukes og forklar hvorfor.

Phototubes baserer seg på fotoelektrisk effekt, dvs. innkommende fotoner kolliderer med en metalloverflate og overfører energi til elektroner slik at de rives løs. Det er satt på et potensiale mellom metallet og en anode, og de løsrevne elektronene dras mot anoden og fører til et elektrisk signal. Photomultiplier tubes baserer seg på samme prinsipp, men løsrevne elektroner dras videre til nye elektroder (dynoder) og for hver elektrode fører hvert elektron til løsrivelse av flere nye elektroner. Fører til en enorm forsterkning av signalet med  $10^6$  –  $10^7$  elektroner per foton. Dette gjør den meget følsom.



Photomultiplier tubes benyttes i UV-Vis området (litt opp i NIR). Dette fordi innkommende stråling må ha nok energi til å rive løs et elektron fra metallet. Stråling i IR-området har ikke nok energi til å gjøre dette.

### Oppgave 3

To av laboratorieoppgavene har vært analyse av kalsium og natrium i vannløsning. Begge elementene har vært analysert på et instrument for atomabsorpsjon utstyrt med flamme hvor man også kan måle flamme-emisjon.

- a) Beskriv atomabsorpsjon og atomemisjon ved flamme. Beskrivelsen bør minimum inneholde mest vanlige teknikk for innføring av analytt og overføring til gassfase, i hvilke form analytten bør være for analyse, hvordan eksitasjon foregår og hva som måles.

Ved flamme benyttes analytt i løsning. Løsningen suges inn ved hjelp av en nebulisator drevet av oksidantgass og brenselgass. Nebulisatoren danner en aerosol av løsningen. Aerosolen føres gjennom et varmt kammer hvor løsemiddel fordamper og det dannes en sky av tørre partikler. Denne skyen føres videre til flammen hvor det dannes atomer i gassfase (atomisering).

Ved atomabsorpsjon har man en strålingskilde som sender elektromagnetisk stråling gjennom flammen. Det benyttes som oftest en linje strålingskilde som

bare sender ut isolerte bølgelengder (snevre områder). Man måler aktuell bølgelengde inn og ut, og beregner hvor mye som er forsvunnet (absorbert).

Ved emisjon er det flammen som eksiterer analyttatomene, og man måler emisjon (utsendt elektromagnetisk stråling) når analyttatomene relaxerer.

- b) Angi hvilken teknikk som ble brukt for hvert element. Hvorfor er det vanlig å bruke flamme-emisjon for det ene elementet?

Ca: Atomabsorpsjon ved flamme

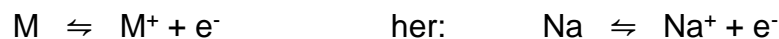
Na: Atomemisjon ved flamme

Atomemisjon ved flamme benyttes nesten kun for alkaliemetallene. Energertilførsel for flamme er relativt lav, og gir lite effektiv eksitasjon av de fleste metaller. Unntak er alkaliemetallene (og noen av jordalkaliemetallene) fordi disse har de laveste eksiteringsenergiene (lengst mot venstre i det periodiske system). Dette gir få og sterke emisjonslinjer fra disse metallene, med lite interferens fordi det ikke er så mange andre metaller som eksiteres i noen signifikant grad.

- c) I disse analysene ble det tilsatt KCl og  $\text{La}(\text{NO}_3)_3$  for å motvirke interferens. Beskriv hvilken type interferens hver av tilsetningene skal motvirke og hvordan tilsetningene virker. Angi hvilket tilsetningsmiddel som ble brukt for hvert element.

KCl: Kaliumklorid ble benyttet for analyse av Na.

