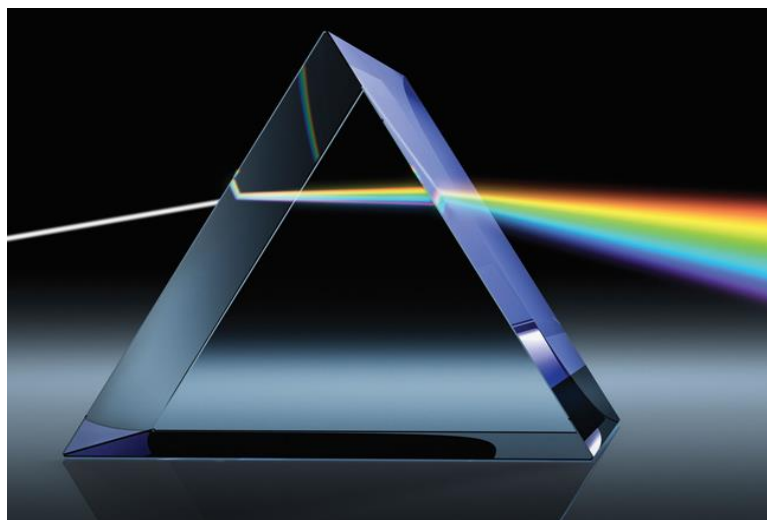


ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ
«Σχεδιασμός και Υλοποίηση
Φασματοφωτόμετρου UV-Vis»



Του φοιτητή
Κουζανίδη Ευστάθιου
Αρ. Μητρώου: 518062

Επιβλέπων
Ονοματεπώνυμο Δελημαράς
Βασίλειος
Βαθμίδα Ακαδημαϊκός υπότροφος

Ημερομηνία 27/10/2022

Τίτλος Δ.Ε. Σχεδιασμός και Υλοποίηση Φασματοφωτόμετρου UV-Vis

Κωδικός Δ.Ε. 23324

Όνοματεπώνυμο φοιτητή Ευστάθιου Κουζανίδη

Όνοματεπώνυμο εισηγητή Βασίλειος Δελημαράς

Ημερομηνία ανάληψης Δ.Ε. 05-11-2023

Ημερομηνία περάτωσης Δ.Ε. 18/5/2024

Βεβαιώνω ότι είμαι ο συγγραφέας αυτής της εργασίας και ότι κάθε βοήθεια την οποία είχα για την προετοιμασία της είναι πλήρως αναγνωρισμένη και αναφέρεται στην εργασία. Επίσης, έχω καταγράψει τις όποιες πηγές από τις οποίες έκανα χρήση δεδομένων, ιδεών, εικόνων και κειμένου, είτε αυτές αναφέρονται ακριβώς είτε παραφρασμένες. Επιπλέον, βεβαιώνω ότι αυτή η εργασία προετοιμάστηκε από εμένα προσωπικά, ειδικά ως διπλωματική εργασία, στο Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής και Ηλεκτρονικών Συστημάτων του ΔΙ.ΠΑ.Ε.

Η παρούσα εργασία αποτελεί πνευματική ιδιοκτησία του φοιτητή Ευστάθιου Κουζανίδη που την εκπόνησε/αν. Στο πλαίσιο της πολιτικής ανοικτής πρόσβασης, ο συγγραφέας/δημιουργός εκχωρεί στο Διεθνές Πανεπιστήμιο της Ελλάδος άδεια χρήσης του δικαιώματος αναπαραγωγής, δανεισμού, παρουσίασης στο κοινό και ψηφιακής διάχυσης της εργασίας διεθνώς, σε ηλεκτρονική μορφή και σε οποιοδήποτε μέσο, για διδακτικούς και ερευνητικούς σκοπούς, άνευ ανταλλάγματος. Η ανοικτή πρόσβαση στο πλήρες κείμενο της εργασίας, δεν σημαίνει καθ' οιονδήποτε τρόπο παραχώρηση δικαιωμάτων διανοητικής ιδιοκτησίας του συγγραφέα/δημιουργού, ούτε επιτρέπει την αναπαραγωγή, αναδημοσίευση, αντιγραφή, πώληση, εμπορική χρήση, διανομή, έκδοση, μεταφόρτωση (downloading), ανάρτηση (uploading), μετάφραση, τροποποίηση με οποιοδήποτε τρόπο, τμηματικά ή περιληπτικά της εργασίας, χωρίς τη ρητή προηγούμενη έγγραφη συναίνεση του συγγραφέα/δημιουργού.

Η έγκριση της διπλωματικής εργασίας από το Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής και Ηλεκτρονικών Συστημάτων του Διεθνούς Πανεπιστημίου της Ελλάδος, δεν υποδηλώνει απαραίτητως και αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα, εκ μέρους του Τμήματος.

*«Αφιερώνω την παρούσα
Διπλωματική Εργασία
στην οικογένεια μου.»*

Πρόλογος

Με την ολοκλήρωση αυτής της διπλωματικής, η οποία αποτελεί ένα πολύ σημαντικό ορόσημο στο ακαδημαϊκό μου ταξίδι, είμαι βαθιά ευγνώμων για την ευκαιρία που είχα ώστε να εμβαθύνω στο περίπλοκο πεδίο της φασματοφωτομετρίας UV-Vis. Σε όλο αυτό το ταξίδι, κατάφερα να υπερβώ τις διάφορες προκλήσεις που όχι μόνο διεύρυναν τις τεχνικές μου γνώσεις, αλλά και ενίσχυσαν τις δεξιότητές μου στην επίλυση προβλημάτων καθώς και την κριτική μου σκέψη.

Η διπλωματική αυτή δεν θα μπορούσε να είχε γίνει χωρίς την αμέριστη υποστήριξη και καθοδήγηση πολλών ατόμων. Πρώτα από όλα θα ήθελα να ευχαριστήσω των επιβλέποντα καθηγητή μου Βασίλειο Δελημαρά, για τις ανεκτίμητες γνώσεις, την υπομονή και την ενθάρρυνση του. Η τεχνογνωσία του πάνω στο θέμα καθώς και τα σχόλια του έπαιξαν καθοριστικό ρόλο στην διαμόρφωση τόσο στην κατεύθυνση όσο και την ποιότητα αυτής της έρευνας. Επιπλέον, θέλω να εκφράσω την βαθιά μου εκτίμηση στην οικογένειά μου, η οποία με την συνεχή υποστήριξη και η πίστη στις ικανότητές μου έδωσε το κίνητρο να επιμείνω στις πιο δύσκολες και απαιτητικές φάσεις αυτού του έργου.

Περίληψη

Η παρούσα διπλωματική εργασία παρουσιάζει τον σχεδιασμό και την υλοποίηση ενός φασματοφωτόμετρου UV-Vis, μιας συσκευής η οποία είναι απαραίτητη για την ανάλυση της αλληλεπίδρασης μεταξύ του φωτός και της ύλης. Ο στόχος αυτής της εργασίας ήταν η δημιουργία ενός οικονομικού αλλά παράλληλα αξιόπιστου φασματοφωτόμετρου που θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί σε διάφορες επιστημονικές εφαρμογές, για την μελέτη διαφορών πραγμάτων για την ζωή και τον κόσμο γύρο μας.

Η έρευνα ξεκίνησε με μια ολοκληρωμένη ανασκόπηση των ήδη υπάρχων φασματοφωτομετρικών τεχνολογιών. Τα βασικά εξαρτήματα του φασματοφωτόμετρου, όπως για παράδειγμα η πηγή φωτός, το φράγμα περίθλασης και η κάμερα, επιλέχθηκαν με προσοχή και συναρμολογήθηκαν για να επιτευχθεί η βέλτιστη απόδοση. Η ακρίβεια της συσκευής διαπιστώθηκε μέσω μιας σειράς πειραμάτων βαθμονόμησης χρησιμοποιώντας διάφορα υγρά δοκιμής.

Τα αποτελέσματα των μετρήσεων έδειξαν ότι το φασματοφωτόμετρο UV-Vis που σχεδιάσα μπορούσε να μετρήσει με αξιοπιστία τα φάσματα απορρόφησης και διαπερατότητας,. Αυτό ήταν ένα πολύ σπουδαίο κατόρθωμα καθώς απέδειξα ότι μπορούν να σχεδιαστούν αξιόπιστα όργανα χωρίς να χρειάζονται συμβιβασμοί στην ποιότητα ή τη λειτουργικότητα.

Εν κατακλείδι, η παρούσα διπλωματική εργασία αφορά τον τομέα της φυσικής και συγκεκριμένα της φασματοφωτομετρίας και αποτελεί μια πρακτική λύση για τα εργαστήρια με περιορισμένους πόρους. Κοιτάζοντας το μέλλον ενδέχεται να υπάρξει περαιτέρω ενίσχυση των δυνατοτήτων της συσκευής καθώς και την εξερεύνηση των εφαρμογών της σε διάφορους επιστημονικούς τομείς.

«Design and Implementation of UV-Vis Spectrophotometer»

Efstathios Kouzanidis

Abstract

This thesis presents the design and implementation of a UV-Vis spectrophotometer, a device which is essential for the analysis of the interaction between light and matter. The goal of this work was to create an economical but at the same time reliable spectrophotometer that could be used in various scientific applications, to study various things about life and the world around us.

The research began with a comprehensive review of already existing spectrophotometric technologies. The essential components of the spectrophotometer, such as the light source, diffraction barrier and camera, were carefully selected and assembled to achieve optimal performance. The accuracy of the device was established through a series of calibration experiments using various test fluids.

The results of the measurements showed that the UV-Vis spectrophotometer I designed could reliably measure the absorption and transmittance spectra. This was quite a feat as I proved that reliable instruments can be designed without having to compromise on quality or functionality.

In conclusion, this thesis concerns the field of physics and specifically spectrophotometry and is a practical solution for laboratories with limited resources. Looking to the future there may be further enhancement of the device's capabilities as well as the exploration of its applications in various scientific fields.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω για αρχή του γονείς μου και την αδερφή μου για τις αξίες που μου έδωσαν σαν άνθρωπο καθώς ήταν η βάση για τον χαρακτήρα και την προσωπικότητά μου και αναμφίβολά χωρίς αυτούς δεν θα ήμουν αυτό που έγινα σήμερα. Τους φίλους μου για όλες τις φορές που μου στάθηκαν στις δυσκολίες που αντιμετώπισα και ήταν πάντα εκεί για μένα. Και φυσικά τον επιβλέποντα καθηγητή μου Βασίλειο Δελημαρά για τον χρόνο που αφοσίωσε για μένα καθώς επίσης και για τις γνώσεις και την βοήθεια που μου έδωσε απλόχερα τόσο στο κομμάτι τις διπλωματικής όσο και στις υπόλοιπες επιστημονικές γνώσεις που αποκόμισα όλα αυτά τα χρόνια.

Περιεχόμενα

Πρόλογος.....	4
Περίληψη.....	5
Abstract	6
Ευχαριστίες	7
Περιεχόμενα	8
Κατάλογος Σχημάτων	12
Κατάλογος Πινάκων.....	14
Κεφάλαιο 1ο: Φασματοσκοπία.....	1
1.1 Φασματομετρία/Φασματοσκοπία.....	1
1.2 Διαφορετικές Οπτικές Τεχνικές	1
1.2.1 Ατομική Φασματοσκοπία.....	1
1.2.2 Μοριακή Φασματοσκοπία.....	2
1.3 Αλληλεπίδραση της ύλης με την Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία.....	3
1.3.1 Σκέδαση ή Διασκορπισμός του Φωτός (Scattering).....	4
1.3.2 Διασπορά του Φωτός (Dispersion).....	4
1.3.3 Ανάκλαση και Διάθλαση του Φωτός (Reflection and Refraction).....	4
1.3.4 Περίθλαση του Φωτός (Diffraction of Light).....	6
1.3.5 Φθορισμός/Φωσφορισμός (Fluorescence/Phosphorescence).....	7
1.3.6 Απορρόφηση και Εκπομπή Φωτός.....	8
1.4 Φασματικές γραμμές και πως παρέχουν μοναδικές πληροφορίες για μια ουσία	9
1.5 Επίλογος.....	9
Κεφάλαιο 2ο: Φασματοσκοπία UV,IR,AAS.....	9
2.1 Εισαγωγή στην Φασματοσκοπία.....	9
2.2 Βασικές αρχές της Φασματοσκοπίας	10
2.2.1 Αλληλεπίδραση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας	10
2.2.2 Beer-Lambert Law	10
2.3 Φασματοσκοπία Υπεριώδους Φάσματος (UV).....	16
2.3.1 Περιοχή UV.....	16
2.3.2 Βασικής Διάταξης Υπεριώδους Φάσματος	16
2.3.3 Ποσοτικής Ανάλυσης.....	17
2.4 Φασματοσκοπία ορατού (ViS).....	17
2.4.1 Τεχνικά χαρακτηριστικά οργάνων	17

2.4.2	Εφαρμογές σε σύγκριση με φασματοσκοπία UV	18
2.5	Φασματοσκοπία ατομικής απορρόφησης (AAS)	18
2.5.1	Επισκόπηση τεχνικής	18
2.5.2	Όργανα-Εξαρτήματα	18
2.5.3	Διαδικασία ατομικής απορρόφησης	20
2.5.4	Πλεονεκτήματα και περιορισμοί	21
2.6	Τεχνικές προετοιμασίας δειγμάτων	21
2.7	Χειρισμός Παρεμβολών	21
2.8	Επίλογος	21
Κεφάλαιο 3ο:	Φασματοφωτόμετρο	22
3.1	Εισαγωγή Φασματοφωτόμετρου	22
3.2	Βασικά όργανα Φασματοφωτόμετρου UV	22
3.2.1	Εύρος Μήκους Κύματος.....	22
3.2.2	Μέτρηση της απορρόφησης	22
3.2.3	Οπτικό Σύστημα	23
3.2.4	Πηγή Φωτός	23
3.2.5	Μονοχρωμάτορας (Prism).....	25
3.2.6	Διαμέρισμα Δειγμάτων (Sample Compartment)	25
3.2.7	Ανιχνευτής Ακτινοβολίας.....	27
3.3	Βασικά όργανα Φασματοφωτόμετρου Vis.....	29
3.3.1	Αρχή Λειτουργίας.....	29
3.3.2	Πηγή Φωτός	29
3.3.3	Οπτικό Σύστημα	30
3.3.4	Χρωματομετρική Ανάλυση	30
3.3.5	Ποσοτική Ανάλυση	30
3.4	Φασματοφωτόμετρο Ατομικής απορρόφησης(AAS).....	31
3.4.1	Λάμπα κοίλης καθόδου	31
3.4.2	Ατομοποιήτης.....	31
3.4.3	Μονοχρωμάτορας.....	31
3.4.4	Κύρια λειτουργία.....	32
3.4.5	Ατομοποίηση Δείγματος	32
3.4.6	Απορρόφηση ατομικών γραμμών.....	32
3.4.7	Ανίχνευση και ποσοτικοποίηση σήματος.....	33
3.4.8	Χειρισμός δειγμάτων.....	33
3.5	Επίλογος	35

Κεφάλαιο 4ο: Ειδικές Εφαρμογές της Φασματοφωτομετρίας στα Ιατρικά Εργαστήρια.	36
4.1 Εισαγωγή στις Ιατρικές Εφαρμογές	36
4.2 Ανίχνευση και Ποσοτικοποίηση Βιοδεικτών (Biomarkers).....	36
4.3 Μέτρηση Ενζυμικής Δραστηριότητας.....	37
4.4 Ανάλυση Ορμονών και Βιταμινών.....	38
4.5 Φαρμακοκινητική και Φαρμακοδυναμική.....	38
4.6 Εξέταση Αιμογλοβίνης και Αιματοκρίτη	39
4.7 Ανάλυση Νεφρικής Λειτουργίας.....	40
4.8 Ανίχνευση Παθολογιών στο Αίμα.....	40
4.9 Ποιοτικός Έλεγχος και Πρότυπα Ασφαλείας.....	41
4.10 Επίλογος.....	41
Κεφάλαιο 5ο: Κατασκευή	42
5.1 Περιγραφή Λειτουργίας	42
5.2 Σωστή Επιλογή υλικών	42
5.3 Πίνακας Κόστους Κατασκευής.....	46
5.4 Εξέλιξη Κατασκευής.....	47
5.4.1 3D Printer	47
5.5 Altium Designer	50
5.6 Κύκλωμα Howland.....	54
5.7 Πλακέτα με κολλήσεις	56
5.7.1 Διαφοροποίηση σε σχέση με το αρχικό πλάνο.....	57
5.8 Υλοποίηση.....	58
5.8.1 Thermo Spectrometer	63
5.8.2 Βαθμονόμηση (Calibration)	68
5.9 Διαπερατότητα (Transmittance) και απορρόφηση (Absorbance)	71
5.10 Έλεγχος των ουσιών	72
5.10.1 Μπλε Φωτιστικό Οινόπνευμα	72
5.10.2 Εξαιρετικά Παρθένο Ελαιόλαδο	73
5.10.3 Ροζ Απορρυπαντικό Πατώματος.....	74
5.10.4 Ούισκι.....	75
5.10.5 Αιθανόλη	76
5.10.6 Φρέσκος Χυμός Πορτοκάλι	77
5.10.7 Κοκκίνο κρασί με αραιώση 1/1 με απιονισμένο νερό.....	78
5.10.8 Κοκκίνο κρασί με αραιώση 1/2 με απιονισμένο νερό.....	79
5.10.9 Κοκκίνο κρασί με αραιώση 1/4 με απιονισμένο νερό.....	80

5.10.10	Κοκκίνο κρασί με αραίωση 1/8 με απιονισμένο νερό.....	81
Κεφάλαιο 6ο:	Συμπεράσματα και Προτάσεις Βελτίωσης.....	83
Κεφάλαιο 7ο:	Βιβλιογραφία.....	84

Κατάλογος Σχημάτων

Εικόνα 1. Φάσμα Συχνοτήτων και Μήκος Κύματος της Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας. [7].....	3
Εικόνα 2. Γραφική παράσταση του μήκους κύματος. [8]	3
Εικόνα 3. Απεικόνιση της Κατοπτρικής & Διάχυτης Ανάκλασης. [10]	5
Εικόνα 4. Φαινόμενο Διάθλασης της πρωτογενούς ακτίνας στην διεπαφή δύο μέσων. [11]	5
Εικόνα 5. Παρατηρούμε την αλλαγή μήκους κύματος καθώς μεταβάλλεται το μέγεθος της οπής. [12]	6
Εικόνα 6. Η εικόνα στα αριστερά αποτυπώνει την ενίσχυση ενώ η δεξιά την απόσβεση. [13].....	7
Εικόνα 7. Παρατηρούμε ότι μια ουσία που τα μόρια της είναι φθοροφόρα μετά την εκτόνωση της ενέργειας που απορροφήσανε επιστρέφουν πιο γρήγορα στην αρχική τους κατάσταση σε σχέση με τα μόρια μιας που περιέχει μόρια φωσφορισμού. [14]	8
Εικόνα 8. Εκπομπή του φωτός. [15]	8
Εικόνα 9. Απορρόφηση του φωτός. [15].....	9
Εικόνα 10. Διάγραμμα απεικόνισης του νόμου Beer-Lambert. [19].....	11
Εικόνα 11. Απόκλιση της γραμμικότητας στην σχέση συγκέντρωσης και απορρόφησης [23]	15
Εικόνα 12. Διαχωρισμός του UV φάσματος σε υποκατηγορίες. [24].....	16
Εικόνα 13. Βασική διάταξη του φασματοφωτόμετρου. [25]	17
Εικόνα 14. Απεικόνιση μήκους κύματος ορατού φάσματος. [28]	17
Εικόνα 15. Διαδικασία τεχνικής φασματοσκοπίας ατομικής απορρόφησης. [29]	18
Εικόνα 16. Απεικόνιση λάμπας κοίλης καθόδου. [31].....	19
Εικόνα 17. Απεικόνιση λυχνία εκκένωσης χωρίς καλώδια. [33]	20
Εικόνα 18. Απεικόνιση λυχνία Αλογόνου. [46]	24
Εικόνα 19. Απεικόνιση λάμπας Δευτερίου. [46].....	25
Εικόνα 20. Μονοχρωματιστής. [47].....	25
Εικόνα 21. Απεικόνιση κυψελίδων. [48].....	25
Εικόνα 22. Μήκη κύματος και καταλληλότητας της εκάστοτε κυβέτας ανάλογα με το υλικό κατασκευής της. [48].....	25
Εικόνα 23. Συσχέτιση ποσοστού μετάδοσης με μήκος κύματος. [48]	27
Εικόνα 24. Φωτοδιόδος. [49]	28
Εικόνα 25. Φωτοπολλαπλασιαστής. [49]	29
Εικόνα 26. Biomarkers. [79]	37
Εικόνα 27. UV LED.	43
Εικόνα 28. White LED.	43
Εικόνα 29 Diffraction grating 1000lines (Φράγμα περίθλασης).....	44
Εικόνα 30. White LED.	44
Εικόνα 31. Ολοκληρωμένο OP-AMP TLC274CN.	45
Εικόνα 32. Κόλληση με σιλικόνη τα LED στο Toslink.	46
Εικόνα 33. Αρχική Επιφάνεια Εργασίας του UltiMaker Cura.	47
Εικόνα 34. Πίνακας Ρυθμίσεων.	48
Εικόνα 35. Απεικόνιση τρισδιάστατου μοντέλου φασματοφωτόμετρου.	49
Εικόνα 36. Parts.	49
Εικόνα 37. Κουτί φασματοφωτόμετρου κατά την διάρκεια του slice.....	50
Εικόνα 38. Αρχική οθόνη του Altium.	51
Εικόνα 39. Μετατροπή του σχηματικού για χρήση στο PCB	51
Εικόνα 40. Σχεδίαση ηλεκτρονικού στοιχείου	52
Εικόνα 41. Απεικόνιση του κυκλώματος.	52

Εικόνα 42. Αρχική μορφή του PCB.....	53
Εικόνα 43. Πλακέτα με τα traces.....	53
Εικόνα 44. Το κύκλωμα σε virtual μορφή.....	55
Εικόνα 45. Η ζητούμενη ένταση του ρεύματος.....	55
Εικόνα 46. Τιμές των τάσεων στις εξόδους των τελεστικών.....	56
Εικόνα 47. Η μορφή της πλακέτας πριν τις κολλήσεις.....	56
Εικόνα 48. Έτοιμη πλακέτα με τις κολλήσεις και την τοποθέτηση της.....	57
Εικόνα 49. Σχεδιασμός έξτρα εξαρτήματος.....	57
Εικόνα 50. Τοποθέτηση στο πλαϊνό μέρος της συσκευής.....	58
Εικόνα 51. Toslink με τις κολλήσεις και τις μονώσεις του.....	59
Εικόνα 52. Οπή και τοποθέτηση μέσα στην συσκευή.....	60
Εικόνα 53. Η βάση και η κυβέτα πριν την τοποθέτηση τους.....	61
Εικόνα 54. Φράγμα περίθλασης σταθεροποιημένο μετά την οπή και πριν την κάμερα.....	62
Εικόνα 55. Τοποθέτηση της κάμερας στο αντίστοιχο print.....	62
Εικόνα 56. Συνολική μορφή κατασκευής.....	63
Εικόνα 57. Αρχική οθόνη του Theremino.....	64
Εικόνα 58. Φάσμα transmittance χωρίς κάποια ουσία.....	64
Εικόνα 59. Κυβέτες με μπλε οινόπνευμα και εξαιρετικά παρθένο ελαιόλαδο.....	65
Εικόνα 60. Καμπύλη απορρόφησης του μπλε οινοπνεύματος.....	66
Εικόνα 61. Καμπύλη απορρόφησης τους εξαιρετικά παρθένου ελαιόλαδου.....	66
Εικόνα 62. Φάσμα διαπερατότητας.....	70
Εικόνα 63. Reference του Theremino.....	72
Εικόνα 64. Απορρόφηση Μπλε Φωτιστικού Οινοπνεύματος.....	73
Εικόνα 65. Διαπερατότητα Μπλε Φωτιστικού Οινοπνεύματος.....	73
Εικόνα 66. Απορρόφηση Εξαιρετικά Παρθένου Ελαιόλαδου.....	74
Εικόνα 67. Διαπερατότητα Εξαιρετικά Παρθένου Ελαιόλαδου.....	74
Εικόνα 68. Απορρόφηση Ροζ Απορρυπαντικού Πατώματος.....	75
Εικόνα 69. Διαπερατότητα Ροζ Απορρυπαντικού Πατώματος.....	75
Εικόνα 70. Απορρόφηση Ουίσκι.....	76
Εικόνα 71. Διαπερατότητα Ουίσκι.....	76
Εικόνα 72. Απορρόφηση Αιθανόλη.....	77
Εικόνα 73. Διαπερατότητα Αιθανόλη.....	77
Εικόνα 74. Απορρόφηση Φρέσκος Χυμός Πορτοκαλιού.....	78
Εικόνα 75. Διαπερατότητα Φρέσκος Χυμός Πορτοκαλιού.....	78
Εικόνα 76. Κόκκινο κρασί 1/1.....	79
Εικόνα 77. Σχεδιάγραμμα διαπερατότητας κόκκινου κρασιού 1/1.....	79
Εικόνα 78. Κόκκινο κρασί 1/2.....	80
Εικόνα 79. Σχεδιάγραμμα διαπερατότητας κόκκινου κρασιού 1/2.....	80
Εικόνα 80. Κόκκινο κρασί 1/4.....	81
Εικόνα 81. Σχεδιάγραμμα διαπερατότητας κόκκινου κρασιού 1/4.....	81
Εικόνα 82. Κόκκινο κρασί 1/8.....	82
Εικόνα 83. Σχεδιάγραμμα διαπερατότητας κόκκινου κρασιού 1/8.....	82

Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 1. Τιμοκατάλογος.....	47
-------------------------------	----

Κεφάλαιο 1ο: Φασματοσκοπία

1.1 Φασματομετρία/Φασματοσκοπία

Η φασματοσκοπία αποτελεί κλάδο της φυσικής και πιο συγκεκριμένα της κυματικής οπτικής με στόχο την μελέτη του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος μιας πηγής σε διαφορετικές συχνότητες. Η διαδικασία της φασματοσκοπίας βασίζεται στην ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία (EMR) όπου πρόκειται για μια πολύ ενδιαφέρουσα επιστημονική τεχνική μιας και χρησιμοποιείται για την μελέτη της αλληλεπίδρασης μεταξύ ύλης και της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (EMR). Με αυτόν τον τρόπο καταφέρνει να αλληλοεπιδρά με άτομα και μόρια, με διακριτού τρόπο παραγωγής χαρακτηριστικών προφίλ όπως η απορρόφηση, η εκπομπή και η διασκόρπιση. Για το εκάστοτε υλικό που μελετάται υπάρχει και το χαρακτηριστικό προφίλ του. Η ιδιότητα με την οποία το EMR καθορίζει το εύρος χρωμάτων που γίνεται αντιληπτό ονομάζεται μήκος κύματος και συμβολίζεται με ημιτονοειδές κύμα. Το φασματοφωτόμετρο είναι ένα εργαλείο που χρησιμοποιείται για την διερεύνηση της αλληλεπίδρασης του φωτός με την ύλη και χρησιμοποιείται κυρίως στην αστρονομία, την φυσική και την χημεία. [1] Με την φασματοσκοπία οι επιστήμονες καταφέρνουν να διερευνήσουν και να αναγνωρίσουν τη σύνθεση, τη δομή και τις ιδιότητες μιας ουσίας με βάση τα μοναδικά πρότυπα και χαρακτηριστικά του εκπεμπόμενου ή απορροφούμενου φωτός. [1]

1.2 Διαφορετικές Οπτικές Τεχνικές

Η φασματοσκοπία διαχωρίζεται σε δυο τεχνικές οποίες είναι η ατομική και η μοριακή και βασίζονται στην ικανότητα που έχουν οι ουσίες να εκπέμπουν ή να αλληλοεπιδρούν με την ακτινοβολία. Παρόλο που και οι δυο τεχνικές συμβάλουν στην μέτρηση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας η κάθε μια από αυτές εστιάζει σε διαφορετικό κομμάτι, της ίδιας μελετώμενης ουσίας. Η ατομική φασματοσκοπία εστιάζει κυρίως στην αλληλεπίδραση μεταξύ ατόμων και της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας της ουσίας και αυτό συνήθως επιτυγχάνεται με ατμοποίηση του δείγματος σε υψηλή θερμοκρασία. [2] Από την άλλη η μοριακή φασματοσκοπία είναι πιο απαιτητική διαδικασία καθώς είναι πολυπλοκότερη από τα ατομικά φάσματα μιας και το σύνολο των ενεργειακών καταστάσεων είναι μεγαλύτερο σε σχέση με τα μεμονωμένα άτομα.

1.2.1 Ατομική Φασματοσκοπία

Με τον όρο ατομική φασματοσκοπία αναφερόμαστε στην επιστημονική τεχνική που βασίζεται στην μελέτη της αλληλεπίδρασης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας σε ατομικό επίπεδο. Για να μπορέσουμε να μελετήσουμε τα διαφορά στοιχεία πρέπει πρώτα να εφαρμόσουμε την τεχνική της ατμοποίησης των δοθέντων δειγμάτων, δηλαδή την μετατροπή τους σε μη φορτισμένα άτομα ή ιόντα. Η ατμοποίηση επιτυγχάνεται με την έκθεση τους σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες μέσω της θερμικής ή ηλεκτρικής ενέργειας. Με την προαναφερθείσα διαδικασία καταφέρνουμε να αναλύσουμε το δείγμα ποιοτικά αλλά και ποσοτικά καθώς το κάθε άτομο έχει χαρακτηριστικό φάσμα απορρόφησης ή εκπομπής. Με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία σε συνδυασμό και με τα ενεργειακά επίπεδα των ατόμων καταφέρνουμε να υπολογίζουμε την ποιοτική ανάλυση από το φως που εκπέμπουν ή απορροφούν μέσω του μήκους κύματος της εκάστοτε ουσίας και έτσι με βάση το ποσό της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας καταλήγουμε στον ποσοτικό τους προσδιορισμό. Την κύρια ανάπτυξη και ευρεία χρήση της ατομικής φασματοσκοπίας διακατέχουν η μέθοδος της «Φασματοσκοπίας Ατομικής Απορρόφησης» (Atomic Absorption Spectrometry-AAS), η «Φασματοσκοπίας Ατομικής Εκπομπής» (Atomic Emission Spectrometry-AES), και η

«Φασματοσκοπίας Ατομικού Φθορισμού» (Atomic Fluorescence Spectrometry-AAF). Πιο συχνά χρησιμοποιούμενες τεχνικές είναι η Φασματοσκοπίας Ατομικής Απορρόφησης (AAS) και Φασματοσκοπίας Ατομικής Εκπομπής (EAS) καθώς η Φασματοσκοπίας Ατομικού Φθορισμού (AAF) είναι περιορισμένη εξαιτίας της χαμηλής έντασης που παράγεται από τον ατομικό φθορισμό και για αυτόν τον λόγο απαιτούνται μηχανήματα με υψηλότερο κόστος κάτι που μπορεί να αποφευχθεί, καθώς οι αναλύσεις ρουτίνας με την χρήση των άλλων δυο μεθόδων έχουν ακριβώς τα ίδια αποτελέσματα. [3]

1.2.2 Μοριακή Φασματοσκοπία

Ο κλάδος της φασματοσκοπίας που επικεντρώνεται στην μελέτη των ενεργειακών επιπέδων και των αλληλεπιδράσεων των μορίων με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία ονομάζεται μοριακή φασματοσκοπία. Η κύρια διαφορά που υπάρχει σε σχέση με τα φάσματα των ατόμων είναι η μεγαλύτερη πολυπλοκότητα τους καθώς στα μόρια οι ηλεκτρονικές μεταβάσεις συχνά συνοδεύονται από δονητικά και περιστροφικά επίπεδα ενέργειας [4]

Χρησιμοποιείται σε διάφορους επιστημονικούς κλάδους πχ. χημεία, φυσική, βιολογία. Βασικό της πλεονέκτημα είναι ότι επιτρέπει στους ερευνητές να αποκτήσουν γνώσεις για την δομή, την σύνθεση και συμπεριφορά των μορίων τόσο στην αέρια κατάσταση όσο και σε συμπυκνωμένη (υγρά - στερεά). Βάση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας που χρησιμοποιείται καταφέρνουμε να αντλήσουμε διαφορετικές πληροφορίες από τα φάσματα των μορίων.

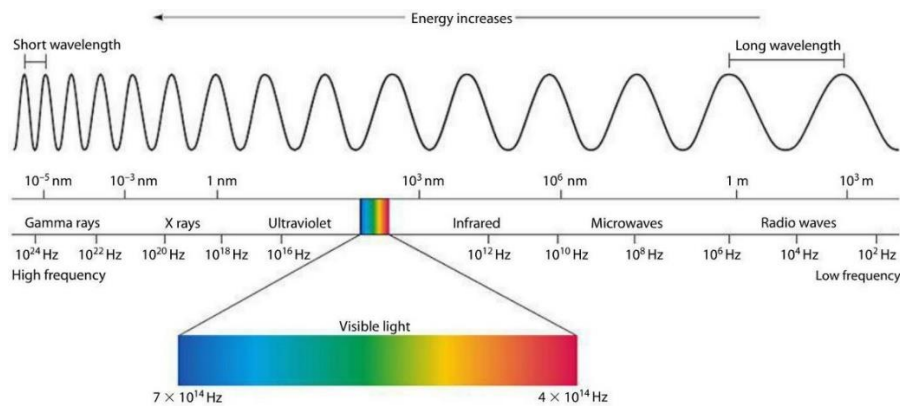
Η φασματοσκοπία μικροκυμάτων (microwave spectroscopy) χρησιμοποιείται για την μελέτη της περιστροφικής κίνησης των μορίων καθώς με αυτήν την μέθοδο μπορούν να μελετηθούν οι περιστροφικές σταθερές και να υπολογιστούν οι ροπές αδρανείας και τα μήκη των δεσμών τους. Επίσης, η φασματοσκοπία υπέρυθρου (infrared spectroscopy), που χαρακτηρίζεται και ως τεχνική μοριακής δόνησης, αναφέρεται στην ακτινοβολία που προκαλεί υψηλότερες στάθμες δόνησης ή περιστροφής των μορίων και αναλύει τις ενεργειακές μεταβάσεις τους. Με αυτήν την μελέτη των μορίων μας παρέχονται πληροφορίες για ακαμψία και την ισχύ των χημικών δεσμών. [5] Τέλος υπάρχει η φασματομετρία υπεριώδους/ορατού (UV/Vis) που χρησιμοποιείται για ποσοτικού προσδιορισμούς και μελετά την ηλεκτρονιακή δομή των μορίων.

Ανάλογα με το εύρος φάσματος της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας οι φασματοσκοπικές τεχνικές ταξινομούνται με αύξουσα σειρά με τον παρακάτω τρόπο, ξεκινώντας από την πιο υψηλή συχνότητα με το μικρότερο μήκος κύματος προς την χαμηλότερη συχνότητα αντίστοιχα με το μεγαλύτερο μήκος κύματος:

- Φασματοσκοπία Ακτινών Γάμμα (Gamma Ray), ανήκουν στην υψηλότερη ενέργεια της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και έχουν πολύ σύντομα μήκη κύματος σε σχέση με τις άλλες μορφές ακτινοβολίας. Έχοντας εύρος $0.005 \text{ \AA} - 1.4 \text{ \AA}$ τους φάσματος της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.
- Φασματοσκοπία Ακτινών Χ (X-Ray), χρησιμοποιούνται για ανάλυση κρυσταλλικών δομών και μελέτη των ατομικών πυρήνων. Έχοντας εύρος $0.01 \text{ \AA} - 10\text{nm}$.
- Φασματοσκοπία Απορρόφησης Υπεριώδους Ακτινοβολίας (UV), χρησιμοποιείται για την μελέτη των ηλεκτρονικών μεταβάσεων σε άτομα και μόρια. Εύρος φάσματος $10\text{nm} - 380\text{nm}$.
- Φασματοσκοπία Ορατού Φάσματος (Visible Spectrum), χρησιμοποιείται για την ανάλυση φωτεινότητας, χρώματος και φωτονίων, μπορεί να την αντιληφθεί το ανθρώπινο μάτι. Εύρος φάσματος $380\text{nm} - 740\text{nm}$.
- Φασματοσκοπία Υπέρυθρου (Infrared Spectrum IR), χρησιμοποιείται για να αναλύσει τις ταλαντώσεις και κινήσεις των μορίων. Έχοντας εύρος φάσματος $740\text{nm} - 1\text{mm}$.
- Φασματοσκοπία Υπερύψηλών Συχνοτήτων (Microwave and Radio Frequencies), βασική τους χρήση είναι η ασύρματη επικοινωνία όπως η ραδιοφωνία και η ασύρματη τεχνολογία καθώς

εντάσσονται σε μια περιοχή υπερύψηλών συχνοτήτων. Έχοντας εύρος φάσματος 1mm-1m τα microwave, και 1m-100000km τα radio frequencies. [6]

Η μονάδα μέτρησης, Ångström (Å), χρησιμοποιείται για την μέτρηση μικρών μηκών κύματος όπως οι ακτίνες X και οι ακτίνες γάμμα.



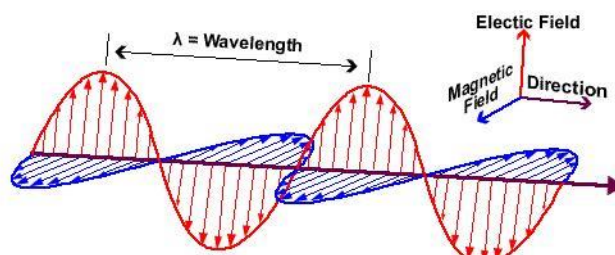
Εικόνα 1. Φάσμα Συχνοτήτων και Μήκος Κύματος της Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας. [7]

1.3 Αλληλεπίδραση της ύλης με την Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία

Η Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία αποτελείται από κυματικά και σωματιδιακά χαρακτηριστικά. Με αυτόν τον τρόπο έχει το πλεονέκτημα να μετακινείται στον χώρο ως “κύμα” και διαδίδεται με την ταχύτητα του φωτός. Το μήκος κύματος (λ) μπορεί να υπολογιστεί από την παρακάτω σχέση,

($c=3 \times 10^8 \text{m/s}^{-1}$ ταχύτητα του φωτός, ν η συχνότητα σε Hz):

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$



Εικόνα 2. Γραφική παράσταση του μήκους κύματος. [8]

Επίσης η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία αλληλοεπιδρά σαν σωματίδιο με την ύλη και συμπεριφέρεται σαν να αποτελείται από ξεχωριστά σωματίδια (κβάντα ή φωτόνια). Την ενέργεια ενός φωτονίου μπορούμε να τον υπολογίσουμε από την σχέση (Q = ενέργεια (J), h σταθερά Planck (6.626×10^{-34} J s), ν συχνότητα (Hz), $c=3 \times 10^8 \text{m/s}^{-1}$ ταχύτητα του φωτός, λ μήκος κύματος).

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

Ωστόσο καθώς η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία διαδίδεται μέσω τις ατμόσφαιρας μπορεί αυτό να επηρεάσει:

- Την ταχύτητα διάδοσης
- Το μήκος κύματος
- Την ένταση
- Την φασματική κατανομή

Όπως επίσης και να παράγει διάφορα φαινόμενα όπως η σκέδαση, η διασπορά, η διάθλαση, η περίθλαση, ο φθορισμός, η απορρόφηση και η εκπομπή. [9]

1.3.1 Σκέδαση ή Διασκορπισμός του Φωτός (Scattering)

Σκέδαση του φωτός είναι ένα φυσικό φαινόμενο κατά το οποίο παρατηρείται η τυχαία αλλαγή κατεύθυνσης τους φωτός όταν αυτό προσπέφτει σε κάποιο αντικείμενο. Με το φαινόμενο της σκέδαση παρατηρούμε ότι η διαδρομή ενός φωτονίου αλλάζει λόγω της σύγκρουσης του με ένα άτομο ή μόριο χωρίς όμως αυτό να απορροφάτε ή να εκπέμπεται. Ο λόγος που συμβαίνει αυτή η διασκόρπιση του φωτός είναι γιατί τα ηλεκτρόνια του ισορροπημένου ατόμου ταλαντεύονται από την σύγκρουση με το ηλεκτρικό πεδίο του προσπίπτοντος φωτός με αποτέλεσμα να ταλαντεύονται γύρο από την περιοχή ισορροπίας τους.

Ωστόσο υπάρχουν δυο τύποι σκέδαση :

- Διασκόρπιση Rayleigh, όπου αλλάζει η κατεύθυνση του όταν το φως αλληλοεπιδρά με την ύλη χωρίς όμως να αλλάζει η ενέργεια του.
- Διασκόρπιση Raman, χρησιμοποιείται για την μελέτη της δομής των κρυστάλλων και την δομή μορίων αλλά αυτός ο τύπος διασκόρπισης αλλάζει την ενέργεια του φωτός. [10]

1.3.2 Διασπορά του Φωτός (Dispersion)

Με το φαινόμενο της διασποράς του φωτός μπορούμε να καταλάβουμε τον τρόπο που το φως αλλάζει κατεύθυνση όταν αυτό διέρχεται από ένα διαφανές μέσο όπως ένα κρύσταλλο ή πρίσμα. Ένα πολύ γνωστό παράδειγμα της διασποράς του φωτός είναι όταν το λευκό φως του ηλίου διασπάται μέσω ενός πρίσματος και αποτελεί την βάση της χρωματικής ανάλυσης. Το λευκό φως αποτελείται από ένα ευρύ φάσμα συχνοτήτων που εξαρτάται από τον δείκτη διάθλασης του εκάστοτε μέσου καθώς σύμφωνα με την εξίσωση του Snell είναι άμεσα εξαρτώμενο από την ταχύτητα του φωτός. [10]

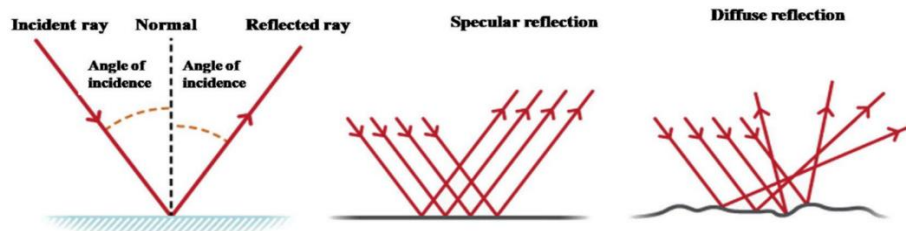
1.3.3 Ανάκλαση και Διάθλαση του Φωτός (Reflection and Refraction)

Ένα φωτεινό κύμα προσπίπτει σε μια επιφάνεια που χωρίζει δύο διαφανή υλικά (αέρα ή γυαλί) ένα μέρος του κύματος ανακλάται ενώ ένα άλλο διαδίδεται μέσα από το δεύτερο υλικό δηλαδή διαθλάται.

Η **ανάκλαση** είναι το φαινόμενο που συμβαίνει όταν το φως προσπίπτει σε μια λεία επιφάνεια, τότε ανακλάται πίσω από την επιφάνεια αυτή όπως γίνεται με έναν καθρέπτη. Όταν η ανάκλαση που γίνεται σε μια εντελώς λεία επιφάνεια ονομάζεται Κατοπτρική Ανάκλαση ή Ολική Ανάκλαση. Αντίθετα όταν η διαχωριστική επιφάνεια είναι ανομοιόμορφη (ανώμαλη), τότε το ανακλώμενο φως σκεδάζεται προς διαφορετικές κατευθύνσεις και το φαινόμενο ονομάζεται Διάχυτη Ανάκλαση ή Μερική Ανάκλαση. [10]

- Ολική Ανάκλαση, κυρίως εμφανίζεται σε λείες επιφάνειες, με το διαδιδόμενο κύμα να ανακλάται ολόκληρο, με συνηθέστερο αντικείμενο έναν καθρέπτη. Βασική προϋπόθεση είναι η διάδοση να γίνεται από ένα μέσο με μεγαλύτερο δείκτη διάθλαση σε ένα άλλο με μικρότερο δείκτη διάθλαση και η γωνία πρόσπτωσης να υπερβαίνει την οριακή ή κρίσιμη γωνία.

- Μερική Ανάκλαση, αποτελεί πιο σύνηθες φαινόμενο καθώς αφορά ανώμαλες επιφάνειες. Σε αυτήν την περίπτωση το φως προσπίπτει στην επιφάνεια και το διαθλώμενο και ανακλώμενο φως σκεδάζονται προς διαφορετικές κατευθύνσεις.



Εικόνα 3. Απεικόνιση της Κατοπτρικής & Διάχυτης Ανάκλασης. [10]

Διάθλαση όπου παρατηρείται αλλαγή στην κατεύθυνση του φωτός καθώς αυτό διαπερνά από ένα μέσο σε κάποιο άλλο που έχει διαφορετικό δείκτης διάθλασης. Βασικός λόγος που παρατηρείται αυτό το φαινόμενο είναι η διαφορά της ταχύτητας του φωτός που υπάρχει σε όταν αυτό διαπερνά διάφορα μέσα.

