

2. ENSTRUMENTAL ANALİZ YÖNTEMLERİ

2.1 GENEL BİLGİLER

Organik maddelerin gerek nicelik (kantitatif), gerekse nitelik (kalitatif) açıdan analizlerini gerçekleştirmek için, bu maddelerin değişen fiziksel özelliklerinin ölçülmesinden yararlanılmaktadır. Bu amaçla çeşitli yöntemler geliştirilmiştir. Bu yöntemlerin herbiri ile maddenin değişen bir fiziksel özelliği ölçülür. Yöntem maddenin hangi fiziksel özelliği için geliştirilmişse, o fiziksel özelliğin adı ile anılır. Örneğin, maddenin kütleini ölçmek için geliştirilen yöntem **gravimetri**, maddenin hacmini ölçmek için geliştirilen yöntem **volumetri**, maddenin elektrik potansiyelini ölçmek için geliştirilen yöntem **potansiyometri**, maddenin ışın absorblanmasını ölçmek için geliştirilen yöntem **absorbimetri** denir. Maddenin değişen bu fiziksel özellikleri bir alet yardımıyla ölçülüyorsa, bu tür analiz yöntemlerine de **Aletli (Enstrumantal) Analiz Yöntemleri** denir. Bu tür yöntemlerin uygulanması ile hem kısa sürede sonuç almak hem de organik bileşiklerin mg (hatta mikro-gram) düzeyindeki miktarlarının doğru, hassas ve kesin olarak nicel ya da nitel analizlerini yapmak mümkün olmaktadır. Aletli analiz yöntemleri arasında çok yaygın olarak kullanılan yöntemlerin başında, **spektroskopik yöntemler** gelmektedir. Spektroskopik yöntemlerin uygulanması ile, maddenin elektromanyetik radyasyon (**ışınım** ya da bir başka deyişle ışın) yayması, elektromanyetik radyasyonu absorblaması (**soğurması**), saçması, saptırması ve dağıtması gibi, maddenin ışınım ile etkileşimi ve bu etkileşimin sonuçları analitik amaçlara yönelik olarak incelenir.

UV-Görünür Alan Spektroskopisinin de aralarında bulunduğu bir grup yöntem (Kolorimetri, IR, X-Işınları Spektroskopisi, NMR, Elektron-Spin Spektroskopisi vb.) elektromanyetik radyasyonun (ışınım) absorblanması esasına göre geliştirilmiş olup analiz amacıyla uygulanmaktadırlar.

2.1.1 Elektromanyetik Radyasyon (Işınım)

Elektromanyetik radyasyon, uzayda çok büyük bir hızla ilerleyen bir enerji şeklidir. Ancak uzayda dalgalar halinde yayılan başka enerjiler de vardır ama bunlar (dalgalar halinde yayılan her enerji) ışınım değildir. Işınım boşlukta enerjisinden hiçbirşey kaybetmeden yayılır. Görünür bölgedeki ışınlar, UV ve IR bölgelerinde bulunan ışınlar, X ışınları, γ ışınları, mikro dalgalar ve radyo dalgaları hep elektromanyetik radyasyona örnek gösterilebilecek ışınım tipleridir. Bunları birbirinden farklılaştıran özellikleri ise, frekanslarının (birim zamandaki titreşim sayısı) değişik olmasıdır. (Örneğin, İnsan gözü λ : 400-750 nm frekans değerleri arasındaki ışınımı algılayabilir ve bu bölgedeki ışınımın mor, mavi, yeşil, sarı, turuncu ve kırmızı renklerde görünürler).

Frekans değerleri farklı olan ışınımın, bu değerler dikkate alınarak sıralandığında, elektromanyetik spektrum elde edilir. Tablo 2.1.1'de, değişik ışınım tipleri frekanslarına (aynı zamanda dalga boyu ve enerji düzeylerine ve pratikteki sonuçlarına göre) sıralanarak elektromanyetik spektrum oluşturulmuştur.

Tablo 2.1.1. Elektromanyetik spektral bölgeleri

Spektral bölge	Dalga boyu	Uyarılma Sonucu
Gama ışınları	0.0001-0.01 nm	Çekirdek reaksiyonları
X ışınları	0.01-10 nm	İç elektronların transisyonu
Uzak UV	10 -200 nm	Atom veya moleküllerin iyonizasyonu
Yakın UV	200 -380 nm	Dış yörünge elektronlarının transisyonu
Visibl	380 -780 nm	Dış yörünge elektronlarının transisyonu
Yakın IR	0.78 -1.5 μ	Moleküler vibrasyon ve rotasyon
IR	1.5 -25 μ	Moleküler vibrasyon ve rotasyon
Uzak IR	25 μ -1mm	Moleküler rotasyon
Mikro dalgalar	0.1 – 100 cm	Moleküler rotasyon
Radyo dalgaları	100 cm – 10-15 km	Nükleer manyetik rezonans

Bir madde kendi özelliğine bağlı olarak, üzerine düşürülen çeşitli dalga boylarındaki (ultraviyole ışınlarından, radyo dalgalarına kadar)

ışınlardan bazılarını absorblar, bazılarıyla ise hiç ilişkiye girmez. İşte maddenin bu özelliğinden yararlanılarak yapısı ve konsantrasyonu tayin edilebilir, yani kalitatif ve kantitatif analizi yapılabilir. Bu amaçla madde üzerine dalga boyu birbirinden çok farklı olan ışınlar düşürülür ve alet yardımıyla bunların hangilerinin (özelliğine bağlı olarak) madde tarafından absorblandığı saptanır. Ancak, pratikte bütün bu dalga boylarında ışınım verecek ve bunların arasından da hangilerinin absorblandığını saptayacak tek bir cihaz yapmak uygun olmadığından, belirli dalga boyları arasında çalışan cihazlar (aletler) geliştirilmiştir. Örneğin, dalga boyları binlerce metreye varan radyo dalgalarıyla analizlerin yürütüldüğü aletlere; Manyetik Rezonans, dalga boyu 200-750 nm arasındaki ışınlarla çalışan aletlere; UV (ultraviyole) - Görünür Alan ve 2500-25000 nm dalga boylarındaki ışınlarla çalışan aletlere de; Infrared Spektrofotometresi adı verilir. Bu aletlerden yararlanılarak yürütülen analiz yöntemlerine de sırasıyla, NMR, UV-Görünür Alan ve IR- spektroskopileri denir.