I gassfase dannes det en likevekt mellom atomer og ioner av analytt. Det måles her på M (atomer) i gassfase. Ionisering av analytten, dvs. dannelse av  $\text{M}^+$  reduserer målbar analytt. Tilsetning av et annet metall som ioniserer lettere øker konsentrasjon av elektroner og reduserer ionisering av analytt, dvs. likevekten



forskyves mot venstre. Dette er effekt av å tilsette kaliumklorid, fordi kalium ioniserer lettere og reduserer andel av ionsiert natrium. KCl er en ioniseringsbuffer.

$\text{La}(\text{NO}_3)_3$ : Lantan(III)nitrat ble benyttet for analyse av Ca.

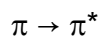
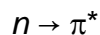
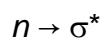
I komplekse matrikser er det fare for at analytt kan danne lite flyktige forbindelser med andre forbindelser i prøven. For Ca gjelder dette spesielt dannelse av

tungtflyktige fosfater. Lantanioner binder seg sterkere til fosfat enn kalsiumioner, og frigjør kalsium for analyse. Lantanioner er derfor en «releasing agent»

---

## Oppgave 4

- a) Absorpsjon av elektromagnetisk stråling i UV-Vis området for organiske molekyler skyldes følgende elektronoverganger:



- 1) Angi hva disse overgangene (forkortet skrivemåte) betyr, dvs. hvilke typer elektroner som er involvert og hvilke typer bindinger som er involvert.
- 

Absorpsjon av elektromagnetisk stråling i UV-Vis-området forårsakes av eksitasjon av bindingselektroner og ikke-bindende elektronpar. For symbolene ovenfor er  $n$  = ikke-bindende elektronpar,  $\sigma$  = bindingselektroner i sigma-binding (direkte overlapp av orbitaler) og  $\pi$  = bindingselektroner i pi-binding (sideveis overlapp av p-orbitaler). Stjerne angir anti-bindende orbital.

Den første overgangen er ikke-bindende elektron til anti-bindende sigmaorbital.

Den andre overgangen er ikke-bindende elektron til anti-bindende pi-orbital.

Den tredje overgangen er pi-elektron fra pi-orbital til anti-bindende pi-orbital.

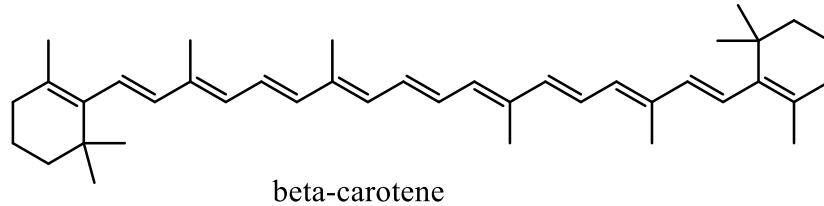
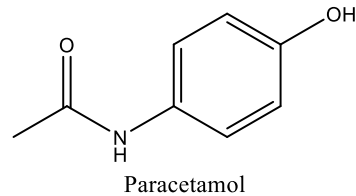
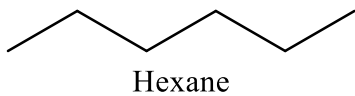
---

- 2) To av disse overgangene benyttes for vanlig molekyllær absorpsjon, mens en ikke gjøre det. Angi hvilke to som benyttes og hvilken som ikke benyttes, og hvorfor. Angi hvilken overgang som generelt har høyest absorptivitet.
- 

Overgangene  $n \rightarrow \pi^*$  og  $\pi \rightarrow \pi^*$  benyttes for vanlig molekyllær absorpsjon fordi disse absorberer i området 200 – 800 nm som er det vanlige UV-Vis området. Overgangen  $\pi \rightarrow \pi^*$  har generelt høyest absorptivitet. Overgangen  $n \rightarrow \sigma^*$  benyttes ikke fordi den i de fleste tilfeller absorberer under 200 nm, dvs. i vacuum-området. Da trenger man spesielle instrumenter hvor vanlig atomosfære (luft) er fjernet siden denne også absorberer her.