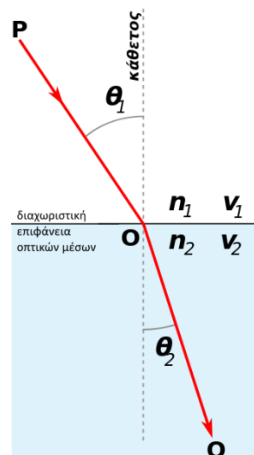
Ο νόμος της Διάθλασης του φωτός είναι ταυτόσημος με τον νόμο του Snell όπου βλέπουμε την σχέση μεταξύ της γωνίας πρόσπτωσης και την γωνία διάθλασης.

Με βάση τον νόμο του Snell μπορούμε να προσδιορίσουμε και τον τρόπο που το φως αλλάζει κατεύθυνση όταν αυτό διαπερνά την διαχωριστική επιφάνεια δυο οπτικών μέσων. Έτσι μπορούμε να υπολογίσουμε την τροχιά του φωτός που προσπίπτει ή διαθλάται σε μια επιφάνεια. [11]

Ο τύπος υπολογισμού είναι:

$$n_1 \cdot \sin(\theta_1) = n_2 \cdot \sin(\theta_2) = \frac{v_1}{v_2}$$

- n_1 = δείκτης διάθλασης αρχικού μέσου
- n_2 = δείκτης διάθλασης νέου μέσου
- v = ταχύτητα σε m/s
- θ_1 = γωνία πρόσπτωσης
- θ_2 = γωνία διάθλασης



Εικόνα 4. Φαινόμενο Διάθλασης της πρωτογενούς ακτίνας στην διεπαφή δύο μέσων. [11]

Δείκτης διάθλασης n ενός οπτικού μέσου ορίζεται ως ο λόγος της ταχύτητας του φωτός στο κενό c προς την ταχύτητα του μέσα σε αυτό u :

$$n = \frac{c}{u}$$

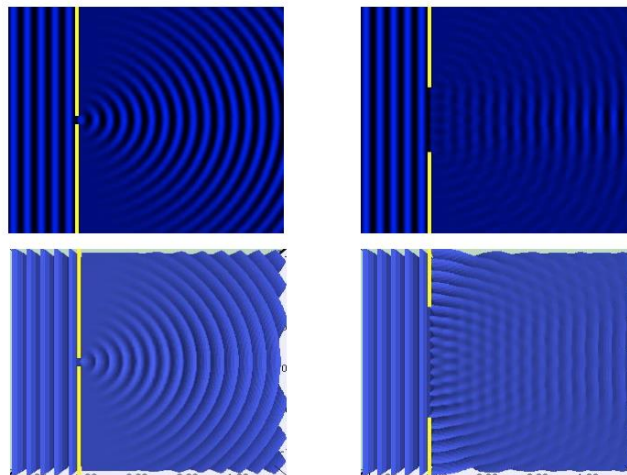
Η ταχύτητα του φωτός προκύπτει πάντα να είναι μεγαλύτερη σε σχέση με όλα τα υπόλοιπα μέσα. Για το κενό ισχύει ότι ο δείκτης διάθλασης n ισούται με την μονάδα, ενώ για όλα τα υπόλοιπα υλικά ισχύει ότι ο δείκτης διάθλασης είναι πάντα μεγαλύτερος από την μονάδα.

Ενδεικτικά ο δείκτης διάθλασης για διάφορα μέσα:

- n αέρα= 1.000293
- n νερού=1.33
- n γυαλιού= 1.5

1.3.4 Περίθλαση του Φωτός (Diffraction of Light)

Περίθλαση του φωτός είναι η περίπτωση στην οποία το φως εκτρέπεται από την ευθύγραμμη πορεία του. Το φαινόμενο της περίθλασης συναντάται όταν το φως προσπαθεί να διέλθει από κάποια λεπτή σχισμή ή οπή. Σε αυτήν την περίπτωση θα περιμέναμε να δούμε στην έξοδο ένα φωτεινό αποτύπωμα του εμποδίου αλλά εν τελεί βλέπουμε μια εικόνα με σκοτεινές και φωτεινές περιοχές γύρο από την περιοχή που θα περιμέναμε το φωτεινό αποτύπωμα. Βασικό προαπαιτούμενο είναι η σχισμή να έχει της ίδιας τάξεως μήκος κύματος με το φως. Η περίθλαση είναι ένα φαινόμενο όπου διαχέονται τα κύματα προς κάθε κατεύθυνση όταν συναντήσουν κάποιο εμπόδιο ή οπή με περίπου ίδια μήκη κύματος. [10]



Εικόνα 5. Παρατηρούμε την αλλαγή μήκους κύματος καθώς μεταβάλλεται το μέγεθος της οπής. [12]

Ο νόμος του **Huygens** αποτελεί βασική αρχή της φυσικής του φωτός και χρησιμοποιήθηκε για την εξήγηση του φωτός ως κύμα. Σύμφωνα με τον Huygens κάθε σημείο της μπροστινής κύμανσης του φωτός έχει την ιδιότητα της πρωτογενής πηγής κύματος, ενώ το δευτερεύον κύμα το οποίο προκύπτει από την σύνθεση των πρωτογενών κυμάτων εξαπλώνεται προς κάθε δυνατή κατεύθυνση. Τα κύματα αυτά μπορούν να λειτουργήσουν καταστρεπτικά ή ενισχυτικά ακολουθώντας όμως τους νόμους της καταστρεπτικής συμβολής. Με την αρχή αυτή μπορούμε να εξηγήσουμε την διάδοση του φωτός ως κύμα όπως επίσης και την διάθλαση, την ανακλαστικότητα και τη διάσπασή του.

Ένα παράδειγμα υπολογισμού της καταστρεπτικής συμβολής σε μια σχισμή πλάτους a με δύο δέσμες να εξέρχονται από αυτήν την διατομή με διεύθυνση θ και απόσταση μεταξύ τους $a/2$ είναι:

$$\frac{a}{2} \cdot \sin(\theta) = m \cdot \frac{\lambda}{2}$$

Και αναλύοντας λίγο παραπάνω μπορούμε να πάρουμε την σχέση που μας επιτρέπει τον υπολογισμό των διευθύνσεων στις οποίες παρατηρείται η καταστρεπτική συμβολή:

$$\sin(\theta) = m \cdot \frac{\lambda}{a}$$

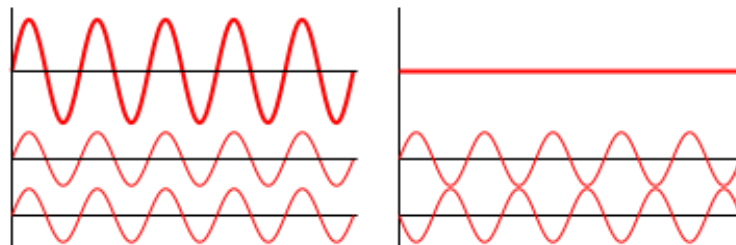
Όπου:

- θ = γωνία απόκλισης (γωνία θέασης)
- λ = μήκος κύματος του φωτός
- a = μέγεθος της οπής(σχισμής)
- m = αριθμός τάξης της καταστρεπτικής συμβολής (ακέραιος αριθμός)

Συμβολή είναι το φαινόμενο της αλληλεπίδρασης δύο ή περισσότερων κυμάτων, που εκπέμπονται από την ίδια ή διαφορετικές πηγές, και συντελούν στην δημιουργία ενός καινούριου κύματος με διαφορετικό πλάτος.

Οι δύο μορφές της Συμβολής είναι:

- Ενισχυτική Συμβολή που συμβαίνει όταν τα κύματα έχουν την ίδια φάση ή άρτιο πολλαπλάσιο του π όταν έχουν διαφορά φάσης, με διπλάσιο πλάτος κορυφής ή ελάχιστου στην έξοδο.
- Αποσβεστική Συμβολή όταν τα κύματα έχουν διαφορά φάσης 180 μοίρες δηλαδή το ελάχιστο του ενός συναντά το μέγιστο του άλλου με αποτέλεσμα να αναιρούνται.

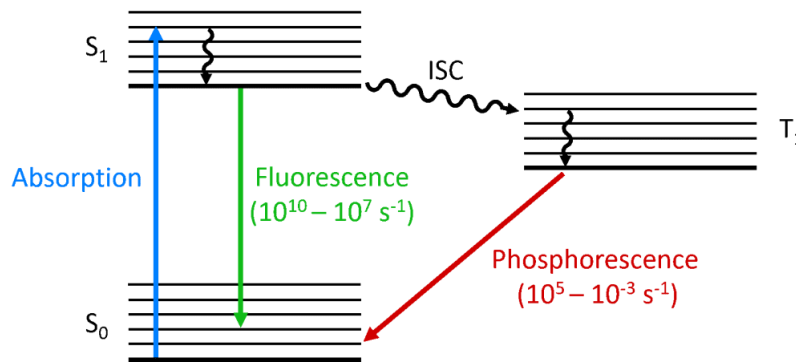


Εικόνα 6. Η εικόνα στα αριστερά αποτυπώνει την ενίσχυση ενώ η δεξιά την απόσβεση. [13]

1.3.5 Φθορισμός/Φωσφορισμός (Fluorescence/Phosphorescence)

Ο **Φθορισμός** είναι ένα φαινόμενο που παρουσιάζουν κάποιες ουσίες που απορροφούν ενέργεια σε κάποια μορφή φωτός (υπεριώδες φως ή το ορατό) και σε δεύτερο χρόνο γίνεται η εκπομπή λόγω της αλλαγής κατάστασης τους, με μεγαλύτερο μήκος κύματος από το αρχικό. Όταν τα μόρια του φθοροφόρου διεγερθούν από την απορρόφησή της ενέργειας τότε μεταβαίνουν σε υψηλότερες ενεργειακές στάθμες. Όταν έρθει η ώρα να επιστρέψουν στην αρχική τους κατάσταση τότε αρχίζουν να απελευθερώνουν την περισσεύουσα ενέργεια ως μια μορφή φωτός. [10]

Φωσφορισμός αποτελεί παρόμοιο φαινόμενο με τον Φθορισμό όσον αναφορά στην εκπομπή του φωτός αλλά η διαφορά τους είναι ότι οι ουσίες καθυστερούν να εκπέμψουν φως μετά την απορρόφηση της ενέργειας, μέχρι να επιστρέψουν στην αρχικής τους κατάσταση. [10]



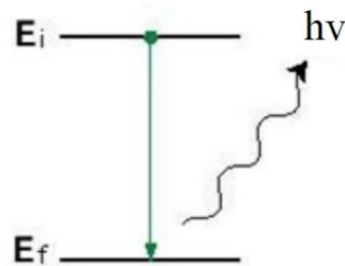
Εικόνα 7. Παρατηρούμε ότι μια ουσία που τα μόρια της είναι φθοροφόρα μετά την εκτόνωση της ενέργειας που απορροφήσανε επιστρέφουν πιο γρήγορα στην αρχική τους κατάσταση σε σχέση με τα μόρια μιας που περιέχει μόρια φωσφορισμού. [14]

1.3.6 Απορρόφηση και Εκπομπή Φωτός

Η Απορρόφηση και η Εκπομπή του φωτός αποτελούν δύο διαδικασίες που συνδέονται μεταξύ τους και αντιπροσωπεύουν την ανταπόκριση των ηλεκτρονικών επιπέδων των ατόμων στην ενέργεια του φωτός.

Ένα άτομο ή μόριο έχει την δυνατότητα να εκπέμψει ένα φωτόνιο, όταν ένα ηλεκτρόνιο κάνει μετάβαση από μια στατική κατάσταση, ή ενεργειακό επίπεδο, σε μια άλλη. Η διατήρηση της ενέργειας καθορίζει την ενέργεια του φωτονίου και συνεπώς τη συχνότητα του εκπεμπόμενου ή απορροφούμενου φωτός. Κατά την εκπομπή το ενεργοποιημένο ηλεκτρόνιο εκπέμπει ένα φωτόνιο και στην συνέχεια πηγαίνει στο χαμηλότερο ενεργειακό επίπεδο με απαράβατο κανόνα την ισότητα της ενέργειας ανάμεσα στο ηλεκτρόνιο που εκπέμφθηκε και αυτό που απορρίφθηκε. [10]

Απορρόφηση του φωτός είναι το φαινόμενο που ένα σώμα μπορεί και απορροφά την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία δηλαδή την ενέργεια ενός φωτονίου. Κατά το φαινόμενο της απορρόφησης τα ηλεκτρόνια περιστρέφονται, δονούνται ή έχουν άλλες αλλαγές από την αρχική τους κατάσταση και σαν αποτέλεσμα έχουν την μετάβαση από μια χαμηλή ενεργειακή κατάσταση σε μια υψηλότερη.



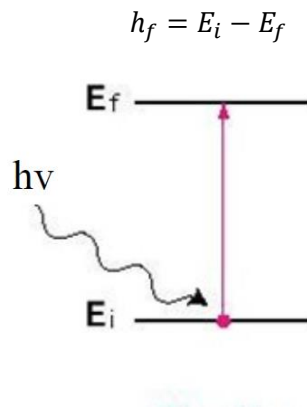
Εικόνα 8. Εκπομπή του φωτός. [15]

Στην πάνω εικόνα παρουσιάζεται η εκπομπή του φωτός με το ηλεκτρόνιο να εκπέμπεται και η ενεργειακή τους κατάσταση να μειώνεται. Μπορούμε να υπολογίσουμε την ενέργεια του φωτονίου με τον τύπο:

E_i = Αρχική κατάσταση με υψηλότερη ενέργεια

E_f = Τελική κατάσταση με χαμηλότερη ενέργεια

h_f = Ενέργεια φωτονίου



Εικόνα 9. Απορρόφηση του φωτός. [15]

Αντίστοιχα στην παραπάνω εικόνα παρατηρούμε το φαινόμενο της Απορρόφησης του φωτός, μόνο που αυτήν την φορά το ηλεκτρόνιο απορροφάει και η ενεργειακή του κατάσταση μεταβάλλεται από μια χαμηλότερη σε μια υψηλότερη την οποία μπορούμε να υπολογίσουμε με τον τύπο:

$$h_f = E_f - E_i$$

1.4 Φασματικές γραμμές και πως παρέχουν μοναδικές πληροφορίες για μια ουσία

Για κάθε ουσία μέσω των φασματικών γραμμών μας παρέχονται πληροφορίες από τον τρόπο που αλληλοεπιδρούν με το φως και κάθε μία έχει μοναδικό φασματικό αποτύπωμα. Το φασματικό αποτύπωμα είναι μια μοναδική σύνθεση από φασματικές γραμμές στο εύρος φάσματος της και χάρη σε αυτές μπορούμε να αντλήσουμε τις απαραίτητες πληροφορίες για:

- Την σύνθεση της ουσίας, από τις συγκεκριμένες μεταβάσεις της ενέργειας στα διάφορα επίπεδα της ουσίας, οι οποίες είναι μοναδικές για κάθε μια και μας παρέχουν μια συνθετική χαρακτηριστική υπογραφή της εκάστοτε ουσίας.
- Την δομή της ουσίας, όπως την απόσταση που έχουν τα άτομα και οι πυρήνες μεταξύ τους ή τις γωνίες των δεσμών τους ώστε να μπορούμε να αναγνωρίσουμε την δομή της ουσίας.
- Την κατάσταση στην οποία βρίσκονται και την θερμοκρασία, καθώς μέσω αυτών των πληροφοριών μας είναι εφικτό να καταλαβαίνουμε αν το δείγμα μας είναι στερεό, υγρό ή αέριο καθώς επίσης και την θερμοκρασία του.
- Την ποσότητα και την συγκέντρωση, για να μπορέσουμε να αναγνωρίσουμε την ποσότητα μιας ουσίας ή την συγκέντρωσή της στο δείγμα που μελετάμε. [16]

1.5 Επίλογος

Στο κεφάλαιο αυτό αναλύσαμε εκτενώς τον διαχωρισμό της Φασματοσκοπίας σε ατομικό και μοριακό επίπεδο καθώς επίσης και τα διαφορετικά φαινόμενα του φωτός. Τα παραπάνω αποτελούν βασικό κλάδο της φυσικής που είναι κρίνεται απαραίτητος για την κατανόηση και ανάλυση της δομής, των ιδιοτήτων και των αλληλεπιδράσεων της ύλης με την Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία και χρησιμοποιείται σε πολλούς επιστημονικούς τομείς.

Κεφάλαιο 2ο: Φασματοσκοπία UV,IR,AAS

2.1 Εισαγωγή στην Φασματοσκοπία

Σκοπός της φασματοσκοπίας είναι η ανάλυση και μελέτη των φαινομένων που προκαλεί η αλληλεπίδραση της Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία με την ύλη τόσο σε ατομικό όσο και σε μοριακό

επίπεδο. Όπως είδαμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, η φασματοσκοπία αποτελείται από μια συλλογή από τεχνικές που τις χρησιμοποιούμε για να εξετάσουμε την αλληλεπίδραση της Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας για τον ποιοτικό και ποσοτικό έλεγχο του δείγματος. Η Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία αποτελείται από ένα ευρύ φάσμα συχνοτήτων, από πολύ μικρά μήκη κύματος έως πολύ υψηλές συχνότητες, και περιλαμβάνει τις φασματικές περιοχές που αναλύσαμε πιο πάνω. Μέσω της φασματοσκοπίας μπορούμε να μελετήσουμε τις ενεργειακές καταστάσεις της ύλης, των δονήσεων των μορίων, όπως και άλλες κρίσιμες παραμέτρους.

2.2 Βασικές αρχές της Φασματοσκοπίας

2.2.1 Αλληλεπίδραση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας

Η φασματοσκοπία αποτελεί έναν από τους τρόπους που χρησιμοποιούνται για την ανίχνευση της κβαντικής συμπεριφοράς των ατόμων ή μορίων με απαραίτητη την γνώση κβαντομηχανικής για την επίτευξη της πλήρους κατανόησης των μετρήσεων. Η αλληλεπίδραση της Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας με την ύλη ωστόσο αποτελεί ένα σύνθετο φαινόμενο μιας και τα άτομο και τα μόρια έχουν την τάση να απορροφούν ή να εκπέμπουν ακτινοβολία κατά την στιγμή μετάβασης τους από το ένα ενεργειακό επίπεδο σε κάποιο άλλο. Με την αλληλεπίδραση της Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας με την ύλη πολλοί σημαντικοί παράγοντες, (ενέργεια του φωτός, δονήσεις, περιστροφές) αποτελούν την βάση για να λάβουμε πληροφορίες σχετικά με την δομή, την σύνθεση και τις κβαντικές καταστάσεις της ύλης. [17]

2.2.2 Beer-Lambert Law

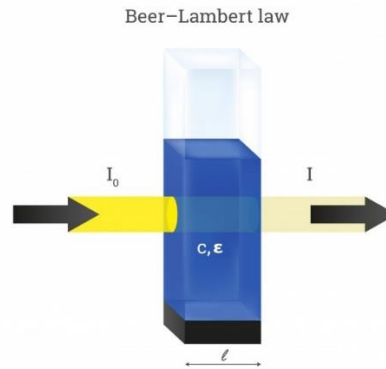
Οι νόμοι Beer, Lambert και Bouguer αποτελούν τρεις θεμελιώδεις αρχές στη φασματοσκοπία και την ανάλυση της αλληλεπίδρασης του φωτός σε διαφανή μέσα. Η εμβάθυνση σε αυτούς τους νόμους αποκαλύπτει πολύτιμες πληροφορίες για την επιστημονική κοινότητα, ειδικά στους τομείς της χημείας και της φυσικής.

Οι νόμοι «Beer -Lambert» αναφέρονται στο φαινόμενο της απορρόφηση του φωτός από ένα υλικό και χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης οποιασδήποτε ουσίας σε ένα διάλυμα. Πιο συγκεκριμένα όταν μια δέσμη φωτός περάσει μέσα κάποιο διάλυμα, αυτό απορροφάει ένα ποσοστό του φωτός με αποτέλεσμα στην έξοδο του διαλύματος να παίρνουμε μειωμένη ένταση σε σχέση με την αρχική δέσμη φωτός. [17]

Η φασματοσκοπία μας δίνει την δυνατότητα να υπολογίσουμε την διαπερατότητα (Transmittance) της ουσίας που μελετάμε χρησιμοποιώντας την αναλογία των μετρήσεων ισχύος από την διαφορά ισχύος της πηγής όταν υπάρχει δείγμα προς μελέτη (I) και όταν αυτό δεν υπάρχει (I_0) και κυμαίνεται από 0-1 (ή 0-100%) δηλαδή τα διαλύματα δεν έχουν υψηλή πυκνότητα (η απορρόφηση κυμαίνεται από 0,1 έως 1). [17]

2.2.2.1 Ο νόμος του Beer

Ο νόμος του Beer είναι μία θεμελιώδης αρχή στην φασματοσκοπία, η οποία είναι σημαντική για την κατανόηση της αλληλεπίδρασης του φωτός με τα διαφανή διαλύματα. Σύμφωνα με αυτόν τον νόμο, η απορρόφηση του φωτός από μια διαλυματική ουσία είναι ανάλογη της συγκέντρωσης της ουσίας αυτής στο διάλυμα. Όταν καταγραφεί κάποια απόκλιση από το αναμενόμενο αποτέλεσμα μπορεί να οφείλεται σε παραλλαγή των χημικών αλληλεπιδράσεων ή στην αλλαγή της μοριακής δομής κάποιου κυττάρου της μονάδας. Το σύνολο αυτών των επιπτώσεων μπορεί να επιφέρει αλλαγές στις δονητικές ή ηλεκτρονικές καταστάσεις των ατόμων και αποτελούν έγκυρη εξήγηση για την παρατήρηση. [18]



Εικόνα 10. Διάγραμμα απεικόνισης του νόμου Beer-Lambert. [19]

Η εξίσωση του νόμου του Beer είναι η εξής:

$$A = \varepsilon \times C \times L$$

Όπου:

A= η Απορρόφηση του φωτός

ε = Συντελεστής Απορρόφησης, εξαρτάται από την μελετώμενη ουσία και το μήκος κύματος του φωτός

C= Συγκέντρωση της ουσίας στο διάλυμα (με μονάδα μέτρησης mol/L)

L= Μήκος του διανύσματος στο διάλυμα (πάχος κυψελίδας σε εκατοστά)

Αυτός ο νόμος είναι ιδιαίτερα χρήσιμος για τον προσδιορισμό της συγκέντρωσης διαλυμάτων με τη μέθοδο της φασματοσκοπίας και εφαρμόζεται ευρέως στη χημική ανάλυση και τη βιοχημεία. [20]

2.2.2.2 Νόμος του Lambert

Ο νόμος του Lambert είναι μια θεμελιώδης αρχή στην οπτική και αφορά την απορρόφηση του φωτός καθώς αυτό διέρχεται μέσα από ένα διαφανές μέσο. Ο νόμος αυτός περιγράφει τον τρόπο με τον οποίο η ένταση του φωτός μειώνεται εξαιτίας της απορρόφησης καθώς το φως διαπερνά ένα ομογενές υλικό. [18]

Η βασική έκφραση του νόμου του Lambert είναι η εξής:

Όπου:

I= Ένταση του φωτός μετά την διέλευση από το μέσο

I_0 = Αρχική ένταση του φωτός πριν το μέσο

e= βάση των φυσικών αριθμών

α = είναι ο συντελεστής απορρόφησης υλικού

x = είναι το πάχος του μέσου ή η απόσταση που διανύει το φως μέσα στο υλικό

Ο νόμος του Lambert είναι θεμελιώδης στην φασματοσκοπία και την οπτική ανάλυση και εφαρμόζεται στη μελέτη της απορρόφησης του φωτός σε διάφορα υλικά. [20]

2.2.2.3 Ο νόμος του Bouguer

Ο νόμος του Bouguer, ο οποίος είναι γνωστός και ως νόμος του Bouguer-Lambert ή νόμος του Beer-Lambert-Bouguer στην πλήρη του μορφή και αφορά στην απορρόφηση του φωτός κατά τη διέλευσή του μέσω ενός διαφανούς μέσου. Ο νόμος αυτός μπορεί και περιγράφει πώς η ένταση του φωτός μειώνεται εξαιτίας της απορρόφησης και της διάχυσης του φωτός κατά τη διέλευση του μέσα από ένα μέσο. [18]

Η βασική εξίσωση του νόμου του Bouguer είναι η εξής:

$$I = I_0 \times e^{-kx}$$

Όπου:

I= Ένταση του φωτός μετά την διέλευση από το μέσο

I_0 = Αρχική ένταση του φωτός πριν το μέσο

e= βάση των φυσικών αριθμών

k= συντελεστής της απορρόφησης και της διάχυσης μέσου

x = η απόσταση την οποία διανύει το φως μέσα στο μέσο

Ο νόμος του Bouguer εφαρμόζεται σε διάφορες εφαρμογές όπως η φασματοσκοπία, η αστρονομία και η μελέτη της ατμόσφαιρας, παρέχοντας μια θεμελιώδη βάση για την κατανόηση της απορρόφησης και της διάχυσης του φωτός σε διαφανή μέσα. [21]

2.2.2.4 Ο Νόμος τους Beer και εφαρμογές του

Ο νόμος του Beer, γνωστός και ως νόμος του Beer-Lambert, είναι ένας θεμελιώδης νόμος στην φασματοσκοπία και τη χημική ανάλυση. Ο νόμος αυτός σχετίζεται με την απορρόφηση του φωτός από τις χημικές ενώσεις και αναφέρει ότι η απορρόφηση του φωτός από ένα διάλυμα είναι ανάλογη της συγκέντρωσης του στοιχείου που απορροφάει στη διάλυση και του μήκους της διαδρομής που διανύει το φως μέσα στο διάλυμα.

Η σημασία του νόμου του Beer είναι τεράστια στην ανάλυση και μελέτη χημικών ουσιών, καθώς επιτρέπει τον προσδιορισμό της συγκέντρωσης ουσιών σε ένα διάλυμα μέσω της μέτρησης της απορρόφησης φωτός. Στη φασματοσκοπία, ο νόμος του Beer είναι θεμελιώδης για την ερμηνεία των φασμάτων απορρόφησης και την αναγνώριση των χημικών ενώσεων. [21]

2.2.2.5 Νόμος τους Lambert και η επίδραση του στην οπτική

Ο Νόμος του Lambert αποτελεί μια θεμελιώδη αρχή στον τομέα της οπτικής, που εξηγεί τον τρόπο με τον οποίο το φως απορροφάτε καθώς διέρχεται μέσα από διάφορα υλικά. Αυτός ο νόμος είναι ιδιαίτερα σημαντικός, μιας και βοηθά στην κατανόηση των βασικών φαινομένων της απορρόφησης του φωτός, της αλλαγής της έντασης του φωτός και της αλληλεπίδρασής του με διάφορες ουσίες.

Σύμφωνα με τον Νόμο του Lambert, η απορρόφηση του φωτός από ένα ομογενές υλικό είναι εξαρτώμενη από το πάχος του υλικού αυτού και τη συγκέντρωση των απορροφητικών μορίων μέσα σε αυτό. Αυτό σημαίνει ότι, όσο πιο παχύ είναι το υλικό, τόσο μεγαλύτερη είναι και η απορρόφηση του φωτός. Επιπρόσθετα, το φαινόμενο αυτό εξαρτάται και από τις φασματικές ιδιότητες του κάθε υλικού, καθώς διαφορετικά υλικά απορροφούν το φως με διαφορετικούς ρυθμούς ανάλογα με το μήκος κύματος του φωτός. Αυτή η αρχή είναι απαραίτητη για την περιγραφή του τρόπου με τον οποίο το φως μεταδίδεται μέσα από ένα διαφανές ή ημιδιαφανές μέσο, όπως ένα γυάλινο παράθυρο ή ένα διαλύτη σε

μια χημική αντίδραση. Ουσιαστικά, ο νόμος αυτός λέει ότι η απορρόφηση του φωτός μειώνεται εκθετικά με την αύξηση του βάθους του υλικού που διέρχεται το φως. Αυτό σημαίνει ότι, όσο πιο βαθύ είναι το υλικό, τόσο περισσότερο φως απορροφάτε και τόσο λιγότερο φως φτάνει στην άλλη πλευρά του. Επίσης, αν η συγκέντρωση των απορροφητικών μορίων είναι υψηλότερη, τότε η απορρόφηση του φωτός θα είναι επίσης μεγαλύτερη. Η εφαρμογή του Νόμου του Lambert έχει σημαντικές επιπτώσεις στην επιστήμη και την τεχνολογία, για παράδειγμα, χρησιμοποιείται στη φωτομετρία για την καθορισμό της συγκέντρωσης λύσεων σε χημικές αναλύσεις, καθώς και στην ιατρική απεικόνιση για την κατανόηση της διάχυσης του φωτός μέσα στους ιστούς. Επιπλέον, είναι θεμελιώδης για την κατανόηση των αλλαγών στο χρώμα και την εμφάνιση των υλικών όταν αυτά φωτίζονται με διαφορετικούς τρόπους. Ένα σημαντικό στοιχείο του νόμου του Lambert είναι η ικανότητά του να εξηγεί την ομοιόμορφη απορρόφηση του φωτός ανάλογα με το βάθος του υλικού. Αυτό σημαίνει ότι σε κάθε στρώμα του υλικού, απορροφάτε ένα σταθερό ποσοστό του φωτός που περνά μέσα από αυτό. Η παραδοχή αυτή είναι ιδιαίτερα χρήσιμη στην πρακτική εφαρμογή, καθώς διευκολύνει τον υπολογισμό της συνολικής απορρόφησης του φωτός από ένα υλικό. Η εξάρτηση της απορρόφησης του φωτός από την πυκνότητα και το είδος των απορροφητικών μορίων σε ένα υλικό επιτρέπει επίσης την ανάλυση και τον προσδιορισμό των χαρακτηριστικών τους. [21]

2.2.2.6 Νόμος του Bouguer και η σχέση του με την αστρονομία και ατμοσφαιρική φυσική

Ο Νόμος του Bouguer, γνωστός και ως ο Νόμος της Εκλείψεως ή Νόμος της Φωτομετρίας του Bouguer, είναι ένας θεμελιώδης κανόνας στην αστρονομία και την ατμοσφαιρική φυσική. Αυτός ο νόμος αποτελεί μια ζωτική σύνδεση μεταξύ της επιστήμης της αστρονομίας και της κατανόησης των φυσικών φαινομένων της ατμόσφαιρας της Γης. Αρχικά, ο νόμος του Bouguer διατυπώθηκε για να περιγράψει τον τρόπο με τον οποίο το φως των αστερών εξασθενίζει καθώς διαπερνά την ατμόσφαιρα της Γης. Ο Pierre Bouguer, ένας Γάλλος αστρονόμος και μαθηματικός του 18ου αιώνα, διαπίστωσε ότι η φωτεινότητα ενός αστεριού μειώνεται εκθετικά με το μήκος της διαδρομής του φωτός μέσα στην ατμόσφαιρα. Αυτή εξασθένιση οφείλεται στη σκέδαση και την απορρόφηση του φωτός από τα ατμοσφαιρικά αέρια, τους ατμοσφαιρικούς ρύπους και τους άλλους σωματιδιακούς ρύπους. Η εφαρμογή του Νόμου του Bouguer στην αστρονομία είναι πολυδιάστατη. Κατ' αρχήν, βοηθά στην καλύτερη κατανόηση και ερμηνεία των αστρονομικών παρατηρήσεων. Για παράδειγμα, όταν οι αστρονόμοι μελετούν τα αστέρια και τα άλλα αστρονομικά αντικείμενα, πρέπει να λάβουν υπόψη την επίδραση της ατμοσφαιρικής εξασθένησης στην εμφανιζόμενη φωτεινότητα αυτών των αντικειμένων. Αυτό σημαίνει ότι η πραγματική φωτεινότητα ενός αντικειμένου είναι συχνά υψηλότερη από αυτή που παρατηρείται από τη Γη. Στην ατμοσφαιρική φυσική, ο Νόμος του Bouguer χρησιμεύει ως ένα εργαλείο για την κατανόηση και τη μελέτη της αλληλεπίδρασης μεταξύ φωτός και ατμόσφαιρας. Μέσω της εφαρμογής του, οι επιστήμονες μπορούν να αναλύσουν τον τρόπο με τον οποίο διάφοροι παράγοντες όπως η συγκέντρωση αερίων, η υγρασία, η θερμοκρασία και η παρουσία σωματιδίων στην ατμόσφαιρα επηρεάζουν τη διάδοση του φωτός. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό για την κατανόηση των φαινομένων όπως η διασπορά του φωτός, η ατμοσφαιρική ακτινοβολία και η οπτική ορατότητα.

Ο Νόμος των Lambert-Beer αποτελεί μία σημαντική αρχή στη φασματοσκοπία και χρησιμοποιείται για την κατανόηση της απορρόφησης του φωτός από διαφανή διαλύματα. Η βασική του αρχή συνδέει την απορρόφηση του φωτός με τη συγκέντρωση των διαλυμένων ουσιών και το μήκος του διαδρομής του φωτός μέσα στο διάλυμα. Μαθηματικά, ο νόμος αυτός εκφράζεται με την εξίσωση:

$A = \epsilon \cdot I \cdot c$, όπου A είναι η απορρόφηση, ϵ είναι ο μοριακός συντελεστής απορρόφησης (ή εκτινακτικότητα), I είναι το μήκος της διαδρομής του φωτός μέσα στο διάλυμα και c είναι η συγκέντρωση της διαλυμένης ουσίας. Η εξαγωγή του νόμου αρχίζει με την παραδοχή ότι η απορρόφηση

του φωτός σε ένα διάλυμα είναι ανάλογη της πυκνότητας των φωτοαπορροφητικών μορίων (συγκέντρωσης) και του μήκους της διαδρομής του φωτός. Πιο συγκεκριμένα, καθώς το φως διαπερνά ένα διάλυμα, ένα ποσοστό του φωτός απορροφάται από τα μόρια της διαλυμένης ουσίας. Αυτή η απορρόφηση μειώνει την ένταση του φωτός καθώς προχωρά μέσα στο διάλυμα. Η εξίσωση του νόμου συνεχίζεται με τη διατύπωση της αρχικής εξίσωσης της φωτομετρίας:

$I = I_0 \cdot e^{(-\epsilon \cdot l \cdot c)}$, όπου I είναι η τελική ένταση του φωτός, I_0 η αρχική ένταση, ϵ ο μοριακός συντελεστής απορρόφησης, l το μήκος της διαδρομής και c η συγκέντρωση της ουσίας. Ο συντελεστής ϵ είναι μια σταθερά που εκφράζει την ποσότητα του φωτός που απορροφάται ανά μονάδα συγκέντρωσης και ανά μονάδα μήκους διαδρομής. Η απορρόφηση (A), η οποία μετρείται συχνά και σε φωτομετρικά όργανα, ορίζεται ως:

$A = -\log_{10}(I / I_0) = \epsilon \cdot l \cdot c$. Αυτή η εξίσωση δείχνει ότι η απορρόφηση είναι άμεσα ανάλογη τόσο με τη συγκέντρωση της ουσίας όσο και με το μήκος της διαδρομής του φωτός. Επιπλέον, ο νόμος αυτός υποθέτει ότι η απορρόφηση γίνεται σε ένα συγκεκριμένο μήκος κύματος, το οποίο σημαίνει ότι η απορρόφηση είναι εξαρτημένη από το μήκος κύματος του φωτός.

Στην πράξη όμως, για να μετρηθεί η απορρόφηση, χρησιμοποιείται η λογαριθμική μορφή της εξίσωσης, που είναι η πιο γνωστή μορφή του νόμου:

$A = -\log(I/I_0) = \epsilon \cdot l \cdot c$. Εδώ, η A (απορρόφηση) είναι μια μη διάσταση μετρητική μονάδα, είναι ο μοριακός συντελεστής της απορρόφησης (συνήθως εκφράζεται σε $L \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$), l είναι το μήκος της διαδρομής μέσα στο διάλυμα (σε εκατοστά), και c είναι η συγκέντρωση της ουσίας (σε mol/L). [22]

2.2.2.7 Περιορισμοί και Αποκλίσεις.

Ο νόμος του Beer-Lambert, επίσης γνωστός ως νόμος της απορρόφησης, είναι ένας βασικός νόμος όπου βοηθά στην κατανόηση της αλληλεπίδρασης του φωτός με την ύλη, στη φασματοσκοπία που περιγράφει πώς η φωτεινή ένταση μειώνεται εξαιτίας της απορρόφησης όταν διέρχεται μέσα από ένα διαφανές μέσο σε συσχέτιση με την συγκέντρωση του απορροφητικού υλικού και το μήκος της διαδρομής που διανύει το φως. Παρόλο που ο νόμος αυτός είναι εξαιρετικά χρήσιμος στην ανάλυση και κατανόηση φωτομετρικών και φασματοσκοπικών δεδομένων, παρουσιάζει ορισμένους θεμελιώδεις περιορισμούς, καθώς και αποκλίσεις, τόσο χημικές όσο και οργανολογικές. Ωστόσο, οι νόμοι αυτοί έχουν ορισμένους περιορισμούς και δεν ισχύουν υπό όλες τις συνθήκες. Οι αποκλίσεις από τους νόμους του Beer-Lambert μπορεί να προκύψουν λόγω παραγόντων όπως η χημική ετερογένεια του δείγματος, η αλληλεπίδραση μεταξύ των μορίων σε υψηλές συγκεντρώσεις, οι σκεδασμοί φωτός λόγω της ύπαρξης σωματιδίων ή οπτικών ανωμαλιών στο διάλυμα, και η περιορισμένη ευαισθησία του φασματοσκοπικού εξοπλισμού. Επιπλέον, οι νόμοι αυτοί δεν λαμβάνουν υπόψη τη φθορά του φωτός λόγω απορρόφησης ή σκέδασης σε άλλες αλληλεπιδράσεις εκτός του στόχου ανάλυσης. Η κατανόηση αυτών των περιορισμών και η ανάπτυξη μεθόδων για την αντιμετώπισή τους είναι κρίσιμη για την ακριβή εφαρμογή της φασματοσκοπίας σε επιστημονικές και βιομηχανικές εφαρμογές. [23]

1. Θεμελιώδεις Περιορισμοί:

- Ομοιογένεια του Διαλύματος: Ο νόμος ισχύει μόνο για τα ομογενή διαλύματα. Σε περιπτώσεις όπου υπάρχουν ανομοιομορφίες, ο νόμος δεν εφαρμόζεται ακριβώς.
- Σταθερή Συγκέντρωση: Απαιτείται να είναι σταθερή σε όλο το μήκος της διαδρομής του φωτός.
- Μονοχρωματικό Φως: Ο νόμος ισχύει μόνο για μονοχρωματικό φως, δηλαδή το φως που έχει μόνο μία συγκεκριμένη συχνότητα ή ένα συγκεκριμένο μήκος κύματος. Η

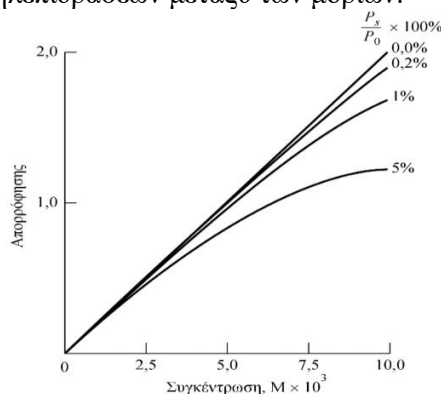
χρήση του φωτός που περιέχει πολλαπλά μήκη κύματος μπορεί να προκαλέσει ανακρίβειες.

2. Χημικοί Περιορισμοί:

- Συγκέντρωση Διαλυτού: Σε πολύ υψηλές συγκεντρώσεις, η απορρόφηση δεν είναι πλέον ανάλογη της συγκέντρωσης λόγω της επίδρασης της εσωτερικής διάχυσης φωτός και των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των μορίων.
- Χημική Φύση του Διαλυτού: Ορισμένα μόρια μπορεί να βρίσκονται σε διαφορετικές χημικές μορφές (π.χ. ιονισμένες ή ανιονισμένες) ανάλογα με το pH του διαλύματος, αλλάζοντας την απορροφητικότητά τους. Αυτό σημαίνει ότι η απορρόφηση μπορεί να επηρεαστεί από τις χημικές αλλαγές που συμβαίνουν στο διάλυμα.
- Πολυμερισμός ή Συσσωμάτωση: Σε ορισμένες περιπτώσεις, τα μόρια του διαλυτού μπορεί να σχηματίζουν συμπλέγματα ή πολυμερή, αλλάζοντας την απορρόφηση του φωτός.
- Θερμοκρασία: Η αλλαγή της θερμοκρασίας μπορεί να επηρεάσει τη δομή και τις ιδιότητες του διαλυτού, επηρεάζοντας έτσι την απορρόφηση.

3. Οργανολογικοί περιορισμοί:

- Όρια Γραμμικότητας: Ο νόμος αυτός ισχύει μόνο εντός ενός συγκεκριμένου εύρους συγκεντρώσεων. Σε πολύ υψηλές συγκεντρώσεις, η απορρόφηση μπορεί να μην είναι γραμμική λόγω αλληλεπιδράσεων μεταξύ των μορίων.



Εικόνα 11. Απόκλιση της γραμμικότητας στην σχέση συγκέντρωσης και απορρόφησης [23]

$$A' = \log \frac{(P_0 + P_s)}{(P + P_s)}$$

Μεγάλες τιμές παράσιτης ακτινοβολίας σε μεγάλες συγκεντρώσεις (ή μεγάλες οπτικές διαδρομές) έχει αποτέλεσμα σημαντικές αποκλίσεις από την γραμμικότητα ως προς την συγκέντρωση και την οπτική διαδρομή. [23]

- Χημικές Ιδιότητες: Χημικές αλλαγές στο δείγμα, όπως αντιδράσεις ιοντισμού ή συμπλοκοποίησης, μπορούν να επηρεάσουν την απορρόφηση.
- Οργανολογικές Πτυχές: Η ακρίβεια των φασματομετρικών συσκευών και η ευαισθησία τους σε διαφορετικά μήκη κύματος μπορεί να επηρεάσει τη μέτρηση. Επίσης, η ανάκλαση του φωτός από το δοχείο δειγμάτων και άλλες οπτικές ατέλειες μπορούν να εισαγάγουν σφάλματα.
- Θερμοκρασιακές Επίδρασεις: Η θερμοκρασία μπορεί να επηρεάσει την απορρόφηση λόγω της αλλαγής στη δομή του διαλυμένου είδους ή της αλληλεπίδρασής του με το διαλυτικό.

- Πολωτικότητα και Σκέδαση Φωτός: Η πολωτικότητα του φωτός και η σκέδαση από σωματίδια ή ακαθαρσίες στο διάλυμα μπορούν να προκαλέσουν ανακρίβειες στη μέτρηση της απορρόφησης.
- Περιορισμοί της Μεθόδου: Ο νόμος του Beer-Lambert απαιτεί ομοιογενή δείγματα και σταθερή οπτική διαδρομή. Ανωμαλίες στη διαδρομή του φωτός ή στην ομοιογένεια του δείγματος μπορούν να επηρεάσουν τα αποτελέσματα. [23]

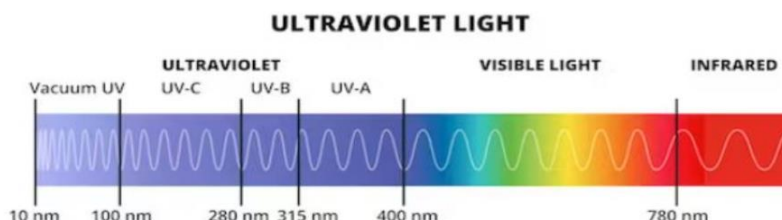
2.3 Φασματοσκοπία Υπεριώδους Φάσματος (UV)

2.3.1 Περιοχή UV

Η περιοχή Υπεριώδους Ακτινοβολίας (UV), αποτελεί ένα συγκεκριμένο εύρος του μήκους κύματος της Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας. Παρατηρείται στην ενδιάμεση θέση από την Ορατή Ακτινοβολία (ViS) και την ακτινοβολία των Ραδιοκυμάτων με εύρος μήκους κύματος από 10nm (νανόμετρα) έως 380nm.