2.1.2 Elektromanyetik Radyasyonun Temel Özellikleri

Işınımın birden çok temel özelliğinden (dalga boyu, periyodu, frekansı, hızı, dalga sayısı gibi) söz edilebilir. Ancak daha önce ışınımın hem dalga hem de foton özelliğinin (bir ışının dalga özelliğinin yanında, parçacık özelliği de vardır ve bu parçacıkların herbirine, foton denir) bulunduğunu ve cinsinin frekans veya foton başına düşen enerji ile belirtileceğini söylememiz gerekir. Işığın şiddeti, ışık demeti içindeki foton sayısı ile ilgilidir ve enerji birimleriyle ölçülür. Işık enerjisinin absorbsiyonunda, molekül kuantlanmış (değişken) miktarda enerji alıp vereceğine göre, tek frekanslı (belli düzeydeki) bir ışınımı absorblar. Bu bileşiğin bütün molekülleri için geçerlidir ve böylece spektrumda absorbsiyon çizgileri görülür. Fakat belli bir elektronik seviyede olan her molekül aynı zamanda değişik titreşim ve dönme seviyelerinde olduğundan bunlar spektruma absorbsiyon bantları ve pikleri şeklinde yansır. Işınımın diğer temel özellikleri ise aşağıdaki gibi sıralanabilir:

Dalga boyu (λ): Bir ışının dalga hareketinin ard arda gelen iki maksimumu (tepe noktası) arasındaki uzaklığa, o ışının dalga boyu denir.

Dalga boyu, metre, cm, mm, mikron (μ), nanometre (nm), angström (Å) gibi birimlerle ifade edilir. Bunların arasındaki ilişki;

$$1 \text{ cm} = 10^4 \mu = 10^7 \text{ nm} = 10^8 \text{ Å} \quad (1 \mu = 1000 \text{ m}\mu), \quad (1 \text{ nm} = 1 \text{ m}\mu = 10 \text{ Å})$$

Frekans (ν): Birim zamandaki (saniyedeki) titreşim sayısıdır. Aynı zamanda bir ışının saniyedeki periyot sayısına ($1/p$) da frekans denir. Birimi hertz dir (1 milyon hertz: 1 MegaHertz).

Periyot (P): Birbirini izleyen iki dalga tepesinin belli bir noktadan geçmesi için gerekli süredir. Birimi (sn) dir.

Hız (c): Işının birim zamanda aldığı yoldur. Her çeşit ışının vakumdaki hızı aynıdır ve (c) ile gösterilir ($c = 3.10^{10} \text{ cm/sn}$). Bir ışının hızı vakumdan, herhangi bir ortama geçişte azalır ve (c_i) ile gösterilir. Buna göre herhangi bir ortamdaki ışın hızı; $c_i = \nu \cdot \lambda$ denklemiyle ifade edilir.

Dalga sayısı ($\bar{\nu}$): Birim uzaklıktaki (örneğin 1 cm'deki) dalga sayısıdır. Birimi cm^{-1} dir.

$$\bar{\nu} = 1 / \lambda \text{ olarak ifade edilir.}$$

2.1.3 Işınımın Tanecik Özelliği, Taneciklerin Enerjisi ve Dalga Boyu İlişkisi

Daha önce ışının dalga özelliğinin yanısıra tanecik özelliğinin de bulunduğunu ve bu taneciklere foton denildiğini belirtmiştik. Fotonlar belli bir enerjiye sahiptirler ve bu radyasyonun (ışınımın) frekansını belirler. Radyasyonun sahip olduğu enerji yukarıda verilmiş olan temel özellikleri dikkate alınarak bulunur. Buna göre bir molekülün ışınımı absorblaması durumunda enerji artışı;

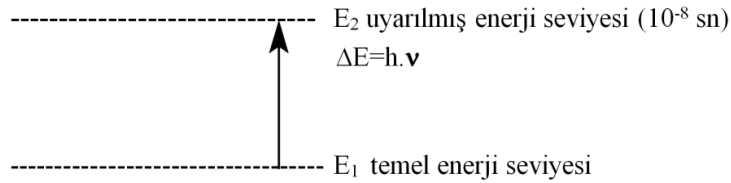
$$E = h \cdot \nu = h \cdot c / \lambda \text{ eşitliğiyle bulunur (h = Planck sabiti: } 6.63 \times 10^{-27} \text{ erg.sn)}$$

Yukarıdaki denklem (Foton'un kütlelerinin (N), birbirinden farklı olduğu göz önüne alınarak); $E = N \cdot h \cdot \nu = N \cdot h \cdot c / \lambda$ şeklinde yazılabilir ve buradan da Foton'un (ışık ışınlarının) enerjisi ile dalga boyunun ters orantılı olduğu anlaşılır.

Her bir spektroskopik yöntemin uygulanışı sırasında, fotonların (ışık ışınlarının) sahip oldukları ve yukarıda sözü edilen enerjiler, moleküller tarafından farklı amaçlarla absorblanırlar. Absorlanan ışık ışınlarının yöntemine uygun alet (Spektrofotometre) tarafından saptanıp, değerlendirilmesiyle de elde edilen veriler (Spektrum) absorpsiyonu yapan maddeye ilişkin analizi sonuçlandırmamıza yardımcı olur.

2.1.4 Işının Absorblanması ve Lambert-Beer Kanunu

Madde ile ışının etkileşmesi sonucu meydana gelecek olaylardan en önemlisi ışının absorblanmasıdır. Çeşitli dalga boylarında ışın içeren bir demet, saydam bir ortamdan geçirilirse, içinden bazı dalga boylarının kaybolduğu görülür. Buna **ışının absorblanması** denir. Belli dalga boyundaki ışınlar absorblandığında ışının enerjisi maddeye geçer ve maddenin molekülleri, atomları, elektronları daha yüksek enerjili hale geçer ki, bu olaya **atom veya moleküllerin uyarılması** (Şekil 2.1.1) denir.



Şekil 2.1.1. Atom veya moleküllerin uyarılması

Uyarılmış halde 10⁻⁸ sn kalan atom veya moleküller, tekrar temel enerji seviyesine dönerler ve uyarılmış halde iken aldıkları enerjiyi ısı veya ışık şeklinde geri verebilirler. Enerjinin ışık olarak yavaş yavaş (saatler boyu) geri verilmesine **fosforesans**, daha kısa sürede (anında) geri verilmesine ise, **fluoresans** denir.

Sonuçta maddeye belli bir doğrultuda gelen (**I₀**) gücündeki bir ışığın, aynı doğrultuda maddeyi terkederken gücü azalır ve (**I**) olur. Zira çözelti tarafından bir kısmı absorblanır ve bir kısmı da yansır. Burada sözü edilen (**I₀**) ve (**I**) değerleri arasındaki ilişki, **Lambert-Beer Kanunu** ile ifade edilir ve UV-Spektroskopisinde de bundan yararlanır. Bu kanuna göre, saydam bir çözeltiliye gönderilen ışın demetinin şiddetinin azalması, gönderilen ışın demetinin şiddeti kadar, içinden geçtiği çözeltideki moleküllerin konsantrasyonu ve gönderilen ışın demetinin geçtiği yolun uzaklığı ile de ilgili ve doğru orantılıdır. Dolayısıyla çalışma koşulları (gönderilen ışığın şiddeti ve katettiği yol açısından) sabit tutulursa, sonuç doğrudan çözeltideki atom ve moleküllerin konsantrasyonu ile ilişkili hale gelir ve bundan da UV spektroskopisinde kantitatif analiz amacıyla yararlanır.