---

b) Vi har følgende forbindelser:



For hver av forbindelsene:

- 1) Angi om de absorberer i UV-Vis-området (200 – 780 nm).
- 2) Angi hvorfor eller hvorfor ikke de absorberer.
- 3) Angi hvilken forbindelse som vil absorbere ved lengst bølgelengde. Svaret skal begrunnes.

og tilslutt:

- 4) Hva er en kromofor?

-----  
Disse er alle molekyler. For å absorbere i UV-Vis området trenger de  $\pi$ -bindinger (multiple bindinger / aromatisk system) fordi det i all hovedsak er  $\pi$  til  $\pi^*$  elektroniske overganger som absorberer. I tillegg kan de ha ikke-bindende elektronpar som kan gi n til  $\pi^*$  overgang.

Heksan: Absorberer ikke. Har ingen multiple bindinger.

Paracetamol: Absorberer. Har både aromatisk system, heteroatomer som oksygen og nitrogen med ikke-bindende elektronpar og C=O dobbeltbinding.

$\beta$ -Karoten: Absorberer. Har et utstrakt konjugert system av dobbeltbindinger.

$\beta$ -Karoten vil absorbere ved høyest (lengst) bølgelengde. Dette fordi den har et stort konjugert system som gir mange energinivåer med liten forskjell mellom



nivåene (dess flere nivåer, dess mindre forskjell). Liten forskjell mellom energinivåene gir absorpsjon ved lengre bølgelengder.

- 4) En kromofor er en gruppe (kan utgjøre hele molekylet) som absorberer i UV-Vis. For molekyler er dette en gruppe som inneholder  $\pi$ -binding, dvs. en umettet gruppe (aromatiske systemer, multiple bindinger). Den kan i tillegg også inneholde heteroatomer med ikke-bindende elektronpar.
- 

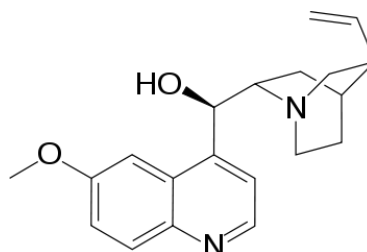
- c) Angi hvilke typer elektronoverganger man har i atomabsorpsjon.
- 

Atomabsorpsjon i UV-Vis har sin basis i elektronoverganger for valenselektroner mellom atomorbitaler (*s*, *p*, *d*, *f*). Et elektron kan eksiteres til ulike orbitaler, men overganger innen samme kvantetall er «forbudt» (*s* til *s* eller *p* til *p*). Overganger til og fra grunntilstand kalles «resonanslinjer», og grunntilstand er laveste energitilstand for valenselektronet.

-----

## Oppgave 5

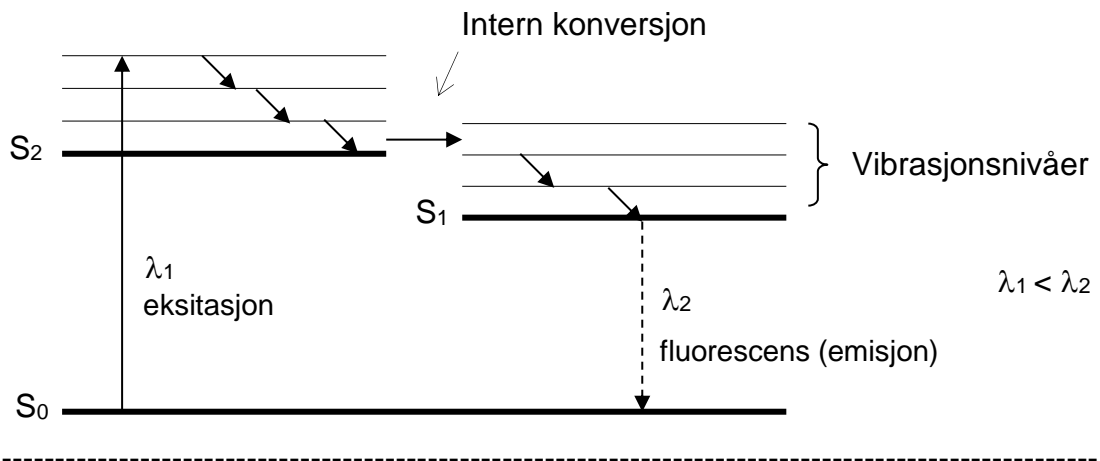
Kinin kan analyseres både ved molekylær absorpsjon og molekylær fluorescens. Vi skal her se på molekylær fluorescens.