Ωστόσο, η Υπεριώδης Ακτινοβολία αποτελείται από 3 διαφορετικές υποκατηγορίες:

- UV-A., έχει εύρος μήκους κύματος 315nm-400nm και είναι επικίνδυνη καθώς μπορεί να προκαλέσει βαθιά εγκαύματα ή μελανώματα χωρίς να υπάρχει κάποιος τρόπος προστασίας από αυτήν.
- UV-B, έχει εύρος μήκους κύματος 280nm-315nm. Είναι υπεύθυνη για το μαύρισμα και την παροχή της βιταμίνης D από το φως του ηλίου, παρόλα αυτά όμως μπορεί να προκαλέσει εγκαύματα μετρίου βαθμού όπως και βασικοκυτταρικά ή πλακωδοκυτταρικά καρκινώματα.
- UV-C, είναι η πιο επικίνδυνη μορφή της υπεριώδους ακτινοβολίας και κυμαίνεται από 100nm-280nm. [6]

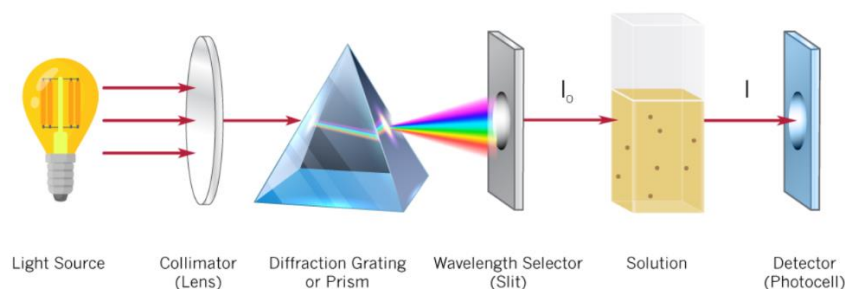


Εικόνα 12. Διαχωρισμός του UV φάσματος σε υποκατηγορίες. [24]

2.3.2 Βασικής Διάταξης Υπεριώδους Φάσματος

Για την φασματοσκοπία υπεριώδους Φάσματος είναι απαραίτητη η διάταξη των παρακάτω οργάνων και εξαρτημάτων:

- Η πηγή φωτός, για παροχή υπεριώδους ακτινοβολίας.
- Φίλτρα, για διαχωρισμό του υπεριώδους φωτός στις ζητούμενες περιοχές του μήκους κύματος.
- Κυψελίδα/Κυβέτα για την τοποθέτηση του μετρούμενου δείγματος.
- Φασματοφωτόμετρο UV, αποτελεί βασικό όργανο για την μέτρηση απορρόφησης ή εκπομπή του φωτός.
- Δέκτες, όπου λαμβάνουν το σήμα αφότου περάσει από το εξεταζόμενο δείγμα.
- Πρίσμα, για ανακατεύθυνση ή απομόνωση μια συγκεκριμένης περιοχής προς εξέταση.



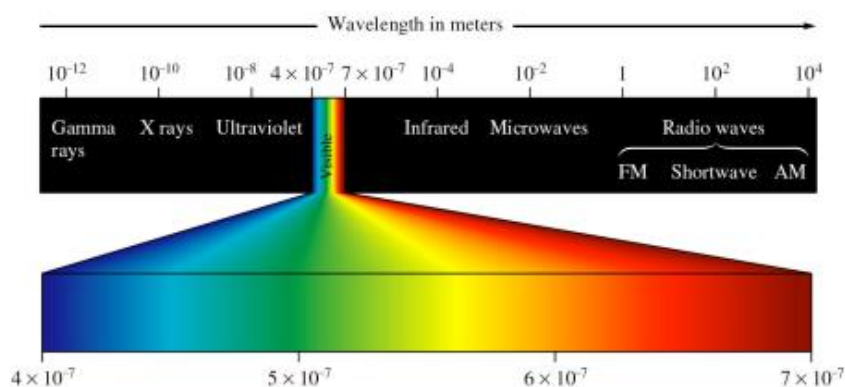
Εικόνα 13. Βασική διάταξη του φασματοφωτόμετρου. [25]

2.3.3 Ποσοτικής Ανάλυσης.

Η Φασματοσκοπία Υπεριώδους Φάσματος είναι μια από τις ισχυρότερες τεχνικές της ποσοτικής ανάλυσης. Το υπεριώδες φως περνώντας μέσα από το δείγμα αλληλοεπιδρά με τα μόρια με αποτέλεσμα να έχουμε το φαινόμενο της χαρακτηριστικής απορρόφησης. Με την χρήση του νόμου του Beer-Lambert που μας επιτρέπει να προσδιορίσουμε την συγκέντρωση μιας ουσίας στο δείγμα μέσω της έντασης της απορρόφησης. Επιπλέον μπορούμε με την χρήση βαθμονόμετρων και φασματομέτρων υψηλής ανάλυσης να ενισχύσουμε την ακρίβεια της ποσοτικής ανάλυσης. [26]

2.4 Φασματοσκοπία ορατού (ViS)

Η περιοχή Ορατού Φάσματος (ViS) παρατηρείται μετά την περιοχή της Υπεριώδους Ακτινοβολίας με εύρος μήκους κύματος από τα 380nm-780nm. Με την φασματοσκοπία του Ορατού φάσματος μπορούμε να μετρήσουμε την απορρόφηση ή την εκπομπή του φωτός στην ορατή περιοχή, το οποίο είναι πολύ χρήσιμο καθώς μας επιτρέπει να κατανοήσουμε τον τρόπο που αλληλοεπιδρά η ύλη με το ορατό φως. [27]



Εικόνα 14. Απεικόνιση μήκους κύματος ορατού φάσματος. [28]

2.4.1 Τεχνικά χαρακτηριστικά οργάνων

- Εύρος Μέτρησης-Ανάλυση, μέτρηση του φάσματος στο μήκος κύματος και ανίχνευση της ελάχιστης αλλαγή του μήκους κύματος αντίστοιχα από το φασματοσκόπιο.
- Φωτομετρικά Εξαρτήματα, εξαρτήματα τα οποία επηρεάζουν την ποιότητα του φωτός που εισέρχεται στο φασματοσκόπιο (φίλτρα).
- Πηγές φωτός, όπως οι λάμπες Νατρίου, λάμπες Υλικού, λάμπες Στόχευσης, λυχνίες Δευτερίου, Φωτοδίοδοι.

- Κυψελίδες δειγμάτων, στα οποία το φως τα διαπερνά ή εκπέμπεται από το περιεχόμενο.
- Σύστημα υπολογισμού, που επεξεργάζεται τα δεδομένα από τις μετρήσεις. [27]

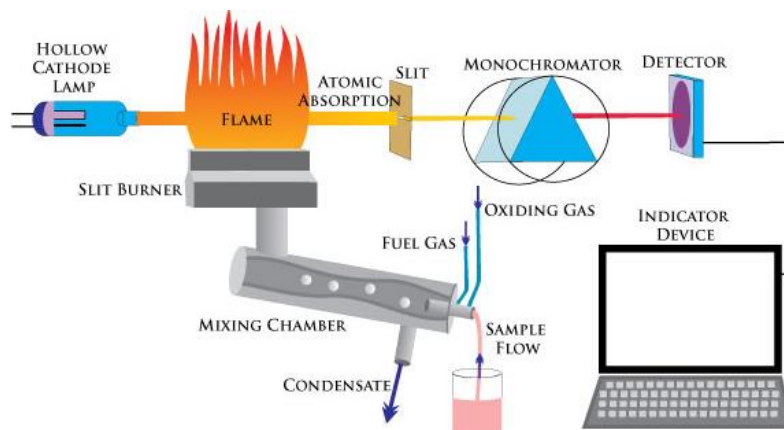
2.4.2 Εφαρμογές σε σύγκριση με φασματοσκοπία UV

Η φασματοσκοπία ορατού και η φασματοσκοπία υπεριώδους ακτινοβολίας είναι τεχνικές που τις χρησιμοποιούμε ώστε να μελετήσουμε την απορρόφηση, την εκπομπή ή την σκέδαση του φωτός όταν αυτό αλληλοεπιδρά με την ύλη. Ωστόσο η φασματοσκοπία ορατού κυρίως χρησιμοποιείται για την ανάλυση του χρώματος του δείγματος και βιολογικές εφαρμογές ενώ η φασματοσκοπία υπεριώδους χρησιμοποιείται για ποσοτική ανάλυση σε φαρμακευτικές και περιβαλλοντικές μελέτες. Συχνά συνδυάζονται οι δύο αυτές τεχνικές ώστε να γίνεται ολοκληρωμένη μελέτη του δείγματος και λαμβάνουμε πληροφορίες για την ηλεκτρονική δομή των μελετώμενων υλικών. [27]

2.5 Φασματοσκοπία ατομικής απορρόφησης (AAS)

2.5.1 Επισκόπηση τεχνικής

Η φασματοσκοπία ατομικής απορρόφησης χρησιμοποιείται για την ποσοτική ανάλυση των στοιχείων που εμπεριέχονται σε ένα δείγμα. Κατασκευαστικά έχει τα ίδια τμήματα με φασματοφωτόμετρο ατομικής εκπομπής και η διαφοροποίησή τους παρατηρείται στην πηγή γραμμικής ακτινοβολίας του στοιχείου που μελετάται καθώς και κάτοπτρο για είσοδο του ειδώλου στον πυρήνα των ατόμων. Η ατομική απορρόφηση του φωτός βασίζεται στην απορρόφηση μιας δέσμης φωτός όταν αυτό διέρχεται από το δείγμα στο οποίο τα άτομα που ερευνώνται απορροφούν το φως σε συγκεκριμένα μήκη κύματος. Το φαινόμενο της απορρόφησης που εμφανίζουν τα άτομα συμβαίνει εξαιτίας της μετάβασης της ηλεκτροστατικής κατάστασης των ηλεκτρονίων από χαμηλότερα επίπεδα ενέργειας σε υψηλότερα. [3]



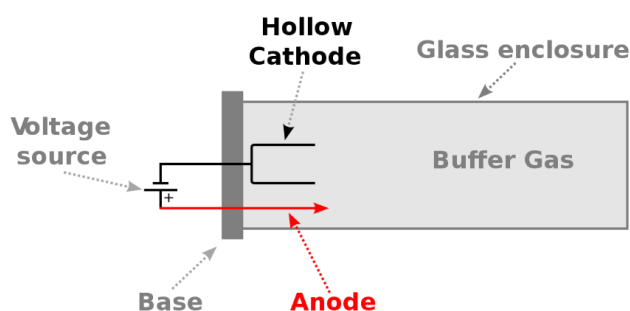
Εικόνα 15. Διαδικασία τεχνικής φασματοσκοπίας ατομικής απορρόφησης. [29]

2.5.2 Όργανα-Εξαρτήματα

2.5.2.1 Λυχνία κοίλης καθόδου (Hollow-Cathode Lamp)

Η λυχνία κοίλης καθόδου (Hollow-Cathode Lamp, HCL) είναι ένα κρίσιμο συστατικό στη φασματοσκοπία ατομικής απορρόφησης (AAS), παρέχοντας την απαραίτητη πηγή φωτός για την ανάλυση των στοιχείων. Η HCL χρησιμοποιεί ένα γυάλινο σωλήνα που περιέχει ένα αέριο φορέα και κοκκίδες του στοιχείου που πρόκειται να ανιχνευθεί. Όταν διέρχεται ηλεκτρικό ρεύμα, τα άτομα του στοιχείου εκπέμπουν φως σε συγκεκριμένες συχνότητες, το οποίο απορροφάτε από το δείγμα και μετράτε για την ποσοτική ανάλυση. Η HCL προσφέρει σημαντικά πλεονεκτήματα στην AAS, όπως

υψηλή ευαισθησία και επαναληψιμότητα, επιτρέποντας την ακριβή ανάλυση μικροσκοπικών ποσοτήτων μετάλλων και άλλων στοιχείων. Έχει εφαρμοστεί ευρέως σε πολλές βιομηχανικές, περιβαλλοντικές και βιολογικές εφαρμογές, όπως η ανάλυση μετάλλων σε τρόφιμα και περιβαλλοντικά δείγματα. Απαραίτητη είναι η εκπομπή σταθερής ακτινοβολίας και οι φασματικές γραμμές τους έχουν διάμετρο 0,001nm με σκοπό την επίτευξη την υψηλή ακρίβεια και την ευαισθησία. Για να εξάγουμε τις χαρακτηριστικές γραμμές απορρόφησης του στοιχείου που μελετάται χρησιμοποιούμε πηγή φωτός κοίλης καθόδου στην οποία περιέχεται το στοιχείο που αναζητούμε. Διακρίνεται για την υψηλή καθαρότητα μετάλλου στην κάθοδο και το παραγόμενο της φάσμα δεν ξεπερνά τα 2-5mm. Στην άνοδο χρησιμοποιείται ηλεκτρόδιο βολφραμίου, νικελίου ή ζirkονίου. [30]



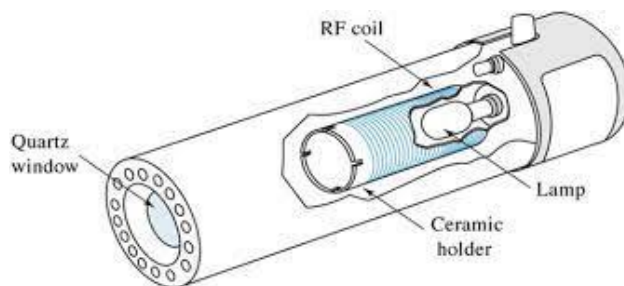
Εικόνα 16. Απεικόνιση λάμπας κοίλης καθόδου. [31]

2.5.2.2 Λυχνίες εκκένωσης Χωρίς Ηλεκτρόδια (Electrodeless discharge Lamp)

Στη φασματοσκοπία ατομικής απορρόφησης, ένα σημαντικό εξάρτημα που χρησιμοποιείται είναι οι λυχνίες εκκένωσης χωρίς ηλεκτρόδια. Αυτές οι λυχνίες, γνωστές και ως λυχνίες ηλεκτρικού πεδίου ή λυχνίες ραδιοσυχνότητας, δημιουργούν φως μέσω της εκκένωσης πλάσματος σε ένα κλειστό δοχείο, χωρίς την ανάγκη φυσικών ηλεκτροδίων που έρχονται σε επαφή με το αέριο ή τον ατμό μέσα στο δοχείο.

Η αρχή λειτουργίας τους βασίζεται στην εφαρμογή ενός εναλλασσόμενου ηλεκτρικού πεδίου στο αέριο ή στον ατμό που περιέχεται μέσα στη λυχνία. Αυτό το ηλεκτρικό πεδίο προκαλεί την εκκένωση του αερίου και τη δημιουργία πλάσματος, το οποίο με τη σειρά του εκπέμπει φως. Το φως αυτό χρησιμοποιείται στη φασματοσκοπία ατομικής απορρόφησης για να διεγείρει τα άτομα του δείγματος, επιτρέποντας έτσι την ανάλυση της σύνθεσής του.

Οι λυχνίες εκκένωσης χωρίς ηλεκτρόδια έχουν κάποια βασικά πλεονεκτήματα σε σχέση με τις παραδοσιακές λυχνίες με ηλεκτρόδια, όπως για παράδειγμα η μεγαλύτερη διάρκεια ζωής, όπως και η υψηλότερη σταθερότητα και ομοιομορφία του φωτός καθώς και η απουσία ηλεκτροδίων που μπορεί να υποστούν φθορά ή να επηρεάσουν τη σύνθεση του αερίου. Είναι πηγές φωτός υψηλής απόδοσης και χρησιμοποιούνται για την ανάλυση στοιχείων που παρουσιάζουν χαμηλή ευαισθησία με τη χρήση συμβατικών λυχνιών κοινής καθόδου. Αυτές οι λυχνίες λειτουργούν με την αρχή της εκκένωσης πλάσματος, παρέχοντας ένα πιο εντατικό και σταθερό φως στο συγκεκριμένο μήκος κύματος του στοιχείου που αναλύεται. Η χρήση τους βελτιώνει την απόδοση της μεθόδου AAS, καθώς αυξάνουν την ευαισθησία και μειώνουν τα όρια ανίχνευσης για στοιχεία που είναι δύσκολο να μετρηθούν με τις παραδοσιακές λυχνίες. [32]



Εικόνα 17. Απεικόνιση λυχνία εκκένωσης χωρίς καλώδια. [33]

2.5.2.3 Μονοχρωμάτορας

Ο μονοχρωματιστής σε ένα φασματοφωτόμετρο ατομικής απορρόφησης (AAS) είναι ένα κρίσιμο στοιχείο που επιτρέπει την επιλογή συγκεκριμένων μηκών κύματος φωτός για την ανάλυση. Η λειτουργία του βασίζεται στην απομόνωση ενός στενού φάσματος φωτός πλάτους 0,2-2nm που αντιστοιχεί στο μήκος κύματος του στοιχείου προς ανάλυση. Αυτό εξασφαλίζει ότι μόνο το συγκεκριμένο φως που απορροφάτε από το στοιχείο θα μετρηθεί, και έτσι αυξάνεται η ακρίβεια και μειώνονται οι παρεμβολές από άλλα στοιχεία. [34]

2.5.2.4 Εισαγόμενο Δείγμα

Διαχωρίζεται σε φούρνο φλόγας ή γραφίτη, στον φούρνο φλόγας το δείγμα ψεκάζεται σε φλόγα ενώ στον γραφίτη εξατμίζεται σε κλίβανο υψηλών θερμοκρασιών. [35]

Σε ένα φασματοφωτόμετρο ατομικής απορρόφησης (AAS), η εισαγωγή και ο χειρισμός του δείγματος είναι πολύ κρίσιμη διαδικασία. Η προετοιμασία του δείγματος πρέπει να γίνεται με μεγάλη προσοχή, καθώς η ακρίβεια των αποτελεσμάτων εξαρτάται από την ορθότητα της διαδικασίας αυτής. Τα δείγματα μπορεί να είναι είτε υγρά ή είτε στερεά και μπορεί να απαιτούν ειδικές μεθόδους προετοιμασίας για να τα καταστήσουν κατάλληλα για ανάλυση. Η σωστή αραίωση, η χώνευση ή άλλες μορφές επεξεργασίας είναι σημαντικές για την εξασφάλιση της ομοιομορφίας και της σταθερότητας των δειγμάτων κατά την ανάλυση. [36]

2.5.2.5 Ανιχνευτής-Ενισχυτής

Ο ανιχνευτής-ενισχυτής σε ένα φασματοφωτόμετρο ατομικής απορρόφησης (AAS) είναι ένα σημαντικό συστατικό που εντοπίζει και ενισχύει το φως που απορροφάτε από τα ατομικά σωματίδια του δείγματος. Αυτή η συσκευή λειτουργεί μετατρέποντας το φως που απορροφάτε από το δείγμα σε ηλεκτρικό σήμα, το οποίο στη συνέχεια ενισχύεται και αναλύεται για την προσδιορισμό της συγκέντρωσης του αντίστοιχου στοιχείου στο δείγμα. Η ακρίβεια του ανιχνευτή-ενισχυτή είναι ζωτικής σημασίας για τον προσδιορισμό των συγκεντρώσεων των στοιχείων στο δείγμα και η ευαισθησία του επηρεάζει την απόδοση της συνολικής μεθόδου ανάλυσης. Η σωστή λειτουργία και συντήρηση του ανιχνευτή-ενισχυτή είναι θεμελιώδης για την αξιοπιστία και την αποδοτικότητα των μετρήσεων AAS. [3]

2.5.3 Διαδικασία ατομικής απορρόφησης

Η διαδικασία ατομικής απορρόφησης σε ένα φασματοφωτόμετρο ατομικής απορρόφησης (AAS) είναι μια πολύτιμη τεχνική για την ανίχνευση και την ποσοτική ανάλυση στοιχείων σε διάφορα δείγματα. Στο AAS, το δείγμα ατομοποιείται, συνήθως μέσω θερμικής διαδικασίας, για να παράγει ατομικό αέριο. Αυτά τα ατομικά σωματίδια στη συνέχεια απορροφούν φως από μια πηγή φωτός σε συγκεκριμένα μήκη κύματος. Η ποσότητα του φωτός που απορροφάτε κατά την ατομική απορρόφηση μετράτε και χρησιμοποιείται για τον καθορισμό της συγκέντρωσης του στοιχείου στο δείγμα. Αυτή η μέθοδος

προσφέρει ακριβείς και επαναλαμβανόμενες μετρήσεις, καθιστώντας το AAS ένα απαραίτητο εργαλείο σε πολλές εφαρμογές επιστημονικής και βιομηχανικής ανάλυσης. [36]

2.5.4 Πλεονεκτήματα και περιορισμοί

Το φασματοφωτόμετρο ατομικής απορρόφησης (AAS) είναι μια προηγμένη αναλυτική μέθοδος με πολλά πλεονεκτήματα, αλλά και κάποιους περιορισμούς. Ανάμεσα στα πλεονεκτήματα του AAS περιλαμβάνονται η υψηλή ευαισθησία, η ακρίβεια και η ειδικότητα στην ποσοτική ανάλυση μετάλλων και μεταλλοειδών. Επίσης, προσφέρει τη δυνατότητα ανάλυσης μιας μεγάλης ποικιλίας δειγμάτων, από περιβαλλοντικά δείγματα έως βιολογικά υγρά. Ωστόσο, υπάρχουν περιορισμοί όπως η ανάγκη για προσεκτική προετοιμασία δείγματος και η δυνατότητα ανάλυσης μόνο ενός στοιχείου τη φορά, που περιορίζει την ταχύτητα της διαδικασίας.

2.6 Τεχνικές προετοιμασίας δειγμάτων

Οι τεχνικές προετοιμασίας δειγμάτων για ανάλυση με ένα φασματοφωτόμετρο ατομικής απορρόφησης (AAS) είναι ουσιώδεις για την ακριβή αποτίμηση των αποτελεσμάτων. Αυτές οι τεχνικές περιλαμβάνουν βήματα όπως η διάλυση, η αραιώση, η χώνευση και η φιλτράρισμα των δειγμάτων. Η διαδικασία προετοιμασίας πρέπει να γίνεται με ακρίβεια για να εξασφαλιστεί ότι το δείγμα είναι ομοιογενές και ελεύθερο από ρύπους που μπορούν να επηρεάσουν τα αποτελέσματα. Επιπλέον, η σωστή επιλογή των αντιδραστηρίων και των διαλυτών είναι κρίσιμη για την αποφυγή χημικών αλληλεπιδράσεων που μπορεί να επηρεάσουν την ακρίβεια της ανάλυσης. Η θερμοκρασία καθώς και άλλοι παράγοντες εργαστηριακών συνθηκών πρέπει επίσης να ελέγχονται προσεκτικά. [37]

2.7 Χειρισμός Παρεμβολών

Ο χειρισμός παρεμβολών σε ένα φασματοφωτόμετρο ατομικής απορρόφησης (AAS) είναι μια κρίσιμη διαδικασία που απαιτεί προσεκτική προσοχή. Οι παρεμβολές στο AAS μπορεί να προκληθούν από διάφορες πηγές, όπως η χημική σύνθεση του δείγματος, η παρουσία άλλων στοιχείων ή ακόμη και από τον εξοπλισμό. Για τον αποτελεσματικό χειρισμό των παρεμβολών, συνήθως εφαρμόζονται τεχνικές όπως η βελτίωση της τεχνικής προετοιμασίας του δείγματος, η χρήση ειδικών αντιδραστηρίων ή η τροποποίηση των παραμέτρων του ίδιου του φασματοφωτόμετρου. Αυτές οι μέθοδοι βοηθούν στην μείωση ή εξάλειψη των παρεμβολών, εξασφαλίζοντας ότι τα αποτελέσματα της ανάλυσης είναι αξιόπιστα και ακριβή.

2.8 Επίλογος

Καθώς κλείνει ο κύκλος αυτής της εκτενούς ανάλυσης στον τομέα της φασματοσκοπίας, τονίζεται η αξία της συνεχούς εξερεύνησης και κατανόησης της αλληλεπίδρασης μεταξύ φωτός και ύλης. Η πορεία μας μέσα από τις πολυπλοκότητες των νόμων Beer-Lambert, Lambert και Bouguer αποκάλυψε πώς η φασματοσκοπία υπερβαίνει τον απλό ποιοτικό και ποσοτικό έλεγχο, αποτελώντας ένα απαραίτητο εργαλείο στην επιστημονική έρευνα και ανάλυση. Η συνεισφορά της στις επιστήμες όπως η χημεία, η φυσική, η βιοχημεία, και πέρα από αυτές, επιβεβαιώνει την ανάγκη για συνεχή εκπαίδευση και ενδυνάμωση των ερευνητών στην εφαρμογή και ερμηνεία της. Αναγνωρίζοντας τις προκλήσεις που ενδέχεται να εμφανιστούν λόγω των οριακών περιπτώσεων και των αποκλίσεων των νόμων αυτών, αναδεικνύεται η αναγκαιότητα για διαρκή ανάπτυξη και βελτίωση των φασματοσκοπικών τεχνικών. Με την προοπτική της εξέλιξης στην τεχνολογία και την επιστημονική μεθοδολογία, η φασματοσκοπία υπόσχεται να συνεχίσει να φωτίζει ανεξερεύνητους δρόμους στην έρευνα και την ανάλυση, οδηγώντας μας πιο κοντά στην αποκάλυψη των μυστικών της ύλης και του φωτός.

Κεφάλαιο 3ο: Φασματοφωτόμετρο

3.1 Εισαγωγή Φασματοφωτόμετρου

Η φασματοσκοπία αποτελεί μια επιστημονική μέθοδο που εστιάζει στη μελέτη της αλληλεπίδρασης μεταξύ ύλης και ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Ο ορισμός της ενσωματώνει την ανάλυση του φάσματος του φωτός ή άλλων μορφών ακτινοβολίας που εκπέμπεται, απορροφάτε ή διαχέεται από υλικά. Ο σκοπός της φασματοσκοπίας είναι πολυδιάστατος: από την αναγνώριση και την ποσοτικοποίηση χημικών στοιχείων και ενώσεων, μέχρι την κατανόηση των δομικών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων της ύλης. Η φασματοσκοπία είναι ένα πολύτιμο εργαλείο στην επιστημονική έρευνα, καθώς επιτρέπει τη λεπτομερή μελέτη των μορίων και των ατόμων, προσφέροντας έτσι βαθύτερη κατανόηση των βασικών φυσικών και χημικών διεργασιών. Από τη βιοχημεία και τη φαρμακολογία, μέχρι την αστροφυσική και την περιβαλλοντική επιστήμη, η φασματοσκοπία παρέχει έναν ακριβή και αναλυτικό τρόπο για την εξερεύνηση και την κατανόηση του φυσικού κόσμου.

3.2 Βασικά όργανα Φασματοφωτόμετρου UV

3.2.1 Εύρος Μήκους Κύματος

Το εύρος μήκους κύματος ενός φασματοφωτόμετρου UV, ζωτικής σημασίας για την εφαρμογή του σε διάφορες επιστημονικές αναλύσεις, εκτείνεται συνήθως από τη βαθιά περιοχή υπεριώδους ακτινοβολίας ξεκινώντας από περίπου 190 nm έως το ορατό φάσμα, περίπου 800 nm. Αυτό το εύρος επιτρέπει τη συνολική διερεύνηση ουσιών με βάση τα χαρακτηριστικά απορρόφησής τους τόσο στο φάσμα UV όσο και στο ορατό φως. Το εύρος υπεριώδους ακτινοβολίας (190-400 nm) είναι ιδιαίτερα πολύτιμο για τη μελέτη οργανικών ενώσεων, πρωτεϊνών και νουκλεϊκών οξέων, τα οποία έχουν διακριτές κορυφές απορρόφησης εντός αυτής της περιοχής λόγω της μοριακής τους δομής. Το ορατό εύρος (400-800 nm) χρησιμοποιείται για την ανάλυση ενώσεων που απορροφούν το ορατό φως, όπως χρωστικές και βαφές. Η ικανότητα σάρωσης σε αυτά τα μήκη κύματος καθιστά τα φασματοφωτόμετρα υπεριώδους ακτινοβολίας ευέλικτα εργαλεία σε τομείς όπως η βιοχημεία, η φαρμακολογία και η περιβαλλοντική επιστήμη, όπου οι λεπτομερείς φασματικές πληροφορίες είναι απαραίτητες για τον προσδιορισμό και τον ποσοτικό προσδιορισμό διαφόρων ουσιών. [38] [39]

3.2.2 Μέτρηση της απορρόφησης

Η μέτρηση της απορρόφησης σε ένα φασματοφωτόμετρο UV είναι μια θεμελιώδης διαδικασία που ποσοτικοποιεί πόσο φως απορροφά ένα δείγμα σε συγκεκριμένα μήκη κύματος. Αυτό επιτυγχάνεται κατευθύνοντας μια δέσμη φωτός, η οποία εκτείνεται σε ένα εύρος υπεριώδους (UV) και ορατού (VIS) μηκών κύματος, μέσω ενός δείγματος. Το φασματοφωτόμετρο μετρά την ένταση του φωτός πριν και μετά τη διέλευση από το δείγμα. Η διαφορά στην ένταση αντανακλά την ποσότητα του φωτός που απορροφάτε από το δείγμα, η οποία ποσοτικοποιείται ως απορρόφηση (A). Σύμφωνα με τον νόμο Beer-Lambert, η απορρόφηση είναι ευθέως ανάλογη με τη συγκέντρωση του απορροφητικού είδους στο δείγμα και το μήκος της διαδρομής μέσω της οποίας ταξιδεύει το φως. Αυτή η αρχή επιτρέπει τον προσδιορισμό της συγκέντρωσης ενός άγνωστου δείγματος μετρώντας την απορρόφησή του σε ένα συγκεκριμένο μήκος κύματος. Η απορρόφηση υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τον τύπο $A = \log(I_0/I)$, όπου I_0 είναι η ένταση του προσπίπτοντος φωτός και I είναι η ένταση του φωτός μετά τη διέλευση από το δείγμα. Αυτή η μέθοδος χρησιμοποιείται ευρέως για την ανάλυση της συγκέντρωσης και της

καθαρότητας ουσιών σε διάφορους τομείς όπως η βιοχημεία, η φαρμακολογία και η περιβαλλοντική επιστήμη. [40] [41]

3.2.3 Οπτικό Σύστημα

Το οπτικό σύστημα ενός φασματοφωτόμετρου UV είναι ένα κρίσιμο σύνολο εξαρτημάτων που διασφαλίζει την ακριβή ανάλυση των δειγμάτων με βάση την απορρόφησή τους από το υπεριώδες (UV) και το ορατό (VIS) φως. Κεντρική θέση σε αυτό το σύστημα είναι ο μονοχρωματιστής, ο οποίος απομονώνει συγκεκριμένα μήκη κύματος φωτός για ανάλυση. Αυτό το εξάρτημα τυπικά ενσωματώνει ένα φράγμα περίθλασης, μια συσκευή που διασκορπίζει το φως στα μήκη κύματος των συστατικών του εκμεταλλευόμενη το φαινόμενο της περίθλασης. Το οπτικό σύστημα περιλαμβάνει επίσης μια σειρά από κάτοπτρα και φακούς που εστιάζουν και κατευθύνουν το φως μέσω του δείγματος στο εσωτερικό των δειγμάτων. Η ένταση του μεταδιδόμενου φωτός στη συνέχεια μετράτε από έναν ανιχνευτή, όπως ένας σωλήνας φωτοπολλαπλασιαστή ή μια συσκευή σύζευξης φορτίου (CCD), η οποία μετατρέπει το φως σε ηλεκτρικό σήμα. Αυτό το σήμα είναι ανάλογο με την ποσότητα φωτός που απορροφάτε από το δείγμα και χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης του δείγματος. Συγκεκριμένα, τα σύγχρονα φασματοφωτόμετρα UV μπορούν να χρησιμοποιούν σχεδιασμό διπλής δέσμης, που μετρά ταυτόχρονα το δείγμα και τις δέσμες αναφοράς για να διορθώσει τυχόν διακυμάνσεις στην πηγή φωτός ή σε άλλα μέρη του οπτικού συστήματος, ενισχύοντας την ακρίβεια και την αξιοπιστία των μετρήσεων. [42] [43]

3.2.4 Πηγή Φωτός

Στη φασματοφωτομετρία UV, η πηγή φωτός είναι αναπόσπαστο μέρος της ικανότητας του οργάνου να διεξάγει ακριβείς και ποικίλες αναλύσεις σε όλο το φάσμα υπεριώδους (UV) έως ορατού (VIS). Συνήθως, τα φασματοφωτόμετρα UV χρησιμοποιούν διπλές πηγές φωτός για να καλύψουν αποτελεσματικά ολόκληρο το φάσμα UV-VIS: μια λάμπα δευτερίου για την περιοχή UV (περίπου 190 έως 400 nm) και μια λάμπα βολφραμίου-αλογόνου για την ορατή περιοχή (400 έως 800 nm). Οι λαμπτήρες δευτερίου επιλέγονται για την ικανότητά τους να παράγουν συνεχή και σταθερή έξοδο υπεριώδους φωτός, ζωτικής σημασίας για ακριβείς μετρήσεις απορρόφησης στην περιοχή UV. Οι λαμπτήρες αλογόνου βολφραμίου, από την άλλη πλευρά, παρέχουν έντονο και ευρέος φάσματος φωτισμό στο ορατό εύρος, απαραίτητο για την ανάλυση ουσιών που απορροφούν σε αυτό το τμήμα του φάσματος. Αυτός ο συνδυασμός επιτρέπει την ολοκληρωμένη φασματική ανάλυση, επιτρέποντας τον ποσοτικό προσδιορισμό και την ταυτοποίηση μιας ευρείας σειράς χημικών ενώσεων. [44] [45]

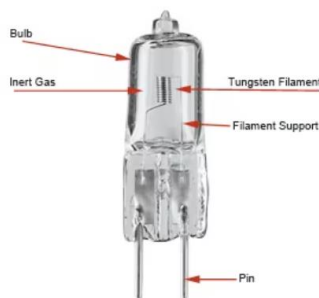
3.2.4.1 Λάμπα Αλογόνου-Βολφραμίου (Tungsten-Halogen Lamp)

Η λάμπα αλογόνου βολφραμίου είναι ένας τύπος λάμπας εκπομπής φωτός, που χρησιμοποιείται ευρέως λόγω της υψηλής απόδοσης και της μακράς διάρκειας ζωής της. Αποτελείται από ένα στενό σωλήνα από ένα σκληρό, κρυσταλλικό ορυκτό (quartz) ή άλλο διαφανές υλικό, μέσα στον οποίο βρίσκεται ένα νήμα βολφραμίου. Το νήμα αυτό θερμαίνεται μέχρι να αρχίσει να εκπέμπει φως, όταν διέρχεται ηλεκτρικό ρεύμα.

Η κύρια διαφορά της λάμπας αλογόνου βολφραμίου από τις συμβατικές λάμπες βολφραμίου είναι η προσθήκη αλογονούχων αερίων (όπως ιωδίου ή βρωμίου) στο εσωτερικό της λάμπας. Αυτά τα αέρια αντιδρούν με το βολφράμιο που εξατμίζεται από το νήμα, επιτρέποντας την επαναθέρμανση και επανακατάθεσή του στο νήμα. Αυτή η διαδικασία, γνωστή ως "αλογονούχος κύκλος", μειώνει την φθορά του νήματος και επεκτείνει σημαντικά την διάρκεια ζωής της λάμπας, ενώ παράλληλα διατηρεί υψηλή τη φωτεινότητα.

Λάμπες αλογόνου βολφραμίου χρησιμοποιούνται σε πληθώρα εφαρμογών λόγω της ευρείας φασματικής κάλυψης που παρέχουν, ιδίως στο ορατό και κοντινό υπέρυθρο φάσμα. Στα φασματοφωτόμετρα VIS, αυτές οι λάμπες είναι ιδιαιτέρως πολύτιμες, καθώς παρέχουν σταθερή και ομοιόμορφη πηγή φωτός που είναι απαραίτητη για την ακριβή μέτρηση της απορρόφησης φωτός από δείγματα.

Tungsten-Halogen Lamp



Εικόνα 18. Απεικόνιση λυχνία Αλογόνου. [46]

3.2.4.2 Λυχνία Δευτερίου (Deuterium Lamp)

Η λυχνία δευτερίου είναι ένας τύπος αέριας εκκένωσης λάμπας που χρησιμοποιείται ως πηγή φωτός σε διάφορες εφαρμογές φασματοσκοπίας, ιδιαίτερα στη φασματοσκοπία υπεριώδους (UV) φάσματος. Το όνομά της προέρχεται από το δευτέριο, ένα σταθερό ισότοπο του υδρογόνου, το οποίο χρησιμοποιείται ως το "καύσιμο" μέσα στη λάμπα.

Η λυχνία δευτερίου παράγει φως όταν ένα ηλεκτρικό ρεύμα περνά μέσα από μια συσκευή που περιέχει ατμούς δευτερίου υπό χαμηλή πίεση, προκαλώντας τον ιονισμό του αερίου και την εκπομπή UV φωτός κατά την διαδικασία της επανασύνδεση των ηλεκτρονίων με τους πυρήνες. Η λάμπα δευτερίου μπορεί να παράγει ένα συνεχές φασματικό εύρος φωτός, κυρίως στο υπεριώδες τμήμα κομμάτι του φάσματος, κάνοντάς την ιδιαίτερα χρήσιμη για φασματοσκοπικές μετρήσεις που απαιτούν υπεριώδη ακτινοβολία.

Οι λυχνίες δευτερίου είναι σημαντικές σε εφαρμογές όπου απαιτείται υψηλή ακρίβεια και ευαισθησία, όπως στη φασματοσκοπία υγρής χρωματογραφίας (HPLC) και σε άλλες φασματοσκοπικές τεχνικές που αναλύουν δείγματα στο UV φάσμα. Η σταθερότητα, η μακροζωία και η ευρεία φασματική κάλυψη των λυχνιών δευτερίου εξασφαλίζουν την παραγωγή αξιόπιστων και επαναλαμβανόμενων μετρήσεων, καθιστώντας τες απαραίτητες σε πολλά επιστημονικά και ερευνητικά περιβάλλοντα.

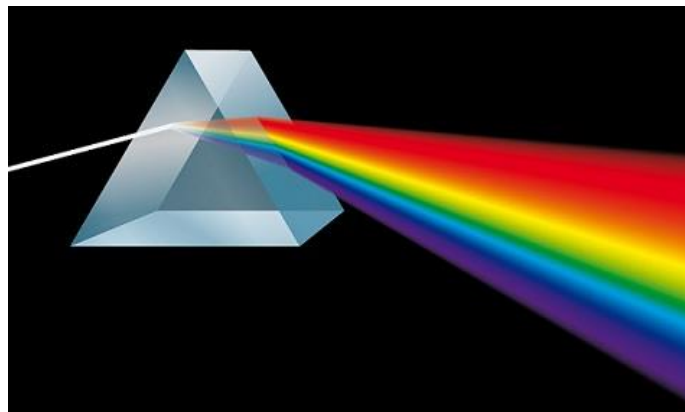
Deuterium Lamp



Εικόνα 19. Απεικόνιση λάμπας Δευτερίου. [46]

3.2.5 Μονοχρωμάτορας (Prism)

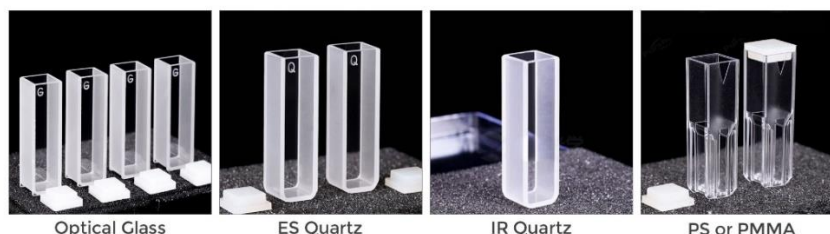
Ο μονοχρωματιστής είναι ένα στοιχείο που διαχωρίζει το φως που εκπέμπεται από την πηγή σε συγκεκριμένα μήκη κύματος. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω ενός διαθλαστικού στοιχείου, όπως ένα πρίσμα ή ένα δίκτυο διάθλασης. Η επιλογή του μήκους κύματος που θα χρησιμοποιηθεί είναι κρίσιμη για την ακρίβεια της μέτρησης.



Εικόνα 20. Μονοχρωματιστής. [47]

3.2.6 Διαμέρισμα Δειγμάτων (Sample Compartment)

Το διαμέρισμα δειγμάτων είναι ο χώρος όπου τοποθετείται το δείγμα για ανάλυση. Συνήθως, τα δείγματα τοποθετούνται σε διαφανή δοχεία, γνωστά ως κυψέλες, που επιτρέπουν στο φως να διέλθει μέσα από το δείγμα. Η ομοιομορφία και η σταθερότητα του διαμερίσματος δειγμάτων είναι σημαντική για την αποφυγή σφαλμάτων στη μέτρηση.



Εικόνα 21. Απεικόνιση κυψελίδων. [48]

Ωστόσο ανάλογα με την μέτρηση που θέλουμε να κάνουμε κρίνεται μεγίστης σημασίας να επιλέξουμε την κατάλληλη κυβέτα-κυψελίδα που χρειαζόμαστε καθώς μπορεί ανάλογα με το υλικό παραγωγής της να έχει διαφοροποιήσεις στο αποτέλεσμα.

Material	Wavelength	Transmission Rate	Usage	Application
Optical Glass	340-2,500nm	82% at 350nm	Reusable	Visible
ES Quartz Glass	190-2,500nm	83% at 220nm	Reusable	UV-visible
IR Quartz Glass	220-3,500nm	88% at 2730nm	Reusable	UV-visible-IR
PS or PMMA	380-780nm	80% at 400nm	Disposable	Visible

Εικόνα 22. Μήκη κύματος και καταλληλότητα της εκάστοτε κυβέτας ανάλογα με το υλικό κατασκευής της. [48]

3.2.6.1 Optical Glass

Η κυβέτα από οπτικό γυαλί είναι ένα θεμελιώδες εξάρτημα στις φασματοσκοπικές μετρήσεις, χρησιμοποιούμενη συχνά σε φασματοφωτόμετρα για τη διεξαγωγή αναλύσεων στο ορατό και προς το κοντινό υπεριώδες τμήμα του φάσματος. Η κυβέτα αυτή αποτελεί το δοχείο μέσα στο οποίο τοποθετείται το δείγμα για ανάλυση και είναι σχεδιασμένη να επιτρέπει τη μέγιστη διέλευση του φωτός μέσα από το δείγμα με ελάχιστη απορρόφηση ή διασπορά από το ίδιο το υλικό της κυβέτας.

Το οπτικό γυαλί, ως υλικό για την κατασκευή της κυβέτας, επιλέγεται λόγω των εξαιρετικών οπτικών του ιδιοτήτων, που περιλαμβάνουν υψηλή διαύγεια και χαμηλή απορρόφηση φωτός στο ορατό φάσμα. Αυτό εξασφαλίζει ότι η παραμόρφωση ή η απώλεια του σήματος φωτός είναι ελάχιστη κατά τη διάρκεια της φασματοσκοπικής μέτρησης, παρέχοντας ακριβείς και αξιόπιστες αναλύσεις.

Οι κυβέτες από οπτικό γυαλί είναι διαθέσιμες σε διάφορα μεγέθη και σχήματα, ανάλογα με την εφαρμογή και τον τύπο του φασματοφωτόμετρου που χρησιμοποιείται. Επιπλέον, πρέπει να χειρίζονται με προσοχή και να καθαρίζονται σωστά μετά από κάθε χρήση για να διατηρούνται οι οπτικές τους ιδιότητες και να αποφεύγεται η διαστρέβλωση των μετρήσεων λόγω υπολειμμάτων ή άλλων ρύπων. [48]

3.2.6.2 ES Quartz

Η κυβέτα ES Quartz αποτελεί μια ειδική κατηγορία κυβετών που χρησιμοποιούνται στη φασματοσκοπία, κυρίως για μετρήσεις στο υπεριώδες (UV) και στο ορατό (VIS) μέρος του φάσματος. Κατασκευασμένες από ποιοτικό κρύσταλλο κουαρτς, αυτές οι κυβέτες προσφέρουν εξαιρετική διαφάνεια και ελάχιστη απορρόφηση φωτός στο ευρύ φασματικό εύρος από το βαθύ UV μέχρι το κοντινό υπέρυθρο (IR), καθιστώντας τες ιδανικές για μια πληθώρα φασματοσκοπικών εφαρμογών.

Το κουαρτς, λόγω της υψηλής καθαρότητάς του και των οπτικών του ιδιοτήτων, επιτρέπει την ακριβή μέτρηση της φωτοαπορρόφησης, της φωτοδιάχυσης ή της φωτοεκπομπής δειγμάτων, χωρίς να προσθέτει σημαντικά σφάλματα λόγω της δικής του απορρόφησης ή διασποράς. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό στις φασματοσκοπικές μεθόδους όπου η ακρίβεια και η επαναληψιμότητα των μετρήσεων είναι κρίσιμες. [48]

3.2.6.3 IR Quartz

Η κυβέτα IR Quartz είναι ένα εξειδικευμένο εξάρτημα που χρησιμοποιείται στη φασματοσκοπία υπέρυθρου (IR), ιδιαίτερα σχεδιασμένο για να επιτρέπει τη διέλευση του υπέρυθρου φωτός μέσα από το δείγμα προς ανάλυση. Η κυβέτα αυτή κατασκευάζεται από κρύσταλλο κουαρτς που είναι διαφανής στο υπέρυθρο φάσμα, προσφέροντας εξαιρετική διαπερατότητα και ελάχιστη απορρόφηση στα μήκη κύματος που ενδιαφέρουν για τις IR φασματοσκοπικές μετρήσεις.

Η χρήση της κυβέτας IR Quartz είναι καθοριστική στην ανάλυση χημικών ενώσεων, βιομορίων και άλλων υλικών, καθώς επιτρέπει την ακριβή μέτρηση της απορρόφησης ή της εκπομπής υπέρυθρου φωτός, η οποία σχετίζεται με τις μοριακές δονήσεις και τις περιστροφές των δειγμάτων. Αυτό παρέχει πληροφορίες για την χημική σύσταση, τη δομή και τις μοριακές αλληλεπιδράσεις των υλικών που μελετώνται.