Lambert-Beer Kanunu yukarıda söylenenler açısından şöyle ifade edilebilir:

$$\text{Log } I_0 / I = A \text{ (Absorbans)} = k.l.c$$

I_0 = Gelen ışığın şiddeti

I =Örnekten çıkan ışığın şiddeti

l = Işığın örnek içinden geçtiği yolun uzunluğu

c = Konsantrasyon (g/l)

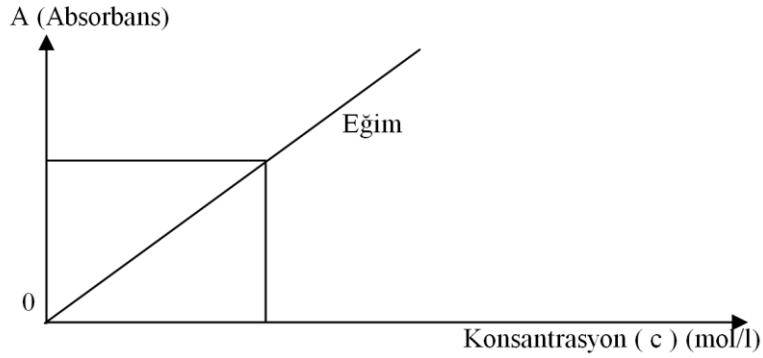
k = Absorbsiyon katsayısı

ϵ = Konsantrasyon mol/litre ise absorpsiyon katsayısı epsilon ile gösterilir ve molar absorptivite olarak adlandırılır.

A =Absorbans (Optik dansite, Ekstinksiyon) değeri olup bunun tersi de (T) transmittans, yani geçirgenliktir ve $T = I / I_0$ şeklinde ifade edilir.

Beer Kanunu ile absorbtivitenin, konsantrasyon, hücrenin kalınlığı ve ışığın şiddetinden bağımsız bir sabit olduğu belirtilir. Fakat sıcaklığın, dalga boyunun ve çözücünün etkisi hakkında bir fikir vermez. Pratikte sıcaklığın etkisi ihmal edilebilir. Çözücü ise her spektrumda belirtilmelidir. Fakat sabit sıcaklık ve belli bir çözücü için de absorbtivite sabit kalmayabilir. Absorbans (A), konsantrasyona (c) karşı grafiğe geçirilecek olursa, Beer kanununa göre sıfır noktasından geçen bir doğru elde edilir (şekil 2.1.2). Bazen Beer kanunundan da sapmalar olabilir. Bunlar genelde

kimyasal örneğin çözücü ile etkileşme, polimerleşme ve aletten ileri gelen sapmalar şeklindedir. Absorbansa karşı konsantrasyon $\{A / c\}$ grafiğinde elde edilen bu doğru, belli bir bileşik için çizildiğinde kalibrasyon eğrisi olarak kullanılabilir ve bu bileşiğin bilinmeyen konsantrasyonunun absorbansı okunarak bu eğri yardımıyla kantitatif miktar tayini yapılabilir. Mecbur olmadığı sürece bu tür çalışmalarda, 0.2-0.9 absorbans değerleri dışına çıkmamak gerekir. Doğrusal ilişkiyi kurup, hassas sonuç elde etmek için en iyi sonuçlar, çözeltinin molar konsantrasyonu 10^{-3} ile 10^{-5} arasında iken alınır.



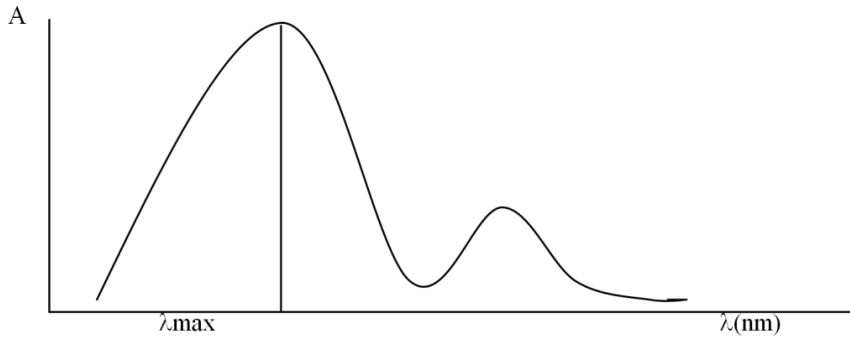
Şekil 2.1.2. Kalibrasyon eğrisi

Maddenin fiziksel özelliklerini bir alet kullanmak suretiyle ölçerek yapılan enstrumantal analiz yöntemleri, organik bileşiklerin mg ölçüsündeki miktarlarının doğru, hassas ve kesin olarak nicel ya da nitel tayinlerine olanak sağlar. Bu spektroskopik yöntemler aşağıda verilen başlıklar altında sırasıyla incelenecektir:

- Ultraviyole ve görünür alan spektroskopisi
- Infrared spektroskopisi
- Nükleer manyetik rezonans spektroskopisi
- Kütle spektroskopisi

2.2 ULTRAVİYOLE VE GÖRÜNÜR ALAN SPEKTROSKOPİSİ

Görünür bölge ve mor ötesi (UV) spektroskopisi, moleküllerdeki elektronik geçişlerin (kendilerine gerekli olan enerjiyi sağlamak amacıyla) absorladıkları ışınımın verdiği spektrumların değerlendirilmesi esasına dayanır. Elektromanyetik radyasyonun 200-400 nm dalga boyundaki ışınları içeren bölgesi UV (Ultraviyole / Mor Ötesi) bölgesidir. 10-200 nm arasındaki ışınlar havada bulunan oksijen tarafından absorblandığı için, bu bölgede özel düzenekler yardımı ile ve havadan arınmış ortamda (vakumda) çalışıldığından bu bölgeye, Vakum UV (Uzak UV) denir. 200-400 nm deki ışınlardan yararlanan bölgeye de mor ötesi (UV) bölgesi denilir. Ancak bu bölgedeki ışınlar da adi cam tarafından absorblandığı için, UV spektroskopisinde kullanılan prizma cam ve mercekler, kuvarz camdan yapılmıştır. Görünür Bölge sınırları ise, 400-780 nm dir. Aletlerde, farklı dalga boylarında ışınım elde etmek için görünür ve UV bölgeleri için farklı tipte ışık kaynağından yararlanılmaktadır. Gelişmiş spektrofotometreler, her iki tipteki ışınım kaynağına da sahiptirler ve frekansı düzgün ve otomatik olarak değiştirirler. Sonuçta gönderilen ışınım demeti arasından absorblanan ışınım veya ışınım demetleri alet tarafından detektör aracılığıyla duyarlı bir biçimde saptanır ve spektruma (absorbans bantı olarak) aktarılırlar. Işığın dalga boyu veya frekansına karşı, absorpsiyon miktarının ya da diğer bir deyişle absorbans ve transmittans arasındaki ilişkinin grafiğe geçirilmesine “**absorpsiyon spektrumu**” denir (şekil 2.2.1).