- a) Ved fluorescensmåling av kinin benytter man eksitasjonsbølgelengde på 350 nm og måler fluorescens ved 450 nm. Forklar kort og skjematisk hva som skjer når et molekyl fluoriserer. Bruk gjerne en figur (enkelt Jablonski-diagram) med tekst. Av forklaringen skal det fremgå hvorfor bølgelengde for eksitasjon er kortere enn bølgelengde for emisjon.
- 

Ved molekylær fluorescens benytter man elektromagnetisk stråling for eksitasjon av elektroner. I molekylet er det flere eksiterte nivåer. Man benytter en bølgelengde som eksiterer til det høyeste nivået. Relaksasjon ved vibrasjon er mye raskere enn relaksasjon ved utsending av elektromagnetisk stråling. Resultatet er at eksiterte elektroner relakserer hovedsakelig gjennom

vibrasjonsrelaksasjon til de når det laveste eksiterte nivået. Deretter relaxerer de ved utsending av elektromagnetisk stråling til grunntilstand. Energiforskjell mellom grunntilstand og høyeste eksiterte tilstand er større enn mellom grunntilstand og laveste eksiterte nivå, og dette gjør at eksitasjonsbølgelengde er kortere (mer energi) enn emisjonsbølgelengde (lavere energi). Dette er illustrert i figuren. Alle tilstander her er singlett-tilstander (S).



b) Forklar følgende begreper:

i) Intern konversjon (internal conversion)

Overgang mellom tilstander med ulike energinivåer men med samme multiplisitet, dvs. enten singlett til singlett (mest vanlig) eller triplett til triplett. Fremmes av overlappende vibrasjonsnivåer.

ii) System kryssing (intersystem crossing)

Overgang mellom tilstander med ulike energinivåer og med ulik multiplisitet, dvs. singlett til triplett (mest vanlig) eller triplett til singlett. Fremmes også av overlappende vibrasjonsnivåer.

c) Forklar hvordan og hvorfor fluorescensintensitet til et molekyl i løsning varierer med løsningsens temperatur og viskositet.

1) Økende temperatur reduserer fluorescens. Økt temperatur gir høyere diffusjonshastigheter og kollisjonsfrekvenser, som igjen gir økt «external conversion». External conversion er at molekylet kvitter seg med energi gjennom overføring til andre molekyler via kollisjoner etc. Dette reduserer

fluorescens fordi molekylet ikke kvitter seg med energi ved å sende ut et foton (fluorescens).

- 2) Økende viskositet øker fluorescens. Økt viskositet gir lavere diffusjonshastigheter og kollisjonsfrekvenser, som igjen gir lavere «external conversion». External conversion er at molekylet kvitter seg med energi gjennom overføring til andre molekyler via kollisjoner etc. Dette reduserer fluorescens fordi molekylet ikke kvitter seg med energi ved å sende ut et foton.
- 

## Oppgave 6 (beregninger skal være med i besvarelsen)

- a) Cesium (Cs) er mye brukt i fotoceller og TV-kamera. Det har den laveste ioniseringsenergien av alle stabile elementer. Hva er max kinetisk energi for et foto-elektron revet løs fra Cs av stråling med bølgelengde 550 nm? Hvis bølgelengden er over 660 nm så blir ingen elektroner revet løs.
- 

Sammenheng mellom energi og kinetisk energi:  $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = KE_m + \omega$