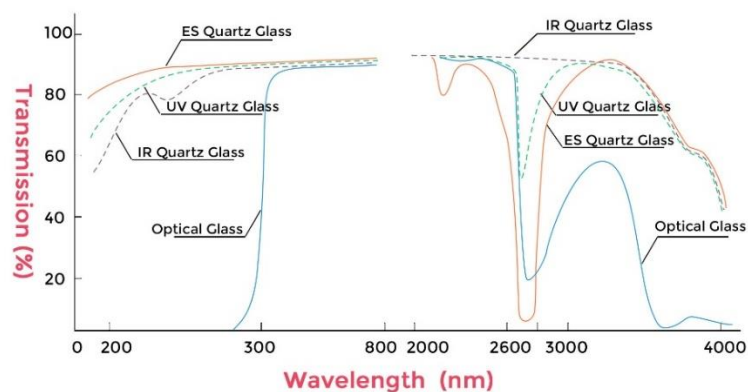
Οι κυβέτες IR Quartz διακρίνονται για την υψηλή τους αντοχή στις χημικές επιδράσεις και στις υψηλές θερμοκρασίες, καθιστώντας τες ιδανικές για εφαρμογές που απαιτούν την ανάλυση δειγμάτων υπό ακραίες συνθήκες. Επιπλέον, η διαφάνειά τους στο υπέρυθρο φάσμα επιτρέπει την εύκολη διεξαγωγή ποικίλων φασματοσκοπικών μετρήσεων χωρίς να επηρεάζεται η ακρίβεια των αποτελεσμάτων λόγω του υλικού της κυβέτας. [48]

3.2.6.4 PS or PMMA

Οι κυβέτες PS (πολυστυρένιο) και PMMA (πολυμεθυλομεθακρυλικό ή ακρυλικό γυαλί) είναι δύο τύποι πλαστικών κυβετών που χρησιμοποιούνται συχνά σε φασματοσκοπικές μετρήσεις, κυρίως στο ορατό φάσμα. Αυτοί οι τύποι κυβετών προσφέρουν έναν οικονομικό εναλλακτικό τρόπο στις πιο ακριβές κυβέτες γυαλιού ή κουαρτς, καθιστώντας τες ιδανικές για μίας χρήσης εφαρμογές ή για περιπτώσεις όπου η κόστος είναι ένας σημαντικός παράγοντας.

Οι κυβέτες PS είναι διαφανείς στο ορατό φάσμα και συνήθως χρησιμοποιούνται για μετρήσεις απορρόφησης φωτός σε φασματοφωτόμετρα VIS. Είναι κατάλληλες για την πλειονότητα των εφαρμογών όπου δεν απαιτείται η διέλευση του υπεριώδους φωτός, καθώς το πολυστυρένιο δεν διαθέτει καλή διαπερατότητα στο UV φάσμα.

Αντίθετα, οι κυβέτες PMMA προσφέρουν καλύτερη διαπερατότητα στο κοντινό υπεριώδες φάσμα σε σύγκριση με το PS, επεκτείνοντας τη χρησιμότητά τους σε εφαρμογές που απαιτούν μετρήσεις σε αυτό το φασματικό εύρος. Το PMMA είναι γνωστό για την καλή του οπτική διαύγεια, την εξαιρετική αντοχή στον κρούση και την ανθεκτικότητα σε πολλούς χημικούς διαλύτες, καθιστώντας το ένα δημοφιλές υλικό για πολλές εφαρμογές. [48]



Εικόνα 23. Συσχέτιση ποσοστού μετάδοσης με μήκος κύματος. [48]

3.2.7 Ανιχνευτής Ακτινοβολίας

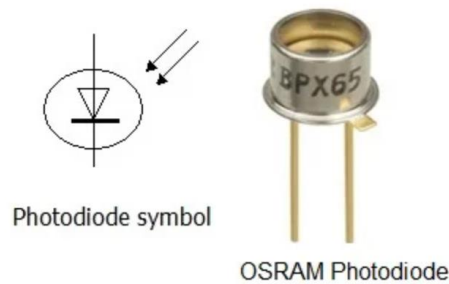
Τέλος, ο ανιχνευτής ακτινοβολίας είναι υπεύθυνος για την ανίχνευση του φωτός που έχει διέλθει από το δείγμα. Οι πιο συνηθισμένοι τύποι ανιχνευτών περιλαμβάνουν φωτοδιόδους και φωτοπολλαπλασιαστές. Αυτοί οι ανιχνευτές μετατρέπουν το φως σε ηλεκτρικό σήμα, το οποίο αναλύεται για να προσδιοριστεί η ποσότητα της απορροφούμενης ή διερχόμενης ακτινοβολίας, παρέχοντας πληροφορίες για τη σύνθεση και τη συγκέντρωση του δείγματος.

3.2.7.1 Φωτοδίοδος

Η φωτοδίοδος είναι ένας ημιαγωγός αισθητήρας που λειτουργεί μετατρέποντας το φως σε ηλεκτρικό σήμα. Αποτελείται από ένα p-n ημιαγωγικό ζεύγος, το οποίο όταν φωτίζεται, επιτρέπει την κίνηση των ηλεκτρονίων και των οπών μέσα στο υλικό, δημιουργώντας ένα ηλεκτρικό ρεύμα. Η ικανότητα της φωτοδίοδου να αντιδρά στο φως καθιστά την ιδανική για εφαρμογές όπως η ανίχνευση και η μέτρηση της έντασης φωτός, η οπτική επικοινωνία, και οι φωτοβολταϊκές συσκευές.

Οι φωτοδιόδοι χαρακτηρίζονται από την υψηλή τους ευαισθησία, την ταχύτητα απόκρισης και την ικανότητά τους να λειτουργούν σε ευρύ φασματικό εύρος, από το υπεριώδες μέχρι το κοντινό υπέρυθρο φάσμα. Μπορούν να κατασκευαστούν ώστε να είναι ευαίσθητες σε συγκεκριμένα μήκη κύματος φωτός, επιτρέποντας την εξειδίκευση για συγκεκριμένες εφαρμογές.

Στα ιατρικά εργαστήρια και στις φασματοσκοπικές μετρήσεις, οι φωτοδιόδοι χρησιμοποιούνται συχνά ως ανιχνευτές για την καταγραφή της έντασης του φωτός που διέρχεται ή ανακλάται από δείγματα, προσφέροντας ακριβείς και γρήγορες μετρήσεις. Η χρήση τους συμβάλλει στην αυτοματοποίηση και την αύξηση της αποδοτικότητας των διαγνωστικών και αναλυτικών διαδικασιών, ενώ η μικρή τους διάσταση και η χαμηλή τους κατανάλωση ενέργειας εξασφαλίζουν την ευκολία ενσωμάτωσής τους σε φορητές και συμπαγείς συσκευές.



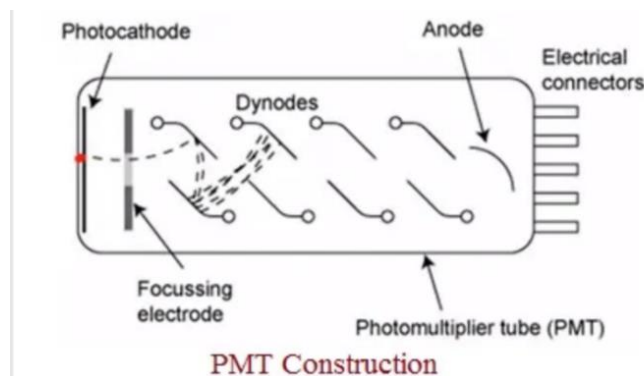
Εικόνα 24. Φωτοδιόδος. [49]

3.2.7.2 Φωτοπολλαπλασιαστής

Ο φωτοπολλαπλασιαστής αποτελεί μια προηγμένη ηλεκτρονική συσκευή που χρησιμοποιείται για την ανίχνευση και ενίσχυση ακόμα και πολύ χαμηλών επιπέδων φωτός, μετατρέποντας τα φωτόνια σε ηλεκτρονικό σήμα. Η λειτουργία του βασίζεται στη φωτοηλεκτρική εκπομπή και στην διαδικασία που ακολουθεί για την ενίσχυση του ηλεκτρικού σήματος που παράγεται όταν το φως πέσει στην ευαίσθητη στο φως επιφάνεια του, γνωστή ως φωτοκαθόδος.

Ο φωτοπολλαπλασιαστής αποτελείται από μια σειρά από δυναμοδιόδους (δίνες), τοποθετημένες σε σειρά εντός ενός κενού σωλήνα. Όταν τα φωτόνια που εκπέμπονται από ένα δείγμα χτυπήσουν τη φωτοκαθόδο, εκείνη εκπέμπει ηλεκτρόνια λόγω του φωτοηλεκτρικού φαινομένου. Τα ηλεκτρόνια αυτά επιταχύνονται και πολλαπλασιάζονται μέσω των διαδοχικών δυναμοδίοδων, κάθε μία από τις οποίες λειτουργεί σε υψηλότερη ηλεκτρική τάση από την προηγούμενη, οδηγώντας σε μια αυξανόμενη ροή ηλεκτρονίων και καταλήγοντας σε ένα ενισχυμένο ηλεκτρικό σήμα στην έξοδο.

Οι φωτοπολλαπλασιαστές χρησιμοποιούνται ευρέως σε επιστημονικές και τεχνικές εφαρμογές, όπου απαιτείται η ανίχνευση πολύ χαμηλών επιπέδων φωτός, όπως στη φασματοσκοπία, την αστρονομία, την πυρηνική φυσική και την ιατρική απεικόνιση. Η υψηλή ευαισθησία τους, η ταχύτητα απόκρισης και η ικανότητα ενίσχυσης καθιστούν τους φωτοπολλαπλασιαστές ιδανικούς για την ακριβή και αξιόπιστη ανίχνευση φωτεινών σημάτων.



Εικόνα 25. Φωτοπολλαπλασιαστής. [49]

3.3 Βασικά όργανα Φασματοφωτόμετρου Vis

3.3.1 Αρχή Λειτουργίας

Σε ένα φασματοφωτόμετρο VIS, το εύρος μήκους κύματος στοχεύει συγκεκριμένα το ορατό φάσμα φωτός, καλύπτοντας τυπικά μήκη κύματος από περίπου 400 nm έως 700 nm. Αυτή η σειρά περιλαμβάνει όλα τα χρώματα που είναι ορατά στο ανθρώπινο μάτι, από το ιώδες (κοντά στα 400 nm) έως το κόκκινο (περίπου 700 nm). Η ικανότητα ανάλυσης δειγμάτων εντός αυτού του εύρους επιτρέπει τον ποσοτικό προσδιορισμό και τον προσδιορισμό των ουσιών με βάση τα χρωματικά χαρακτηριστικά τους, κάτι που είναι θεμελιώδες σε διάφορες εφαρμογές, όπως η χρωματομετρία, ο ποιοτικός έλεγχος στην κατασκευή και η ανάλυση συγκέντρωσης των έγχρωμων ενώσεων σε διαλύματα. Το ορατό φάσμα είναι απαραίτητο για τη μελέτη ενώσεων που απορροφούν, μεταδίδουν ή αντανακλούν το ορατό φως, επιτρέποντας τον προσδιορισμό της συγκέντρωσής τους μέσω του νόμου Beer-Lambert. Αυτή η αρχή υποστηρίζει ότι η απορρόφηση του φωτός από ένα διάλυμα είναι ευθέως ανάλογη με τη συγκέντρωση του απορροφητικού είδους και το μήκος της διαδρομής του φωτός μέσω του δείγματος. Τα φασματοφωτόμετρα VIS είναι επομένως ανεκτίμητα εργαλεία σε βιομηχανίες όπως τα τρόφιμα και τα ποτά, τα φαρμακευτικά προϊόντα και η περιβαλλοντική παρακολούθηση, όπου χρησιμοποιούνται για την αξιολόγηση του χρώματος και της καθαρότητας προϊόντων και λύσεων. [50] [51]

3.3.2 Πηγή Φωτός

Στη φασματοφωτομετρία UV, η πηγή φωτός είναι αναπόσπαστο μέρος της ικανότητας του οργάνου να διεξάγει ακριβείς και ποικίλες αναλύσεις σε όλο το φάσμα υπεριώδους (UV) έως ορατού (VIS). Συνήθως, τα φασματοφωτόμετρα UV χρησιμοποιούν διπλές πηγές φωτός για να καλύψουν αποτελεσματικά ολόκληρο το φάσμα UV-VIS: μια λάμπα δευτερίου για την περιοχή UV (περίπου 190 έως 400 nm) και μια λάμπα βολφραμίου-αλογόνου για την ορατή περιοχή (400 έως 800 nm). Οι λαμπτήρες δευτερίου επιλέγονται για την ικανότητά τους να παράγουν συνεχή και σταθερή έξοδο υπεριώδους φωτός, ζωτικής σημασίας για ακριβείς μετρήσεις απορρόφησης στην περιοχή UV. Οι λαμπτήρες αλογόνου βολφραμίου, από την άλλη πλευρά, παρέχουν έντονο και ευρέος φάσματος φωτισμό στο ορατό εύρος, απαραίτητο για την ανάλυση ουσιών που απορροφούν σε αυτό το τμήμα του φάσματος. Αυτός ο συνδυασμός επιτρέπει την ολοκληρωμένη φασματική ανάλυση, επιτρέποντας τον ποσοτικό προσδιορισμό και την ταυτοποίηση μιας ευρείας σειράς χημικών ενώσεων. [44] [45]

3.3.3 Οπτικό Σύστημα

Το οπτικό σύστημα σε ένα ορατό φασματοφωτόμετρο (VIS) έχει σχεδιαστεί για να κατευθύνει, να διασκορπίζει και να μετράει με ακρίβεια το φως εντός του ορατού φάσματος, που τυπικά κυμαίνεται από 400 έως 800 nm. Αυτό το σύστημα αποτελείται από πολλά βασικά στοιχεία: μια πηγή φωτός, συνήθως μια λάμπα αλογόνου βολφραμίου λόγω του αποτελεσματικού και σταθερού φωτισμού της σε όλη την ορατή περιοχή, ένα πλέγμα μονοχρωμάτορα ή περίθλασης για την επιλογή συγκεκριμένων μηκών κύματος φωτός που πρόκειται να αναλυθούν, και ένα διαμέρισμα δείγματος όπου το φως αλληλοεπιδρά με το δείγμα. Αφού περάσει μέσα από το δείγμα, το φως φτάνει σε έναν ανιχνευτή, όπως μια φωτοδίοδο ή μια συσκευή συζευγμένη με φορτίο (a charge-coupled device -CCD), η οποία μετατρέπει το φως σε ηλεκτρικό σήμα ανάλογο με την ένταση του εκπεμπόμενου φωτός. Οι καθρέφτες και οι φακοί μέσα στο σύστημα διασφαλίζουν ότι η φωτεινή διαδρομή είναι βέλτιστη ευθυγράμμιση και εστίαση, διευκολύνοντας την ακριβή μέτρηση της απορρόφησης ή της διαπερατότητας του δείγματος στα επιλεγμένα μήκη κύματος. Η ακρίβεια του οπτικού συστήματος είναι ζωτικής σημασίας για την αξιοπιστία και την ακρίβεια της φασματοφωτομετρικής ανάλυσης, επιτρέποντας τον ποσοτικό προσδιορισμό και την ταυτοποίηση ουσιών με βάση τα χαρακτηριστικά απορρόφησής τους στο εύρος του ορατού φωτός. [52] [53]

3.3.4 Χρωματομετρική Ανάλυση

Η χρωματομετρική ανάλυση με χρήση ορατού φασματοφωτόμετρου (VIS) είναι μια τεχνική που ποσοτικοποιεί τη συγκέντρωση έγχρωμων ενώσεων σε ένα διάλυμα μετρώντας την απορρόφηση του ορατού φωτός σε συγκεκριμένα μήκη κύματος. Αυτή η μέθοδος εκμεταλλεύεται το γεγονός ότι το χρώμα ενός διαλύματος σχετίζεται άμεσα με τη συγκέντρωση των απορροφητικών ειδών που περιέχει, σύμφωνα με το νόμο Beer-Lambert. Σε χρωματομετρικούς προσδιορισμούς, συχνά προστίθεται ένα αντιδραστήριο στο δείγμα που αντιδρά με την ένωση που μας ενδιαφέρει για να παραχθεί ένα έγχρωμο προϊόν. Στη συνέχεια, το φασματοφωτόμετρο VIS μετρά την ένταση του παραγόμενου χρώματος, η οποία είναι ανάλογη με τη συγκέντρωση της αναλύμενης ουσίας στόχου. Αυτή η τεχνική είναι ευρέως χρησιμοποιούμενη στη βιοχημεία για δοκιμές ενζύμων, σε περιβαλλοντικές αναλύσεις για δοκιμές ποιότητας νερού καθώς και στην κλινική διάγνωση για την ανάλυση αίματος και ούρων. Η ισχύς της χρωματομετρικής ανάλυσης έγκειται στην απλότητα, την ευαισθησία και την ικανότητά της να προσδιορίζει γρήγορα τις συγκεντρώσεις συγκεκριμένων ουσιών σε πολύπλοκα μείγματα. [54] [55]

3.3.5 Ποσοτική Ανάλυση

Η ποσοτική ανάλυση χρησιμοποιώντας ένα ορατό φασματοφωτόμετρο (VIS) είναι μια βασική τεχνική στην αναλυτική χημεία, που επιτρέπει τον ακριβή προσδιορισμό της συγκέντρωσης μιας ουσίας σε ένα δείγμα με βάση τις ιδιότητες απορρόφησης φωτός. Η βάση αυτής της μεθόδου βρίσκεται στον νόμο Beer-Lambert, ο οποίος συσχετίζει την απορρόφηση του φωτός από ένα διάλυμα με τη συγκέντρωση του απορροφητικού είδους και το μήκος διαδρομής μέσω του οποίου το φως ταξιδεύει στο διάλυμα. Μετρώντας την απορρόφηση σε ένα συγκεκριμένο μήκος κύματος που η ουσία απορροφά μοναδικά, μπορεί να υπολογιστεί η συγκέντρωση της ουσίας. Αυτή η προσέγγιση απαιτεί τη δημιουργία μιας καμπύλης βαθμονόμησης, που απεικονίζει γνωστές συγκεντρώσεις της ουσίας σε σχέση με τις μετρούμενες τιμές απορρόφησής τους. Μόλις καθοριστεί η καμπύλη, η συγκέντρωση ενός άγνωστου δείγματος μπορεί να προσδιοριστεί μετρώντας την απορρόφησή του και αναφερόμενοι στην καμπύλη βαθμονόμησης. Αυτή η μέθοδος εκτιμάται ευρέως για την ευαισθησία, την ακρίβεια και την ειδικότητά της στον ποσοτικό προσδιορισμό των επιπέδων των ενώσεων σε διάφορους τομείς όπως τα φαρμακευτικά προϊόντα, η περιβαλλοντική παρακολούθηση και η κλινική διάγνωση. [56] [40]

3.4 Φασματοφωτόμετρο Ατομικής απορρόφησης(AAS)

Το φασματοφωτόμετρο ατομικής απορρόφησης (Atomic Absorption Spectrophotometer - AAS) είναι μια τεχνική που χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της ποσότητας ενός συγκεκριμένου στοιχείου μέσα σε ένα δείγμα. Βασίζεται στην αρχή ότι τα ατομικά σωματίδια ενός στοιχείου μπορούν να απορροφήσουν φως σε συγκεκριμένα μήκη κύματος, ανάλογα με την ενεργειακή τους κατάσταση. Αυτή η μέθοδος είναι ιδιαίτερα ακριβής και ευαίσθητη, κάνοντας την ιδανική για την ανάλυση μετάλλων και άλλων στοιχείων σε περιβαλλοντικά δείγματα, τρόφιμα, βιολογικά υγρά και πολλά άλλα.

3.4.1 Λάμπα κοίλης καθόδου

Στη Φασματοσκοπία Ατομικής Απορρόφησης (AAS), η λυχνία κοίλης καθόδου (HCL) χρησιμεύει ως κρίσιμη πηγή φωτός, σχεδιασμένη ειδικά για να εκπέμπει τα ακριβή μήκη κύματος που απορροφώνται από την αναλυόμενη ουσία που μας ενδιαφέρει. Κάθε HCL περιέχει μια κάθοδο κατασκευασμένη από το μέταλλο του προς ανάλυση στοιχείου, η οποία, όταν ενεργοποιείται, εκπέμπει φως σε μήκη κύματος χαρακτηριστικά αυτού του στοιχείου. Αυτή η ιδιαιτερότητα διασφαλίζει ότι το φως που εκπέμπεται από τη λάμπα ταιριάζει με τις γραμμές απορρόφησης της αναλυόμενης ουσίας, επιτρέποντας την εξαιρετικά επιλεκτική και ευαίσθητη ανίχνευση. Η λειτουργία του HCL περιλαμβάνει την εφαρμογή τάσης που προκαλεί την εκπομπή ηλεκτρονίων από την κάθοδο. Αυτά τα ηλεκτρόνια συγκρούονται με τα άτομα αερίου που υπάρχουν στη λάμπα, διεγείροντας τα μεταλλικά άτομα της καθόδου. Καθώς αυτά τα διεγερμένα άτομα επιστρέφουν στη βασική τους κατάσταση, εκπέμπουν φως σε χαρακτηριστικά μήκη κύματος. Το μονοχρωματικό φως που παράγεται στη συνέχεια κατευθύνεται μέσω του δείγματος, επιτρέποντας τον ποσοτικό προσδιορισμό της αναλυόμενης ουσίας με βάση την απορρόφησή της. Αυτός ο μηχανισμός είναι θεμελιώδης για το AAS, παρέχοντας τη βάση για την εξαιρετική επιλεκτικότητα και ευαισθησία της μεθόδου στον προσδιορισμό των συγκεντρώσεων μετάλλων στα δείγματα. [57] [58]

3.4.2 Ατομοποίησης

Στη Φασματοφωτομετρία Ατομικής Απορρόφησης (AAS), ο ψεκαστήρας είναι ένα κρίσιμο συστατικό που είναι υπεύθυνο για τη μετατροπή του δείγματος σε κατάσταση κατάλληλη για ανάλυση—συγκεκριμένα, η ψεκασμός του δείγματος σε ελεύθερα άτομα στην αέρια φάση. Ο πιο κοινός τύπος ατομοποιητή στο AAS είναι ο ψεκαστήρας φλόγας, ο οποίος χρησιμοποιεί μια φλόγα για την αποδιάλυση, την εξάτμιση, τον ψεκασμό και τη διέγερση των ατόμων του δείγματος. Ένας εναλλακτικός τύπος είναι ο ηλεκτροθερμικός ψεκαστήρας (φούρνος γραφίτη), ο οποίος προσφέρει υψηλότερη ευαισθησία συγκεντρώνοντας την αναλυόμενη ουσία σε μικρό όγκο μέσα σε ένα σωλήνα γραφίτη, ο οποίος στη συνέχεια θερμαίνεται γρήγορα για να ψεκάσει το δείγμα. Η επιλογή μεταξύ φλόγας και ηλεκτροθερμικού ψεκασμού εξαρτάται από την απαιτούμενη ευαισθησία, ταχύτητα και συμβατότητα της μήτρας του δείγματος. Οι ψεκαστήρες φλόγας προτιμώνται για την ταχύτητα και την ευκολία χρήσης τους, είναι κατάλληλοι για ανάλυση υψηλής απόδοσης με μέτριες ανάγκες ευαισθησίας. Αντίθετα, οι ψεκαστήρες κλιβάνων γραφίτη επιλέγονται για ανάλυση ιχνοστάθμης λόγω της υψηλότερης ευαισθησίας και των χαμηλότερων ορίων ανίχνευσης, αν και με πιο αργούς χρόνους ανάλυσης και πιο περίπλοκη λειτουργία. [59] [60]

3.4.3 Μονοχρωμάτορας

Στη Φασματοφωτομετρία Ατομικής Απορρόφησης (AAS), ο μονοχρωμάτης παίζει καθοριστικό ρόλο στην απομόνωση του συγκεκριμένου μήκους κύματος φωτός που αντιστοιχεί στη γραμμή απορρόφησης

του στοιχείου που αναλύεται. Αυτό το συστατικό είναι απαραίτητο για την επίτευξη υψηλής εξειδίκευσης στις μετρήσεις, καθώς διασφαλίζει ότι μόνο το φως που απορροφάται από τα άτομα με στόχο να συμβάλλει στο σήμα που ανιχνεύεται από το όργανο. Ο μονοχρωμάτης τυπικά χρησιμοποιεί ένα πλέγμα περίθλασης για να διασκορπίσει το φως που εκπέμπεται από την πηγή, επιτρέποντας την επιλογή ενός στενού εύρους ζώνης μηκών κύματος. Αυτή η επιλεκτική διαδικασία είναι ζωτικής σημασίας για την εξάλειψη των παρεμβολών από άλλα μήκη κύματος που θα μπορούσαν να οδηγήσουν σε ανακρίβειες στην ανάλυση. Με τον ακριβή έλεγχο του μήκους κύματος του φωτός που φθάνει στον ανιχνευτή, ο μονοχρωμάτης ενισχύει την ευαισθησία και την επιλεκτικότητα του AAS, καθιστώντας δυνατό τον ακριβή ποσοτικό προσδιορισμό της συγκέντρωσης συγκεκριμένων στοιχείων σε σύνθετα δείγματα. [61] [62]

3.4.4 Κύρια λειτουργία

Η κύρια λειτουργία ενός Φασματοφωτόμετρου Ατομικής Απορρόφησης (AAS) είναι να μετρήσει τη συγκέντρωση συγκεκριμένων μεταλλικών στοιχείων μέσα σε ένα δείγμα ανιχνεύοντας την ποσότητα φωτός που απορροφάται από τα άτομα του στοιχείου που αναλύεται. Αυτή η τεχνική βασίζεται στην αρχή ότι τα ελεύθερα άτομα στη θεμελιώδη κατάσταση μπορούν να απορροφήσουν φως σε συγκεκριμένα μήκη κύματος μοναδικά για κάθε στοιχείο. Στο AAS, ένα δείγμα ψεκάζεται πρώτα για να μετατραπούν τα στοιχεία σε ελεύθερα άτομα. Στη συνέχεια, φως συγκεκριμένου μήκους κύματος, που αντιστοιχεί στη γραμμή απορρόφησης του στοιχείου που μας ενδιαφέρει, περνά μέσα από το ψεκασμένο δείγμα. Η ποσότητα του φωτός που απορροφάται μετριέται και, με βάση τον νόμο Beer-Lambert, είναι ευθέως ανάλογη με τη συγκέντρωση του στοιχείου μέσα στο δείγμα. Το AAS είναι γνωστό για την εξαιρετική του ειδικότητα, την ευαισθησία και τα σχετικά χαμηλά όρια ανίχνευσης, καθιστώντας το ιδανικό για την ανάλυση ιχνών ποσοτήτων μετάλλων σε μια ποικιλία μητρών, από περιβαλλοντικά δείγματα έως βιολογικά υγρά. [63] [64]

3.4.5 Ατομοποίηση Δείγματος

Η εξατομίκευση δείγματος στη Φασματοφωτομετρία Ατομικής Απορρόφησης (AAS) αναφέρεται στη διαδικασία προετοιμασίας και παρουσίασης του δείγματος με τρόπο που επιτρέπει την εξατομίκευση και την ανάλυσή του μεμονωμένα. Αυτό το κρίσιμο βήμα περιλαμβάνει τη μετατροπή του δείγματος από την αρχική του μορφή σε μια ομοιογενή, ελεύθερη ατομική κατάσταση, όπου τα στοιχεία ενδιαφέροντος μπορούν να απορροφήσουν το υπεριώδες ή ορατό φως σε συγκεκριμένα μήκη κύματος. Οι πιο συνηθισμένες μέθοδοι εξατομίκευσης του δείγματος περιλαμβάνουν την ψεκασμό με φλόγα, όπου το δείγμα νεφελοποιείται σε φλόγα που διαχωρίζει αποτελεσματικά το δείγμα στα συστατικά του άτομα και η ψεκασμός σε φούρνο γραφίτη, ο οποίος χρησιμοποιεί έναν κλίβανο υψηλής θερμοκρασίας για να ψεκάσει το δείγμα σε πιο ελεγχόμενο και συγκεντρωμένο τρόπο, επιτρέποντας την ανάλυση ιχνοστοιχείων με υψηλότερη ευαισθησία. Αυτή η διαδικασία είναι απαραίτητη για την επίτευξη ακριβών και αναπαραγωγίμων αποτελεσμάτων στο AAS, καθώς επηρεάζει άμεσα την αποτελεσματικότητα της ψεκασμού και την ανίχνευση των στοιχείων που αναλύονται. [60] [59]

3.4.6 Απορρόφηση ατομικών γραμμών

Η απορρόφηση ατομικών γραμμών στη Φασματοφωτομετρία Ατομικής Απορρόφησης (AAS) είναι μια θεμελιώδης πτυχή του τρόπου με τον οποίο αυτή η αναλυτική τεχνική ποσοτικοποιεί τη συγκέντρωση συγκεκριμένων μεταλλικών στοιχείων μέσα σε ένα δείγμα. Κάθε στοιχείο έχει ένα μοναδικό σύνολο ενεργειακών επιπέδων και όταν τα ελεύθερα άτομα στη θεμελιώδη κατάσταση εκτίθενται σε φως συγκεκριμένου μήκους κύματος που αντιστοιχεί σε αυτά τα ενεργειακά επίπεδα, μπορούν να

απορροφήσουν το φως και να μεταβούν σε μια διεγερμένη κατάσταση. Αυτή η απορρόφηση συμβαίνει σε πολύ συγκεκριμένα μήκη κύματος γνωστά ως γραμμές ατομικής απορρόφησης, τα οποία είναι χαρακτηριστικά κάθε στοιχείου. Μετρώντας την ένταση της απορρόφησης φωτός σε αυτά τα μήκη κύματος, το AAS μπορεί να προσδιορίσει τη συγκέντρωση του στοιχείου στο δείγμα με υψηλή ειδικότητα και ευαισθησία. Αυτή η αρχή στηρίζει την ικανότητα της μεθόδου να πραγματοποιεί ανάλυση ιχνοστοιχείων σε διάφορες μήτρες, από περιβαλλοντικά δείγματα έως βιολογικά υγρά, αξιοποιώντας τις μοναδικές γραμμές απορρόφησης κάθε στοιχείου. [65] [61]

3.4.7 Ανίχνευση και ποσοτικοποίηση σήματος

Η ανίχνευση και η ποσοτικοποίηση σήματος στη Φασματοφωτομετρία Ατομικής Απορρόφησης (AAS) περιλαμβάνει τη μέτρηση της ποσότητας φωτός που απορροφάται από το εξατομικευμένο δείγμα και τη μετάφραση αυτής της μέτρησης σε συγκέντρωση του στοιχείου που αναλύεται. Αφού εξατμιστεί το δείγμα και απομονωθούν οι συγκεκριμένες γραμμές ατομικής απορρόφησης από το μονοχρωμάτορα, η ένταση του φωτός που διέρχεται από το δείγμα μετράται από έναν ανιχνευτή, συνήθως έναν φωτοπολλαπλασιαστικό σωλήνα, ο οποίος είναι εξαιρετικά ευαίσθητος στις ελαφρές αλλαγές στην ένταση φωτός που χαρακτηρίζουν ατομική απορρόφηση. Η μείωση της έντασης φωτός, λόγω της απορρόφησης από τα ελεύθερα άτομα του στοιχείου στη φλόγα ή τον κλίβανο, συγκρίνεται με την ένταση του φωτός που δεν έχει περάσει από το δείγμα (ένταση γραμμής βάσης). Αυτή η διαφορά στην ένταση είναι ευθέως ανάλογη με τη συγκέντρωση του στοιχείου, σύμφωνα με τον νόμο Beer-Lambert. Το λογισμικό AAS χρησιμοποιεί αυτές τις πληροφορίες για να υπολογίσει τη συγκέντρωση του στοιχείου στο δείγμα με βάση προκαθορισμένες καμπύλες βαθμονόμησης, οι οποίες συσχετίζουν την απορρόφηση με τη συγκέντρωση για γνωστά πρότυπα. Αυτή η διαδικασία επιτρέπει τον ακριβή και ακριβή ποσοτικό προσδιορισμό των μεταλλικών στοιχείων ακόμη και σε πολύ χαμηλές συγκεντρώσεις. [66] [67]

3.4.8 Χειρισμός δειγμάτων

Ο χειρισμός του δείγματος στη Φασματοφωτομετρία Ατομικής Απορρόφησης (AAS) είναι ένα κρίσιμο βήμα που περιλαμβάνει την προετοιμασία, την αποθήκευση και την εισαγωγή του δείγματος στο όργανο για ανάλυση. Ο σωστός χειρισμός του δείγματος είναι απαραίτητος για τη διασφάλιση της ακρίβειας, της αναπαραγωγιμότητας και της αξιοπιστίας των αποτελεσμάτων. Αρχικά, τα δείγματα, τα οποία μπορεί να είναι σε διάφορες μορφές όπως υγρά, στερεά ή σκόνες, πρέπει συχνά να υποβάλλονται σε πέψη ή να διαλύονται σε κατάλληλο διαλύτη για να διασφαλιστεί η ομοιογένεια και η συμβατότητα με την πηγή ψεκασμού. Αυτή η διαδικασία μπορεί να περιλαμβάνει βήματα όπως πέψη με οξύ, αραίωση ή ξηρή τέφρα για τη μετατροπή του δείγματος σε μορφή διαλύματος που μπορεί εύκολα να ψεκαστεί. Μόλις προετοιμαστούν, τα δείγματα πρέπει να φυλάσσονται υπό συνθήκες που αποτρέπουν τη μόλυνση ή την αποικοδόμηση πριν από την ανάλυση. Η εισαγωγή του δείγματος στο AAS γίνεται συνήθως μέσω ενός αυτόματου δειγματολήπτη ή χειροκίνητα με μια πιπέτα για ψεκασμό με φλόγα ή μέσω άμεσης εισαγωγής για ψεκασμό σε φούρνο γραφίτη. Η προσεκτική προσοχή στον όγκο του δείγματος, τη συγκέντρωση και τα αποτελέσματα της μήτρας είναι ζωτικής σημασίας για τη διατήρηση της ακεραιότητας της αναλυτικής διαδικασίας και την επίτευξη ακριβούς στοιχειακού ποσοτικού προσδιορισμού. [68] [62]

Τμήμα δείγματος:

3.4.8.1 Κυβέτες- Κυψελίδες

Στη Φασματοφωτομετρία Ατομικής Απορρόφησης (AAS), οι κυψελίδες, που συνήθως αναφέρονται σε άλλες φασματοσκοπικές μεθόδους, δεν χρησιμοποιούνται συνήθως λόγω της φύσης της διαδικασίας ψεκασμού που απαιτείται για την ανάλυση AAS. Αντίθετα, το AAS χρησιμοποιεί ατμοποιητές, όπως ψεκαστήρες φλόγας ή κλίβανους γραφίτη, για να μετατρέψει το δείγμα σε ελεύθερα άτομα στην αέρια φάση. Αυτοί οι ψεκαστήρες εξυπηρετούν τον κρίσιμο ρόλο της προετοιμασίας του δείγματος για τη μέτρηση της απορρόφησης, λειτουργώντας αποτελεσματικά ως «κυψελίδα» κρατώντας το ψεκασμένο δείγμα στη διαδρομή της δέσμης φωτός. Αυτή η διάκριση είναι σημαντική επειδή, σε αντίθεση με τις παραδοσιακές κυψελίδες που περιέχουν υγρά δείγματα για μετρήσεις μετάδοσης στη φασματοσκοπία UV-Vis, το AAS απαιτεί το δείγμα να βρίσκεται σε ατομική κατάσταση για τη μέτρηση της απορρόφησης συγκεκριμένων μηκών κύματος φωτός που αντιστοιχούν στον αναλύτη ενδιαφέροντος. Επομένως, ενώ ο όρος "κυβέτες" μπορεί να είναι εσφαλμένη ονομασία στο πλαίσιο του AAS, η κατανόηση της λειτουργίας των ψεκαστών είναι απαραίτητη για την κατανόηση της διαδικασίας εισαγωγής και ανάλυσης του δείγματος σε αυτήν την τεχνική Αυτόματη δειγματοληψία. Η αυτόματη δειγματοληψία σε ένα φασματοφωτόμετρο ατομικής απορρόφησης (AAS) αναφέρεται στη χρήση αυτοματοποιημένων συστημάτων για την εισαγωγή και επεξεργασία δειγμάτων. Αυτό εξαλείφει την ανάγκη για χειροκίνητη διαχείριση των δειγμάτων και αυξάνει την ακρίβεια, την επαναληψιμότητα και την απόδοση των αναλύσεων. Η αυτοματοποιημένη δειγματοληψία βελτιώνει την αποδοτικότητα, καθώς μειώνει τον απαιτούμενο χρόνο για την προετοιμασία και την ανάλυση των δειγμάτων. [60] [68]

3.4.8.2 Τεχνικές προετοιμασίας δείγματος

Οι τεχνικές προετοιμασίας δειγμάτων στη Φασματοφωτομετρία Ατομικής Απορρόφησης (AAS) είναι ζωτικής σημασίας για τη διασφάλιση ακριβούς, αξιόπιστης ανάλυσης ιχνοστοιχείων σε διάφορες μήτρες. Αυτές οι τεχνικές έχουν σχεδιαστεί για να μετατρέπουν το δείγμα σε μια μορφή που μπορεί να εξατμιστεί αποτελεσματικά και να αναλυθεί από το φασματόμετρο. Οι κοινές μέθοδοι περιλαμβάνουν πέψη με οξύ, όπου τα δείγματα υποβάλλονται σε επεξεργασία με οξέα για να διαλυθούν τα μέταλλα. Η ξηρή τέφρα, η οποία περιλαμβάνει θέρμανση του δείγματος για την απομάκρυνση της οργανικής ύλης και τη συμπύκνωση των μετάλλων και μικροκυματική πέψη, μια γρήγορη μέθοδος κλειστού συστήματος που χρησιμοποιεί ενέργεια μικροκυμάτων για τη θέρμανση του δείγματος και των οξέων μαζί. Επιπλέον, τα δείγματα μπορούν να παρασκευαστούν μέσω άμεσης ανάλυσης ή μετά από στάδια προ-συγκέντρωσης όπως η εκχύλιση με διαλύτη ή η συγκαταβύθιση για να αυξηθεί η ανιχνευσιμότητα των ιχνοστοιχείων. Η σωστή προετοιμασία του δείγματος αφαιρεί τις παρεμβολές στη μήτρα, ενισχύει την αποτελεσματικότητα της ψεκασμού και διασφαλίζει ότι οι αναλύόμενες ουσίες βρίσκονται σε κατάλληλη μορφή για ακριβή ποσοτικό προσδιορισμό. Η επιλογή της μεθόδου προετοιμασίας εξαρτάται από τη μήτρα του δείγματος, το στοιχείο που μας ενδιαφέρει και την απαιτούμενη ευαισθησία της ανάλυσης. [69] [70]

3.4.8.3 Έλεγχος θερμοκρασίας

Ο έλεγχος θερμοκρασίας σε ένα φασματοφωτόμετρο ατομικής απορρόφησης (AAS) είναι μια κρίσιμη πτυχή, ειδικά όταν χρησιμοποιείται η ψεκασμός σε φούρνο γραφίτη για ανάλυση δείγματος. Ο ψεκαστήρας κλίβανου γραφίτη απαιτεί ακριβή έλεγχο θερμοκρασίας μέσω διαφόρων σταδίων της διαδικασίας ψεκασμού: στέγνωμα, τέφρα, ψεκασμός και καθαρισμός. Κάθε στάδιο προγραμματίζεται σε μια συγκεκριμένη θερμοκρασία για να διασφαλιστεί ότι το δείγμα είναι κατάλληλα προετοιμασμένο για ανάλυση χωρίς αποσύνθεση ή απώλεια αναλυόμενης ουσίας. Το στάδιο ξήρανσης εξατμίζει τον διαλύτη σε χαμηλή θερμοκρασία, το στάδιο της τέφρας αποσυνθέτει την οργανική μήτρα σε υψηλότερη θερμοκρασία και το στάδιο της ψεκασμού εξατμίζει τις αναλυόμενες ουσίες σε ακόμη υψηλότερη

θερμοκρασία, που κυμαίνεται συνήθως από 2000°C έως 3000°C, δημιουργώντας ένα νέφος ελεύθερων ατόμων στην πορεία της δέσμης φωτός. Ο ακριβής έλεγχος θερμοκρασίας είναι απαραίτητος για την επίτευξη υψηλής ευαισθησίας, επαναληψιμότητας και ακρίβειας στις μετρήσεις. Τα σύγχρονα όργανα AAS χρησιμοποιούν εξελιγμένα ηλεκτρονικά χειριστήρια για τη ρύθμιση της θερμοκρασίας του κλιβάνου με ακρίβεια, διασφαλίζοντας ότι κάθε δείγμα υφίσταται την ίδια επεξεργασία για αξιόπιστη ανάλυση. [66] [71]

3.4.8.4 Χειρισμός υγρών δειγμάτων και στερεών

Ο χειρισμός υγρών και στερεών δειγμάτων στη Φασματοφωτομετρία Ατομικής Απορρόφησης (AAS) απαιτεί διακριτές τεχνικές προετοιμασίας για να διασφαλιστεί η ακριβής ανάλυση. Τα υγρά δείγματα συχνά υποβάλλονται σε μια απλή διαδικασία προετοιμασίας, η οποία μπορεί να περιλαμβάνει αραιώση με κατάλληλους διαλύτες για να ταιριάζει στο εύρος συγκέντρωσης του AAS και προσθήκη τροποποιητών μήτρας για μείωση των παρεμβολών. Αυτό το παρασκεύασμα διασφαλίζει ότι η σύνθεση του δείγματος είναι συμβατή με τη διαδικασία ψεκασμού, είτε χρησιμοποιείται ψεκαστήρας φλόγας είτε φούρνου γραφίτη. Τα στερεά δείγματα, από την άλλη πλευρά, απαιτούν πιο σύνθετα βήματα προετοιμασίας για τη μετατροπή τους σε μορφή διαλύματος επιδεκτική ανάλυσης AAS. Τεχνικές όπως η πέψη με οξύ, όπου το στερεό διαλύεται σε ισχυρό οξύ, ή η ξηρή τέφρα, όπου το δείγμα αποτεφρώνεται για την απομάκρυνση της οργανικής ύλης, χρησιμοποιούνται συνήθως. Η πέψη με μικροκύματα είναι επίσης μια δημοφιλής μέθοδος για την παρασκευή στερεών δειγμάτων λόγω της ταχύτητας και της αποτελεσματικότητάς της στη διάσπαση των μητρών δειγμάτων. Αυτά τα βήματα προετοιμασίας είναι ζωτικής σημασίας για την απομάκρυνση πιθανών ρύπων και την επίτευξη ενός ομοιογενούς διαλύματος δείγματος που μπορεί να εξαμιστεί με ακρίβεια για στοιχειακή ανάλυση. [72] [73]

3.4.8.5 Διαδικασίες αραιώσης και βαθμονόμησης

Οι διαδικασίες αραιώσης και βαθμονόμησης είναι βασικά βήματα στη Φασματοφωτομετρία Ατομικής Απορρόφησης (AAS) για τη διασφάλιση της ακριβούς ποσοτικοποίησης των στοιχείων στα δείγματα. Η αραιώση περιλαμβάνει τη ρύθμιση της συγκέντρωσης του δείγματος ώστε να εμπίπτει στο βέλτιστο εύρος του οργάνου AAS, βελτιώνοντας την ακρίβεια και την ακρίβεια των μετρήσεων. Αυτό το βήμα είναι κρίσιμο τόσο για υγρά όσο και για στερεά δείγματα, ειδικά όταν η αρχική συγκέντρωση του αναλύτη στόχου είναι πολύ υψηλή ή πολύ χαμηλή για άμεση ανάλυση. Η βαθμονόμηση, από την άλλη πλευρά, δημιουργεί μια σχέση μεταξύ της συγκέντρωσης της αναλυόμενης ουσίας και της έντασης απορρόφησης. Αυτό επιτυγχάνεται τυπικά με την παρασκευή και ανάλυση μιας σειράς τυπικών διαλυμάτων με γνωστές συγκεντρώσεις της αναλυόμενης ουσίας. Οι τιμές απορρόφησης που μετρήθηκαν για αυτά τα πρότυπα χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία μιας καμπύλης βαθμονόμησης, η οποία στη συνέχεια χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της συγκέντρωσης της αναλυόμενης ουσίας σε άγνωστα δείγματα. Η καμπύλη βαθμονόμησης πρέπει να είναι γραμμική εντός του εύρους εργασίας του οργάνου για να διασφαλίζεται αξιόπιστη ποσοτικοποίηση. Τόσο η αραιώση όσο και η βαθμονόμηση είναι ζωτικής σημασίας για την αντιστάθμιση των επιδράσεων της μήτρας, των διακυμάνσεων των οργάνων και άλλων παραγόντων που ενδέχεται να επηρεάσουν το σήμα απορρόφησης, διασφαλίζοντας έτσι την εγκυρότητα των αναλυτικών αποτελεσμάτων. [74] [75]

3.5 Επίλογος

Συνοψίζοντας το περιεχόμενο του εγγράφου, η έρευνα και η παρουσίαση της φασματοσκοπίας αποκαλύπτουν την απίστευτη δυνατότητα αυτής της τεχνολογίας να μετρά και να αναλύει την αλληλεπίδραση μεταξύ φωτός και ύλης. Από την εκπεφρασμένη βαθιά κατανόηση των βασικών στοιχείων, όπως η πηγή φωτός, οι λάμπες δευτερίου και αλογόνου, μέχρι τις λεπτομέρειες των

μετρήσεων απορρόφησης και διαπερατότητας, το κείμενο αποτυπώνει την εξέλιξη της φασματοσκοπικής μεθόδου. Η συμβολή της σε διάφορους επιστημονικούς τομείς είναι αδιαμφισβήτητη, αποτελώντας ένα απαραίτητο εργαλείο για την επιστημονική έρευνα και ανάλυση. Η ακρίβεια, η αποδοτικότητα και η δυνατότητα εφαρμογής σε μια πληθώρα διαφορετικών δειγμάτων και συνθηκών καθιστούν τη φασματοσκοπία έναν πολύτιμο σύμμαχο στην επιστημονική κοινότητα. Η συνεχής ανάπτυξη και βελτίωση των φασματοφωτομέτρων υπόσχεται να αποκαλύψει ακόμα περισσότερες δυνατότητες στο μέλλον, προσφέροντας πιο λεπτομερείς και ακριβείς αναλύσεις που θα συμβάλουν στην πρόοδο της επιστήμης και της τεχνολογίας.

