

Spektroskoopilised analüüsimeetodid

LOKT.06.017 (6 EAP)

<http://tera.chem.ut.ee/~ivo/Spec/>

Ivo Leito (vastutav: ivo.leito@ut.ee), Koit Herodes

05.09.2018

Ainekava

Kursuses käsitletakse praktilise analüütilise keemia seisukohast süvendatult ja konkreetsetele analüüsimeetoditele orienteeritult mõningaid levinumaid molekulspektroskoopia meetodeid.

1. **Sissejuhatus.** Ülevaade kursusest. Elektromagnetkiirgus, selle vastasmõju ainega ja sellest tulenevad erinevad spektroskoopilised meetodid.
2. **UV-Vis spektroskoopia**
 - 2.1. **UV-Vis spektroskoopia, molekulide UV-Vis spektrid (kordamine).** Molekulide UV-Vis spektrid, nende seos molekuli elektronstruktuuriga. Kromofoorid. UV-Vis spektroskoopia aparatuuride komponendid (allikad, monokromaatorid, detektorid, valgusjuhid, ...) ja realiseerimised. Meetodi võtmeaspektid. Lisaseadmed UV-Vis spektrofotomeetritele.
 - 2.2. **UV-Vis spektrofotomeetrilise analüüsimeetodika diskuteerimine:** Valgusisalduse määramine toiduainetes.
3. **Infrapunane spektroskoopia**
 - 3.1. **Infrapunase spektroskoopia põhimõte ja aparatuur (kordamine).** Molekulid, nende võnkumised. Kiirgusallikad. Detektorid. Aparatuuride ehitus. IR spektroskoopia. Võrdlus UV-Vis spektroskoopiaga.
 - 3.2. **ATR IR spektroskoopia, rakendus rasvade ja õlide uurimisel.** ATR-IR spektroskoopia. Trans-rasvhapete määramine toidurasvades ja õlides. Konkreetse rakenduse diskussioon.
 - 3.3. **IR spektroskoopia rakendused gaasianalüüsis.** IR Gaasianalüüsisaatorid ja nendel põhinevad analüüsisaatorid. TOC-TIC analüüsisaatori diskussioon.
4. **Lähi-Infrapunane (NIR) Spektroskoopia.** Põhimõte. Aparatuur, neeldumis- ja peegeldumisspektromeetrid. Võrdlus UV-Vis ja IR spektroskoopiaga. Struktuuri ja spektrite vahelised seosed. Multilineaarne kalibreerimine.
 - 4.1. **NIR Rakendused toiduaidetööstuses.** Konkreetsete rakenduste diskussioon.
5. **Luminestsentsispektroskoopia**
 - 5.1. **Põhimõte, aparatuur (kordamine).** Luminestsents, fluorestsents ja fosforestsents. Energianivood ja üleminekud molekulides. Ergastus- ja emissioonispektrid. Ergastusallikad, aparatuuride konstrueerimised. Seosed molekulide struktuuri ja luminestsentsomaduste vahel. Fluorestsents-spektroskoopia kui meetodi omadused. Nõuded proovidele.
 - 5.2. **Luminestsentsi eritehnikad.** Fluorestsents-märgistamine. Valguse Polariseerimisastandi pöördumise mõõtmine. Ergastusenergia ülekanne (FRET). Luminestsentsi eluea mõõtmine. Fluorestsentsseerivad valgud.
 - 5.3. **Luminestsentsispektroskoopia rakendusnäite diskussioon:** Ammoniaagi määramine õhus.
 - 5.4. **Luminestsentsispektroskoopia rakendusnäite diskussioon:** Eritehnikad.
6. **Raman spektroskoopia**
 - 6.1. **Põhimõte, aparatuur (kordamine).** Raman hajumine ja fluorestsents. Raman spektrid. Raman spektrijoone tekketingimus. Dispersiivne ja FT Raman spektroskoopia. Nõuded proovidele. Raman eritehnikad.
 - 6.2. **Raman spektroskoopia rakendusnäide:** Ravimpreparaadi analüüs.
7. **Protsessispektroskoopia.** Nõuded spektroskoopilistele meetoditele tööstusprotsesside kontrollimisel ja juhtimisel. Diskussioon.