Bølgelengden 660 nm tilsvarer grensefrekvensen, dvs. når  $KE_m = 0$  og  $hc/\lambda = \omega$

$$\omega = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}) \times (3,000 \times 10^8 \text{ m/s})}{660 \times 10^{-9} \text{ m}} = 3,012 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Har nå funnet  $\omega$ , og går tilbake til ligningen for å finne  $KE_m$  ved 550 nm:

$$KE_m = \frac{hc}{\lambda} - \omega = \frac{6,626 \times 10^{-34} \text{ Js} \times 3,000 \times 10^8 \text{ m/s}}{550 \times 10^{-9} \text{ m}} - 3,012 \times 10^{-19} \text{ J} = 3,614 \times 10^{-19} \text{ J} - 3,012 \times 10^{-19} \text{ J} = \underline{\underline{6,022 \times 10^{-20} \text{ J}}}$$

---

- b) Beregn hastighet ( $v$ ), frekvens ( $\nu$ ) og bølgelengde ( $\lambda$ ) for natrium D-linje,  $\lambda = 589$  nm, i honning som har en brytningsindeks på  $n_D$  (honning) = 1,50.
-

Sammenheng mellom hastighet og brytningsindeks:  $n_i = \frac{c}{v_i}$

Hastighet i honning:  $v_i = \frac{c}{n_i} = \frac{3,000 \times 10^8 \text{ m/s}}{1,50} = \underline{\underline{2,000 \times 10^8 \text{ m/s}}}$

Frekvens er konstant:  $c = v \times \lambda_1 \Rightarrow$

$$v = \frac{c}{\lambda_1} = \frac{3,000 \times 10^8 \text{ m/s}}{589 \times 10^{-9} \text{ m}} = \underline{\underline{5,093 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}}}$$

Bølgelengde i honning:  $v = v \times \lambda_2 \Rightarrow$

$$\lambda_2 = \frac{v}{\nu} = \frac{2,000 \times 10^8 \text{ m/s}}{5,093 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}} = 3,927 \times 10^{-7} = \underline{\underline{392,7 \text{ nm}}}$$

---

## Oppgave 7 (beregninger skal være med i besvarelsen)

- a) En 25,0 ml alikvot (mengde) av en vandig quinine-løsning ble fortynnet til 50,0 ml og absorbansen ble målt til 0,656 ved 348 nm i en 2,50 cm kyvette. En annen 25,0 ml alikvot ble blandet med 10,00 ml av en løsning som inneholdt 25,7 ppm quinine og deretter også fortynnet til 50,0 ml. Absorbans for denne løsningen ble målt til 0,976 ved 348 nm i en 2,50 cm kyvette.

Skjematisk prøveoppsett:

| Volum prøve | Tilsatt standard | Sluttvolum | Absorbans, A              |
|-------------|------------------|------------|---------------------------|
| ml          | 25,7 ppm Quinine | ml         | 348 nm<br>2,50 cm kyvette |
| 25,00       | 0                | 50,0       | 0,656                     |
| 25,00       | 10,00            | 50,0       | 0,976                     |

Beregn konsentrasjon av quinine i ppm i den opprinnelige løsningen.

---

Dette er standard tilsetning

I dette tilfellet er:  $b = 0,656$  (absorbans ved tilsatt 0 ml standardløsning)

$$c_s = 25,7 \text{ ppm}$$

$$m = (0,976 - 0,656)/10,00 = 0,032$$

Finner stigningstallet for en kurve ved å ta to punkter på kurven, trekke det minste tallet fra det største (forutsatt at kurven har et positivt stigningstall) og deretter dele på forskjellen mellom punktene, her 10,0 fordi verdiene er målt ved 0 ml og 10,0 ml tilsatt standardløsning.

$$V_x = 25,0 \text{ ml}$$

Setter inn i ligningen og finner: 
$$c_x = \frac{b \times c_s}{m \times V_x} = \frac{0,656 \times 25,7 \text{ ppm}}{0,032 \times 25,0} \approx 21,1 \text{ ppm}$$

---

b) En løsning som inneholder 6,23 ppm  $\text{KMnO}_4$  har en transmittans på 0,195 i en 1,00 cm kyvette målt ved 520 nm.