Κεφάλαιο 4ο: Ειδικές Εφαρμογές της Φασματοφωτομετρίας στα Ιατρικά Εργαστήρια.

4.1 Εισαγωγή στις Ιατρικές Εφαρμογές

Η φασματομετρία αποτελεί μία από τις πλέον κρίσιμες και διαδεδομένες τεχνικές ανάλυσης στα σύγχρονα ιατρικά εργαστήρια, καθώς προσφέρει τη δυνατότητα ακριβούς και αξιόπιστης μέτρησης ποικίλων βιοχημικών παραμέτρων. Εκμεταλλευόμενη την αλληλεπίδραση μεταξύ του φωτός και της ύλης, η φασματομετρία μας επιτρέπει την αναγνώριση και ποσοτικοποίηση διαφόρων μοριακών ειδών μέσα από τη μέτρηση της απορρόφησης, εκπομπής ή διάχυσης του φωτός σε συγκεκριμένα μήκη κύματος.

Στον τομέα της ιατρικής, η φασματομετρία έχει ενσωματωθεί ευρέως στην κλινική διαγνωστική, τη μοριακή βιολογία, την παθολογία και την βιοχημική έρευνα, καθώς παρέχει έναν αποτελεσματικό τρόπο για την ανίχνευση και μελέτη μιας ευρείας γκάμας βιολογικών δεικτών και παθολογικών καταστάσεων. Η ακρίβεια, η ευελιξία και η ταχύτητα της φασματομετρικής ανάλυσης την καθιστούν αναντικατάστατη για την εκτέλεση ευρέως φάσματος δοκιμασιών, από την απλή μέτρηση γλυκόζης και χοληστερόλης στο αίμα, μέχρι πιο σύνθετες αναλύσεις όπως η ενζυμική δραστηριότητα, ορμονικά επίπεδα και γενετικοί δείκτες.

Η εφαρμογή της φασματομετρίας στα ιατρικά εργαστήρια συνεχίζει να εξελίσσεται, με την ανάπτυξη των νέων τεχνικών και τη βελτίωση των υπαρχουσών, βοηθώντας στην ακόμα πιο λεπτομερή μελέτη βιολογικών δειγμάτων. Με την συνεχή τεχνολογική πρόοδο και την ενσωμάτωση της φασματομετρίας με άλλες βιοαναλυτικές μεθόδους ανοίγονται νέοι δρόμοι για την ανίχνευση, τη διάγνωση και τη θεραπεία πολλαπλών ασθενειών, συμβάλλοντας στην περαιτέρω πρόοδο της ιατρικής επιστήμης και της παροχής υγειονομικής φροντίδας.

4.2 Ανίχνευση και Ποσοτικοποίηση Βιοδεικτών (Biomarkers)

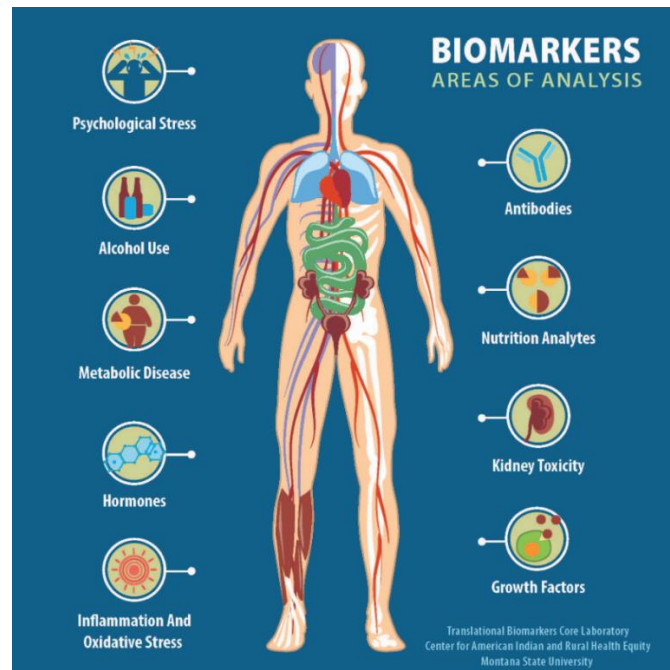
Η φασματομετρία στα ιατρικά εργαστήρια αναδεικνύεται ως μία από τις πλέον ισχυρές μεθόδους για την ανίχνευση και ποσοτικοποίηση βιοδεικτών (biomarkers), οι οποίοι είναι κρίσιμοι για τη διάγνωση, παρακολούθηση και θεραπεία πολλών παθήσεων. Οι βιοδείκτες περιλαμβάνουν μια σύνολο βιολογικών μορίων, όπως το DNA, RNA, οι πρωτεΐνες, τα μικρομόρια και οι μεταβολίτες, των οποίων η παρουσία,

η απουσία ή η συγκέντρωση στο ανθρώπινο σώμα μπορεί να παρέχει σημαντικές πληροφορίες για την υγεία ή την εξέλιξη μιας ασθένειας.

Η φασματομετρία επιτρέπει την ακριβή μέτρηση των βιοδεικτών μέσω της ανάλυσης των φασματικών χαρακτηριστικών των δειγμάτων, εκμεταλλευόμενη τις μοναδικές αλληλεπιδράσεις τους με το φως. Για παράδειγμα, η φασματομετρία μαζών μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον εντοπισμό και την ποσοτικοποίηση πεπτιδίων και πρωτεϊνών σε δείγματα αίματος, ούρων ή άλλων βιολογικών υγρών, παρέχοντας σημαντικές πληροφορίες για διάφορες καταστάσεις όπως ο καρκίνος, οι καρδιακές παθήσεις και οι νευρολογικές διαταραχές.

Επιπλέον, η φασματομετρία υπεριώδους και ορατού φωτός (UV-Vis) χρησιμοποιείται ευρέως για την ποσοτικοποίηση μικρομορίων όπως η γλυκόζη, η χοληστερόλη και διάφορες ορμόνες, καθιστώντας την αναγκαία για τη διαχείριση μεταβολικών διαταραχών και ενδοκρινικών παθήσεων.

Η ανάπτυξη της φασματομετρίας στα ιατρικά εργαστήρια έχει προωθήσει σημαντικά την προσωποποιημένη ιατρική, καθώς επιτρέπει τη λεπτομερή ανάλυση του βιολογικού προφίλ του κάθε ασθενούς, παρέχοντας τη δυνατότητα για πιο στοχευμένες και αποτελεσματικές θεραπευτικές προσεγγίσεις. Η συνεχής τεχνολογική πρόοδος της φασματομετρίας και η ενσωμάτωση της με άλλες αναλυτικές μεθόδους προβλέπεται να ενισχύσουν περαιτέρω την ικανότητα των ιατρικών εργαστηρίων ώστε να αναγνωρίζουν και να αντιμετωπίζουν πολύπλοκες ασθένειες με μεγαλύτερη ακρίβεια και αποτελεσματικότητα. [76] [77] [78]



Εικόνα 26. Biomarkers. [79]

4.3 Μέτρηση Ενζυμικής Δραστηριότητας

Η μέτρηση της ενζυμικής δραστηριότητας μέσω της φασματοφωτομετρίας αποτελεί μια θεμελιώδη εφαρμογή στον τομέα των ιατρικών εργαστηριακών εξετάσεων, προσφέροντας πολύτιμη βοήθεια στη διαγνωστική αξιολόγηση και τη θεραπευτική παρακολούθηση ποικίλων παθήσεων. Η φασματοφωτομετρική ανάλυση ενζυμικής δραστηριότητας επικεντρώνεται στην ποσοτική μέτρηση της μεταβολής συγκεκριμένων υποστρωμάτων ή προϊόντων εντός μιας ενζυμικής αντίδρασης, προσδιορίζοντας έτσι την ενζυμική δράση με ακρίβεια και αξιοπιστία.

Η διαδικασία αυτή απαιτεί την προσθήκη ειδικών χρωμογόνων υποστρωμάτων, τα οποία υπόκεινται σε μετατροπή μέσω της ενζυμικής αντίδρασης σε χρωματιζόμενα προϊόντα, επιτρέποντας την φασματοφωτομετρική ανάγνωση της αλλαγής της απορρόφησης σε συγκεκριμένα μήκη κύματος. Αυτή η μεθοδολογία είναι ιδιαίτερα χρήσιμη για την αξιολόγηση της δραστηριότητας κρίσιμων ενζύμων, όπως η λακτάτη δεϋδρογονάση (LDH-Lactate dehydrogenase), η ασπαρτάτη αμινοτρανσφεράση (AST-Aspartate transferase) και η αλανίνη αμινοτρανσφεράση (ALT-Alanine transaminase), που συχνά χρησιμοποιούνται ως βιοδείκτες για την αξιολόγηση καρδιακών παθήσεων και ηπατικής λειτουργίας αντίστοιχα.

Η ευαισθησία της φασματοφωτομετρίας επιτρέπει την ανίχνευση μικροσκοπικών αλλαγών στην ενζυμική δραστηριότητα, κάτι που καθιστά τη μέθοδο ιδανική για την πρόωρη διάγνωση πολλών παθήσεων. Επιπλέον, η αυτοματοποίηση των φασματοφωτομετρικών τεχνικών έχει βελτιώσει σημαντικά την αποδοτικότητα και την ακρίβεια των εργαστηριακών αναλύσεων, μειώνοντας τον χρόνο ανάλυσης και το περιθώριο ανθρώπινου λάθους. Με την δυνατότητα ταυτόχρονης ανάλυσης πολλαπλών δειγμάτων και πληθώρα στην επιλογή των ενζυμικών δοκιμών ενισχύεται περαιτέρω τη σημασία της φασματοφωτομετρίας στην ιατρική διαγνωστική. [80] [81] [82]

4.4 Ανάλυση Ορμονών και Βιταμινών

Η φασματομετρία στα ιατρικά εργαστήρια αποτελεί μια κομβική τεχνική για την ανάλυση ορμονών και βιταμινών, παρέχοντας πολύτιμες πληροφορίες για τη διάγνωση, την παρακολούθηση και τη θεραπεία διαφόρων καταστάσεων και ασθενειών. Οι ορμόνες διαδραματίζουν κρίσιμους ρόλους στη ρύθμιση των φυσιολογικών λειτουργιών του οργανισμού, ενώ οι βιταμίνες είναι απαραίτητες για τη διατήρηση και βελτίωση της υγείας όπως και την ανάπτυξη και την καλή λειτουργία των κυττάρων.

Η φασματομετρική ανάλυση ορμονών, όπως οι θυροειδικές ορμόνες, η ινσουλίνη, οι στεροειδείς ορμόνες (π.χ. κορτιζόλη, εστρογόνα, τεστοστερόνη) και οι πεπτιδικές ορμόνες, επιτρέπει την ακριβή ποσοτικοποίηση και αξιολόγηση της ορμονικής ισορροπίας του ασθενούς. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό στην ενδοκρινολογία, όπου η ορμονική δυσλειτουργία μπορεί να οδηγήσει σε ποικίλες καταστάσεις όπως ο διαβήτης, οι θυροειδικές παθήσεις, οι διαταραχές της ανάπτυξης και η υπογονιμότητα.

Αντίστοιχα, η φασματομετρική ανάλυση βιταμινών, όπως η βιταμίνη D, οι βιταμίνες της ομάδας B και η βιταμίνη A, παρέχει σημαντικές πληροφορίες για την κατανόηση της διατροφικής κατάστασης και την πιθανή ανάγκη για συμπληρωματική θεραπεία. Ωστόσο με την έλλειψη ή ακόμη και με την υπερβολική πρόσληψη βιταμινών μπορεί να υπάρξουν σε σοβαρές υγειονομικές επιπτώσεις, καθιστώντας την ακριβή ανάλυση ζωτικής σημασίας για την πρόληψη και τη διαχείριση των σχετικών καταστάσεων.

Με την φασματομετρία μας δίνεται η δυνατότητα για ακριβή, ευαίσθητη και γρήγορη ανάλυση ορμονών και βιταμινών, ακόμη και με μικρές ποσότητες δειγμάτων κάνοντας την κατάλληλη για εξετάσεις ρουτίνας στα ιατρικά εργαστήρια

4.5 Φαρμακοκινητική και Φαρμακοδυναμική

Η ανάλυση ορμονών και βιταμινών μέσω της φασματοφωτομετρίας στα ιατρικά εργαστήρια αποτελεί μία από τις ειδικές εφαρμογές που έχουν σημαντικό αντίκτυπο στην κλινική διάγνωση και την παρακολούθηση της κατάστασης υγείας των ασθενών. Οι ορμόνες και οι βιταμίνες είναι κρίσιμοι

βιολογικοί διαμεσολαβητές και συντελεστές αντίστοιχα, που επηρεάζουν πληθώρα μεταβολικών διαδικασιών και φυσιολογικών λειτουργιών στον οργανισμό.

Η ανάλυση ορμονών χρησιμοποιεί συχνά την ανοσοφασματοφωτομετρία, μία τεχνική που συνδυάζει την ανοσολογική ανίχνευση με τη φασματοφωτομετρική ανάλυση, επιτρέποντας την ακριβή ποσοτικοποίηση ορμονών όπως η θυροξίνη, η ινσουλίνη και οι κορτικοστεροειδείς. Από την άλλη πλευρά, η ανάλυση βιταμινών αντιμετωπίζει προκλήσεις λόγω της χαμηλής συγκέντρωσης και της ευαισθησίας τους σε περιβαλλοντικούς παράγοντες. Ωστόσο, η φασματοφωτομετρία παρέχει τη δυνατότητα αξιόπιστης μέτρησης βιταμινών όπως η βιταμίνη D, B12 και φολικό οξύ, που είναι ζωτικής σημασίας για την αξιολόγηση της διατροφικής κατάστασης και της συνολικής υγείας των ασθενών.

Η εξέλιξη των φασματοφωτομετρικών τεχνολογιών και η ενσωμάτωση της αυτοματοποίησης έχουν βελτιώσει σημαντικά την ταχύτητα, την ακρίβεια και την αποδοτικότητα των αναλύσεων ορμονών και βιταμινών. Με την χρήση της παράλληλης διεξαγωγής πολλαπλών δοκιμών μειώνεται ο χρόνος αναμονής των αποτελεσμάτων και παρέχει στους γιατρούς την δυνατότητα για διάγνωση και να παρακολουθήσει πολύπλοκων καταστάσεων υγείας με μεγαλύτερη ακρίβεια.

Η εφαρμογή της φασματομετρίας στην έρευνα φαρμακοκινητικής και φαρμακοδυναμικής συμβάλλει στην ανάπτυξη πιο αποτελεσματικών και ασφαλέστερων φαρμακευτικών προτύπων, βελτιώνοντας την ποιότητα και την αποτελεσματικότητα της των ιατρών ώστε να παρέχουν μια πιο προσωποποιημένη φροντίδα. [83] [84] [85]

4.6 Εξέταση Αιμογλοβίνης και Αιματοκρίτη

Η εξέταση της αιμογλοβίνης και του αιματοκρίτη μέσω της φασματοφωτομετρίας αποτελεί μια θεμελιώδη διαδικασία στα ιατρικά εργαστήρια, καθώς προσφέρει σημαντικές πληροφορίες για την αξιολόγηση της κατάστασης του αιματικού συστήματος ενός ασθενούς. Η αιμογλοβίνη, είναι ένα πρωτεϊνικό συστατικό των ερυθρών αιμοσφαιρίων, διαδραματίζει κεντρικό ρόλο στη μεταφορά οξυγόνου από τους πνεύμονες προς τα διάφορα μέρη του σώματος και την επιστροφή διοξειδίου του άνθρακα για αποβολή. Ο αιματοκρίτης, από την άλλη πλευρά, αντιπροσωπεύει το ποσοστό του όγκου των ερυθρών αιμοσφαιρίων σε σχέση με τον συνολικό όγκο του αίματος και είναι ένδειξη της πυκνότητας του αίματος.

Η φασματοφωτομετρική ανάλυση για την εξέταση της αιμογλοβίνης και του αιματοκρίτη είναι μια τεχνική που χαρακτηρίζεται από την ακρίβεια, την ταχύτητα και την ευκολία εφαρμογής της. Η μέθοδος βασίζεται στην μέτρηση της απορρόφησης φωτός από την αιμογλοβίνη σε συγκεκριμένα μήκη κύματος, προσδιορίζοντας έτσι τη συγκέντρωσή της στο δείγμα αίματος. Για τον υπολογισμό του αιματοκρίτη, η φασματοφωτομετρία μπορεί να χρησιμοποιηθεί έμμεσα, μετρώντας την αλλαγή στην απορρόφηση που προκαλείται από την αύξηση ή μείωση των ερυθρών αιμοσφαιρίων.

Η σημασία της φασματοφωτομετρικής ανάλυσης στην εξέταση αιμογλοβίνης και του αιματοκρίτη δεν περιορίζεται μόνο στην ακρίβεια και την αποδοτικότητα, αλλά επεκτείνεται και στην δυνατότητα μαζικών εξετάσεων και στην άμεση αξιολόγηση της ανάγκης για περαιτέρω διαγνωστικές διερευνήσεις ή θεραπευτικές παρεμβάσεις. Αυτό το γεγονός καθιστά την τεχνική αυτή ιδιαίτερα χρήσιμη σε περιπτώσεις όπου απαιτείται άμεση διαγνωστική απόκριση, όπως σε καταστάσεις έκτακτης ανάγκης ή σε περιπτώσεις χρόνιων παθήσεων που απαιτούν συχνή παρακολούθηση. [86] [87]

4.7 Ανάλυση Νεφρικής Λειτουργίας

Η ανάλυση της νεφρικής λειτουργίας μέσω της φασματοφωτομετρίας αποτελεί μία από τις πιο κρίσιμες εφαρμογές στα ιατρικά εργαστήρια, καθώς η κατάσταση των νεφρών είναι ζωτικής σημασίας για την υγεία κάθε ασθενή. Οι νεφροί είναι υπεύθυνοι για το φιλτράρισμα των αποβλήτων από το αίμα, τη ρύθμιση της αρτηριακής πίεσης, την ισορροπία των ηλεκτρολυτών και την παραγωγή ορισμένων ορμονών. Η φασματοφωτομετρία επιτρέπει την ακριβή και γρήγορη ανάλυση δεικτών που αντικατοπτρίζουν τη νεφρική λειτουργία, όπως τα επίπεδα κρεατινίνης, ουρίας και ουρικού οξέος στο αίμα, καθώς και άλλες ουσίες στα ούρα που μπορεί να υποδηλώνουν νεφρική δυσλειτουργία.

Η κρεατινίνη είναι ένα προϊόν απόβλητο που παράγεται από τον κανονικό μεταβολισμό των μυϊκών ινών και φιλτράρεται αποκλειστικά από τους νεφρούς. Επομένως, η συγκέντρωση κρεατινίνης στο αίμα αποτελεί ένδειξη της γενικής νεφρικής λειτουργίας. Η φασματοφωτομετρική ανάλυση της κρεατινίνης βασίζεται στην αντίδραση Jaffe, κατά την οποία η κρεατινίνη αντιδρά με έναν χημικό αντιδραστήριο δημιουργώντας ένα χρωματιζόμενο σύμπλεγμα το οποίο μετράτε φασματοφωτομετρικά. Αντίστοιχα, η συγκέντρωση της ουρίας, ένα άλλο σημαντικό προϊόν απόβλητο του μεταβολισμού που εκκρίνεται από τους νεφρούς, μπορεί να μετρηθεί φασματοφωτομετρικά για την αξιολόγηση της νεφρικής λειτουργίας.

Η φασματοφωτομετρία προσφέρει τη δυνατότητα για ανάλυση άλλων δεικτών νεφρικής λειτουργίας, όπως η β-2-μικροσφαιρίνη, η οποία μπορεί να υποδηλώσει νεφρική βλάβη σε πρώιμο στάδιο. Η ακριβής και έγκαιρη ανάλυση των δεικτών αυτών είναι κρίσιμη για τη διαγνωστική αξιολόγηση, την παρακολούθηση της εξέλιξης νεφρικών παθήσεων και την αξιολόγηση της αποτελεσματικότητας της θεραπείας.

Επιπρόσθετα, η φασματομετρία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την ανίχνευση και ποσοτικοποίηση άλλων μεταβολιτών και ηλεκτρολυτών που επηρεάζονται από την νεφρική λειτουργία, όπως το κάλιο, το νάτριο, το φωσφόρο και το ασβέστιο, παρέχοντας μια ολοκληρωμένη εικόνα της νεφρικής υγείας. [88] [89]

4.8 Ανίχνευση Παθογόνων στο Αίμα

Η ανίχνευση παθογόνων στο αίμα μέσω της φασματοφωτομετρίας αποτελεί μία από τις ειδικές και καινοτόμες εφαρμογές στα ιατρικά εργαστήρια, η οποία έχει σημαντική επίδραση στην πρόωπη διάγνωση και την αποτελεσματική θεραπεία λοιμώξεων. Τα παθογόνα, όπως βακτήρια, ιοί, μύκητες και παράσιτα, μπορούν να προκαλέσουν σοβαρές λοιμώξεις και ασθένειες στον άνθρωπο. Η έγκαιρη και ακριβής ανίχνευσή τους είναι κρίσιμη για την εφαρμογή της κατάλληλης θεραπευτικής προσέγγισης.

Η φασματοφωτομετρία επιτρέπει την ανίχνευση και ποσοτικοποίηση συγκεκριμένων μεταβολιτών ή στοιχείων που σχετίζονται με την παρουσία και τη δραστηριότητα των παθογόνων. Για παράδειγμα, στην περίπτωση βακτηριακών λοιμώξεων, η ανίχνευση της αυξημένης παραγωγής συγκεκριμένων ενζύμων ή τοξινών μπορεί να υποδηλώσει την παρουσία ενός συγκεκριμένου βακτηριακού στελέχους. Αντίστοιχα, στην περίπτωση ιογενών λοιμώξεων, μπορεί να ανιχνευθεί η παρουσία ικών νουκλεϊκών οξέων ή συγκεκριμένων πρωτεϊνών που σχετίζονται με τον ιό.

Επιπρόσθετα, η φασματοφωτομετρία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την αξιολόγηση της απόκρισης του οργανισμού σε μια λοίμωξη, μελετώντας την παραγωγή αντισωμάτων ή άλλων μορίων της ανοσοαπόκρισης. Αυτό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο για την παρακολούθηση της πορείας της νόσου και την αξιολόγηση της αποτελεσματικότητας της θεραπείας. [90] [91] [92]

4.9 Ποιοτικός Έλεγχος και Πρότυπα Ασφαλείας

Ο ποιοτικός έλεγχος και οι πρότυποι ασφαλείας στην εφαρμογή της φασματοφωτομετρίας στα ιατρικά εργαστήρια αποτελούν δύο από τους πιο σημαντικούς πυλώνες για τη διασφάλιση της ακρίβειας, της αξιοπιστίας και της ασφάλειας των αναλύσεων.

Για τον λόγο αυτό, η εφαρμογή αυστηρών προτύπων ποιοτικού ελέγχου είναι απαραίτητη για τη διασφάλιση της ακριβούς και επαναληπτικής μέτρησης των δειγμάτων. Αυτό περιλαμβάνει την τακτική βαθμονόμησης των φασματοφωτομέτρων, τη χρήση ελεγχόμενων δειγμάτων για την επαλήθευση της ακρίβειας των μετρήσεων και την ακολουθία ελέγχων για την αποφυγή σφαλμάτων.

Επιπρόσθετα, τα πρότυπα ασφαλείας στα εργαστήρια αποτελούν έναν άλλο κρίσιμο τομέα, ιδιαίτερα όταν χειρίζονται δείγματα που μπορεί να περιέχουν επικίνδυνα μικροοργανισμούς ή τοξικές χημικές ουσίες. Η τήρηση των κατάλληλων μεθόδων χειρισμού, η χρήση προστατευτικών ενδυμάτων και η εφαρμογή αποτελεσματικών προτύπων καθαρισμού και απολύμανσης είναι απαραίτητα για την προστασία του προσωπικού και τη διατήρηση της ακεραιότητας των δειγμάτων. [93] [94] [95]

4.10 Επίλογος

Καθώς ολοκληρώνουμε την εξερεύνηση της φασματομετρίας και των εφαρμογών της στον τομέα της ιατρικής, αποκαλύπτεται η αξιοσημείωτη συμβολή αυτής της τεχνολογίας στη βελτίωση της κλινικής διαγνωστικής και της θεραπευτικής παρέμβασης. Η ακρίβεια, η ταχύτητα και η ευελιξία της φασματομετρίας στην ανίχνευση και ποσοτικοποίηση βιοδεικτών, ορμονών, βιταμινών και άλλων σημαντικών μορίων προσφέρουν ένα ισχυρό εργαλείο για την αντιμετώπιση πληθώρας παθήσεων. Η συνεχής εξέλιξη και βελτίωση της φασματομετρικής τεχνολογίας, σε συνδυασμό με την ενσωμάτωσή της σε πολυπλοκότερα διαγνωστικά συστήματα, υπόσχεται να ανοίξει νέους δρόμους στην ιατρική έρευνα και πρακτική, ενισχύοντας την ικανότητα των επιστημόνων και των ιατρών να παρέχουν προηγμένη φροντίδα και να βελτιώνουν την ποιότητα ζωής των ασθενών. Η φασματομετρία, με την ευρεία εφαρμογή της και την αδιάκοπη εξέλιξή της, συνεχίζει να αποτελεί μία από τις πλέον δυναμικές και πολλά υποσχόμενες τεχνικές στον τομέα των ιατρικών επιστημών.

Κεφάλαιο 5ο: Κατασκευή

5.1 Περιγραφή Λειτουργίας

Το φασματοφωτόμετρο είναι ένας σύνθετος αναλυτικός εξοπλισμός που χρησιμοποιείται ευρέως στην επιστήμη και τη βιομηχανία για την ανάλυση διαφόρων ουσιών. Η βασική αρχή λειτουργίας του φασματοφωτομέτρου βασίζεται στην μέτρηση του φωτός που απορροφάτε, διαχέεται ή εκπέμπεται από μια δειγματοληπτική ουσία, καθώς αυτή διαπερνάτε από ένα συγκεκριμένο φάσμα φωτός. Η απορρόφηση του φωτός από τα μόρια στο δείγμα σχετίζεται άμεσα με τις χημικές τους ιδιότητες και τη συγκέντρωσή τους, παρέχοντας έναν πολύτιμο μηχανισμό για την ποιοτική και ποσοτική ανάλυση.

Η λειτουργία του φασματοφωτομέτρου ξεκινά με την επιλογή του κατάλληλου μήκους κύματος φωτός, το οποίο είναι συγκεκριμένο για την ουσία που εξετάζεται. Αυτό επιτυγχάνεται με τη χρήση ενός μονοχρωμάτορα ή φίλτρων που επιτρέπουν τη διέλευση μόνο ενός συγκεκριμένου φάσματος του φωτός. Στη συνέχεια, το φως περνά από το δείγμα που έχει τοποθετηθεί σε ένα διαφανές δοχείο, συνήθως ένα κυβετόμετρο. Ένας ανιχνευτής στην απέναντι πλευρά μετρά την ποσότητα του φωτός που έχει απορροφηθεί από το δείγμα.

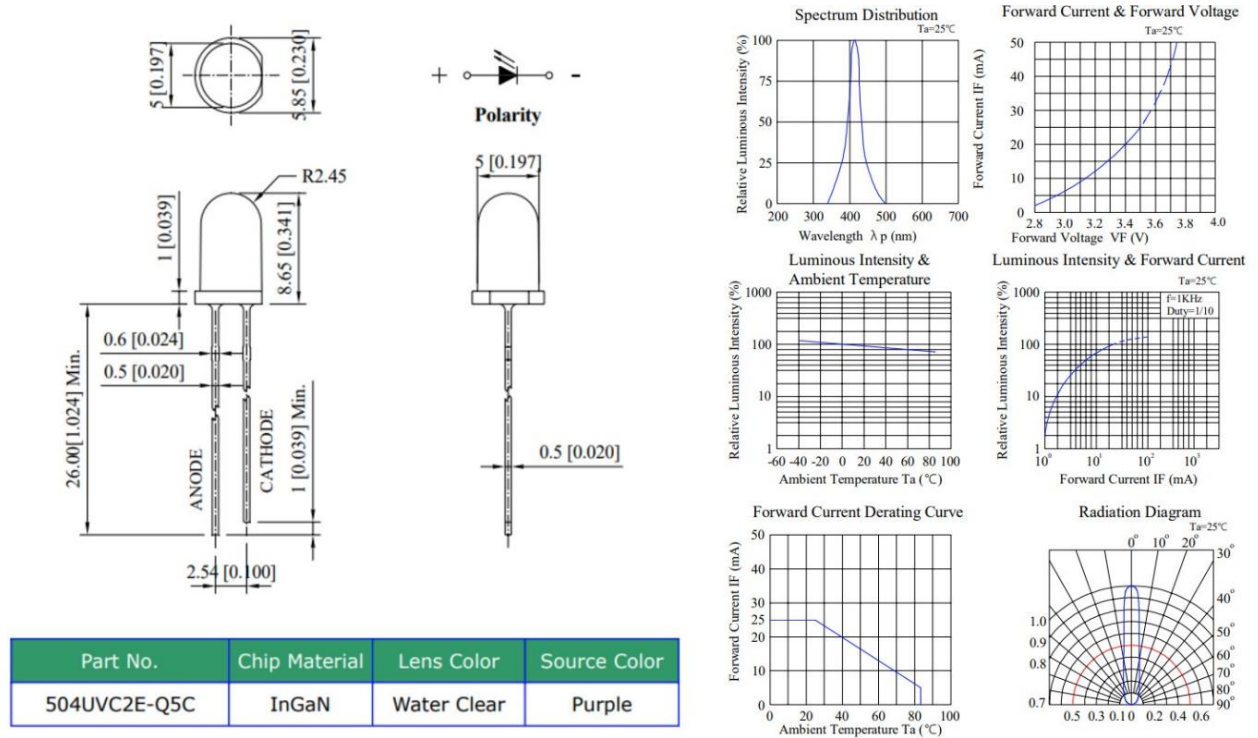
Οι πληροφορίες που λαμβάνονται από τον ανιχνευτή επεξεργάζονται στη συνέχεια μέσω ενός λογισμικού, το οποίο μετατρέπει τις μετρήσεις της απορρόφησης φωτός σε χημικές πληροφορίες, όπως η συγκέντρωση της ουσίας στο δείγμα. Ο νόμος του Beer-Lambert, ένας κεντρικός φυσικός νόμος στη φασματοσκοπία, χρησιμοποιείται για την ερμηνεία των αποτελεσμάτων, συνδέοντας την απορρόφηση του φωτός με τη συγκέντρωση της αναλυόμενης ουσίας στο δείγμα.

Η φασματοφωτομετρία είναι ιδιαίτερα χρήσιμη σε διάφορους τομείς, παρέχοντας ακριβείς και γρήγορες μετρήσεις για την ανάλυση διαφόρων χημικών ουσιών. Επιπλέον, είναι ευέλικτη τεχνική με ικανότητα προσαρμογής σε διάφορες μεθοδολογίες με αποτέλεσμα το φασματοφωτόμετρο να είναι ένα αναντικατάστατο εργαλείο στα εργαστήρια σε όλο τον κόσμο.

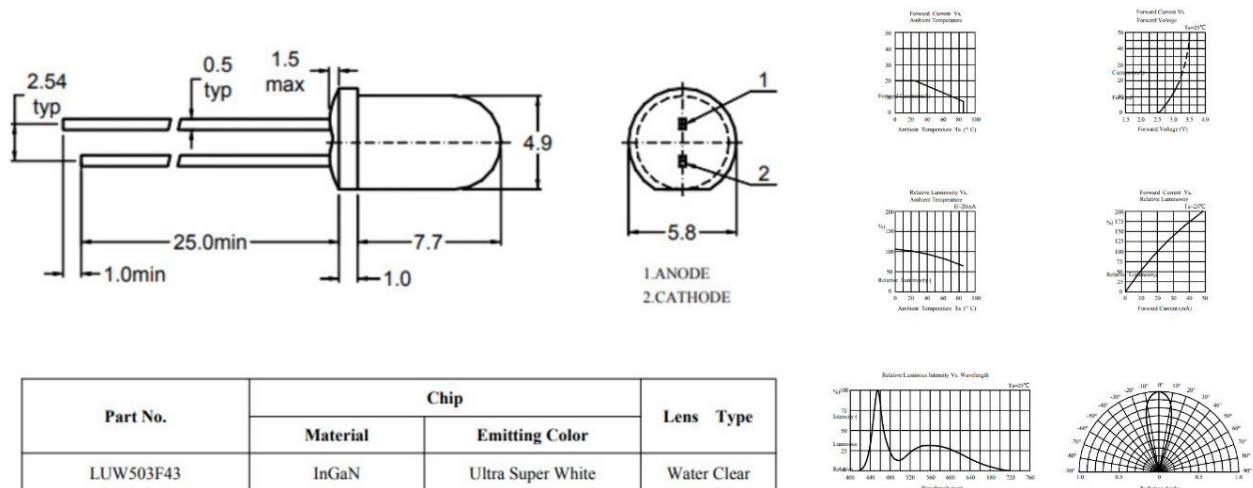
5.2 Σωστή Επιλογή Υλικών

Η σωστή επιλογή των υλικών κατασκευής είναι κρίσιμη για την αποδοτικότητα, την ακρίβεια και τη διάρκεια ζωής ενός φασματοφωτομέτρου. Τα υλικά πρέπει να επιλέγονται με βάση την αντοχή τους στις χημικές ουσίες, την ικανότητά τους να διατηρούν σταθερές οπτικές ιδιότητες και την ανθεκτικότητά τους σε φθορά και υψηλές θερμοκρασίες.

Πηγή Φωτός: Στην παρούσα υλοποίηση χρησιμοποιήσα μια δίοδο εκπομπής φωτός (LED) όπου ακτινοβολεί στο μήκος κύματος ορατού φάσματος και μία στην περιοχή UV. Επέλεξα ένα μωβ LED που εκπέμπει στα 400nm και ένα λευκό ψυχρό LED για μεγαλύτερη ευστάθεια της κυματομορφή και απεικόνιση του ορατού φάσματος 400-780nm. Τα δύο αυτά LED αφού έλεγξα την ορθή λειτουργία τους για να καταφέρω να έχω μια πιο στοχευμένη πηγή φωτός με τις λιγότερες δυνατές απώλειες τα κόλλησα με μαύρη σιλικόνη σε ένα Toslink.



Εικόνα 27. UV LED.



Εικόνα 28. White LED.

Φράγμα περίθλασης: Το φράγμα περίθλασης με 1000 γραμμές είναι ένα σημαντικό εξάρτημα που χρησιμοποιείται σε φασματοφωτόμετρα για το διαχωρισμό του φωτός σε διαφορετικά μήκη κύματος. Η λειτουργία του βασίζεται στον διαχωρισμό του φωτός σε διάφορες διακριτές γραμμές, όπου η κάθε μία αντιστοιχεί σε ένα συγκεκριμένο μήκος κύματος. Αυτό το εξάρτημα επιτρέπει την παραγωγή ενός φασματικού διαγράμματος που απεικονίζει την αναλυτική σύνθεση του φωτός που διαπερνά το δείγμα. Με την χρήση ενός φράγματος περίθλασης 1000 γραμμών, επιτυγχάνεται υψηλή ανάλυση και ακρίβεια στις μετρήσεις της φασματοσκοπίας, καθιστώντας το ιδανικό για εφαρμογές που απαιτούν υψηλή επίδοση και ακρίβεια στην ανάλυση του φάσματος του φωτός.



Εικόνα 29 Diffraction grating 1000lines (Φράγμα περίθλασης).

Webcam: Επιλέξαμε την παρακάτω κάμερα η οποία είναι full hd με 1080p μιας και είναι οικονομικά αποδοτική και ένας πιο ευέλικτος τρόπος για την λήψη των φασματικών δεδομένων. Τοποθετήθηκε έτσι ώστε να συλλαμβάνει την ανάκλαση ή μετάδοση του φωτός που περνάει μέσα από το δείγμα. Είναι απαραίτητο στοιχείο καθώς με την χρήση κατάλληλου λογισμικού μας επιτρέπει να καταγράψουμε εικόνες του δείγματος σε διαφορετικά μήκη κύματος. Για να πετύχουμε σωστή φασματική ανάλυση είναι σημαντική η βαθμονόμηση της καθώς περιλαμβάνει τη σύγκριση της απόκρισης της κάμερας με κάποια γνωστά πρότυπα για την συσχέτιση της καταγεγραμμένης έντασης και της συγκέντρωσης ή τις ιδιότητες του δείγματος.



Εικόνα 30. White LED.

Κυβέτες: Οι κυβέτες για φασματοφωτόμετρα είναι σημαντικά εξαρτήματα που χρησιμοποιούνται για μετρήσεις απορρόφησης (A) και διαπερατότητας (T) στο ορατό μέρος του φάσματος. Με εξωτερικές διαστάσεις 12,5 x 12,5 χιλιοστά και ύψος 45 χιλιοστά, και εσωτερικές διαστάσεις 10 x 10 χιλιοστά, αυτές οι γυάλινες κυβέτες παρέχουν την ακρίβεια και την αξιοπιστία που απαιτούνται για ακριβείς μετρήσεις στο ορατό μέρος του φάσματος. Είναι συμβατές με φασματοφωτόμετρα Vis (ορατό μέρος του φάσματος) και UV-Vis (ορατό μέρος και υπέρυθρο μέρος του φάσματος), προσφέροντας ευελιξία και αξιοπιστία στις μετρήσεις φασματοσκοπίας.

Ποτενσιόμετρο: Το ποτενσιόμετρο που επιλέχθηκε είναι το B500Ω και χρησιμοποιήθηκε για να μπορούμε να ρυθμίσουμε την ένταση του ρεύματος με μεγαλύτερη ακρίβεια σε πραγματικές συνθήκες χωρίς να μας επηρεάζουν οι απώλειές που συναντάμε από την θεωρητική μελέτη στην υλοποίηση.

Αντιστάσεις: Οι αντιστάσεις που χρησιμοποιήθηκαν είναι του 1/4W με ανοχή στα 5% και ωμικής αντίστασης που κυμαίνεται από 560Ω έως 100kΩ.

Ολοκληρωμένο TLC274CN: Είναι ένα ολοκληρωμένος κύκλωμα και πιο συγκεκριμένα ένας τετραπλός τελεστικός ενισχυτής (op-amp), που παράγεται από την εταιρία Texas Instruments. Το κάθε ολοκληρωμένο περιέχει τέσσερις ανεξάρτητους ενισχυτές που το καθιστούν κατάλληλο για πολλούς ενισχυτές με πολλαπλό σχεδιασμό. Είναι σχεδιασμένος με χαρακτηριστικά χαμηλού θορύβου που τον καθιστούν κατάλληλο για εφαρμογές με απαίτηση την ελαχιστοποίηση της παραμόρφωσης και των παρεμβολών του σήματος. Επιπλέον χαρακτηρίζεται από υψηλό ρυθμό περιστροφής (High Slew Rate) επιτρέποντας του τις γρήγορες αλλαγές στην τάση εξόδου όταν υπάρχουν αλλαγές στην τάση εισόδου. Είναι Rail to Rail output, δηλαδή μπορεί να μετατοπίσει την τάση εξόδου του κοντά τόσο στην θετική όσο και την αρνητική «ράγα» τροφοδοσίας. Έχει χαμηλή κατανάλωση ενέργειας που μας επιτρέπει να το τροφοδοτήσουμε ακόμη και με μια μπαταρία όπως επίσης έχει και ένα ευρύ φάσμα θερμοκρασιών που κυμαίνεται από -40°C έως 125°C κάνοντας το ανθεκτικό σε κυκλώματα με ακραίες θερμοκρασίες.



Εικόνα 31. Ολοκληρωμένο OP-AMP TLC274CN.

Toslink: Χρησιμοποιήσα ένα Toslink 1 προς 2 το οποίο είναι ένας διακλαδωτής για ψηφιακά οπτικά σήματα ήχου και σκοπός τους είναι η κατανομή ενός ψηφιακού οπτικού σήματος από μια πηγή σε δύο ξεχωριστές συσκευές εξόδου. Είναι ένα τυποποιημένος σύστημα σύνδεσης οπτικών ινών για την μετάδοση ψηφιακών σημάτων χρησιμοποιώντας παλμούς φωτός και με την μέθοδο αυτή μας εξασφαλίζει μετάδοση του σήματος χωρίς παρεμβολές και απώλειές ακόμη και σε μεγάλες αποστάσεις. Στην παρούσα διπλωματική το χρησιμοποιήσαμε για τις οπτικές είναι που περιέχει ώστε να κατευθύνουμε το φως που εκπέμπουν τα LED χωρίς να έχουμε το φαινόμενο της διάθλασης μέχρι να φτάσει το φράγμα περίθλασης.



Εικόνα 32. Κόλληση με σιλικόνη τα LED στο Toslink.

5.3 Πίνακας Κόστους Κατασκευής

A/A	ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ	ΑΡΙΘΜΟΣ	ΑΞΙΑ
1	TOSLINK	1	14,90
2	ΞΥΡΑΦΑΚΙΑ 5τμχ	1	0,48
3	PLA ΥΛΙΚΟ ΕΚΤΥΠΩΤΗ 1kg	1	17,74
4	Web Cam	1	19,99
5	ΠΙΣΤΟΛΙ ΣΙΛΙΚΟΝΗΣ	1	7,20
6	ΣΙΛΙΚΟΝΗ ΜΑΥΡΗ	2	0,50
7	DIFFRACTION GRATING (ΦΡΑΓΜΑ ΠΕΡΙΘΛΑΣΗΣ) 1000lines	1	9,89
8	ΚΥΒΕΤΕΣ	2	59,90
9	TLC 274CN	1	1,56
10	ΑΝΤΙΣΤΑΣΕΙΣ	10	4,46
11	ΠΟΤΕΝΣΙΟΜΕΤΡΟ	1	2,70
12	ΠΛΑΚΕΤΑ	5	13,58
13	ΜΠΛΕ ΟΙΝΟΠΝΕΥΜΑ	1	1,05

14	ΕΞΑΙΡΕΤΙΚΑ ΠΑΡΘΕΝΟ ΕΛΑΙΟΛΑΔΟ	1	14,50
	ΦΠΑ		40,45
	ΣΥΝΟΛΟ		168,55

Πίνακας 1. Τιμοκατάλογος

5.4 Εξέλιξη Κατασκευής

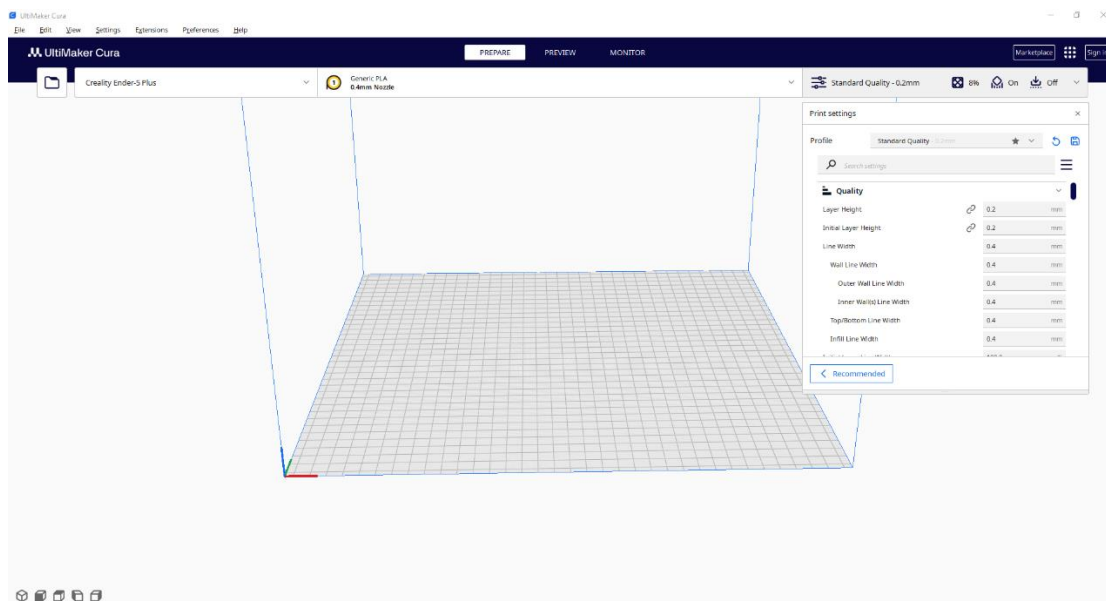
5.4.1 3D Printer

Το Ultimaker Cura αποτελεί μια ισχυρή εφαρμογή επεξεργασίας ανοιχτού κώδικα που προορίζεται για τη διαχείριση και τεμαχισμό των σχεδίων που πρόκειται να εκτυπωθούν με τρισδιάστατους εκτυπωτές. Το κύριο χαρακτηριστικό του είναι η δημιουργία της αντίστοιχης γλώσσας G-code, η οποία καθοδηγεί τον εκτυπωτή στην κατασκευή του αντικειμένου.