Şekil 2.2.1. Absorpsiyon spektrumu

2.2.1 UV ve Görünür Alanda Organik Maddelerin Absorbsiyonu

Işın enerjisi veya elektromanyetik enerjiyi absorblayan, maddenin en dış tabaka elektronları veya bağ elektronlarıdır. Bunlar ışık ışınlarını absorblayınca, daha önce de belirtildiği gibi daha yüksek enerji seviyelerine çıkarlar. Bazı bağların enerjileri düşüktür ve düşük enerjili (uzun dalga boylu) ışınları absorblarlar. Bazı bağların ise, enerjileri daha büyüktür ve bunlar da daha yüksek enerjili (kısa dalga boylu) ışınları absorblarlar (bu farklılık, yani farklı dalga boyundaki ışınların farklı bağlarca absorblanması bize analiz olanağı vermektedir. Örneğin, tek bağlı ve üzerinde fonksiyonel grup taşımayan bir molekül, oldukça kısa dalga boylu yani enerjisi yüksek ışınları absorblar, ancak aynı ışınlar havadaki diğer moleküllerce de absorblandığından bu tür moleküllerle çalışmak için havasız ortamda, yani vakumda çalışmak gerekir. Fonksiyonel grup taşıyan moleküllerdeki elektronlar daha kolaylıkla üst enerji seviyelerine çıkabildiklerinden, bunların uyarılması için daha düşük enerjili (dalga boyu daha uzun) ışınlar yeterli olabilmektedir.

2.2.2 Absorbsiyon ve Spektrumların Açıklanmasında Yararlanılan Teori

Konuya ilişkin diğer bazı teorilerin yanında, absorbsiyon ve spektrumların oluşumunun açıklanmasında yararlanılan esas teori, **Moleküler Orbital Teorisi**'dir. Teorinin esası aşağıda belirtildiği gibi, analizlenen moleküllerdeki, moleküler bağ orbitallerinin, anti-bağ orbitallerinin ve absorbsiyondan sorumlu elektronların varlığına dayanmaktadır.

Moleküler Orbital: İki atom arasında bağ elektronları tarafından işgal edilen ve lokalize olmamış elektron bulutuna ya da diğer bir deyişle, bindirilmiş atom orbitallerine, moleküler orbitaldenir.

Moleküler Bağ Orbitali: İki atom orbitalinin birbiri üstüne bindirmeleriyle (iç içe girmesiyle) bu atomların orbitallerinin enerji seviyeleri toplamından daha düşük enerji seviyesinde meydana gelen orbitale moleküler bağ orbitali denir. İki şekilde oluşabilir:

- İçindeki elektronların mono-valan (tek) bağ yaptığı orbitale ; sigma molekül orbitalidir ve (σ) ile gösterilir (tek bağlar aynı zamanda ; sigma elektronlarının oluşturduğu σ bağları olarak da anılırlar).
- İçindeki bağların çift bağ yaptığı orbitale; pi- molekül orbitalidir ve (π) ile gösterilir. (çift bağlar aynı zamanda, π elektronlarının oluşturduğu π bağları olarak da anılırlar).

Anti-bağ orbitali: İki atom orbitalinin birbiri üstüne bindirmeleriyle (iç içe girmesiyle) bu atomların orbitallerinin enerji seviyeleri toplamından daha yüksek enerji seviyesinde meydana gelen orbitale karşı / anti- bağ orbitali denir bu da (σ^*) ve (π^*) şeklinde gösterilir.

Absorbsiyondan Sorumlu Elektronlar ve Absorbsiyon: Organik bir moleküle absorpsiyon özelliği kazandıran ya da absorpsiyondan sorumlu (dış tabaka elektronları olarak da nitelendirilen) elektronlar şu şekilde sıralanabilirler;

- Moleküldeki atomları birbirine bağlayan elektronlar ;
- Tek bağ, (σ) elektronları halinde
- Çift bağ, (π) elektronları halinde
- Moleküldeki (O,S,N ve X gibi) hetero atomlar üzerinde ortaklanmamış halde bulunan (**n**) elektronları

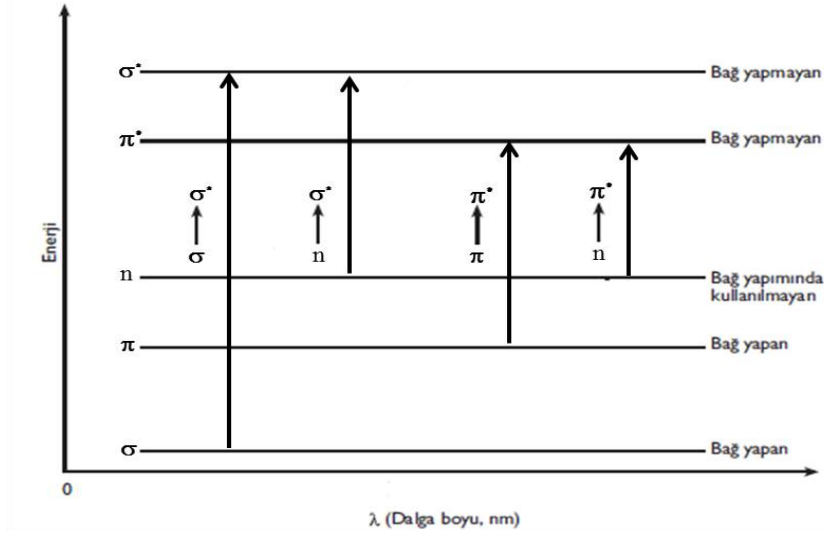
Absorbsiyonun Gerçekleşmesi ve Kromofor Gruplar: Absorpsiyon, yukarıda sıraladığımız elektronların kendilerine uygun seviyedeki enerjiye sahip ışınlarla karşılaşmaları durumunda, bunları absorblayarak başlangıçtaki (σ), (π) ve (**n**) yani bağ-orbitali enerji düzeyinden, anti-bağ enerji düzeyleri olan (σ^*) ve (π^*) düzeylerine sıçrama girişimiyle gerçekleşir (**n**-elektronları da enerji alıp, sıçrama yaptıklarında, σ^* ve π^* seviyelerine sıçrarlar (Şekil 2.2.3.1)).