Beregn molar absorptivitet for  $\text{KMnO}_4$  ved 520 nm.

Oppgitt:  $M_m(\text{KMnO}_4) = 158,1 \text{ g/mol}$

---

Beer's lov:  $A = \epsilon bc$  hvor  $\epsilon =$  molar absorptivitet ( $\text{liter mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ )

$b =$  lengde lysvei, her 1,00 cm

$c =$  konsentrasjon i molar (mol/l)

$A =$  absorpsjon

som gir: 
$$\epsilon = \frac{A}{b \times c}$$

$A = -\log T$  (transmittans) som gir:  $A = -\log 0,195 = 0,71$  når  $T = 0,195$

Nå vet vi  $A$  og  $b$ , men trenger å finne  $c$ . Den finner vi fra konsentrasjon i ppm.  
 $6,23 \text{ ppm} \approx 6,23 \text{ mg/liter}$

Mm (KMnO<sub>4</sub>) = 158,1 g/mol

6,23 mg  $\Rightarrow$  0,00623 g / (158,1 g/mol) = 3,94 x 10<sup>-5</sup> mol

$\Rightarrow$  3,94 x 10<sup>-5</sup> mol/liter

Molar absorptivitet:  $\epsilon = \frac{0,71}{1,00\text{cm} \times 3,94 \times 10^{-5} \text{ mol/liter}} = 18019,4 \frac{\text{liter}}{\text{mol} \times \text{cm}}$

---

## Formler – IRK21515 Instrumentell analyse 1

### Kalibrering, sammenheng mellom respons og konsentrasjon av analytt

Ekstern standard:  $c_x = \frac{y-b}{m}$       hvor  $y = \text{respons}$   
 $x = \text{konsentrasjon av analytt}$   
 $m = \text{stigningstall}$   
 $b = \text{skjæringspunkt}$

Intern standard:  $c_x = \frac{\left( \frac{\text{respons analytt}}{\text{respons intern standard}} \right) - b}{m}$

Standard tilsetning:  $c_x = \frac{bc_s}{mV_x}$       hvor  $c_x = \text{konsentrasjon av analytt}$   
 $c_s = \text{konsentrasjon av tilsatt}$   
 standard

$V_x = \text{volum tilsatt prøve}$

eller fra ekstrapolert volum ( $-V_0$ ):  $c_x = \frac{V_0 c_s}{V_x}$

### Elektromagnetisk stråling, basic

$v = \nu\lambda$       hvor  $v = \text{hastighet (m/s)}$   
 $\nu = \text{frekvens (s}^{-1} \text{ eller Hz)}$   
 $\lambda = \text{bølgelengde (m)}$   
 I vakuum:  $v = c = 3,000 \times 10^8 \text{ m/s}$

$\bar{\nu} = \nu/c = 1/\lambda$       hvor  $\bar{\nu} = \text{bølgetall (cm}^{-1}\text{)}$

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

hvor

E = energi (J)

h = Plank's konstant =  $6,626 \times 10^{-34}$  Js

$\nu$  = frekvens ( $s^{-1}$ )

### Diverse størrelser

Elektronvolt, eV:  $1 \text{ J} = 6,24 \times 10^{18} \text{ eV}$

Avogadro's tall =  $N_A = 6,022 \times 10^{23}$  enheter/mol

Hastighet for elektromagnetisk stråling i vakuum:  $c = 3,000 \times 10^8 \text{ m/s}$

Plank's konstant:  $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$

### Refraksjon og refleksjon

Brytningsindeks, def.:  $n_i = \frac{c}{v_i}$   
frekvens/bølgelengde  $i$

hvor  $n_i$  = brytningsindeks for

$v_i$  = hastighet i medium

Snell's lov:  $\frac{n_2}{n_1} = \frac{v_1}{v_2} = \frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2}$

for stråling som beveger seg fra medium 1 med brytningsindeks  $n_1$  og hastighet  $v_1$  til medium 2 med brytningsindeks  $n_2$  og hastighet  $v_2$ , og  $\theta_1$  er innfallsvinkel og  $\theta_2$  er refraksjonsvinkel.