Μέσω του Ultimaker Cura, οι χρήστες έχουμε τη δυνατότητα να προσαρμόσουμε πληθώρα ρυθμίσεων σύμφωνα με τις ανάγκες μας. Αυτό επιτρέπει την επίτευξη επιθυμητών αποτελεσμάτων κατά την εκτύπωση, καθώς διαφορετικά υλικά και σχεδιαστικές λεπτομέρειες απαιτούν διαφοροποιημένες ρυθμίσεις. Με τη δυνατότητα προσαρμογής του χρήστη σε παράγοντες όπως η ταχύτητα εκτύπωσης, η θερμοκρασία εξώθησης και άλλες παράμετροι, επιτυγχάνεται η βέλτιστη απόδοση της εκτύπωσης..

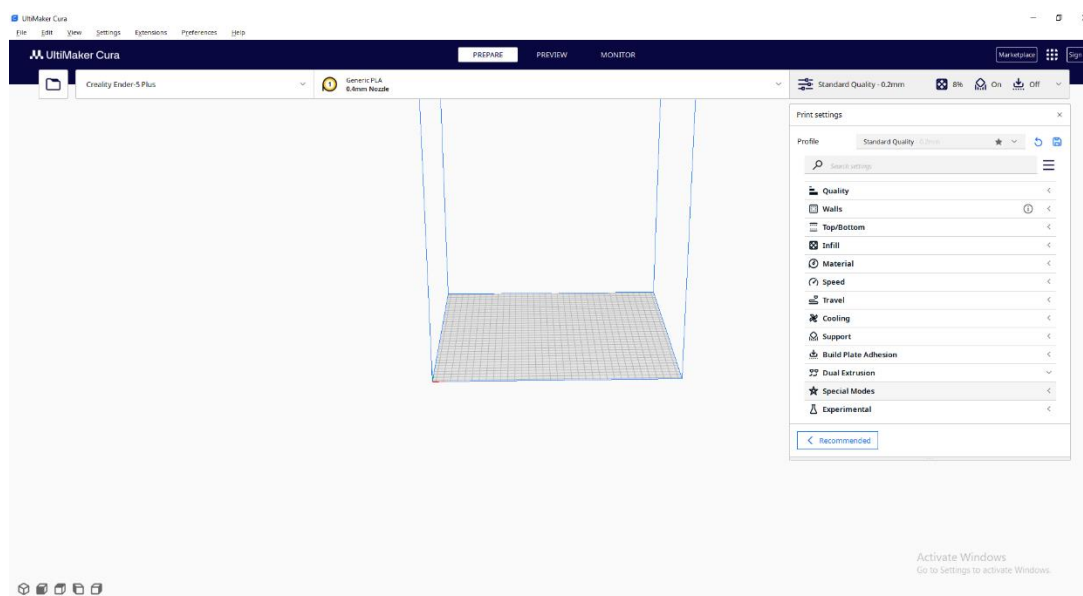
Το πρόγραμμα επιτρέπει επίσης τη διαχείριση διαφορετικών υλικών εκτύπωσης, αναλύοντας τις ιδιότητές τους και προσφέροντας κατάλληλες ρυθμίσεις για κάθε υλικό. Με την ευελιξία και την πολυπλοκότητα που προσφέρει το Ultimaker Cura, οι χρήστες μπορούν να επιτύχουν τα καλύτερα δυνατά αποτελέσματα στις εκτυπώσεις τους, προσαρμόζοντας τις ρυθμίσεις σύμφωνα με τις ανάγκες και τις προδιαγραφές τους.

5.4.1.1 Εισαγωγή στο Περιβάλλον Εργασίας



Εικόνα 33. Αρχική Επιφάνεια Εργασίας του Ultimaker Cura.

Σε αυτό το σημείο (αρχική κατάσταση, prepare mode) θα πρέπει να γίνει η σωστή επιλογή του μοντέλου και μάρκα του εκτυπωτή καθώς το πρόγραμμα που χρησιμοποιούμε έχει στο λογισμικό του όλες τις απαραίτητες διαστάσεις και ρυθμίσεις για τον εκάστοτε εκτυπωτή. Η επόμενη επιλογή στην οποία συνιστάτε η προσοχή της επιλογής μας είναι η επιλογή του υλικού που θα επιλέξουμε στο πρόγραμμα ότι θα εκτυπώσουμε και θα πρέπει να είναι η ίδια με το υλικό που θα χρησιμοποιήσουμε στην εκτύπωση καθώς το κάθε υλικό έχει διαφορετικές απαιτήσεις όπως για παράδειγμα τις θερμοκρασίες που θα πρέπει να ρυθμίσουμε τόσο την θερμοκρασία της μύτης (Nozzle) όσο και την θερμοκρασία του κρεβατιού (Bed Temperature). Όλα τα υλικά που χρησιμοποιούνται στους τρισδιάστατους εκτυπωτές παρέχονται από τους παραγωγούς με διαφορετική διάμετρο και προτεινόμενες ρυθμίσεις θερμοκρασίας. Άρρηκτα συνδεδεμένη με την διάμετρο του υλικού είναι το μέγεθος του Nozzle από το οποίο περνάει το υλικό, θερμαίνεται και εκτυπώνεται πάνω στο Bed.



Εικόνα 34. Πίνακας Ρυθμίσεων.

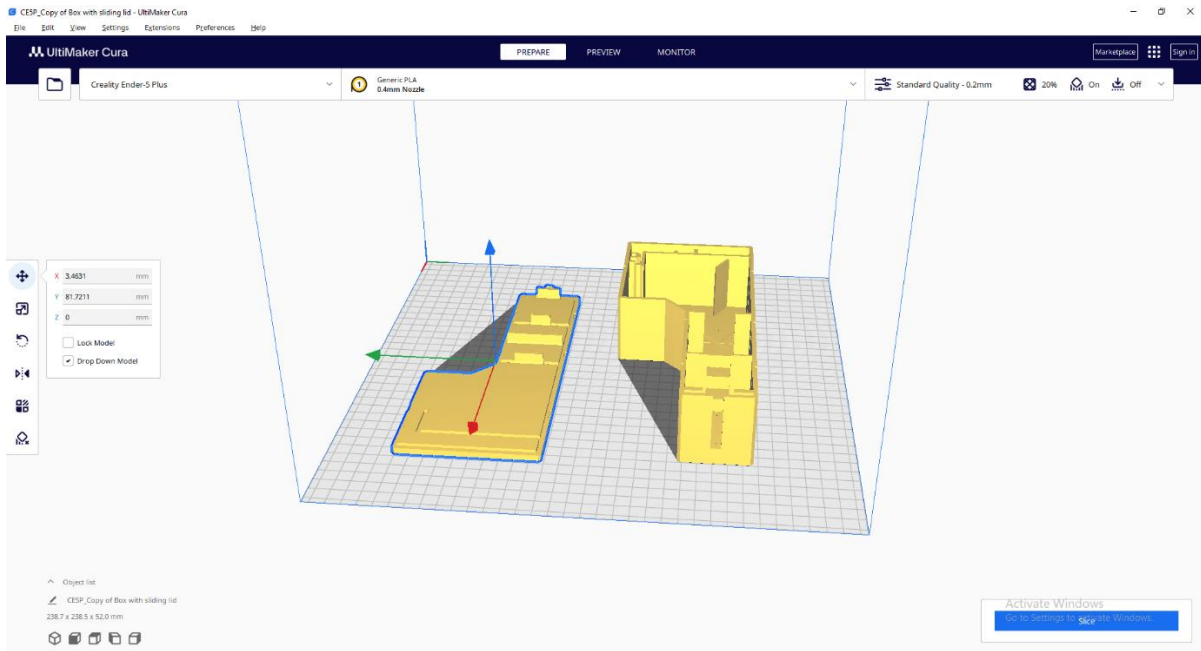
Σε αυτόν τον πίνακα που φαίνεται στην δεξιά πλευρά του προγράμματος μπορούμε να μεταβάλουμε τις ρυθμίσεις που θέλουμε σε όλες τις αναγραφόμενες επιλογές με σκοπό την βελτιστοποίηση της εκτύπωσης μας.

5.4.1.2 Εκτύπωση

Έπειτα από αναζήτηση στο διαδίκτυο βρήκα ένα κουτί για φασματοφωτόμετρο το οποίο μας βολεύει στην κατασκευή που θέλω να υλοποιήσω και το οποίο σχεδιάστηκε από τον χρήστη του Thingiverse με όνομα Quas7 (<https://www.thingiverse.com/thing:3351995>).

Αφότου κατέβασα το αρχείου προχώρησα στην απεικόνιση του μοντέλου μέσω του Ultimaker Cura για να προσαρμόσω τις επιθυμητές ρυθμίσεις.

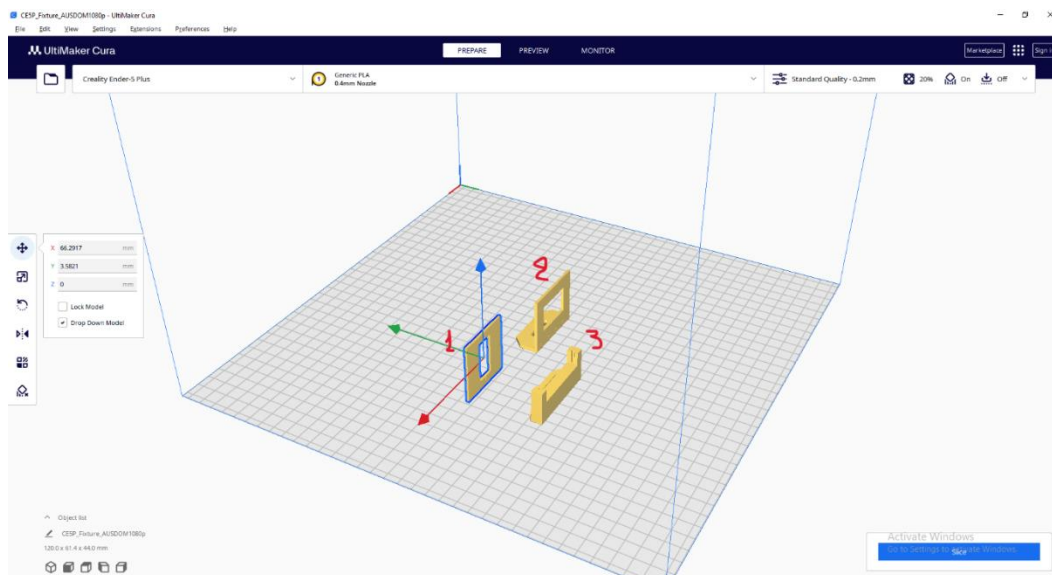
Κεφάλαιο 5



Εικόνα 35. Απεικόνιση τρισδιάστατου μοντέλου φασματοφωτόμετρου.

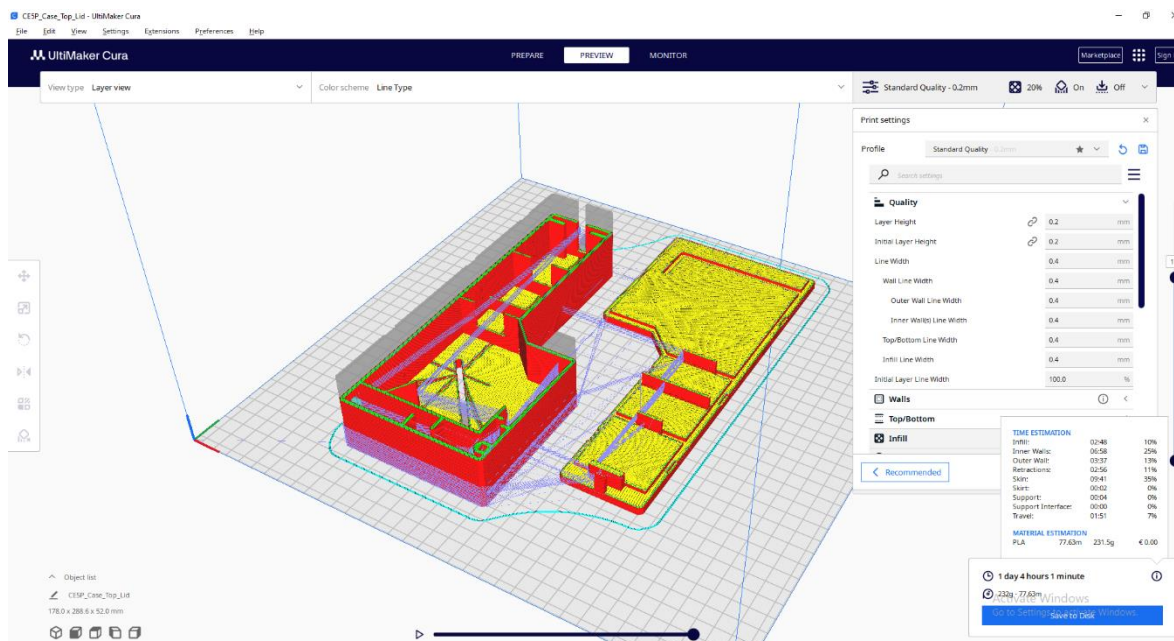
Στην παραπάνω φωτογραφία παρατηρούμε τα μοντέλα από το κουτί και το καπάκι του φασματοφωτόμετρου καθώς και τρία διαφορετικού χρώματος βελάκια (το μπλε μας προσδιορίζει την τιμή στον άξονα του Z(ύψος), το κόκκινο τον άξονα του X(μήκος), και το πράσινο χρώμα τον άξονα Y(πλάτος). Επιλέγοντας με το ποντίκι το μοντέλο που θέλουμε μπορούμε να επιλέξουμε τις συντεταγμένες που θέλουμε να εκτυπωθεί πάνω στο Bed.

Στην φωτογραφία που ακολουθεί έχω τοποθετήσει 1. τα στηρίγματα στα οποία θα κάνουμε την οπή, 2. την βάση στην οποία θα κολληθεί το φράγμα περιθλασης, 3. την βάση στήριξης της κάμερας.



Εικόνα 36. Parts.

Μόλις καθορίσουμε τις ρυθμίσεις πατάμε το slice ώστε να ετοιμάσει το πρόγραμμα το gcode του αρχείου. Μπορούμε να ενημερωθούμε για την συνολική απαιτούμενη ώρα εκτύπωσης καθώς και το υλικό που θα χρησιμοποιηθεί, μπορούμε επίσης να ενημερωθούμε και για την ώρα που θα χρειαστεί το κάθε κομμάτι για να εκτυπωθεί.



Εικόνα 37. Κουτί φασματοφωτόμετρου κατά την διάρκεια του slice.

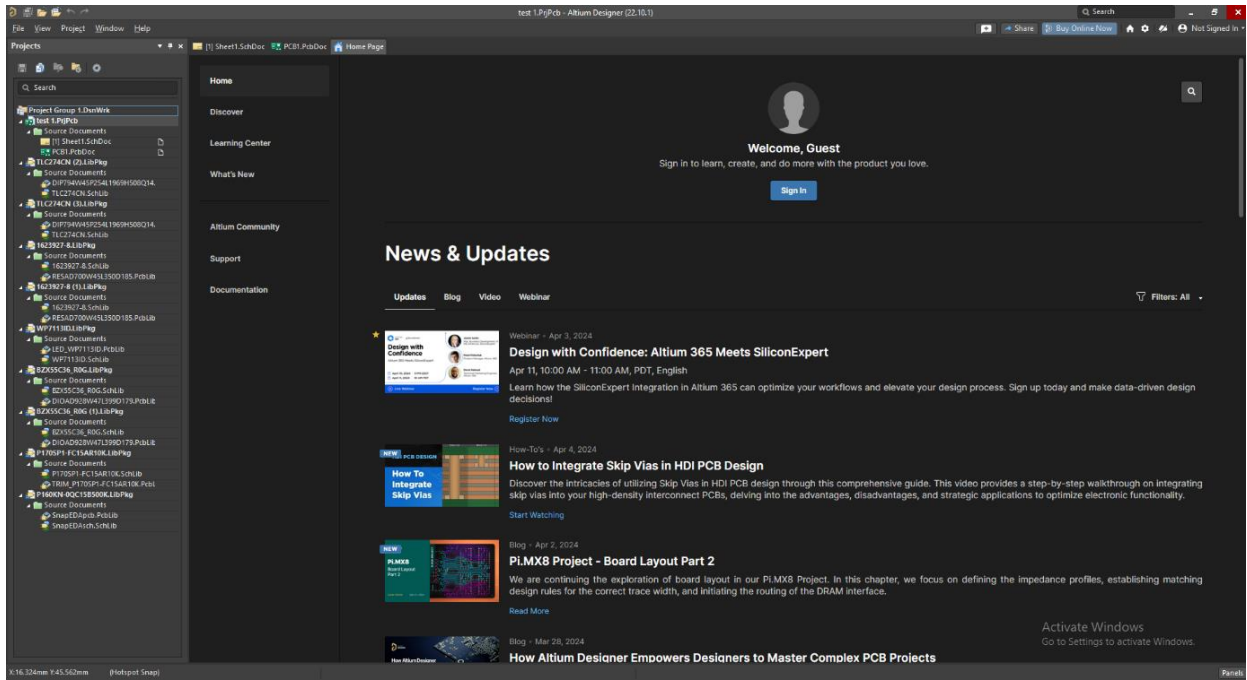
5.5 Altium Designer

Το Altium Designer είναι ένα ισχυρό και ευέλικτο λογισμικό για σχεδίαση ηλεκτρονικών κυκλωμάτων και PCB (Printed Circuit Board - Εκτυπωμένο Κύκλωμα). Προσφέρει μια ενιαία πλατφόρμα που καλύπτει όλες τις ανάγκες της διαδικασίας σχεδιασμού, από τη δημιουργία του σχηματικού κυκλώματος μέχρι την τελική παραγωγή του PCB. Με το Altium Designer, οι μηχανικοί και οι σχεδιαστές μπορούν να εργαστούν σε ένα ενοποιημένο περιβάλλον, βελτιστοποιώντας τη διαδικασία ανάπτυξης προϊόντων.

Οι δυνατότητες του περιλαμβάνουν προχωρημένες λειτουργίες για σχεδίαση PCB, όπως δυνατότητες 3D προσομοίωσης, που επιτρέπουν στους χρήστες να ελέγχουν την τοποθέτηση των στοιχείων σε τρισδιάστατο περιβάλλον πριν την πραγματική παραγωγή. Επίσης, παρέχει εκτενή υποστήριξη για διαχείριση βιβλιοθηκών, επαλήθευση σχεδίου, και αυτόματη τοποθέτηση και δρομολόγηση καλωδίωσης, μειώνοντας σημαντικά τον χρόνο και το κόστος ανάπτυξης.

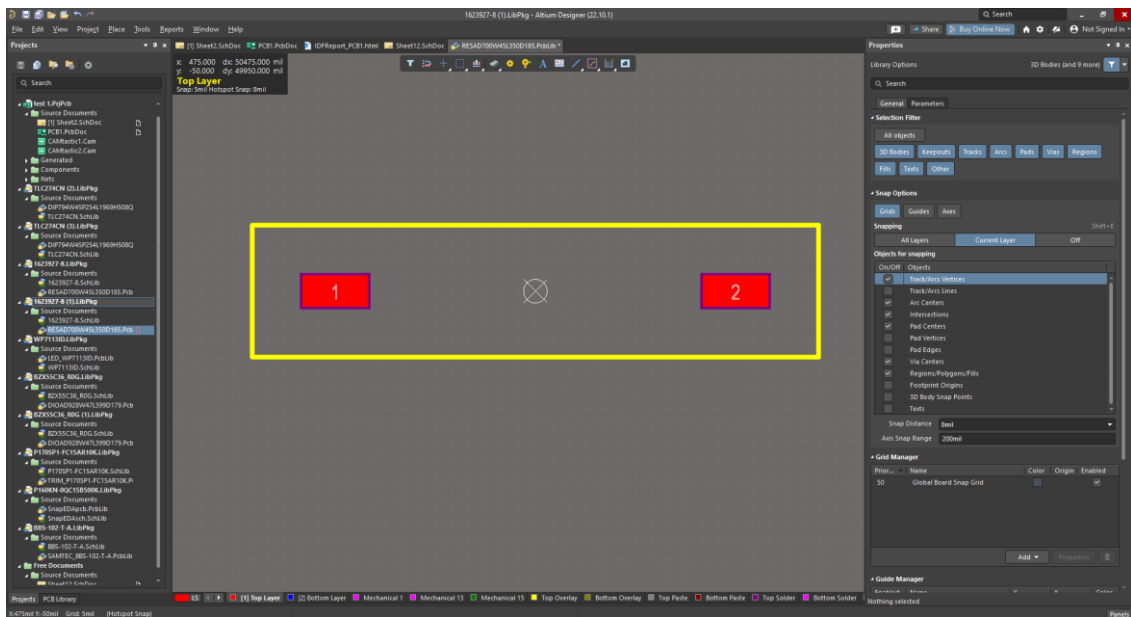
Το Altium Designer απευθύνεται σε επαγγελματίες μηχανικούς και σχεδιαστές ηλεκτρονικών, προσφέροντας μια πλήρη λύση για την ανάπτυξη περίπλοκων ηλεκτρονικών προϊόντων. Με τη χρήση του, οι επαγγελματίες μπορούν να επιταχύνουν την εμπορική διάθεση των προϊόντων τους, ενώ ταυτόχρονα διασφαλίζουν υψηλή ποιότητα και αξιοπιστία.

1. Αρχικό Περιβάλλον Εργασίας



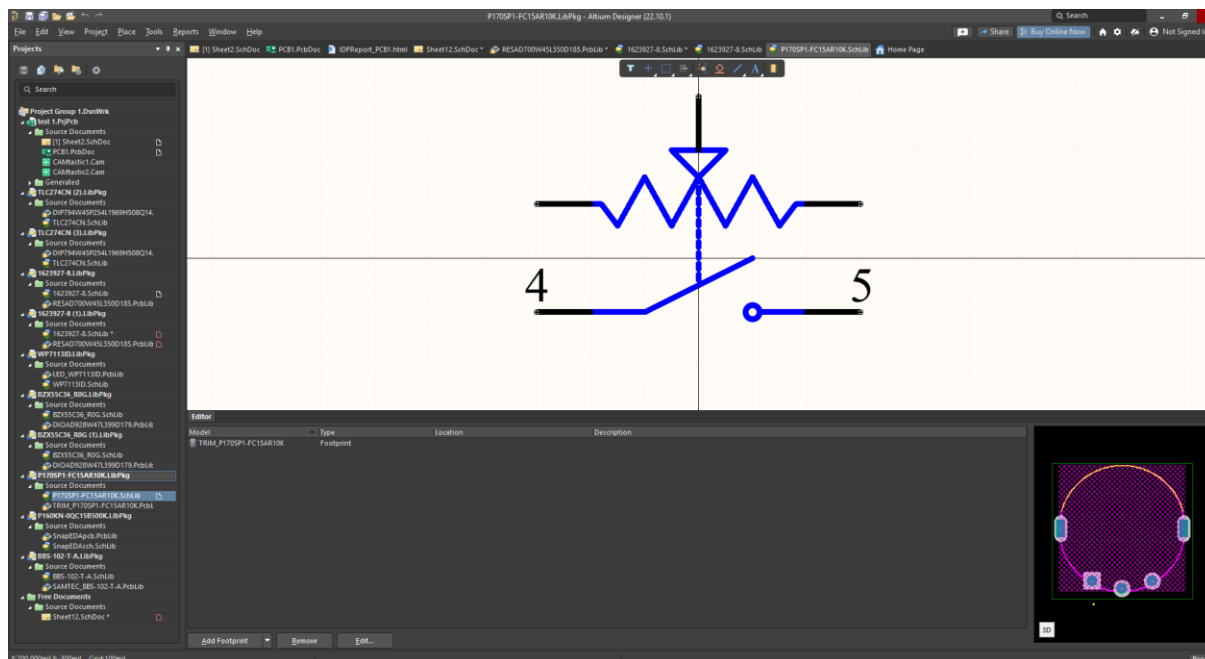
Εικόνα 38. Αρχική οθόνη του Altium.

2. Αφού δημιούργησα ένα νέο σχηματικό project, ξεκίνησα να πειραματίζομαι με τα υλικά που μου παρέχει το πρόγραμμα ώστε να κατανοήσω τον τρόπο με τον οποίο λειτουργεί. Έμαθα πως μπορώ να δημιουργήσω ή να τροποποιήσω διάφορα ηλεκτρονικά στοιχεία όπως και σχηματικά όπως και τα footprints τους που θα με βοηθούσαν στην υλοποίηση της πλακέτας (PCB).



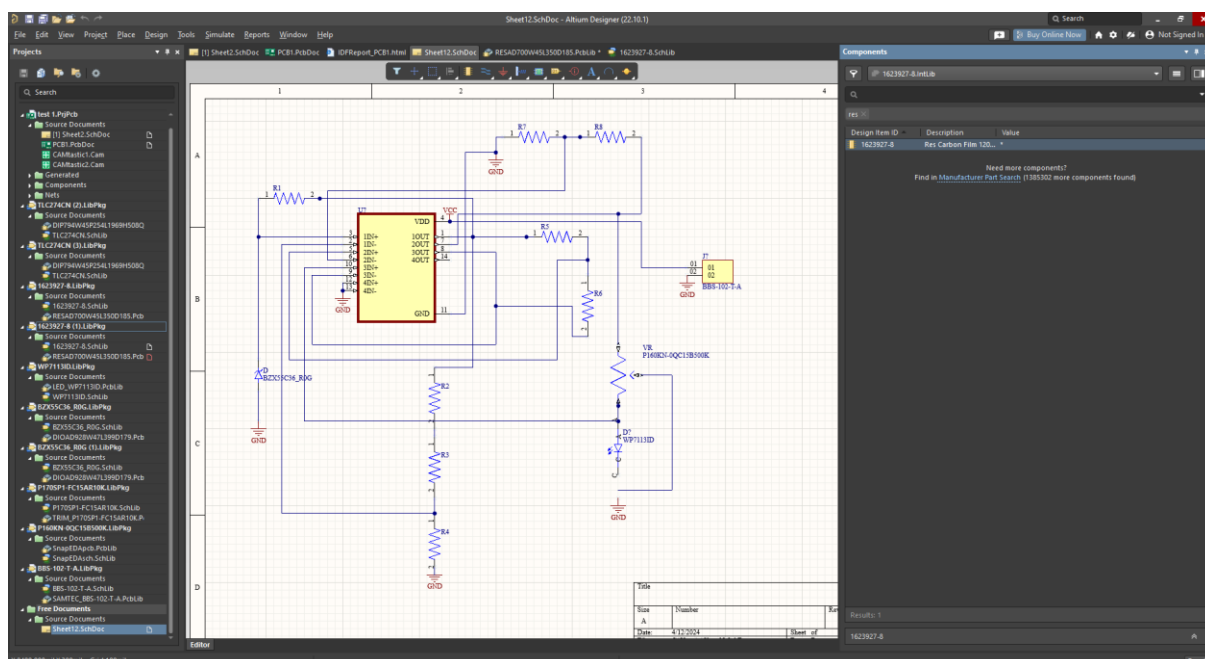
Εικόνα 39. Μετατροπή του σχηματικού για χρήση στο PCB

3. Για να μπορέσω να μεταβάλλω το σχηματικό της αντίστασης όπως φαίνεται στην παραπάνω φωτογραφία, έπρεπε να πάω στην επιλογή tools, και από εκεί να επιλέξω το footprint wizard. Με τον τρόπο αυτό κατάφερα να αλλάξω τις default ρυθμίσεις όπως για παράδειγμα η ένωση της αντίστασης να είναι through hole ή surface mount όπως και την διάμετρο του στοιχείου.



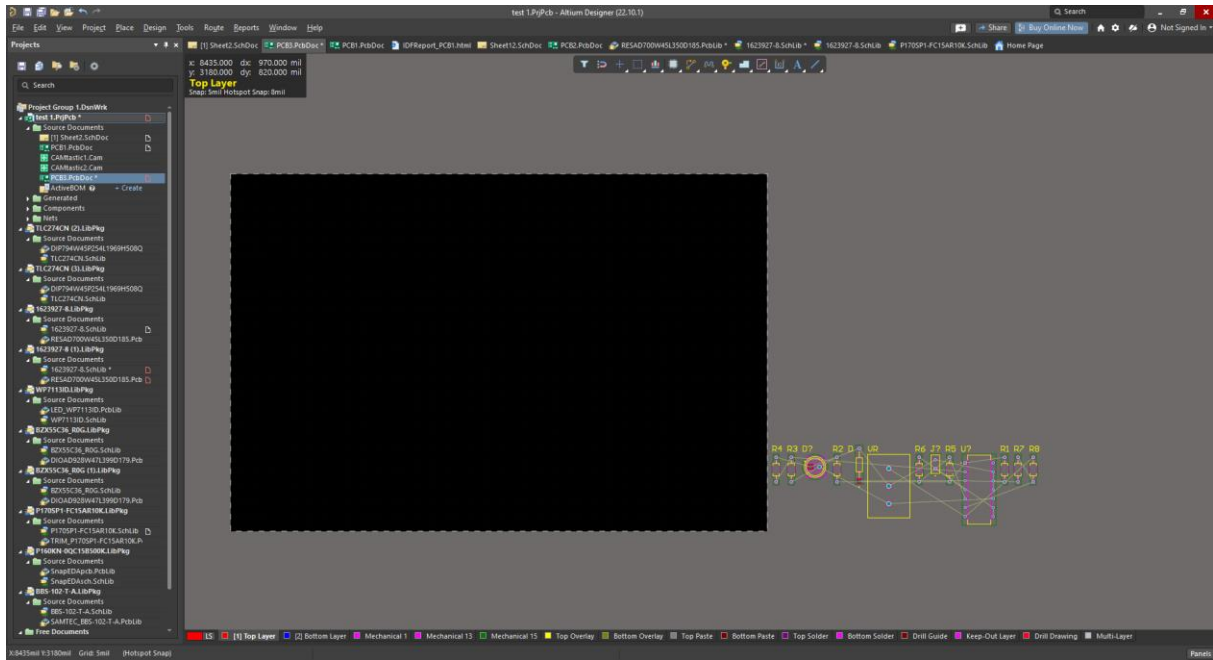
Εικόνα 40. Σχεδίαση ηλεκτρονικού στοιχείου

4. Απαραίτητη προϋπόθεση για την εξαγωγή του PCB ήταν να ετοιμάσω το κύκλωμα σε schematic μορφή. Η παραπάνω φωτογραφία απεικονίζει το περιβάλλον που μου επιτρέπει να μεταβάλλω την μορφή του στοιχείου.



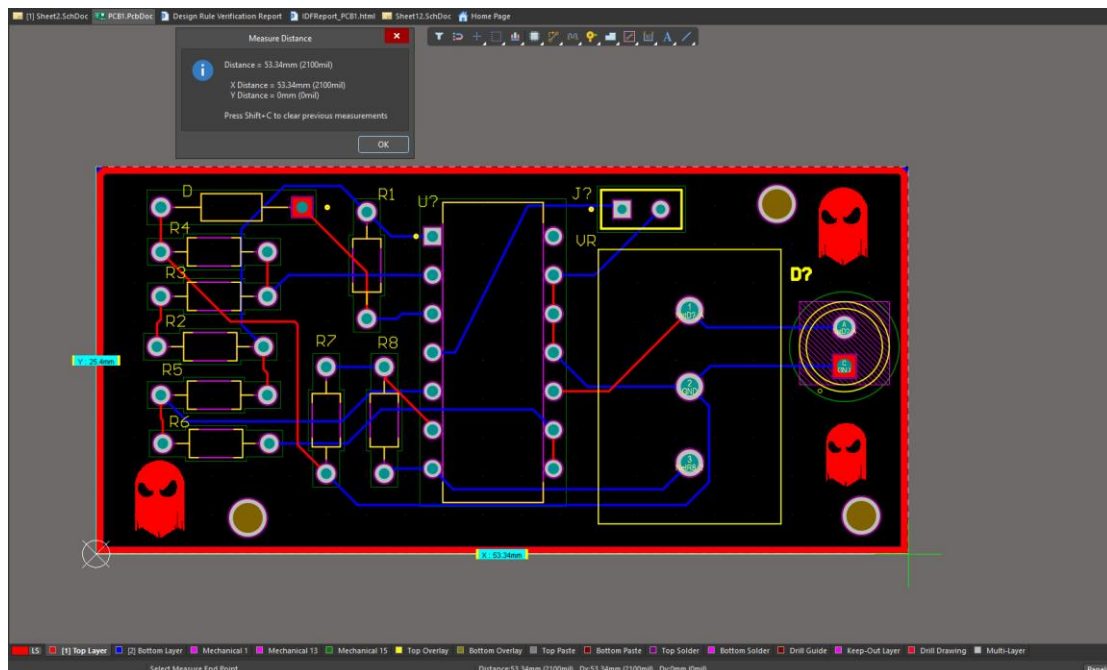
Εικόνα 41. Απεικόνιση του κυκλώματος.

5. Αφού ολοκλήρωσα τον σχεδιασμό του σχηματικού, δημιούργησα μέσα στον φάκελο του ίδιου project ένα κενό αρχείο PCB. Αφού το έκανα αυτό επέστρεψα στο schematic που είχα κάνει και μέσω του design επέλεξα το update σε PCB. Έλεγξα για τυχόν σφάλματα που μπορεί να είχαν προκύψει έκανα validate changes και αφού διόρθωσα κάποια σφάλματα συνέχισα με το execute changes για να τα ελέγξει και το πρόγραμμα. Τότε ήμουν έτοιμος να προχωρήσω στο PCB. Το οποίο εμφανίστηκε κατά αυτόν τον τρόπο.



Εικόνα 42. Αρχική μορφή του PCB.

- Επόμενο βήμα που ακολούθησα ήταν να φέρω όλα τα στοιχεία σε μια διάταξη η οποία με βολεύει τόσο αισθητικά όσα και πρακτικά για να μην έχω θέμα με τα συνδέσεις (traces). Αφού έκανα τις ενώσεις και το πάνω layer (κόκκινο) και το κάτω (μπλε) ήμουν σε θέση να υπολογίσω τις διαστάσεις που θα έβγαине η πλακέτα μου ώστε να σχεδιάσω το αντίστοιχο κουτί στο οποίο θα την τοποθετούσα. Στην επόμενη φωτογραφία απεικονίζεται η πλακέτα μαζί με τις διαστάσεις της στην κάθε πλευρά (περίπου 2,5 εκατοστά 5,5 εκατοστά).



Εικόνα 43. Πλακέτα με τα traces.

Κατά τον σχεδιασμό της πλακέτας έπρεπε να προσέξουμε το πάχος των traces, έτσι ώστε να μπορούν τα 20mA να περάσουν εκεί. Αρχικά χρησιμοποίησα τον τύπο για να υπολογίσω την μεταβλητή της περιοχής:

$$A = \left(\frac{I}{k \times T_R^a b} \right)^{\frac{1}{c}}$$

Όπου:

A: η περιοχή

I: το ρεύμα που θα διαπερνά (20mA)

k: σταθερά (0.024)

TR: αύξηση θερμοκρασίας (20 Βαθμούς Κελσίου)

b: σταθερά (0.44)

c: σταθερά (0.725)

Καταλήγοντας στο παρακάτω:

$$A = \left(\frac{0,02}{0,024 \times 20^0,44} \right)^{\frac{1}{0,725}} = 0.12623909432$$

Μόλις βρήκα το A μπορούσα να υπολογίσω εν τέλει το μήκος:

$$W = \frac{A}{t \times 1.378}$$

t: πάχος που του trace

$$w = \frac{A}{t \times 1,378} = \frac{0.12623909432}{0,2 \times 1,378} = 0.4580518662mm$$

Οπότε το με τις τιμές που χρησιμοποιήσαμε το απαιτούμενο πλάτος των traces θα πρέπει να είναι τουλάχιστον 0,4581mm για να επιτύχουμε την ομαλή λειτουργία του κυκλώματος.

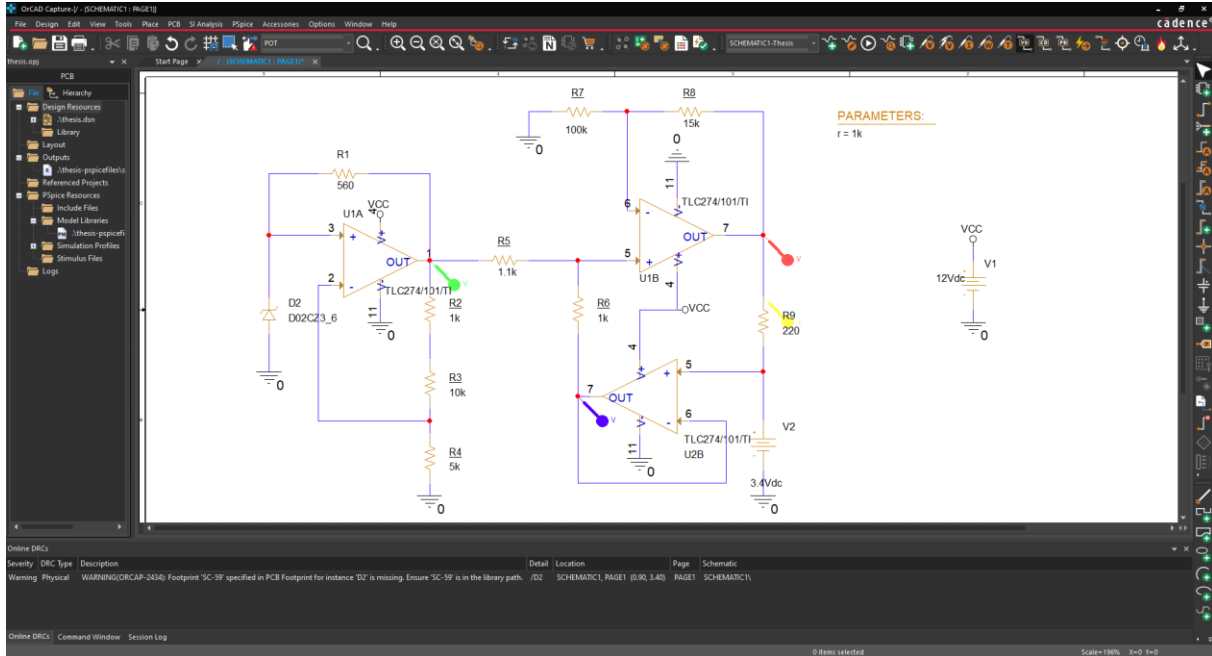
5.6 Κύκλωμα Howland

Με σκοπό την επίτευξη μεγαλύτερης ακρίβειας και πιο αξιόπιστου αποτελέσματος κατά τη μέτρηση μέσω κάμερας, αναγκαστήκαμε να αναπτύξουμε ένα ηλεκτρονικό κύκλωμα που θα διατηρεί σταθερή την ένταση του ρεύματος καθ' όλη τη διάρκεια της μέτρησης. Γι' αυτό το λόγο, δημιουργήσαμε μια πηγή ρεύματος, γνωστή και ως πηγή ρεύματος Howland. Η πηγή αυτή συχνά χρησιμοποιείται για τη δημιουργία ακριβούς ρεύματος εξόδου, με συνήθεις εφαρμογές τα κυκλώματα πόλωσης ή διέγερσης αισθητήρων. Ο πυρήνας της πηγής αυτής είναι ένας τελεστικός ενισχυτής, ο οποίος έχει διαμορφωθεί έτσι ώστε να παρέχει ακριβή ρύθμιση ρεύματος.

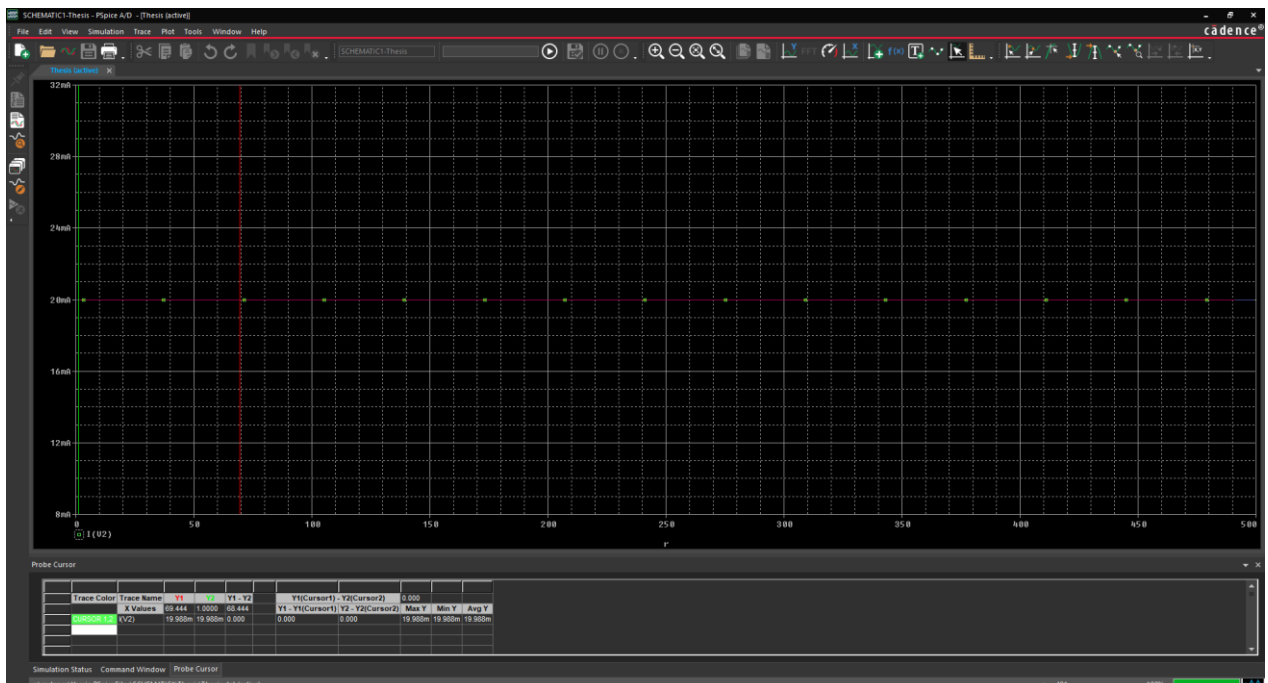
Ο τελεστικός ενισχυτής συνδέεται σε έναν βρόχο ανάδρασης με ένα δίκτυο αντιστάσεων, τα οποία συνήθως εμφανίζονται ως RF-RG και Rz. Η RF-RG είναι υπεύθυνη για το κέρδος του ενισχυτή, ενώ η Rz καθορίζει την αντίσταση εξόδου και τη σταθερότητα της πηγής ρεύματος. Για να επιτευχθεί η ακρίβεια και η σταθερότητα του κυκλώματος, απαιτείται η σωστή επιλογή των εξαρτημάτων, η σταθερότητα της θερμοκρασίας του τελεστικού ενισχυτή και ο προσεκτικός σχεδιασμός του κυκλώματος ανάδρασης.

Κεφάλαιο 5

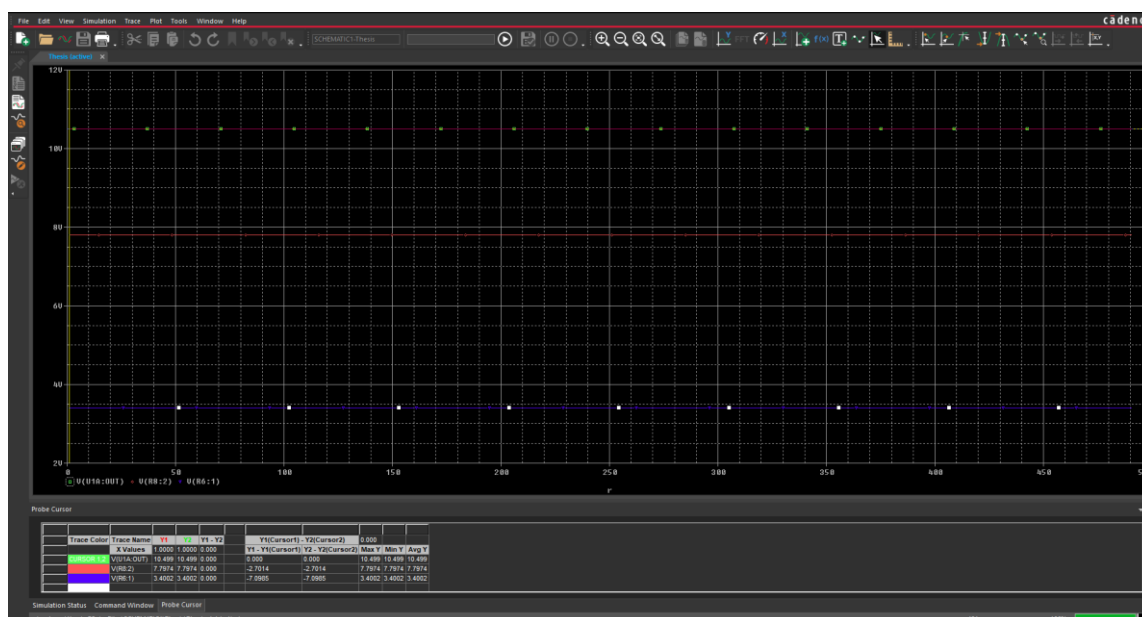
Για την υλοποίηση και τον έλεγχο του κυκλώματος, αξιοποιήθηκε το πρόγραμμα OrCAD Allegro Pspice. Το οποίο αποτελεί ιδανικό εργαλείο για την επιτυχή υλοποίηση και την ανάλυση του κυκλώματος σε εικονική μορφή. Η εν λόγω εφαρμογή επιτρέπει την ακριβή προσομοίωση του κυκλώματος, την ανίχνευση πιθανών σφαλμάτων και τη βελτίωση της απόδοσης πριν από την πραγματική υλοποίηση του.