UV veya görünür bölgedeki absorpsiyon pikleri de, analizlenen moleküldeki bir elektronun bağ-orbitalinden (temel durumdaki orbital olarak da adlandırılır), daha yüksek (enerjili) bir orbitale sıçrama gayreti sonucu oluşur. Moleküllerin böyle bir sıçramayı gerçekleştirebilmesi için, enerjiye gereksinimleri vardır ve gereksinim duydukları enerji düzeyindeki ışınlarla

karşılaştıklarında, bunları absorblayarak bu enerjiye erişirler ve sonuçta eksilen bu ışın ya da ışın demetlerinin spektruma yansınmasıyla pikler oluşur. Normal olarak bu geçişe ait enerji orbitallerin durumuna bağlı olup molekülün geri kalan kısmı ile pek ilgili değildir. Bundan dolayı basit bir fonksiyonlu grup, Örneğin $-C=C-$ çifte bağı daima aynı bölgede absorpsiyon yapar. Bu şekilde absorpsiyon yapan gruplara “**kromofor**” denir. Genellikle UV spektrumu doymamışlık içeren bileşikler için analizde yararlanabileceğimiz bilgiler verir ($-C=C-$ çifte bağlı bileşiklerde $\pi-\pi^*$ geçişleri vardır ve bunların enerjisi $\sigma-\sigma^*$ geçişlerinden daha düşüktür ve dolayısıyla pratikte kullanılan ışınların enerjisiyle uyum gösterir (şekil 2.2.3.1).

2.2.3 Moleküler Orbital Enerji Seviyeleri ve Seviyeler Arasındaki Geçişler

Moleküllerdeki orbitallerin ve dolayısıyla bu orbitallerdeki elektronların enerji seviyelerinin birbirinden farklı olduğunu daha önce Moleküler Orbital Teorisine göre açıklamıştık. Bağ yapmayan (ortaklanmamış n) elektronların enerji seviyeleri, bağ yapan elektronların (σ , π moleküler bağ orbitallerinin) enerji seviyeleri ile bağa karşı olan elektronların (σ^* , π^* anti-bağ orbitallerinin) enerji seviyeleri arasındadır.



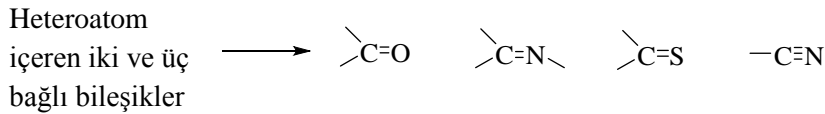
Şekil 2.2.2. Elektronların uyarılma enerji seviyeleri ve elektronik geçiş tipleri

Şekil 2.2.2'den de anlaşılacağı gibi sigma (σ) ve pi (π) orbitalindeki bir elektron ışın enerjisi absorbladığında, yalnızca kendisinin üst enerji seviyesi olan anti-bağ moleküler orbitallerine ($\sigma - \sigma^*$ ve $\pi - \pi^*$) geçtiği halde, bağ yapmayan (ortaklanmamış - n) elektronlar her iki bağında anti orbitallerine ($n - \sigma^*$ ve $n - \pi^*$) geçebilmektedirler.

Geçişlerin kendilerine has özellikleri kısaca ele alınacak olursa;

$\sigma - \sigma^*$ Geçişleri (125-150 nm): $\sigma - \sigma^*$ geçişleri en çok enerjiye ihtiyaç gösteren geçişlerdir. Uzak UV ışınlarına (125-150 nm) ihtiyaç vardır. C-H bağındaki bir elektronu uyarıp σ^* ne çıkarabilmek için 125 nm dalga boyunda bir ışına ihtiyaç olduğu halde, C-C bağındaki bir elektronu σ^* ne çıkarmak için 135 nm dalga boyunda bir ışına ihtiyaç vardır. Örneğin metan ve etanın spektrumları alındığında, metan 125 nm de tek, etan ise 125-135 nm de iki pik verir.

$\pi - \pi^*$ Geçişleri (200-700 nm): Çok rastlanan geçişlerden biridir. Bu geçişler, dalga boyu 200-700 nm olan daha az enerjili ışınlarla gerçekleştirilebilirler. Böyle geçişlere elverişli çifte bağı olan maddelerin spektrumları daha kolaylıkla alınır. Bu tip geçişlerin karakteristik olan bir yönü de çözeltiye bağlı olarak çözücünün polarlığının artmasıyla absorpsiyon pikinin daha uzun dalga boyuna kaymasıdır. Çözücüye bağlı olarak meydana gelen bu kaymaya **batokromik kayma** veya **kırmızıya kayma** adı verilir.



$n - \sigma^*$ Geçişleri (150-250 nm): Bu geçişler üzerinde ortaklanmamış serbest elektron çifti bulunduran bileşiklerde görülür. Bu geçişler yüksek enerji gerektiren geçişlerdir. Çözücü polarlaştıkça maksimum absorpsiyonda

alçak dalga boyuna doğru kayar. Bu kaymaya **hipsokromik kayma** veya maviye kayma denir. Tespiti çok güçtür, vakumda çalışmak gerekir.



X= Bağ oluşumunda kullanılmayan
elektronlara sahip atom (F, Cl, Br, I, S, N, O)

n - π* Geçişleri (200-700 nm): UV alanda yapılan çalışmaların pek çoğunda elde edilen pikler n - π* geçişlerinden ileri gelir. Bunların tespit edilmeleri oldukça kolaydır zira daha ziyade görünür alana düşerler. Bu geçişi meydana getiren maddelerin n elektronlarından başka π elektronlarının da bulunması gerekir. Absorbsiyon pikleri bu geçişte de çözücünün polaritesinin artması ile kısa dalga boyuna doğru kayar (Hipsokrom kayma; maviye kayma). Maviye kayma bazen 30 nm yi bulabilir. Bu kaymanın nedeni polar çözücülerde bulunan -OH gruplarının molekülün ortaklanmamış elektron çiftleri ile hidrojen bağları vermesindedir.

Hetero atom
içeren iki ve üç
bağlı bileşikler \longrightarrow $\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C}=\ddot{\text{O}} \\ \diagdown \end{array}$ $\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C}=\ddot{\text{N}} \\ \diagdown \end{array}$ $\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C}=\ddot{\text{S}} \\ \diagdown \end{array}$ $-\text{C}\equiv\ddot{\text{N}}$

$\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C}=\text{X} \\ \diagdown \end{array}$ X= Bağ oluşumunda kullanılmayan
elektronlara sahip atom (F, Cl, Br, I)

2.2.4 UV ve Görünür Alan Spektrofotometrelerinin Bölümleri

Cihazların başlıca kısımları şunlardır:

- Işın kaynağı
- Işın kaynağından gelen ışınları dalga boylarına göre ayıran kısım
- Çözelti ve çözücüyü koymaya yarayan şeffaf kaplar ve bunları hareket ettiren düzenek
- Işın enerjisini elektrik enerjisine dönüştüren kısım veya detektör
- Detektörde elektrik enerjisine dönüştürülen enerjinin şiddetini gösteren bir sinyal düzeneği (yazıcı)

Işın kaynağı: UV alanda yapılan çalışmalar için genellikle düşük basınçlı hidrojen ve döteryum lambaları kullanılır. cam UV ışığını absorbladığı için hidrojen lambaları kvartzdandır. Döteryum lambaları, ışığı daha kuvvetli olduğundan tercih edilir. Görünür alanda yapılacak çalışmalar için genellikle 320-2500 nm arasındaki tüm ışınları veren Wolfram lambası kullanılır.