Brytningsindeks angis ofte som  $n_D$  fordi den måles som brytning av D-linje for Na.

Andel refleksjon for stråle som treffer grenseflate mellom to medier:

$$\frac{I_r}{I_0} = \frac{(n_2 - n_1)^2}{(n_2 + n_1)^2}$$

hvor  $I_r$  er intensitet for reflektert stråle,  $I_0$  er intensitet for innkommende stråle og  $n_1$  og  $n_2$  er brytningsindekser for de to mediene.



## Fotoelektrisk effekt

Max kinetisk energi for fotoelektron:  $KE_m = h\nu - \omega$

hvor  $\omega$  = arbeidsfunksjon

$\nu$  = frekvens

$$\text{Dette gir: } E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = KE_m + \omega$$

## Absorbans og transmittans

$A = -\log T = \log(P_0/P)$

hvor  $A$  = absorbans

$T$  = transmittans

$P_0$  = styrke av innkommende stråling

$P$  = styrke av transmittert stråling

Beer's lov:  $A = \epsilon bc$

hvor  $\epsilon$  = molar absorptivitet (liter mol<sup>-1</sup> cm<sup>-1</sup>)

$b$  = lengde av lysvei (cm)

$c$  = konsentrasjon av analytt (mol/liter)

## Filter og gitter

Bølgelengde sluppet gjennom av interferens-filter:  $\lambda = \frac{2dn_D}{n}$

hvor  $d$  = tykkelse av dielektrisk materiale

$n_D$  = brytningsindeks for dielektrisk materiale

$n$  = interferensorden

Bølgelengde som gjennomgår konstruktiv interferens for Echellette-type gitter:

$$n\lambda = d(\sin i + \sin r)$$

hvor  $d$  = avstand mellom linjer (riller)

$i$  = innfallsvinkel

$r$  = diffraksjonsvinkel (refleksjonsvinkel)

$n$  = interferensorden

Resiprok lineær dispersjon for Echellette-type gitter:

$$D^{-1} = \frac{d \cos r}{nf} \approx \frac{d}{nf}$$

når r er liten ( $< 20^\circ$ )

hvor d = avstand mellom linjer (riller)

r = diffraksjonsvinkel (refleksjonsvinkel)

**n** = interferensorden

f = fokallengde

Oppløsning til Echellette-type gitter:  $R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = nN$

hvor  $\lambda$  = gjennomsnittsbølgelengde for de to bølgelengdene som kan skiller

$\Delta\lambda$  = differanse mellom de to bølgelengdene

**n** = interferensorden

**N** = Antall linjer (riller) opplyst av stråling fra inngangsslit

Bølgelengde som gjennomgår konstruktiv interferens for Echelle-type gitter:

$$n\lambda = 2d \sin \beta$$

hvor d = avstand mellom linjer (riller)

$\beta$  = innfallsvinkel  $\approx$  diffraksjonsvinkel

**n** = interferensorden

Resiprok lineær dispersjon for Echelle-type gitter:

$$D^{-1} = \frac{2d \cos \beta}{nf}$$

hvor d = avstand mellom linjer (riller)

$\beta$  = innfallsvinkel  $\approx$  diffraksjonsvinkel

**n** = interferensorden

f = fokallengde

Evne til å samle innkommende stråling:

Hastighet = f-nummer  $F = f/d$

hvor  $f$  = fokallengde for kollimerende linse/speil

$d$  = diameter for kollimerende linse/speil