Εικόνα 44. Το κύκλωμα σε virtual μορφή.



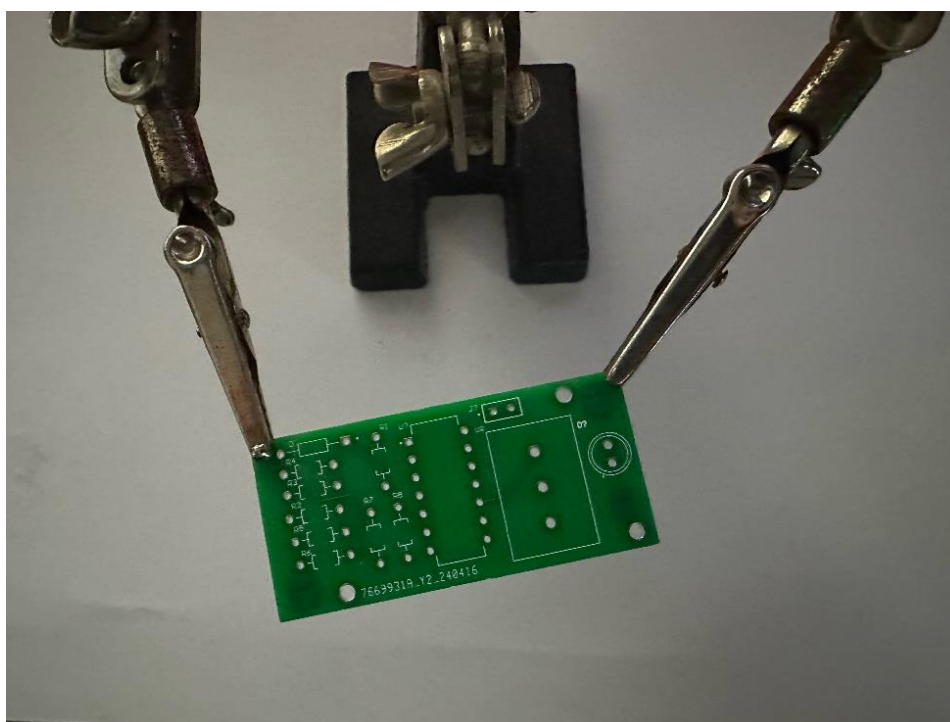
Εικόνα 45. Η ζητούμενη ένταση του ρεύματος.



Εικόνα 46. Τιμές των τάσεων στις εξόδους των τελεστικών.

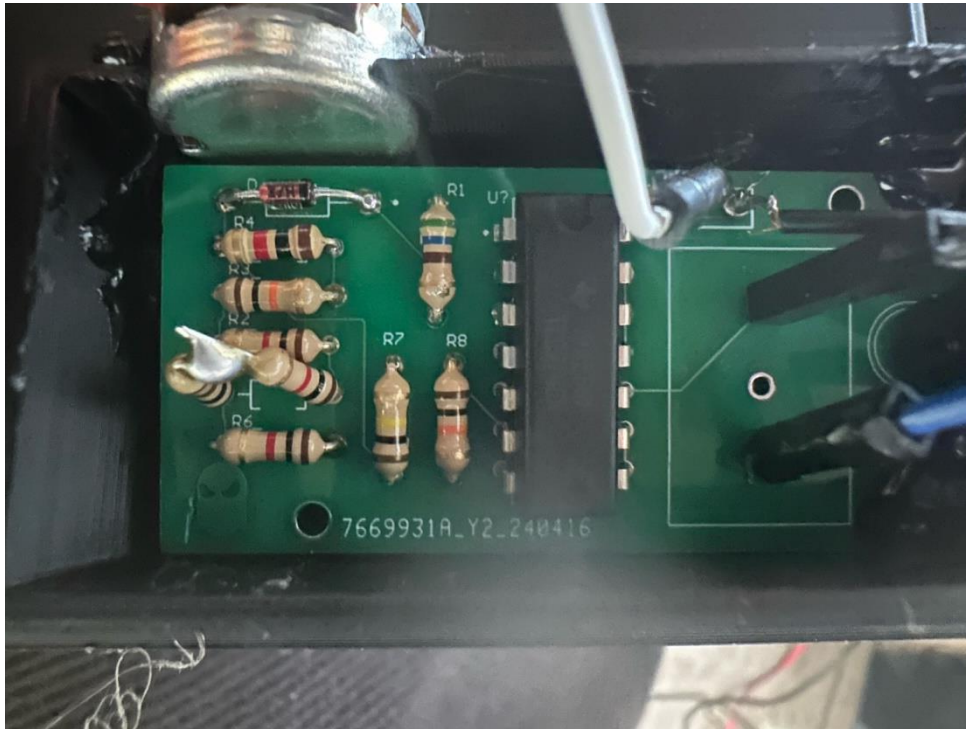
5.7 Πλακέτα με κολλήσεις

Αρχικά όταν παραλάβαμε την πλακέτα ήταν στην μορφή που φαίνεται παρακάτω.



Εικόνα 47. Η μορφή της πλακέτας πριν τις κολλήσεις.

Έπειτα αφού τοποθέτησα στις σωστές υποδοχές τα σωστά υλικά προχώρησα στην συγκόλληση τους.

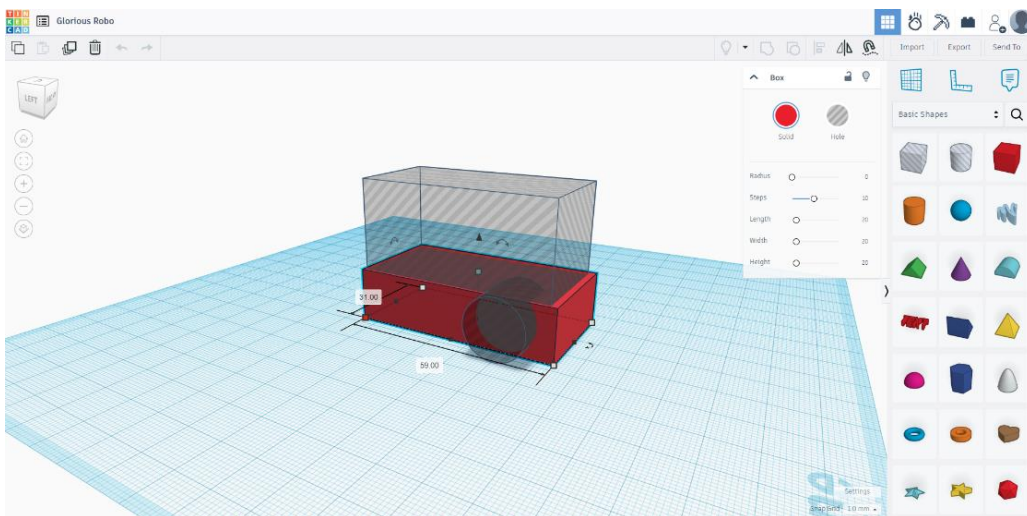


Εικόνα 48. Έτοιμη πλακέτα με τις κολλήσεις και την τοποθέτηση της.

Μετά την συγκόλληση όλων το υλικών αυτό που έκανα είναι να ελέγξουμε ότι όλα δουλεύουν όπως τα θέλουμε, με κύριο γνώμονα η ένταση του ρεύματος που παίρνουμε στην έξοδο να είναι 20mA περιστρέφοντας το ποτενσιόμετρο που χρησιμοποίησα για στην σχεδίαση για την μελλοντική μου ευκολία και ακρίβεια.

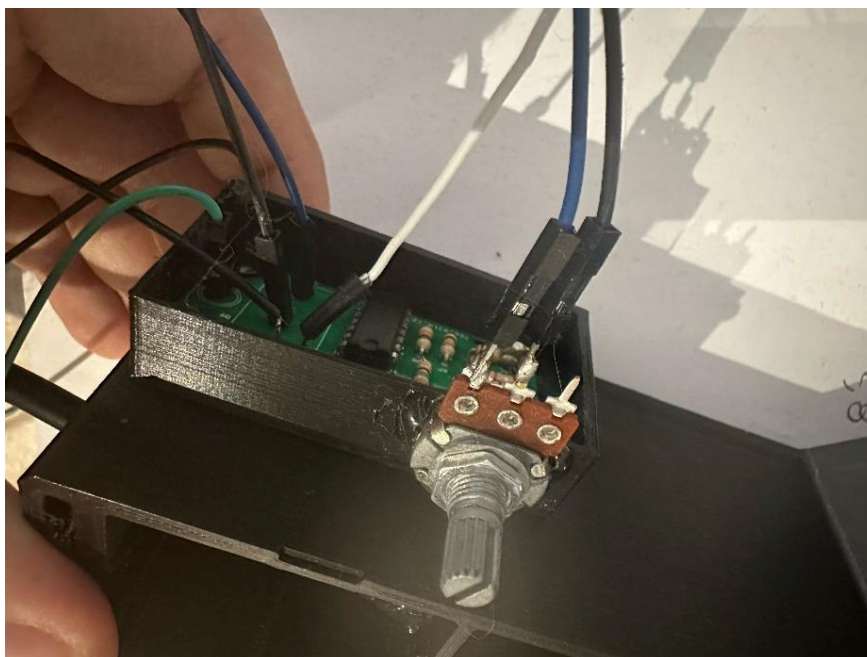
5.7.1 Διαφοροποίηση σε σχέση με το αρχικό πλάνο

Χρειάστηκε να σχεδιάσω και να εκτυπώσω άλλο ένα κομμάτι το οποίο θα μου επέτρεπε να το τοποθετήσω μέσα την πλακέτα για να είναι σταθερή καθώς και να μπορώ με εύκολο τρόπο να έχω πρόσβαση στον δείκτη του ποτενσιόμετρο. Έτσι με την βοήθεια του online εργαλείου tinkercad προχώρησα στον σχεδιασμό ενός παραλληλόγραμμου όπως είναι και η παλέτα μου με τις ανάλογες διαστάσεις.



Εικόνα 49. Σχεδιασμός έξτρα εξαρτήματος.

Στην συνέχεια τοποθέτησα την πλακέτα στο εσωτερικό του όπως φαίνεται στην εικόνα 48 και κόλλησα το συνολικό αποτέλεσμα στο εξωτερικό του κουτιού.



Εικόνα 50. Τοποθέτηση στο πλαϊνό μέρος της συσκευής.

5.8 Υλοποίηση

Το Toslink που χρησιμοποίησα είναι 2-1 (δύο εισοδοί σε μια έξοδο), είναι ένα αποκωδικοποιητής φωτοηλεκτρικών σημάτων που χρησιμοποιείται για τη μετατροπή οπτικών σημάτων Toslink σε ηλεκτρικά σήματα. Βασικός λόγος που μας βόλεψε να το χρησιμοποιήσουμε είναι οι οπτικές ίνες που περιέχει, πιο συγκεκριμένα από δύο οπτικές ίνες ανά είσοδο, ώστε να μπορούμε να κατευθύνουμε την ακτινοβολία που παράγουν τα Leds χωρίς απώλειες ή διαθλάσεις ανεξάρτητα της απόστασης από την οπή. Στο φασματοφωτόμετρο που σχεδίασα και κατασκεύασα, τοποθέτησα δυο Leds, αφότου έλεγξα τις προδιαγραφές τους, ένα μωβ χρώματος και ένα ψυχρό άσπρο στις τρύπες του Toslink 2-1 και τα σταθεροποίησα χρησιμοποιώντας μαύρη σιλικόνη για να σφραγίσω τις συνδέσεις. Η μαύρη σιλικόνη προσφέρει μια αξιόπιστη και ανθεκτική λύση για την κόλληση των Leds στις τρύπες, εξασφαλίζοντας την ασφάλεια και τη σταθερότητα της τοποθέτησής τους. Επιπλέον μονώνει τα Leds από την ακτινοβολία του περιβάλλοντος χώρου και τα αποτρέπει από το να ακτινοβολήσουν προς τα πίσω στέλνοντας όλη την ακτινοβολία μέσα στο Toslink. Με αυτήν τη μέθοδο, πέτυχα μια καλή εφαρμογή των Leds στο φασματοφωτόμετρο, εξασφαλίζοντας την αποτελεσματική λειτουργία και ακρίβεια των μετρήσεών. Τελευταίο βήμα που έκανα είναι η συγκόλληση από το θετικό πόδι του ενός Led με το αρνητικό του άλλου για να επιτύχω την σύνδεσή του σε σειρά, και όπως απεικονίζεται στην φωτογραφία που ακολουθεί κόλλησα την γείωση της πλακέτας (μαύρο καλώδιο) στον αρνητικό ποδαράκι του ενός Led και το κροκοδείλακι είναι το αρνητικό του αμπερομέτρου ενώ το θετικό συνδέεται στο θετικό hole της πλακέτας για να μπορέσω να συνδέσω το αμπερόμετρο σε σειρά και να γνωρίζω πάντα την ένταση του ρεύματος που παρέχω στο κύκλωμα.



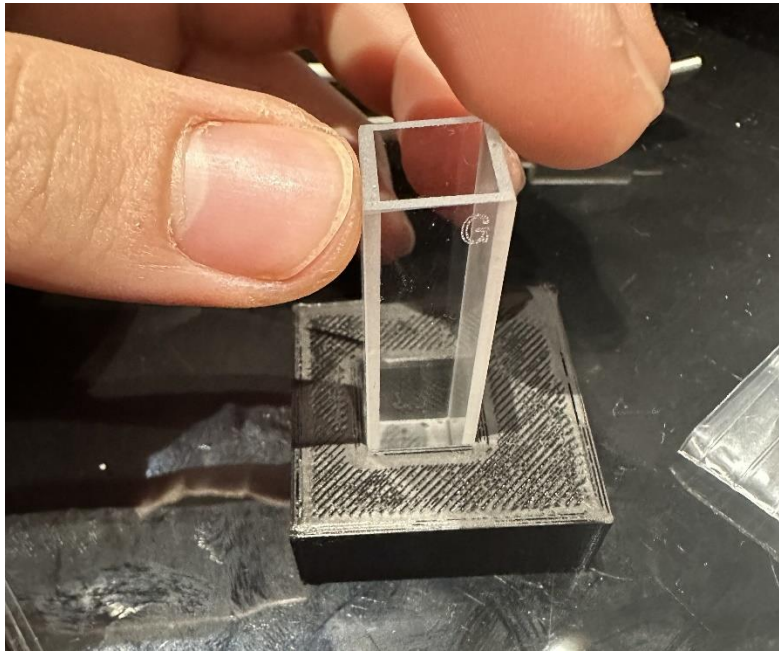
Εικόνα 51. Toslink με τις κολλήσεις και τις μονώσεις του.

Έπειτα αφού εκτύπωσα το κουτί του φασματοφωτόμετρου προσαρμόστηκα στο πως θα πρέπει να τοποθετήσω τα εξαρτήματα που θα χρησιμοποιήσω. Πριν όμως ξεκινήσω να τα τοποθετώ, για αρχή αγόρασα μεγάλα ξυραφάκια ώστε να δημιουργήσω την οπή. Τα ξυραφάκια τα τύλιξα με αλουμινόχαρτο και τα κόλλησα πάνω στο μοντέλο της τρισδιάστατης εκτύπωσης που είχαμε βγάλει για αυτόν τον σκοπό με τρόπο τέτοιο ώστε να έχω μια ευθεία του ενός χιλιοστού. Η χρήση του αλουμινόχαρτου ήταν σκόπιμη καθώς είναι ένα αδιαφανές υλικό το οποίο σημαίνει ότι δεν επιτρέπει την διέλευση του φωτός και με αυτόν τον τρόπο καταφέρνουμε να ελέγξουμε από που περνάει το φως καθώς και την ποσότητα που περάσει. Επιπλέον το αλουμινόχαρτο είναι ομοιόμορφο υλικό και μας παρέχει μια καθαρή και λεία επιφάνεια, είναι φθινό και άμεσα διαθέσιμο που μας βολεύει στην αντικατάσταση του αν χρειαστεί. Πιο σημαντικό χαρακτηριστικό που μας παρέχει είναι ο έλεγχος του μεγέθους της οπής και έτσι μπορούμε να διαχειριστούμε την έκταση της περίθλασης που είναι συχνό φαινόμενο του φωτός όταν διέρχεται από μια οπή.



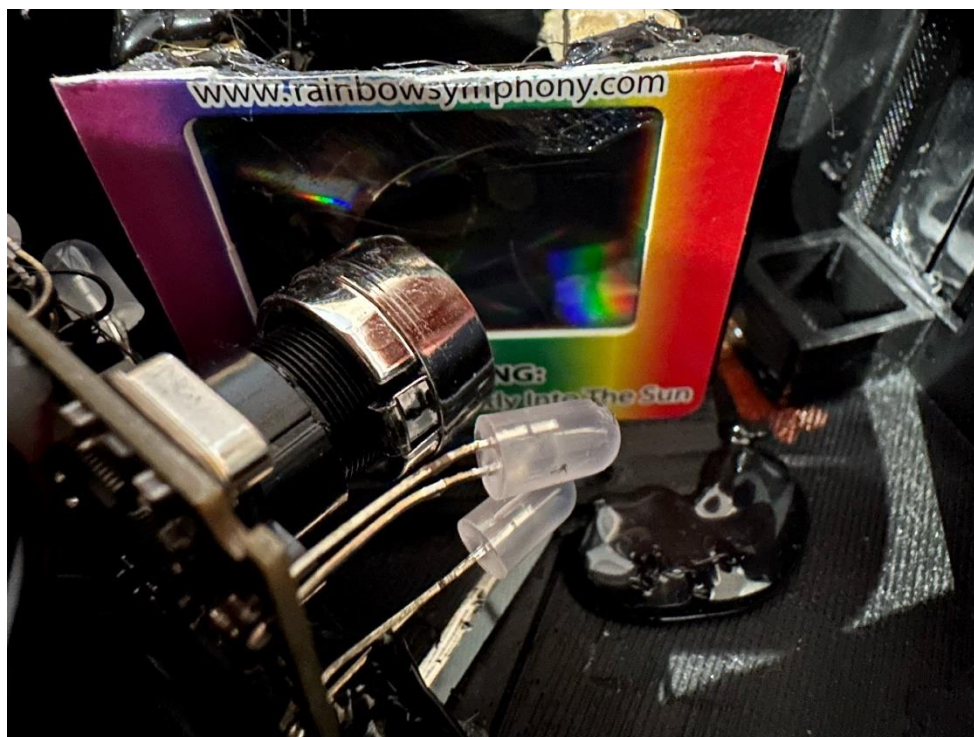
Εικόνα 52. Οπή και τοποθέτηση μέσα στην συσκευή.

Η κυβέτα που χρησιμοποιήσα είναι γυάλινη και στο φασματοφωτόμετρο αποτελεί κρίσιμη επιλογή για την αξιοπιστία και την ακρίβεια των μετρήσεων. Η γυάλινη κυβέτα παρέχει έναν ιδανικό χώρο για την τοποθέτηση του δείγματος, εξασφαλίζοντας τη σταθερότητά του κατά τη διάρκεια της μέτρησης. Επιπλέον, η βάση που σχεδιάστηκε και εκτυπώθηκε σε τρισδιάστατο εκτυπωτή αποτελεί το ιδανικό συνδυασμό με τη γυάλινη κυβέτα. Η προσαρμοσμένη βάση εξασφαλίζει τη σταθερή και ασφαλή τοποθέτηση της κυβέτας, ενώ παράλληλα επιτρέπει την εύκολη προσαρμογή του φασματοφωτόμετρου στο επιθυμητό ύψος και γωνία για την εκτέλεση των μετρήσεων. Αυτή η συνδυαστική προσέγγιση εξασφαλίζει την ακρίβεια και τη σταθερότητα του φασματοφωτόμετρου, επιτρέποντάς μας να προχωρήσουμε σε αξιόπιστες αναλύσεις με ακρίβεια και αξιοπιστία.



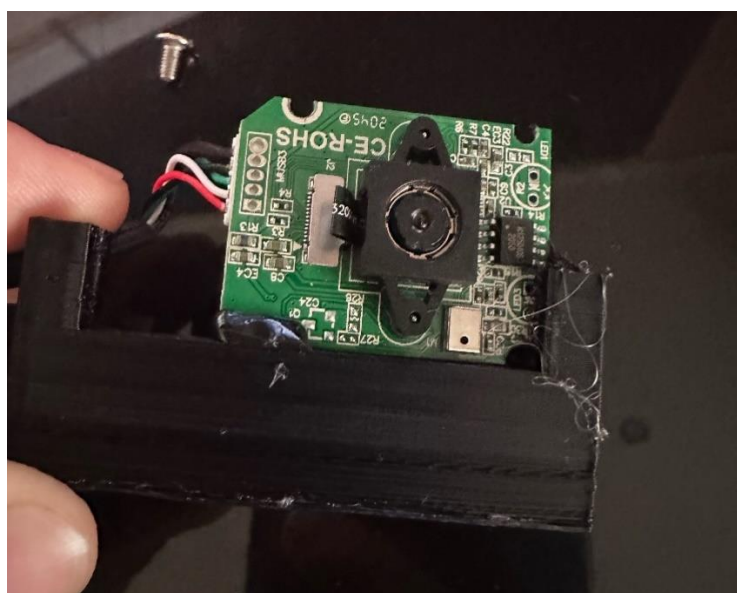
Εικόνα 53. Η βάση και η κυβέτα πριν την τοποθέτησή τους.

Το φράγμα περίθλασης 1000 γραμμών αποτελεί κρίσιμη επιλογή στην υλοποίηση του φασματοφωτόμετρου μου. Το φράγμα περίθλασης αποτελεί ένα ζωτικό σημείο στην υλοποίηση του φασματοφωτόμετρου με σκοπό τη διαχείριση του φωτός που εισέρχεται στο σύστημα, επιτρέποντας μόνο το πέρασμα του φωτός με συγκεκριμένο εύρος ζώνης. Η τοποθέτηση του φράγματος έγινε με προσοχή και ακρίβεια στην γωνία τοποθέτησης, εξασφαλίζοντας ότι η είσοδος του φωτός διέρχεται μέσω του φράγματος με τη σωστή γωνία και θέση για την απεικόνιση ολόκληρου του χρωματικού κώδικα. Η σωστή ρύθμιση της γωνίας εξασφαλίζει τη σωστή είσοδο και έξοδο του φωτός από το φράγμα περίθλασης, εξασφαλίζοντας την ακρίβεια και την αξιοπιστία των μετρήσεων στο φασματοφωτόμετρο. Η γωνία τοποθέτησης του φράγματος περίθλασης διαφέρει σε πολλές περιπτώσεις λόγω του CCD της κάμερας. Το CCD (Charge-Coupled Device) της κάμερας αποτελεί ένα βασικό στοιχείο στο φασματοφωτόμετρο, που αναλαμβάνει την ανίχνευση του φωτός και τη μετατροπή του σε ηλεκτρικό σήμα. Κρίνεται σημαντικό να επιτευχθεί ισορροπία μεταξύ της ποσότητας του διακριτικού φωτός και της ευαισθησίας του συστήματος, με τη σωστή ρύθμιση του φράγματος περίθλασης και την γωνία της κάμερας, που εξασφαλίζει την αποτελεσματική λήψη φασματικών δεδομένων με ακρίβεια και αξιοπιστία. Με αυτόν τον τρόπο, το φράγμα περίθλασης 1000 γραμμών συμβάλλει στη βελτίωση της απόδοσης και της ακρίβειας του φασματοφωτόμετρου μου.



Εικόνα 54. Φράγμα περίθλασης σταθεροποιημένο μετά την οπή και πριν την κάμερα.

Ένα επόμενο βήμα που ακολούθησα ήταν η προσαρμογή της κάμερας ώστε να χωράει στο κουτί και να είναι πιο εύκολα διαχειρίσιμη μέσα σε αυτό. Για να το επιτύχουμε αυτό, αποφάσισα να αφαιρέσω το εξωτερικό πλαστικό που εμπεριείχε την πλακέτα και τον φακό. Κατά την αφαίρεση του φακού, παρατήρησα την παρουσία ενός φίλτρου υπέρυθρων (infrared filter). Μετά από αυτό, τοποθέτησα την κάμερα στο κομμάτι που εκτύπωσα και εφάρμοσα το φίλτρο πάνω σε αυτό, καταλήγοντας στο αποτέλεσμα που φαίνεται παρακάτω. Αυτή η διαδικασία επέτρεψε την ενσωμάτωση της κάμερας στο φασματοφωτόμετρο με αποτέλεσμα μια πιο λειτουργική και εύχρηστη συσκευή.



Εικόνα 55. Τοποθέτηση της κάμερας στο αντίστοιχο print.



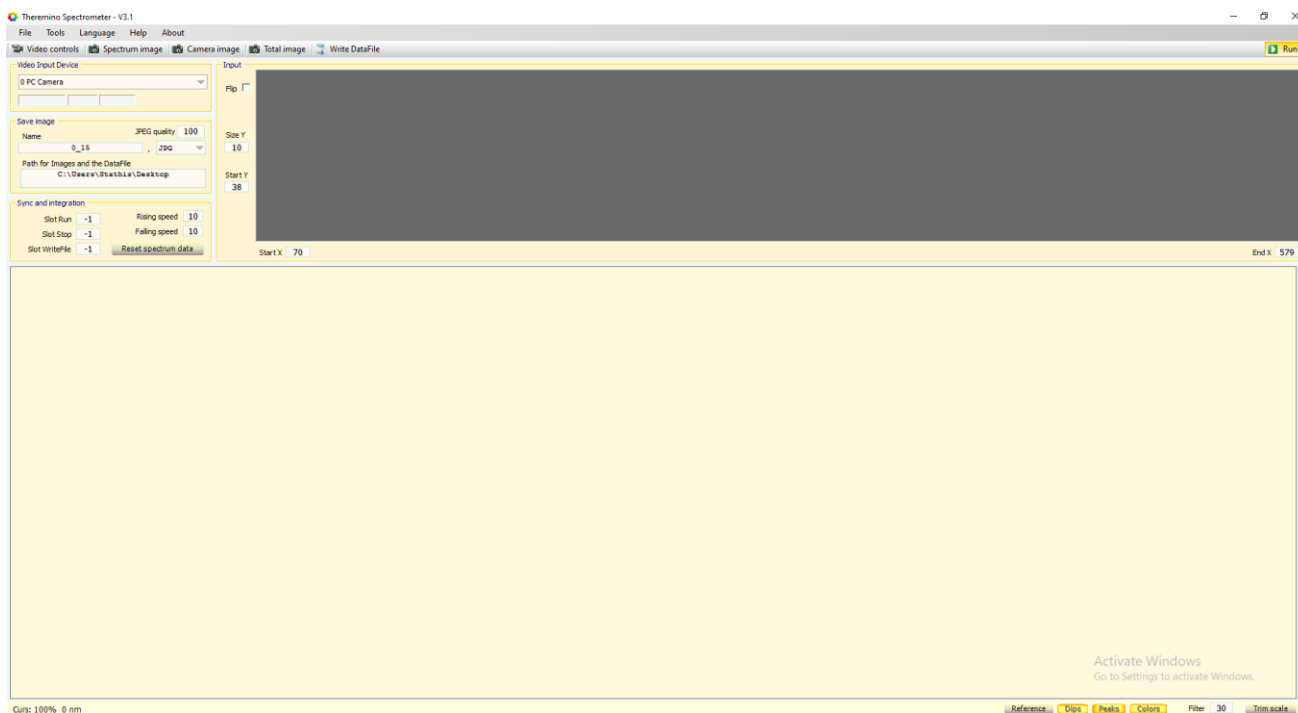
Εικόνα 56. Συνολική μορφή κατασκευής.

Έχοντας σαν πηγή τροφοδοσίας ένα παλιό τροφοδοτικό υπολογιστή πήρα τις εξόδους του που έβγαζαν 0V και 12V αντίστοιχα και αφού τις σύνδεσα στις υποδοχές τις πλακέτας και τοποθέτησα σε σειρά το αμπερόμετρο τότε έβαλα σε λειτουργία το κύκλωμα. Στο εσωτερικό του κουτιού αμέσως μετά την οπή που δημιούργησα τοποθέτησα και κόλλησα την βάση της κυβέτας με σκοπό η δέσμη φωτός που θα περνάει από την οπή να κατευθύνεται ακριβώς στο μέσω κομμάτι της κυβέτας. Η έξοδος του φωτός από την κυβέτα ακτινοβολεί στο φράγμα περίθλασης (diffraction grating). Με το πέρας της υλοποίησης της κατασκευής του φασματοφωτόμετρου ασχολήθηκα με τις ουσίες που θα χρησιμοποιήσω για την μελέτη.

5.8.1 Theremino Spectrometer

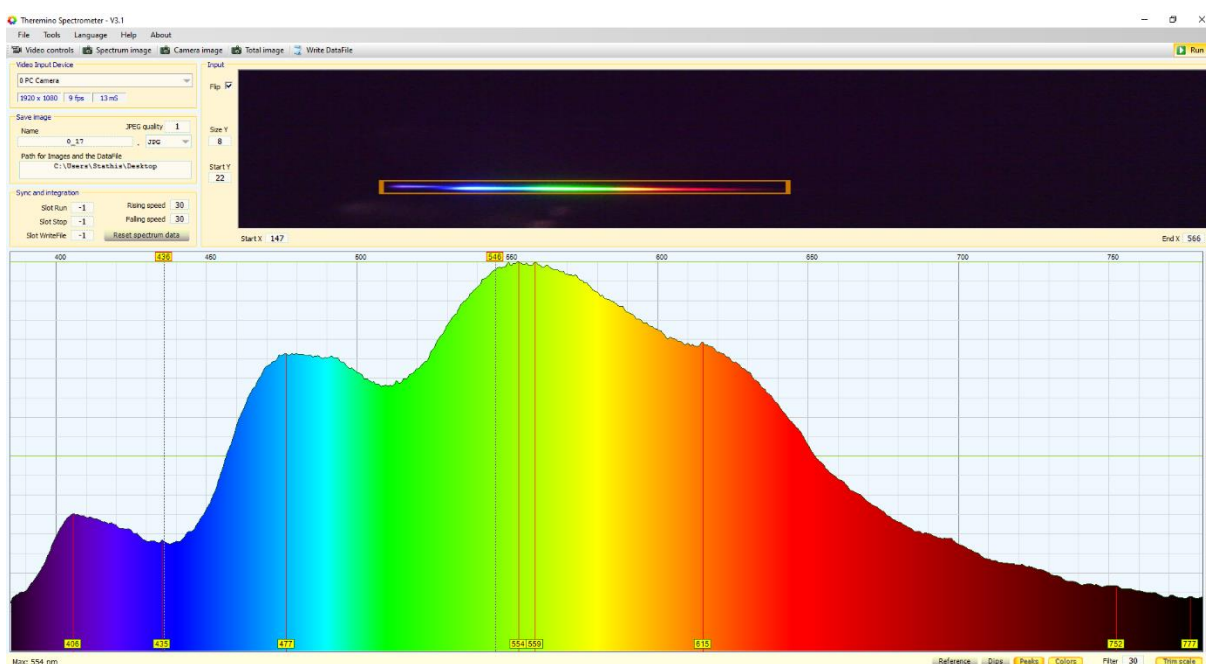
Το Theremino spectrometer είναι ένα πρόγραμμα λογισμικού που χρησιμοποιείται για την ανάλυση φασμάτων φωτός σε φασματοσκοπικές εφαρμογές. Χρησιμοποιείται συνήθως σε συστήματα DIY (Κάντο μόνος σου) ή σε πειραματικά εργαστήρια όπου η δυνατότητα ανάλυσης φασμάτων είναι απαραίτητη. Το πρόγραμμα λογισμικού λαμβάνει δεδομένα από μια φωτοανιχνευτική συσκευή, όπως μια CCD κάμερα ή μια φωτοανιχνευτική πλάκα, και αναλύει το φάσμα του φωτός που καταγράφεται από αυτήν τη συσκευή. Το πρόγραμμα επιτρέπει στους χρήστες να εκτελούν διάφορες λειτουργίες, όπως τον υπολογισμό των μετρήσεων απορρόφησης ή διαπερατότητας, την αναγνώριση φασματικών γραμμών, και την απεικόνιση των φασμάτων σε γραφική μορφή. Το Theremino spectrometer προσφέρει ένα ευέλικτο και προσιτό εργαλείο για την φασματοσκοπική ανάλυση σε ερευνητικές και εκπαιδευτικές εφαρμογές.

Στην φωτογραφία που ακολουθεί παρουσιάζεται η αρχική οθόνη του προγράμματος Theremino το οποίο θα χρησιμοποιήσουμε.



Εικόνα 57. Αρχική οθόνη του Theremino.

Μετά την ενεργοποίηση της κάμερας, προχώρησα στη σταθεροποίησή της σε μια γωνία περίπου 40 μοιρών, με σκοπό να αποφύγω την ευθύγραμμη ακτινοβολία που θα μπορούσε να πέσει απευθείας στον φακό της κάμερας. Έπειτα, προχώρησα σε πειράματα, περιστρέφοντας το φράγμα περίθλασης σε οριζόντιο άξονα, και ανακάλυψα ότι η τρέχουσα θέση ή γωνία του φράγματος, σε σχέση με την τοποθέτηση της κάμερας, επέτρεπε την απόκτηση του πλήρους φάσματος που αναζητώ. Αυτή η σωστή τοποθέτηση και ρύθμιση της κάμερας μου επέτρεψε να επιτύχω την επιθυμητή απόδοση και ακρίβεια στις μετρήσεις μου, διασφαλίζοντας την αξιόπιστη λήψη του φάσματος.



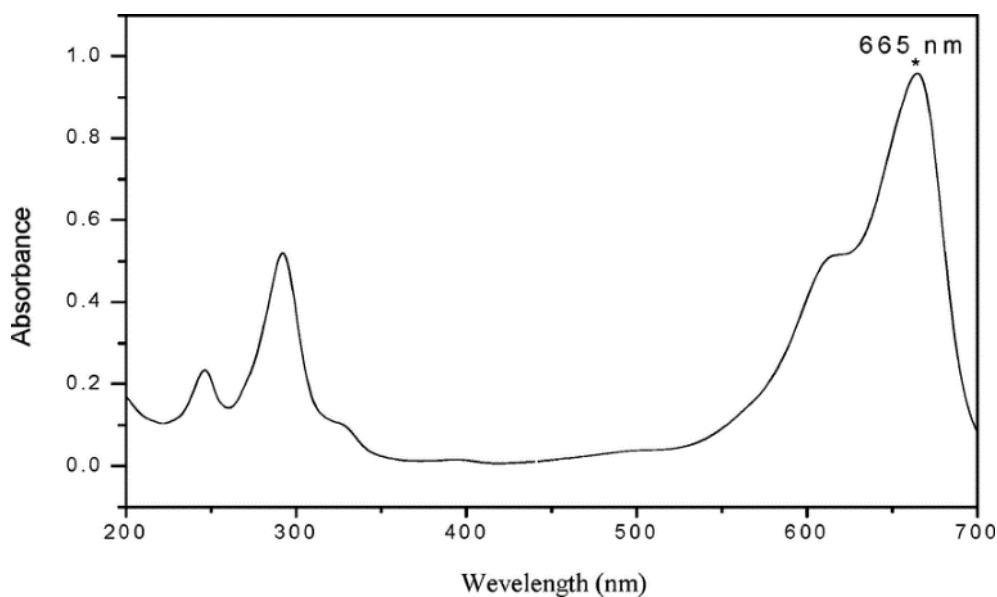
Εικόνα 58. Φάσμα transmittance χωρίς κάποια ουσία.

Για τη διεξαγωγή της διαδικασίας της βαθμονόμησης στο φασματοφωτόμετρο, τοποθέτησα δύο διαφορετικά δείγματα μέσα σε κυβέτες. Η χρήση αυτών των δειγμάτων μου επιτρέπει να προβώ στη βαθμονόμηση της γραμμής του φάσματος στον οριζόντιο άξονα. Στη φωτογραφία που ακολουθεί, στην αριστερή κυβέτα παρουσιάζεται το μπλε οινόπνευμα, όπου η παρουσία του μπλε του μεθυλενίου μας επιτρέπει να προσδιορίσουμε το μήκος κύματος. Στη δεξιά κυβέτα χρησιμοποίησα εξαιρετικά παρθένο ελαιόλαδο, το οποίο περιέχει χλωροφύλλη. Μέσω αυτού του δείγματος θα παρατηρήσουμε την παρουσία της χλωροφύλλης και θα μπορέσουμε να προβούμε σε ακριβή και αξιόπιστη βαθμονόμηση του φασματοφωτόμετρου.

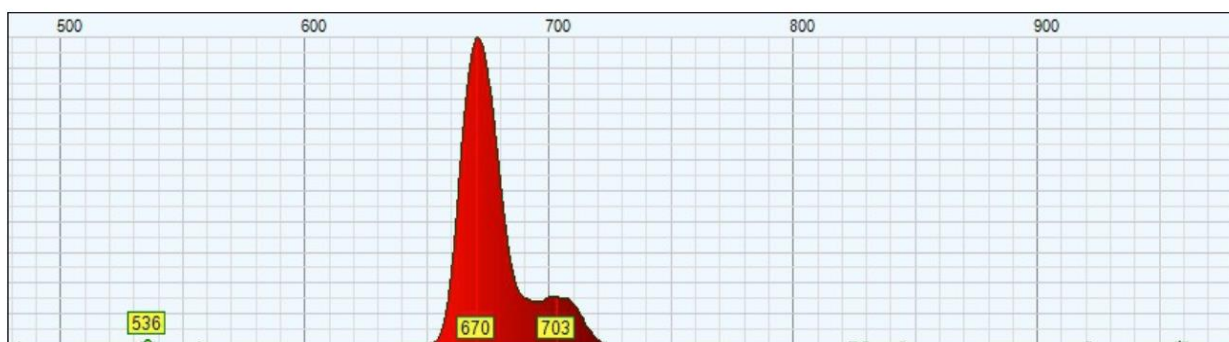


Εικόνα 59. Κυβέτες με μπλε οινόπνευμα και εξαιρετικά παρθένο ελαιόλαδο.

Αφού πραγματοποιήσα έρευνα στο διαδίκτυο, ανακαλύψαμε τις χαρακτηριστικές κυματομορφές απορρόφησης για τη χλωροφύλλη και το μπλε του μεθυλενίου. Εφαρμόζοντας αυτές τις πληροφορίες, προχώρησα στη ρύθμιση της κυματομορφής στον οριζόντιο άξονα με τη διαδικασία του calibrate. Η αποτύπωση των κυματομορφών απορρόφησης των δύο αυτών ουσιών παρουσιάζεται στο παρακάτω σχεδιάγραμμα. Μέσω αυτής της διαδικασίας βελτίωσα την ακρίβεια και την αξιοπιστία της μέτρησης στο φασματοφωτόμετρο, επιτυγχάνοντας έτσι ακριβέστερα αποτελέσματα στην ανάλυση των δειγμάτων.



Εικόνα 60. Καμπύλη απορρόφησης του μπλε οινοπνεύματος.



Extra virgin olive oil (chlorophyll)

Εικόνα 61. Καμπύλη απορρόφησης τους εξαιρετικά παρθένου ελαιόλαδου.

Ωστόσο πρέπει να προσέχουμε καθώς υπάρχουν και παράγοντες που επηρεάζουν την απορρόφηση σε ένα φασματοφωτόμετρο.

1. Σχετικά με την συγκέντρωση του δείγματος: Οι υψηλότερες συγκεντρώσεις του δείγματος έχουν ως αποτέλεσμα μεγαλύτερη απορρόφηση φωτός. Αυτό μας περιγράφει και μπορεί και υπολογίζεται από τον νόμο Beer-Lambert, ο οποίος μας λέει ότι η απορρόφηση σε μια ουσία είναι ευθέως ανάλογη με τη συγκέντρωση.
2. Το μήκος διαδρομής (ή πάχος κυβέτας): Που είναι η απόσταση που διανύει το φως μέσα στο δείγμα και επηρεάζει την απορρόφηση. Τα μεγαλύτερα μήκη διαδρομής μας οδηγούν σε μεγαλύτερη απορρόφηση, καθώς περισσότερο φως μπορεί και αλληλοεπιδρά με το δείγμα.

Σε ένα φασματοφωτόμετρο, η μαθηματική εξίσωση που περιγράφει τη σχέση μεταξύ απορρόφησης, συγκέντρωσης, μήκους διαδρομής και μοριακής απορρόφησης (ή μοριακού συντελεστή εξάλειψης) βασίζεται στον νόμο Beer-Lambert. Αυτός ο νόμος μπορεί να εκφραστεί ως εξής:

$$A = \epsilon \cdot c \cdot l$$

Όπου:

A είναι η απορρόφηση,

ϵ είναι η μοριακή απορροφητικότητα της ουσίας σε ένα συγκεκριμένο μήκος κύματος,

ϵ είναι η συγκέντρωση της ουσίας στο διάλυμα

l είναι το μήκος διαδρομής του φωτός μέσα από το διάλυμα

Η παραπάνω εξίσωση μας δείχνει ότι η απορρόφηση του φωτός από μια ουσία είναι ευθέως ανάλογη με τη συγκέντρωση του είδους που απορροφάτε, το μήκος διαδρομής και τη μοριακή απορροφητικότητα του δείγματος.

Το μήκος διαδρομής (l) το πάχος της κυβέτας (κυψελίδας) στην οποία εισάγουμε το δείγμα.

Για παράδειγμα, εάν το μήκος της διαδρομής είναι 1 cm, η εξίσωση γίνεται:

$$A = \epsilon \cdot c \cdot l$$

$$A = \epsilon \cdot c$$

Εάν το μήκος διαδρομής είναι διαφορετικό, αντικαθιστούμε το 1 με την πραγματική τιμή του μήκους διαδρομής αλλά πάντα προσέχουμε να είναι σε εκατοστά.

3. Φύση της Ουσίας: Διαφορετικές ουσίες έχουν διαφορετικές ιδιότητες απορρόφησης. Η συγκεκριμένη μοριακή δομή και σύνθεση επηρεάζουν το πόσο φως απορροφά μια ουσία σε ένα δεδομένο μήκος κύματος.

Μοριακή Δομή: Η μοριακή δομή μιας ουσίας καθορίζει το φάσμα απορρόφησης της, το οποίο είναι το σχέδιο των μηκών κύματος του φωτός που απορροφά. Διαφορετικά μόρια έχουν και διαφορετική διάταξη ατόμων και ηλεκτρονίων, με αποτέλεσμα τις μοναδικές ιδιότητες απορρόφησης. Για παράδειγμα, συζευγμένα συστήματα σε μόρια μπορεί να έχουν ως αποτέλεσμα την απορρόφηση του ορατού φωτός, προκαλώντας έγχρωμες ενώσεις.

Χημική Σύνθεση: Η χημική σύνθεση της ουσίας επηρεάζει επίσης τη συμπεριφορά απορρόφησης της. Για παράδειγμα, οι ουσίες που περιέχουν μέταλλα μεταπτώσεως συχνά εμφανίζουν έντονες ζώνες απορρόφησης λόγω ηλεκτρονικών μεταπτώσεων εντός των μεταλλικών ιόντων.

Συγκέντρωση απορροφητικών ειδών: Η συγκέντρωση του απορροφητικού είδους στο δείγμα επηρεάζει άμεσα την έκταση της απορρόφησης. Σύμφωνα με το νόμο Beer-Lambert, η απορρόφηση είναι ευθέως ανάλογη με τη συγκέντρωση. Επομένως, μια υψηλότερη συγκέντρωση απορροφητικών ειδών θα οδηγήσει σε μεγαλύτερη απορρόφηση φωτός. **Μοριακή απορρόφηση (συντελεστής εξαφάνισης):** Αυτό είναι ένα μέτρο του πόσο ισχυρά μια ουσία απορροφά το φως σε ένα συγκεκριμένο μήκος κύματος. Εξαρτάται τόσο από τη μοριακή δομή όσο και από τη χημική σύσταση της ουσίας. Ουσίες με υψηλότερη μοριακή απορροφητικότητα θα απορροφήσουν περισσότερο φως σε δεδομένη συγκέντρωση και μήκος διαδρομής.

Ειδικότητα Απορρόφησης: Ορισμένες ουσίες απορροφούν φως μόνο σε συγκεκριμένα μήκη κύματος λόγω της φύσης των ηλεκτρονικών τους μεταβάσεων. Αυτή η ειδικότητα μπορεί να αξιοποιηθεί για επιλεκτική ανάλυση ή ανίχνευση συγκεκριμένων ενώσεων σε ένα μείγμα.