Işın demetini dalga boyuna ayıran düzenekler: Bunlar başlıca iki kısma ayrılırlar.

- Filtreler
- Monokromatörler

Filtreler: Filtreler ile monokromatik ışın demeti elde edilemez. Ancak belirli aralıklardaki demetler elde edilir. Bu demetlerin içinde de çok sayıda dalga boyları vardır.

Monokromatörler: Çeşitli dalga boylarından oluşan bir ışın demetini tek dalga boylu demetler haline dönüştürmek için kullanılan düzeneklerdir. Başlıca üç kısımdan meydana gelirler.

- Işın demetinin giriş ve çıkış aralıkları: Bir monokromatör için aralıklar da oldukça önemlidir. Aralıklar birbirine yaklaşıp uzaklaşabilen iki sivri uç ile ayarlanırlar. Bazı monokromatörlerde bu aralık sabittir, bazılarında ise mikrometre düzeniyle daraltılıp genişletilebilir. Monokromatör ayarının değiştirilmesi ile çıkış aralığı üzerindeki görüntüsü yavaş yavaş kaybedilebilir. Böyle giriş aralığı görüntüsünü, çıkış aralığından tamamen uzaklaştırmak için dalga boyu ölçüsü cinsinden monokromatör ayarlanmasına band genişliği denir. Piklerin iyice ayrılması için mümkün olduğu kadar dar giriş ve çıkış aralıklarında çalışmak gerekir.
- Mercek sistemi
- Gelen ışını tek dalga boylu demetlere ayırmaya yarayan prizma veya optik ağı: Bunlar da prizmalar gibi UV ve görünür sahada tüm ışınları verebilirler.

Numune kapları: Cam ve plastik kaplar görünür alanda, silis kaplar UV, görünür ve IR alanda kullanılır.

Detektörler: Işık enerjisini elektrik enerjisine dönüştüren düzeneklere detektör denir. İyi bir detektör şu özellikleri taşımalıdır.

- Bütün dalga boylarına aynı derecede hassas olmalı
- Düşük enerjili ışın demetine dahi hassas olmalı
- Üzerine düşen ışın enerjisini hemen ve tümüyle elektrik enerjisine çevirmeli ve çevirme sırasında titreşim olmamalı
- Sinyaller detektörün üzerine düşen ışın demetinin şiddetiyle orantılı olmalı

2.2.5 Spektrum Alma Tekniği

UV spektroskopisinde 190-780 nm arasında ölçüm yapılabilir. Analiz çalışması yapılırken uygun konsantrasyonda bir çözelti hazırlanır ve genellikle 1 cm kalınlığındaki hücrelere (tercihen **kuartz** camdan yapılmış **küvetlere**) konularak (küvetlerin taban alanları da 1 cm² olup, alabildikleri çözelti miktarı 3-4 ml kadardır) spektrumu alınır. Spektrum alınması, molekülün ışık ışınları ile etkileşmesi sonucu verdiği sinyallerin alet tarafından (detektör aracılığıyla) algılanıp değerlendirilmesi ve (yazıcı tarafından) kağıda dökülmesiyle sonuçlanır. Ancak UV-Spektroskopisinde, analizlenen maddelerin uygun çözücüler içinde verdiği absorpsiyon ve molar absorptivite (ϵ) değerleri ölçülüp aletin kadran veya dijital göstergesinden doğrudan okunarak çalışmalar yürütülebilir. ϵ , 1 mol/l konsantrasyonda ve 1 cm kalınlığındaki hücrede bulunan çözeltinin absorpsiyon değeri olduğundan, değişik konsantrasyonlarda alınmış olan spektrumların karşılaştırılmasında kullanılır.

UV spektroskopisinde çözücü olarak alifatik alkoller ve klorlu hidrokarbonların kullanılması uygundur. En kullanışlı çözücüler *n*-hekzan, siklohekzan, kloroform ve karbon tetraklorürdür. Polar çözücüler (su, dietil eter, etanol, metanol vb.) çok gerekli olmadıkça bu amaçla kullanılmaz. Seçilen çözelti spektroskopide kullanılacak kadar saf olmalı ve çözücü ile analizlenen maddenin karşılıklı etkileşmesinin olmamasına dikkat edilmelidir. Saf bir maddenin absorpsiyon spektrumu, bir seri çözücüde ölçülürse, çözücü değişikliği ile beraber, absorpsiyon bantının yerinde ve şiddetinde hafif bir değişiklik göze çarpar. Dikkat çekici değişiklikler ise,

çözücü ile kimyasal etkileşme, disosiyasyon, kompleks oluşması veya keto-enol dengesi nedeniyle meydana gelebilmektedir.

Modern spektrofotometreler, çift ışın demetli olup dalga boyuna karşı örneğe ait absorbansı (veya geçirgenliği), toplam absorbanstan çözücüye ait olanını çıkararak kaydederler. Çift ışın demetli cihazlarda ışık, numunenin bulunduğu çözeltiden ve numuneyi çözmek için kullandığımız çözücünden ayrı ayrı geçen iki demete ayrılır. Bu nedenle numune çözeltisi ve çözücü iki ayrı hücreye (küvete) konarak, cihazın ilgili bölmesine yerleştirilir. Daha sonra ölçüm, değişik biçimlerde yapılabilir. Örneğin tek bir dalga boyundaki absorbansı ölçülebileceği gibi, dalga boyu istenilen aralıkta değiştirilerek absorbans, dalga boyuna karşı kaydedilip yazıcı ile spektruma aktarılabilir.

Çözeltilerin hazırlanışı: Analizi yapılacak maddeden tam olarak tartılmış örnek, bir ölçü balonunda, uygun bir çözücü içinde çözülür ve aynı çözücü ile işaret çizgisine kadar tamamlanır. Sonra bu ana çözeltiden yapılan uygun seyreltmelerle istenen konsantrasyonlar sağlanır. Daha önceki ölçmelerden kalan eser miktardaki maddeyi gidermek için küvet iyice yıkanıp birkaç defa madde çözeltisi ile yıkandıktan sonra kurutularak kullanılır. Bazı durumlarda bantlar kullanılan çözücüye bağlı olarak ince ya da yaygın olabilir. UV analizlerinde kullanılan çözücülerin spektral saflıkta olması ve madde ile reaksiyon vermemesi gerekir. Bazı önemli UV alan çözücülerini ve absorpsiyon yapmadıkları alanları şöyle gösterebiliriz:

Etanol	206 nm den ötede absorpsiyon yapmaz.
Metanol	206 nm den ötede absorpsiyon yapmaz.
Kloroform	244 nm den ötede absorpsiyon yapmaz.
<i>n</i> -Hekzan	195 nm den ötede absorpsiyon yapmaz.
1,4-Dioksan	216 nm den ötede absorpsiyon yapmaz.
Asetonitril	190 nm den ötede absorpsiyon yapmaz.
Su	190 nm den ötede absorpsiyon yapmaz.

2.2.6 Toplanabilirlik Kuralı ve Spektroskopide Kullanılışı

Aynı molekülde iki veya daha fazla kromofor bulunduğu zaman ve bu gruplar iki veya daha fazla tek bağla bağlı olduklarında absorpsiyon, bu

grupların absorpsiyonunun toplamına eşittir ve buna “toplanabilirlik kuralı” denir. Bu kuraldan UV spektrumlarının değerlendirilebilmesi için çok yararlanır. Uygulamaya ilişkin bazı esasları şöyle sıralanabilir:

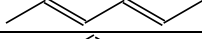

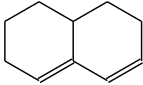
- Gözlenen absorbanstan, çözücüye ve reaktiflere ait absorban çıkarılarak, esas örneğe ait absorban bulunabilir.

- Bir örnekte bir kromoforun absorpsiyonu biliniyorsa, ikinci bir kromoforunki hesaplanabilir.

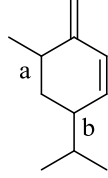
- İki veya daha fazla absorbanın aynı çözültide spektrumu alınabilir ve her birini absorbanları bulunabilir.

Woodward Fieser tarafından; dien, aynı halkalı dien ve komşu halkalı dienler için belli temel değerler ve belli süstitüentlerin varlığında bu temel değerlere eklenecek değerler tablolandırılmıştır (Tablo 2.2.1).

Tablo 2.2.1. Woodward Fieser değerleri

Temel değerler:Dien		217 nm
Aynı halkalı dien		253 nm
Komşu halkalı dien		214 nm
<u>İlave değerler:</u>		
Alkil süstitüent veya halka artığı		
Her grup için (R)5 nm		
Halka dışı her çifte bağ için (HDÇB).....5 nm		
Konjugasyonu artıran her çifte bağ için (KAÇB).....30 nm		
-OR için.....6 nm		
-SR için.....30 nm		
-NH ₂ veya -NR ₂ için.....60 nm		
-X için.....17 nm		

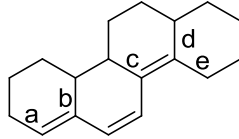
Örnek 1. Aşağıdaki molekülün absorpsiyon maksimumunu hesaplayınız.



$$\text{Dien}=217, 2R \text{ (a ve b)} 2 \times 5=10, \text{hdçb}=5$$

$$\lambda_{\text{max}}=217+10+5=232$$

Örnek 2. Aşağıdaki molekülün absorpsiyon maksimumunu hesaplayınız.

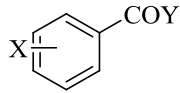


$$\text{Komşu halkalı dien}=214, 5R(a,b,c,d,e) 5 \times 5=25, \text{KAÇB}=30, 3 \text{ HDÇB}$$

$$3 \times 5=15$$

$$\lambda_{\text{max}}=214+25+30+15=284$$

Aromatik bileşikler için asetofenon esas sistem olarak alınırsa absorpsiyon kuralı, α,β -doymamışlığına ait sayısal bir bağıntı verebilir:



Y	:	<u>R(Ar)</u>	<u>H</u>	<u>OH</u>
$\lambda_{\text{max}}, m\mu$:	246	250	230

X'in cinsine ve yerine göre bu esas λ_{max} 'a aşağıdaki ilaveler yapılır:

<u>X</u>	:	<u>R(Ar)</u>	<u>OH</u>	<u>Cl</u>	<u>NH</u>
		-o -m -p	-o -m -p	-o -m -p	-o -m -p
$\lambda_{\text{max}}, m\mu$:	3 3 10	7 7 25	0 0 10	15 15 58

Örnek 3. m-Hidroksi benzoik asidin absorpsiyon maksimumunu hesaplayınız.

λ_{max} , $m\mu$: Esas değer (230 $m\mu$) + m-OH (7 $m\mu$)= 237 $m\mu$ (Gözlenen: 236 $m\mu$).

2.2.7 Absorpsiyon Bantlarının Pratikte Değerlendirilmesi

UV bölgesi absorpsiyonu, moleküldeki doymamışlığın bir sonucu olduğundan, spektroskopisinin uygulanmasında özellikle -çok az istisna ile- çifte bağlı ve üçlü bağlı bileşikler analizlenebilmektedir. Bir kısım bileşiğin örneğin, mono fonksiyonlu alkanlar, alkenler, alkinler, asitler, esterler, amidler ve oksimlerin absorpsiyon maksimumları, pratikte yararlanılan UV alanının dışında olduğundan, bunların analizinde UV'den yararlanılamamaktadır. Bir başka grup bileşiğin (örneğin, aldehitler, ketonlar, alifatik nitro bileşikleri vb.) ise, absorpsiyon bantlarının şiddeti, çok özel uygulamaları gerektirecek kadar düşüktür. Dolayısıyla bunlar içinde çalışma gücünü olmakla birlikte, UV spektrofotometresi bazen böyle zayıf absorpsiyon yapan fonksiyonlu grupların belirlenmesinde yararlanılan çok önemli bir yöntemdir. UV spektroskopisi özellikle doymamış konjuge sistemler için yararlı bir analiz yöntemidir ve özellikle kalitatif analizlerde IR spektroskopisi ile birbirinin tamamlayıcısı rolündedir. IR spektroskopisi, bütün organik bileşiklerin spektrum alınan bölgede absorpsiyon yapmasından yararlanılması gibi bir üstünlüğe sahiptir ve bunun da ötesinde, katı maddelerin spektroskopik analizinin yapılabilmesine olanak sağlar. UV ve Görünür Alan Spektroskopisinde ise, tüm organik maddeleri çözebilecek çok sayıda çözücü kullanabilme olanağının bulunması bütün bu maddeleri çözerek analizleme olanağı yaratır.

2.2.8 Organik Maddelerin Karakteristik Absorpsiyonları

UV ve Görünür Alanda spektroskopik uygulamaların yürütülebilmesi için, analizlenecek maddelerin (yapısal) niteliklerinin neler olması gerektiği, önceki bölümlerde açıklanmaya çalışıldı. Sözü edilen bu nitelikler, moleküllere bazı karakteristik absorpsiyon özellikleri kazandırmaktadır. Bunların başlıcaları:

Etilenik Kromofor: İzole etilenik kromofor $\pi-\pi^*$ transisyonu (geçiş) yapmakta ve daima uzak UV alanda absorpsiyon göstermektedir. Eğer etilenik bağlı karbondaki bir alkil süstitüsü varsa bu takdirde batokromik etki görülecek ve absorpsiyon daha uzun dalga boyuna kayacaktır. Çünkü alkil grubuna ait elektronlar hiperkonjugasyon nedeniyle, kromoforik grup ile etkileşecek kadar hareketlidirler. Etilenik bağa ortaklanmamış elektron içeren bir heteroatomun bağlanması da batokromik kaymaya neden olacak ve absorpsiyonu yakın ultraviyole alana getirecektir. Birden fazla etilenik bağ içeren maddelerde, absorpsiyon bu etilenik bağların birbirlerine yakınlığına göre değişir ve 3 temel sonuç ortaya çıkabilir:

- Eğer etilenik bağlar izole durumda iseler, tek etilenik bağ gibi davranırlar, yani absorpsiyon tek etilenik bağın absorpsiyon yaptığı yerde olur. Ancak absorpsiyonun yeri değişmemekle birlikte, absorpsiyon bantının şiddeti, bu grupların sayısı ile orantılı olarak artar.
- $C=C=C-$ birimine sahip allenler genellikle uzak UV bölgede 170 nm de kuvvetli bir absorpsiyon gösterirler. Bazen yakın UV'ye dayanan dalga boyunda, bunlara ait bir omuz da izlenebilir.
- Etilenik bağların konjuge durumda bulunması absorpsiyonun hem şiddetini artırır hem de dalga boyunu batokromik olarak kaydırır.

Etilenik yapılarda gözlenen cis / trans izomerlerinde absorpsiyon, gerek dalga boyu gerekse absorpsiyon şiddeti bakımından farklılık göstermekte ve trans izomerler cis'e göre, daha uzun dalga boyunda absorpsiyon yapmaktadırlar.

Dien yapısına bağlanan her bir alkil grubu absorpsiyonu 5 nm kadar uzun dalga boyuna kaydırır. Ekzosiklik bir çift bağın varlığı, absorpsiyonda 5 nm lik daha batokromik kayma yapar (Woodward kuralları).

Karbonil Kromoforu: Aldehit ve ketonlar 150, 190 ve 270-300 nm lerde olmak üzere üç absorpsiyon bandına sahiptirler. Bunlardan ilki $\pi-\pi^*$, ikincisi $n-\sigma^*$ ve üçüncüsü $n-\pi^*$ transisyonundan ileri gelmekte, ilk iki bant uzak UV'de, üçüncü bant ise yakın UV'de gözlenmektedir. Yakın UV'de gözlenen absorpsiyon R bandı (Karbonil, nitro gibi tek bir kromofor gruptaki

n- π^* transisyonundan ileri gelen bantlar) olup şiddeti küçüktür ve çözücünün polarlığının artması hipsokromik bir kaymaya neden olur. Alifatik ketonlarda fazla dallanma da batokromik kayma yapar. Aldehit ve ketonların semikarbazon yapısına geçmeleri durumunda ise, absorpsiyonları 30-40 nm kadar batokromik bir kayma yapar.

Karbonil gruplarına ortaklanmamış elektron çifti içeren grupların bağlanması, bunlara ait bandı daha kısa dalga boyuna kaydırır. Çünkü bu tür bir yapısal değişim, karbonil grubunun n- π^* transisyonu üzerinde belirgin bir etkiye sahiptir. Karbonil grubu ile konjuge durumda etilenik bir grup içeren maddelerin spektrumları 215-250 nm arasında şiddetli bir K bandı ve 310-330 nm arasında zayıf bir R bandı ile karakterize edilir. Karbonil bileşiklerinin R bantları çözücünün artan polaritesiyle hipsokromik, K bantları (π - π^* transisyonlarına ait bantlar) ise batokromik kayma gösterir.

Karboksilli asitler, 200 nm'de zayıf bir absorpsiyon bandı gösterir, zincir uzunluğunun artması batokromik kaymaya neden olur. Esterler ve sodyum tuzları, ana asit ile hemen hemen aynı dalga boyunda absorpsiyon gösterirlerken, konjugasyon ile batokromik kayma olur. Amid ve laktamlar n- π^* transisyonundan kaynaklanan 205-215 nm dalga boyunda bir absorpsiyon yaparlar.

Nitriller ve Azo Bileşikleri: Yakın ultraviyolede absorpsiyon göstermezler. Azo grubunun π - π^* transisyonu uzak UV'de, alifatik azo bileşiklerindeki n- π^* transisyonu ise 350 nm'de absorpsiyon bandı verir.

Nitro, Nitrozo, Nitrat ve Nitrit Türevleri: n- π^* transisyonuna bağlı olarak yakın UV de zayıf bir absorpsiyon gösterirler.

Organik Kükürt Bileşikleri: Alifatik sülfonlar yakın UV'de absorpsiyon yapmazlar. α,β -doymamışlık absorpsiyonu yakın UV'ye kaydırır.

Aromatik Bileşikler: Absorbsiyon bantları molekülün yapısına bağlı olarak değişir. Benzen 184, 204 nm'de şiddetli E bantları ve 256 nm'de B bandı olmak üzere üç absorpsiyon bandına sahiptir.

Benzen halkasında alkil süstitüsüyonu hiperkonjugasyon sonucu batokromik kaymaya neden olur. Benzen halkasında alkil grubu varken p-konumuna ikinci bir alkil grubunun getirilmesi, büyük bir batokromik kaymaya neden olur. Eğer benzen halkasına bağlı bir heteroatom varsa, bu atomun ortaklanmamış elektron çifti, halkanın π elektronları mezomerisine katılır ve benzenin E (Aromatik yapıların karakteristikleri olan bantlar) ve B bantları daha uzun dalga boyuna kayar. Fenolün fenolat haline geçişi E ve B bantlarında batokromik kaymaya neden olurken anilinin anilinyuma dönüşmesi ise hipsokromik bir kayma yapar. Bunun nedeni olarak, anilinyum katyonunda azotun ortaklanmamış elektronları asit protonu tarafından tutulmuş olup, halkanın π elektron mezomerisine katılamaması gösterilebilir. Doymamış bir grubun benzen halkasına bağlanması ile B bandında (Aromatik veya heteroaromatik moleküllere ait bantlar) kuvvetli bir batokromik kayma gerçekleşir.

Heteroaromatik Bileşikler: Beş üyeli heteroaromatik bileşiklerin ultraviyole spektrumları siklopentadieninkiyle karşılaştırıldığında, siklopentadien spektrumu ile 200 nm deki kuvvetli dien absorpsiyonu ile 238 nm deki orta şiddetli absorpsiyonun furan, pirol ve tiyofende sırasıyla, furandan tiyofene doğru gidildikçe daha büyük dalga boylarına kaydıkları görülür. Altı üyeli heteroaromatik bileşiklerden piridinin ultraviyole spektrumu, 257 ve 270 nm'lerde olmak üzere başlıca iki absorpsiyon maksimumu gösterir. 5 ve 6 üyeli heteroaromatik bileşiklerin aksine doymuş türevleri 200 nm den daha uzun dalga boylarında absorpsiyon yapmazlar.

2.2.9 UV ve Görünür Alan Spektroskopisinin Uygulamaları

Kalitatif analizde: Bilinmeyen madde saflaştırıldıktan sonra UV spektrumu alınır. Bu spektrum aynı madde için daha önce alınmış spektrumlarla karşılaştırılır. Spektrumlardan hangisine uyarsa bilinmeyen madde spektrumuna uyan maddedir.