Η κατανόηση της φύσης της ουσίας που αναλύεται είναι ζωτικής σημασίας για την ακριβή ερμηνεία των φασμάτων απορρόφησης.

4. Μήκος κύματος φωτός: Κάθε ουσία έχει συγκεκριμένα χαρακτηριστικά απορρόφησης σε διαφορετικά μήκη κύματος. Η επιλογή του μήκους κύματος επηρεάζει την ευαισθησία και την ακρίβεια της μέτρησης.
5. Βαθμονόμηση οργάνου: Το φασματοφωτόμετρο πρέπει να είναι σωστά βαθμονομημένο για να διασφαλίζονται ακριβείς μετρήσεις. Παράγοντες όπως το περιβαλλοντικό φως, η μετατόπιση της γραμμής βάσης και ο θόρυβος του οργάνου μπορούν να επηρεάσουν την ακρίβεια των μετρήσεων απορρόφησης.

6. Θερμοκρασία και pH: Οι αλλαγές στη θερμοκρασία και το pH μπορούν να αλλάξουν τη μοριακή δομή του δείγματος, επηρεάζοντας τις ιδιότητες απορρόφησής του.

Θερμοκρασία:

Επίδραση στους μοριακούς κραδασμούς: Οι αλλαγές στη θερμοκρασία μπορούν να αλλάξουν τα επίπεδα δόνησης της ενέργειας των μορίων. Αυτό μπορεί να επηρεάσει το φάσμα απορρόφησης, ιδιαίτερα στην υπέρυθη περιοχή, όπου οι μοριακές δονήσεις είναι εμφανείς. Καθώς η θερμοκρασία αυξάνεται, τα μόρια μπορεί να δονούνται πιο έντονα, οδηγώντας σε διεύρυνση ή μετατόπιση των κορυφών απορρόφησης.

Θερμική σταθερότητα δειγμάτων: Η θερμοκρασία μπορεί να επηρεάσει τη σταθερότητα των δειγμάτων. Ορισμένες ουσίες μπορεί να υποστούν θερμική αποσύνθεση ή δομικές αλλαγές σε υψηλές θερμοκρασίες, επηρεάζοντας τις ιδιότητες απορρόφησής τους. Είναι απαραίτητο να διατηρούνται σταθερές θερμοκρασίες κατά τις φασματοφωτομετρικές μετρήσεις για να διασφαλίζεται η ακρίβεια και η αναπαραγωγικότητα των αποτελεσμάτων.

pH:

Ισορροπίες ιονισμού: Πολλά μόρια παρουσιάζουν αλλαγές στις ιδιότητες απορρόφησης με διακυμάνσεις στο pH λόγω των ισορροπιών ιονισμού. Για παράδειγμα, όξινες ή βασικές λειτουργικές ομάδες σε μόρια μπορεί να υποστούν πρωτονίωση ή αποπρωτονίωση καθώς αλλάζει το pH, οδηγώντας σε μετατοπίσεις στα φάσματα απορρόφησης.

Συνοπτικά, η θερμοκρασία και το pH μπορούν να επηρεάσουν σημαντικά τις ιδιότητες απορρόφησης σε ένα φασματοφωτόμετρο επηρεάζοντας τους μοριακούς κραδασμούς, τις ισορροπίες ιονισμού, τη σταθερότητα του δείγματος και τις αλληλεπιδράσεις του ρυθμιστικού διαλύματος. Ο σωστός έλεγχος και παρακολούθηση της θερμοκρασίας και του pH είναι ουσιαστικής σημασίας για τη λήψη ακριβών και αναπαραγωγικών φασματοφωτομετρικών μετρήσεων, ιδιαίτερα σε εφαρμογές που περιλαμβάνουν ευαίσθητα δείγματα ή διεργασίες που εξαρτώνται από το pH.

7. Καθαρότητα δείγματος: Οι ακαθαρσίες ή κατάλοιπα στο δείγμα μπορεί να επηρεάσουν τις μετρήσεις απορρόφησης. Είναι σημαντικό να διασφαλιστεί ότι το δείγμα είναι καθαρό και απαλλαγμένο από ρύπους.
8. Επίδρασεις διαλύτη: Ο διαλύτης στον οποίο διαλύεται το δείγμα μπορεί να επηρεάσει τις ιδιότητες απορρόφησής του. Διαφορετικοί διαλύτες μπορεί να αλληλοεπιδράσουν διαφορετικά με τα μόρια του δείγματος, επηρεάζοντας το φάσμα απορρόφησης.

5.8.2 Βαθμονόμηση (Calibration)

Η βαθμονόμηση στη φασματοσκοπία είναι μια κρίσιμη διαδικασία που στοχεύει στη διασφάλιση ακριβών και αξιόπιστων μετρήσεων των οπτικών ιδιοτήτων των υλικών. Τα φασματοσκοπικά όργανα, όπως τα φασματοφωτόμετρα βασίζονται στη βαθμονόμηση για να καθορίσουν μια σχέση μεταξύ του ανιχνευόμενου σήματος και της συγκέντρωσης της αναλυόμενης ουσίας ή άλλων παραμέτρων ενδιαφέροντος.

Η διαδικασία βαθμονόμησης συνήθως περιλαμβάνει πολλά βασικά βήματα:

Επιλογή προτύπων βαθμονόμησης: Τα κατάλληλα πρότυπα βαθμονόμησης επιλέγονται με βάση τις γνωστές οπτικές τους ιδιότητες και τη συμβατότητά τους με την τεχνική και το όργανο μέτρησης. Αυτά τα πρότυπα θα πρέπει να καλύπτουν το εύρος των συγκεντρώσεων αναλυόμενης ουσίας ή των οπτικών χαρακτηριστικών που αναμένονται στα δείγματα που αναλύονται.

Προετοιμασία των καμπυλών βαθμονόμησης: Οι καμπύλες βαθμονόμησης ή οι εξισώσεις βαθμονόμησης καθορίζονται με τη μέτρηση της απόκρισης του οργάνου σε γνωστές συγκεντρώσεις ή ιδιότητες των προτύπων βαθμονόμησης. Αυτές οι μετρήσεις δημιουργούν μια σειρά σημείων δεδομένων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή μιας καμπύλης βαθμονόμησης που συσχετίζει το μετρούμενο σήμα με τη συγκέντρωση ή την ιδιότητα της αναλυόμενης ουσίας.

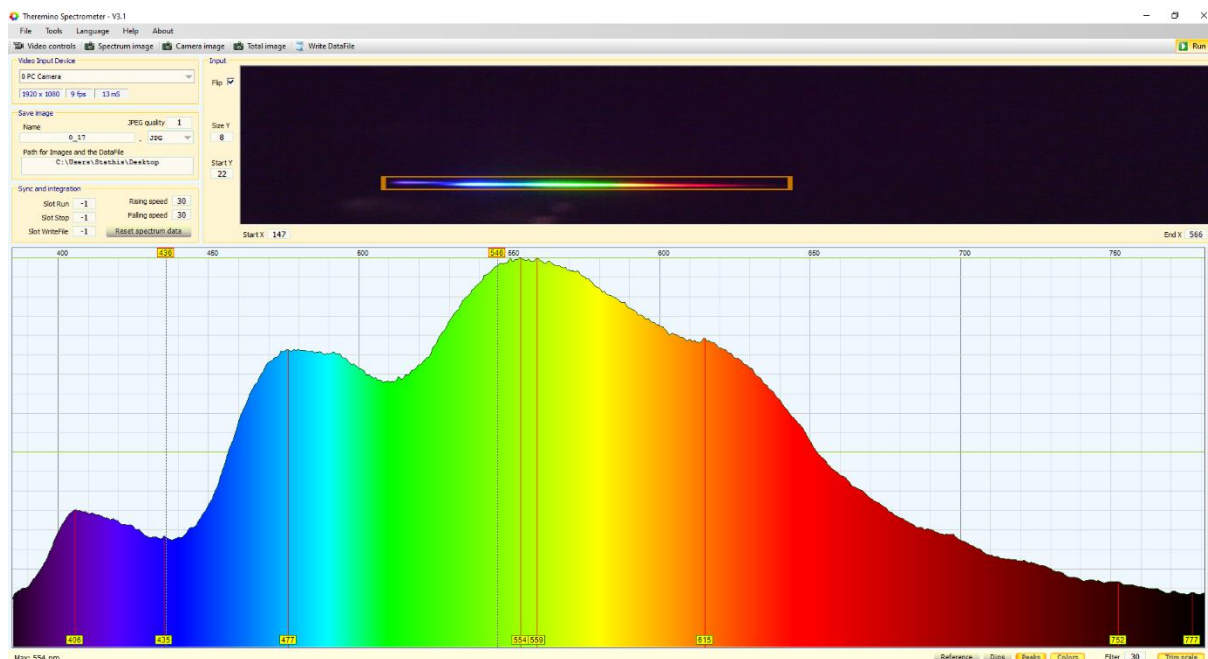
Ανάλυση των δεδομένων και η προσαρμογή καμπύλης: Μόλις συλλεχθούν τα δεδομένα βαθμονόμησης, αναλύονται για να προσδιοριστεί το καλύτερο μαθηματικό μοντέλο ή καμπύλη που περιγράφει τη σχέση μεταξύ του μετρούμενου σήματος και της συγκέντρωσης ή ιδιότητας της αναλυόμενης ουσίας. Αυτό μπορεί να περιλαμβάνει γραμμική παλινδρόμηση, πολυωνυμική προσαρμογή ή άλλες τεχνικές προσαρμογής καμπύλης.

Επικύρωση και ποιοτικός έλεγχος: Το μοντέλο ή η καμπύλη βαθμονόμησης επικυρώνεται για να διασφαλιστεί η ακρίβεια και η αξιοπιστία του. Αυτό μπορεί να περιλαμβάνει την αξιολόγηση της γραμμικότητας, της ευαισθησίας και της ακρίβειας της καμπύλης βαθμονόμησης μέσω στατιστικής ανάλυσης και μέτρων ποιοτικού ελέγχου.

Βαθμονόμηση ρουτίνας: Εκτελούνται τακτικοί έλεγχοι και προσαρμογές βαθμονόμησης για την παρακολούθηση και τη διατήρηση της ακρίβειας και της αξιοπιστίας των φασματοσκοπικών μετρήσεων με την πάροδο του χρόνου.

Ιχνηλασιμότητα και τεκμηρίωση: Οι διαδικασίες βαθμονόμησης θα πρέπει να συμμορφώνονται με τα καθιερωμένα πρότυπα και τις κατευθυντήριες γραμμές για να διασφαλίζεται η ιχνηλασιμότητα σε αναγνωρισμένα πρότυπα μετρήσεων. Λεπτομερής τεκμηρίωση των διαδικασιών βαθμονόμησης, των αποτελεσμάτων και τυχόν προσαρμογών που έγιναν στο όργανο θα πρέπει να τηρούνται για σκοπούς διασφάλισης ποιότητας και ελέγχου.

Συντήρηση και παρακολούθηση ρουτίνας: Η βαθμονόμηση δεν είναι μια εφάπαξ διαδικασία, αλλά απαιτεί περιοδική επαλήθευση και επαναβαθμονόμηση για τη διατήρηση της ακρίβειας της μέτρησης με την πάροδο του χρόνου. Οι τακτικοί έλεγχοι απόδοσης, οι έλεγχοι βαθμονόμησης οργάνων με χρήση πιστοποιημένων υλικών αναφοράς και η παρακολούθηση για ολίσθηση ή αλλαγές στην απόκριση του οργάνου είναι βασικοί για τη διασφάλιση της συνεχούς αξιοπιστίας των φασματοσκοπικών μετρήσεων.



Εικόνα 62. Φάσμα διαπερατότητας.

Στην παραπάνω φωτογραφία απεικονίζεται η το φάσμα που λαμβάνουμε από την κατασκευή μας χωρίς να έχουμε τοποθετήσει κάποια ουσία μέσα στην κυβέτα. Παρατηρούμε ότι έχουμε όλη την φασματική γραμμή ξεκινώντας από το κόκκινο, πορτοκαλί, κίτρινο, πράσινο, γαλάζιο, μπλε, και τελειώνοντας στο μωβ. Στην συγκεκριμένη φωτογραφία έχουμε ήδη κάνει την βαθμονόμηση στον οριζόντιο άξονα και το βλέπουμε από το εξωτερικό πορτοκαλί περίβλημα που έχει το φάσμα μας.

Τον οριζόντιο άξονα τον ονομάζουμε X , ο άξονας αυτός αντιπροσωπεύει την συχνότητα μετρούμενη σε Hertz, με αύξουσα τιμή των συχνοτήτων από αριστερά προς τα δεξιά.

Ο κάθετος άξονας Y , μας υποδεικνύει την ένταση του σήματος ή το επίπεδο της ισχύος του. Με τις υψηλότερες κορυφές αντιπροσωπεύουμε τα ισχυρότερα σήματα στην εκάστοτε συχνότητα (σε ποσοστά επι τις 100).

Για να καταφέρουμε να το φτάσουμε σε αυτό το σημείο αρχικά μεταβάλλαμε την τιμή του start Y έτσι ώστε η αρχή της κάτω γραμμής του εικονιζόμενου παραλληλόγραμμου να εμφανιστεί πιο ψηλά σε σχέση με την default ρύθμιση. Από την στιγμή που το ανεβάσαμε την κάτω γραμμή στο επιθυμητό ύψος τότε ξεκινήσαμε να πειραματιζόμαστε με την τιμή του size Y καθώς είναι η τιμή του πάχους του ορθογωνίου, και κατά αυτόν τον τρόπο καταλήξαμε στο αποτέλεσμα που βλέπουμε ως προς το ύψος. Επόμενο βήμα που ακολουθήσαμε είναι η προσαρμογή του επιθυμητού πλάτους, αυτό το πετύχαμε μεταβάλλοντας το start X ώστε η αριστερή κάθετη γραμμή του παραλληλόγραμμου να μετατοπιστεί πιο δεξιά δηλαδή πιο κοντά στο κόκκινο.

Επιπλέον, μεταβάλλαμε την τιμή του end X , ώστε να μετακινηθεί προς τα αριστερά, πιο κοντά στο τέλος του φάσματος λίγο πριν το μωβ. Επιπρόσθετος μια διαφοροποίηση που έχουμε στις ρυθμίσεις του προγράμματος είναι η ταχύτητα ανόδου (Rising) και πτώσης (Falling), οι οποίες by default ήταν στην προεπιλεγμένη τιμή 30 και οι τιμές του φάσματος ανεβοκατέβαιναν με πιο γρήγορους και έντονους ρυθμούς, έτσι για δικιά μας ευκολία μειώσαμε αυτήν την τιμή στο 10 για να έχουμε πιο ομαλές μεταβολές των τιμών.

5.9 Διαπερατότητα (Transmittance) και απορρόφηση (Absorbance)

Στη φασματοφωτομετρία, η διαπερατότητα και η απορρόφηση είναι βασικοί ορισμοί που χρησιμοποιούνται για να ποσοτικοποιήσουμε την αλληλεπίδραση του φωτός με ένα δείγμα. Η διαπερατότητα είναι η ποσότητα του φωτός που περνάει από το δείγμα και αναφέρεται στο κλάσμα του προσπίπτοντος φωτός που εισέρχεται σε ένα δείγμα και εξέρχεται στην άλλη πλευρά.

Μπορεί να εκφραστεί σαν ποσοστό επι τις εκατό ή μια δεκαδική τιμή από 0 έως 1. Όσο υψηλότερη η τιμή της διαπερατότητας τόσο περισσότερο φως είναι που διέρχεται από το δείγμα. Ο μαθηματικός τύπος της διαπερατότητας είναι ο ακόλουθος:

$$T = \frac{I}{I_0}$$

I_0 : είναι η ένταση του προσπίπτοντος φωτός (intensity of incident light)

I : είναι η ένταση του μεταδιδόμενου φωτός (intensity of transmitted light)

Επειδή είναι αναλογία δεν έχει μονάδα μέτρησης, είναι καθαρός αριθμός.

Η απορρόφηση, από την άλλη πλευρά, μετρά την ποσότητα φωτός που απορροφάτε από το δείγμα σε ένα συγκεκριμένο μήκος κύματος. Οι τιμές απορρόφησης κυμαίνονται από 0 έως άπειρο, με την υψηλότερη απορρόφηση να υποδηλώνει την μεγαλύτερη ποσότητα του φωτός που απορροφάτε από το δείγμα.

Αν η το δείγμα απορρόφηση μεγάλη ποσότητα του προσπίπτοντος φωτός τότε η ποσότητα του μεταδιδόμενου φωτός θα είναι μικρότερη.

$$T \ll 1$$

Αν δεν απορροφήσει καθόλου τότε έχουμε ισότητα σε προσπίπτον και μεταδιδόμενο φως.

$$T = 1$$

Το T (Transmittance) δεν πρέπει ποτέ να είναι μεγαλύτερο από 1 καθώς αυτό σημαίνει ότι περισσότερη ποσότητα φωτός βγήκε από το δείγμα παρά μπήκε

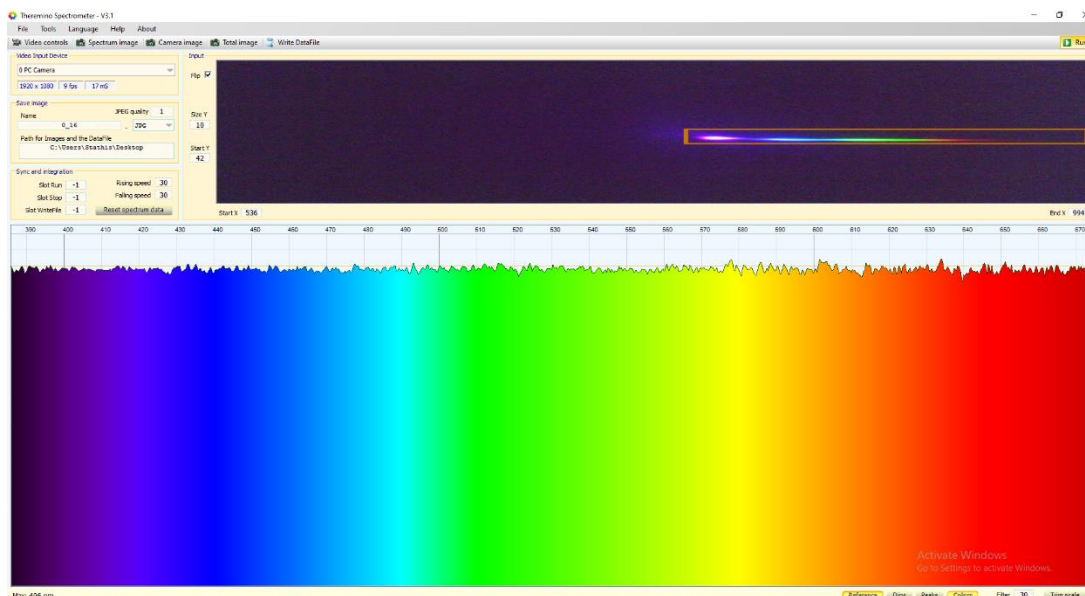
$$A = -\log(T) = -\log\left(\frac{I}{I_0}\right)$$

Ο παραπάνω λόγος είναι αντίστροφος ανάλογος με το transmittance, όσο ανεβαίνει το transmittance μεγαλώνει το \log μειώνεται και το absorbance μειώνεται εξίσου. Αντίστοιχα αν το transmittance μειωθεί τότε αυξάνεται το \log και αυξάνεται παράλληλα και η απορρόφηση.

Με το φασματοφωτόμετρο μπορώ μεταβάλλοντας τις ρυθμίσεις του προγράμματος Theremino να μετρήσω τη διαπερατότητα και την απορρόφηση ώστε να αναλύσω τα αποτελέσματα τους.

Ωστόσο στην εργασία μου δεν μπορώ να χρησιμοποιήσω τους παραπάνω τύπους καθώς χρησιμοποιώ κάμερα για την είσοδο των δεδομένων στο πρόγραμμα. Με την κατασκευή μου μπορούν να μετρηθούν μόνο τα μήκη κύματος και όχι το ποσό του φωτός καθώς όλες οι κάμερες η απόκριση που λαμβάνουμε δεν είναι γραμμική με αποτέλεσμα να μην μπορούμε να έχουμε ποσοτικές μετρήσεις.

Τέλος, η χρήση της επιλογής Reference στο Theremino την οποία χρησιμοποίησα κατά την διάρκεια των μετρήσεων μου καθώς ήταν αναγκαία για να πάρω την απεικόνιση της ποσοστιαίας απορρόφησης.



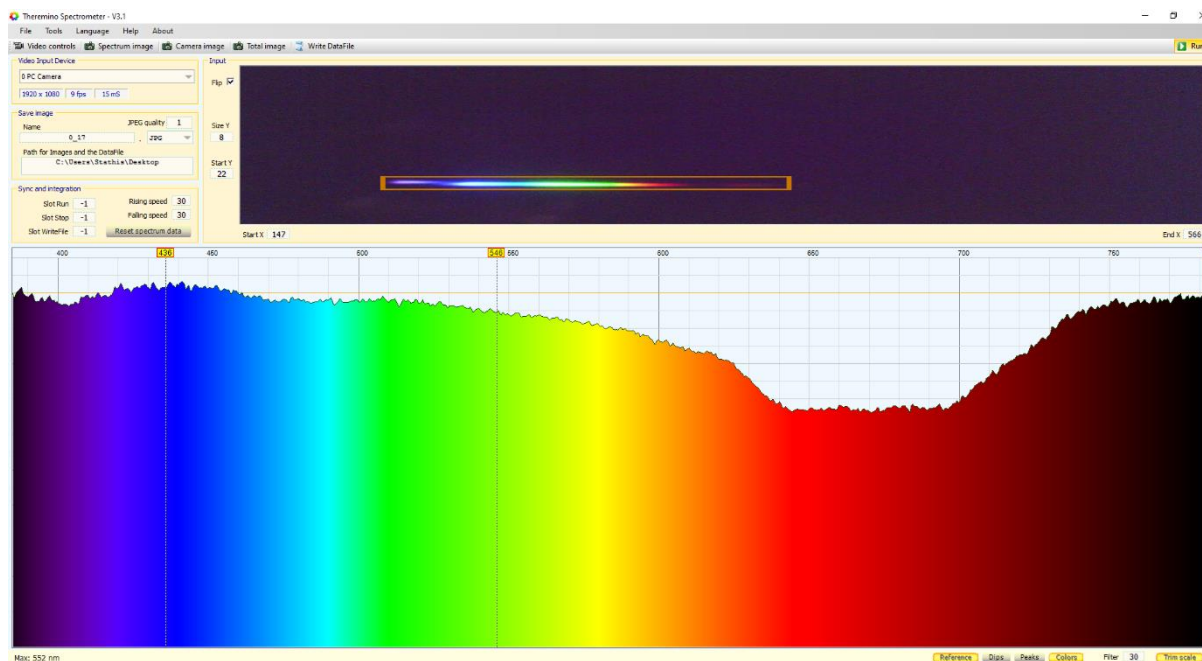
Εικόνα 63. Reference του Theremino.

5.10 Έλεγχος των ουσιών

Σε κάποια δείγματα θα παρατηρήσουμε ότι το φάσμα ξεφεύγει και πάνω από το 100% του reference, αυτό συμβαίνει λόγω του συντελεστή που πολλαπλασιάζεται η κυματομορφή στο κάθε μήκος κύματος για να γίνει η παραπάνω ευθεία γραμμή. Όσο πιο μεγάλος ο συντελεστής πολλαπλασιασμού τόσο πιο ευάλωτο είναι στον θόρυβο.

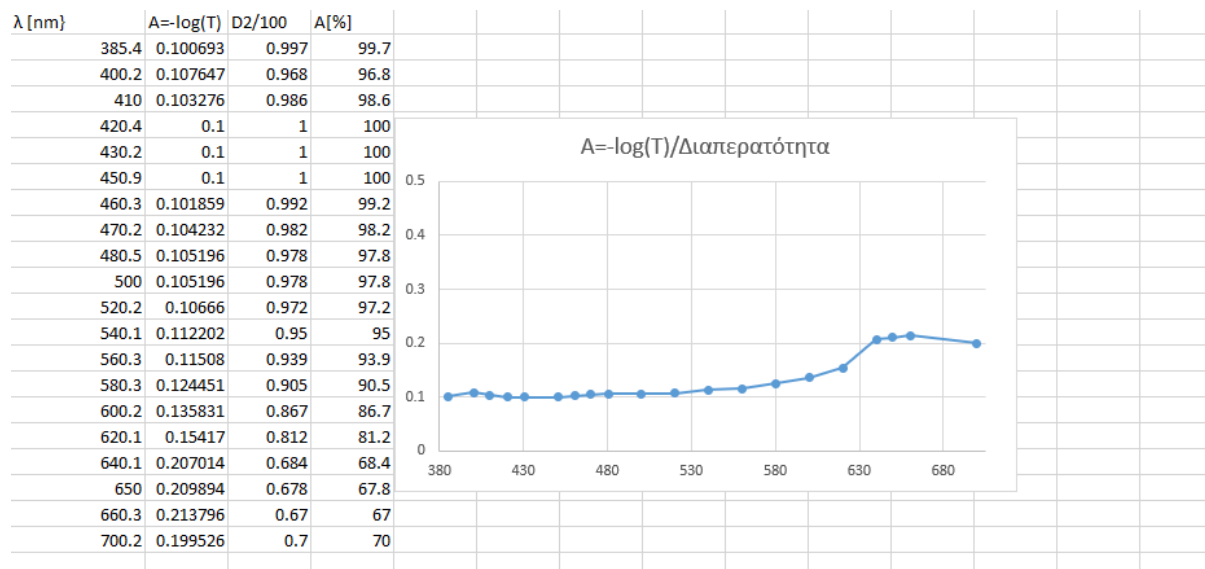
5.10.1 Μπλε Φωτιστικό Οινόπνευμα

Η απορρόφηση του μπλε οινοπνεύματος μετά τις μετρήσεις που πήρα απεικονίζεται με τον παρακάτω τρόπο. Παρατηρούμε ότι η τα μόρια από τα οποία αποτελείται δεν απορροφούν υψηλά ποσοστά της ακτινοβολία στο μωβ και καθόλου στο μπλε. Ωστόσο όσο αυξάνεται το μήκος κύματος παρατηρούμε να αυξάνεται το ποσοστό της απορρόφησης σταδιακά 625nm, και μετά μια πιο απότομη αύξηση στην περιοχή του κόκκινου.



Εικόνα 64. Απορρόφηση Μπλε Φωτιστικού Οινοπνεύματος.

Η διαπερατότητα ωστόσο ήταν της παρακάτω μορφής. Στην περίπτωση της διαπερατότητας παρατηρούμε ότι η κυματομορφή μας είναι αντίθετη με την κυματομορφή της απορρόφησης, σε όποια σημεία η απορρόφηση αυξάνεται τότε η διαπερατότητα αυξάνεται. Εδώ παρατηρούμε ότι η τιμή της διαπερατότητας αυξάνεται σταδιακά από τα 480nm, μέχρι τα 620nm όπου από το σημείο εκείνο και μετά παρατηρούμε μια πιο απότομη αύξηση της τιμής της διαπερατότητας.

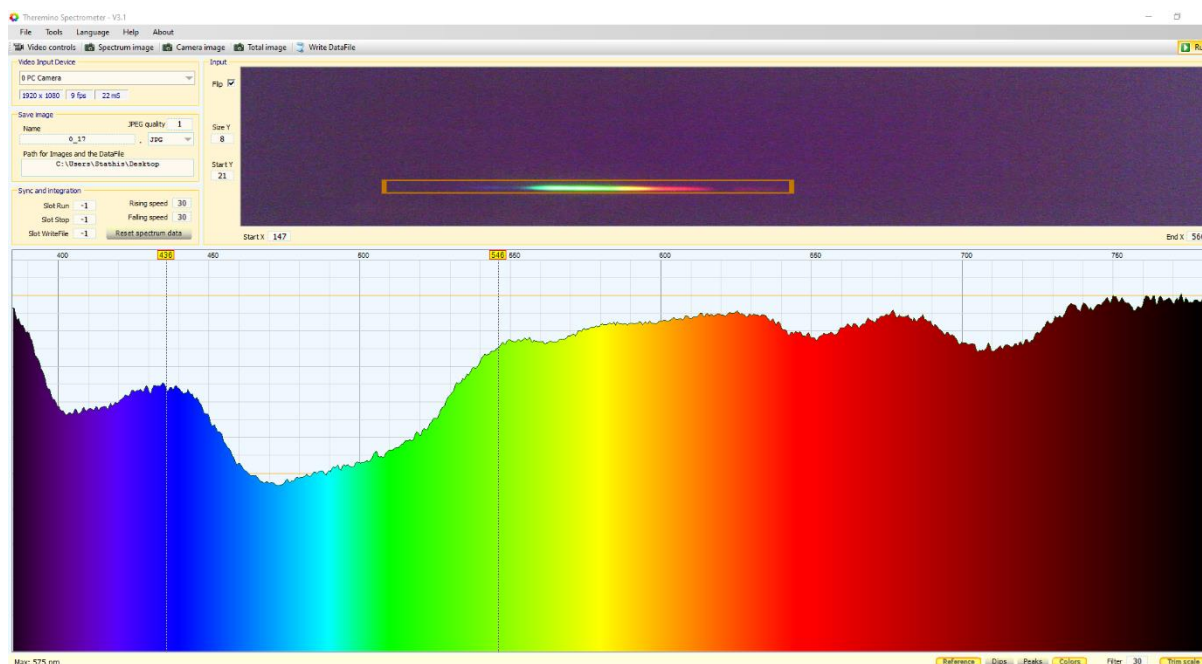


Εικόνα 65. Διαπερατότητα Μπλε Φωτιστικού Οινοπνεύματος.

5.10.2 Εξαιρετικά Παρθένο Ελαιόλαδο

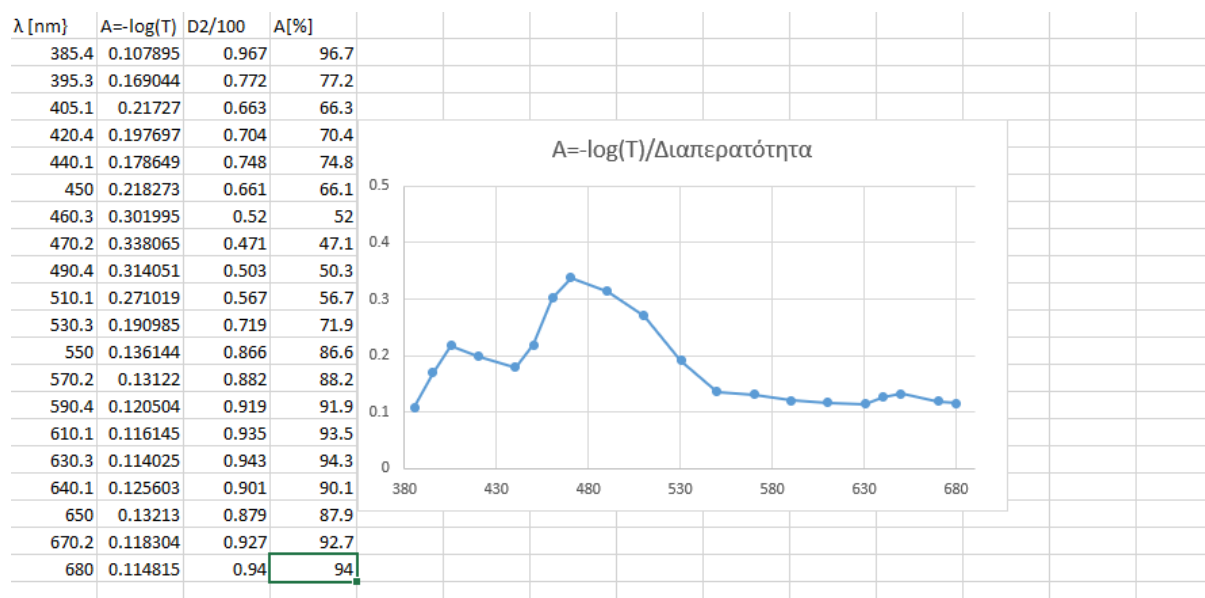
Η απορρόφηση του εξαιρετικά παρθένου ελαιόλαδου μετά τις μετρήσεις μας δείχνει ότι η τα μόρια από τα οποία αποτελείται απορροφούν ακτινοβολία στο μωβ (περίπου 33,7% απορρόφηση), με τα ποσοστά της απορρόφησης να μειώνονται στο μπλε, αλλά με πιο μεγάλη αύξηση στο ενδιάμεσα μπλε-γαλάζιο.

Παρατηρούμε σταδιακή μείωση της απορρόφηση στο πράσινο όσο αυξάνεται το μήκος κύματος καθώς και στο κόκκινο.



Εικόνα 66. Απορρόφηση Εξαιρετικά Παρθένου Ελαιόλαδου.

Για την διαπερατότητα, βλέπουμε πως ξεκινώντας στο μωβ παρατηρούμε αύξηση της τιμής με την τιμή να μειώνεται στην περιοχή του μπλε περίπου στα 425nm-445nm και στην συνέχεια να αυξάνεται σε φτάνοντας σε τιμή κορυφής στα 470nm. Από το σημείο αυτό και μετά καθώς η τιμή της απορρόφησης μειώνεται η διαπερατότητα αυξάνεται.



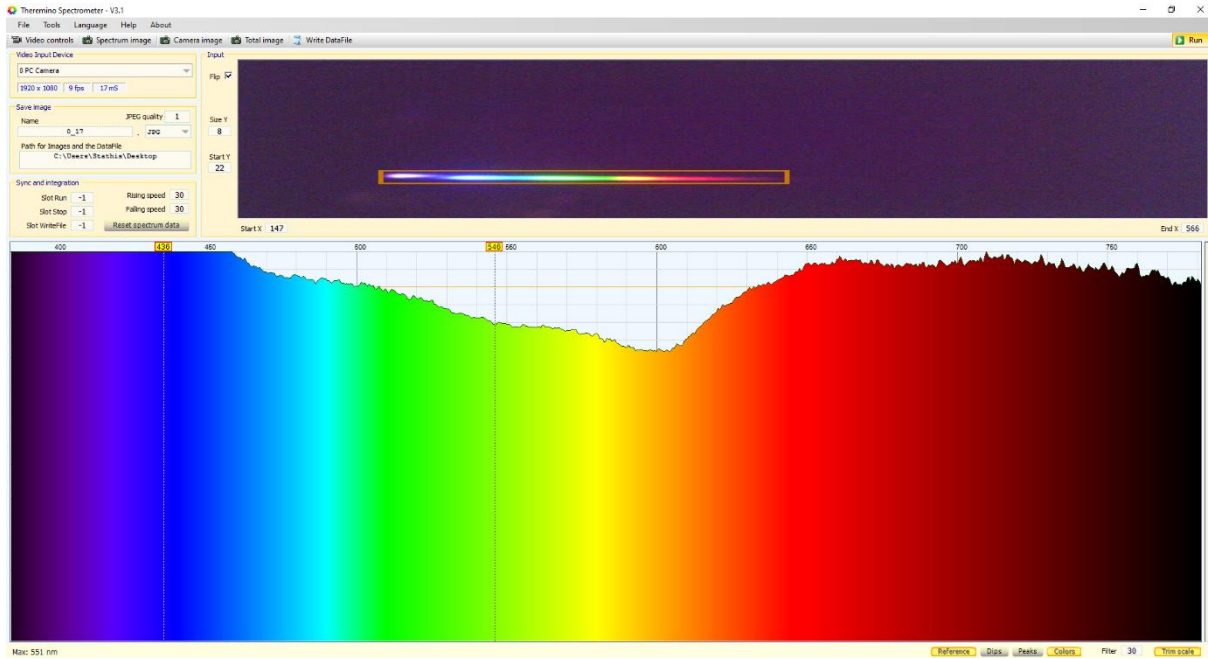
Εικόνα 67. Διαπερατότητα Εξαιρετικά Παρθένου Ελαιόλαδου.

5.10.3 Ροζ Απορρυπαντικό Πατώματος

Παρατηρούμε πως από την αρχή μέχρι τα 510nm η τιμή της απορρόφησης είναι μηδενική. Το απορρυπαντικό ξεκίνησε να απορροφάει από τα 512nm σταδιακά με την τιμή της απορρόφησης να

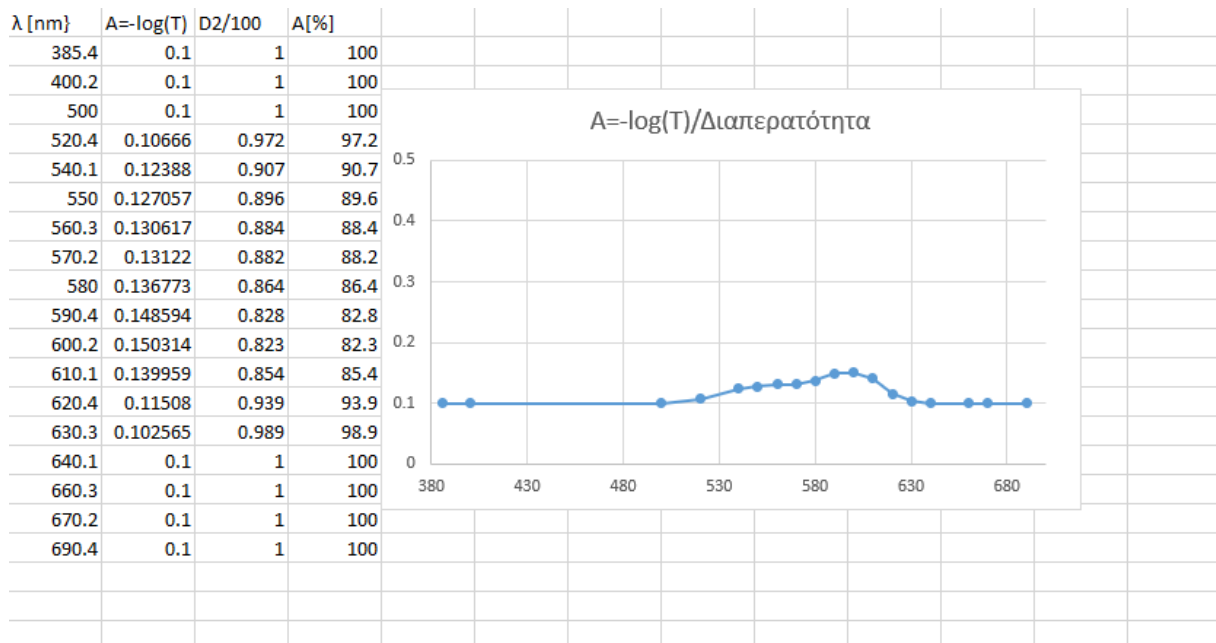
Κεφάλαιο 5

κορυφώνεται στα 600nm με ποσοστό 17,7%. Μετά το πρώτο μισό του πορτοκαλί η απορρόφησης άρχισε να μειώνεται μέχρι τα 630nm που η απορρόφηση μηδενίστηκε.



Εικόνα 68. Απορρόφηση Ροζ Απορρυπαντικού Πατώματος.

Η διαπερατότητα της ουσίας είναι σταθερή στο 0,1 μέχρι τα 520nm που ξεκινάει να αυξάνεται με αργούς ρυθμούς μέχρι να συναντήσει την κορύφωση στα 600nm όπου ξεκινάει πάλι να μειώνεται μέχρι που στα 630nm επανέρχεται στην αρχική του κατάσταση.

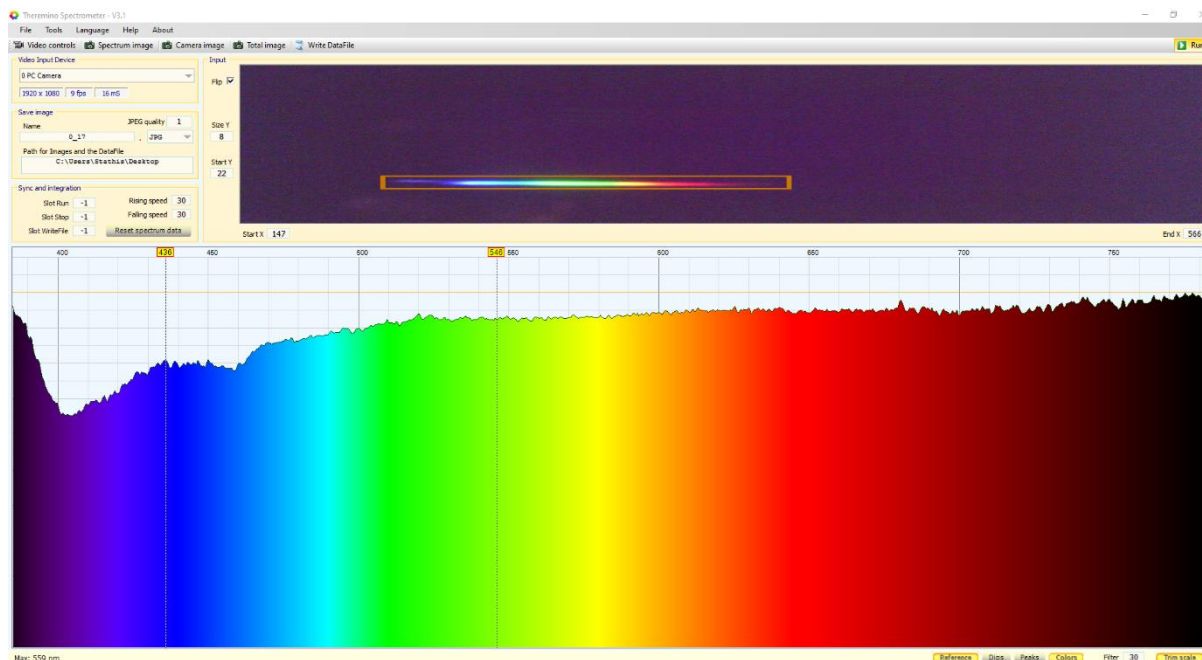


Εικόνα 69. Διαπερατότητα Ροζ Απορρυπαντικού Πατώματος.

5.10.4 Ουίσκι

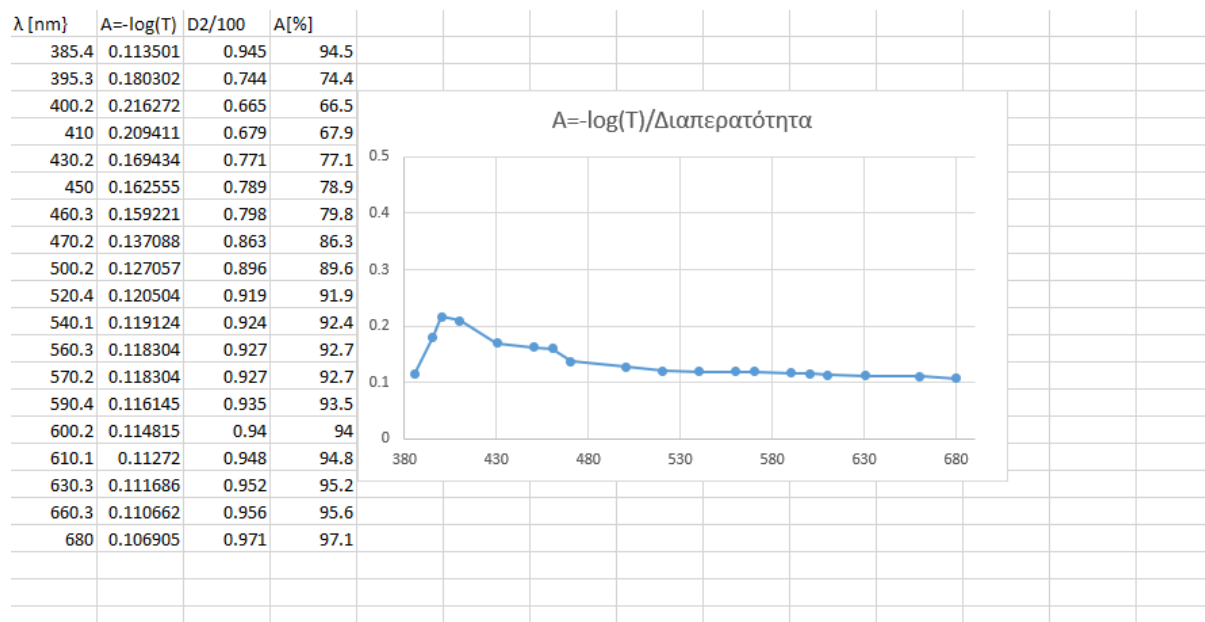
Η απορρόφηση μετά τις μετρήσεις μας, δείχνει ότι η απορρόφηση μετά το αρχικό σημείο του μωβ αυξάνεται και ξανά μειώνεται στο μπλε. Από το μπλε και όσο μετακινούμαστε προς το κόκκινο η τιμή

της απορρόφησης μειώνεται και παρατηρούμε ότι κοντεύει να σταθεροποιηθεί στην περιοχή του πορτοκαλί και κόκκινου.



Εικόνα 70. Απορρόφηση Ουίσκι.

Η τιμή της διαπερατότητα όπως φαίνεται παρακάτω από την πρώτη δειγματοληψία αυξάνεται και με κορυφή στα 395nm. Από το σημείο εκείνο ξεκινάει να μειώνεται με αργούς ρυθμούς ενώ παρατηρούμε πιο μεγάλη μείωση στα 470nm.

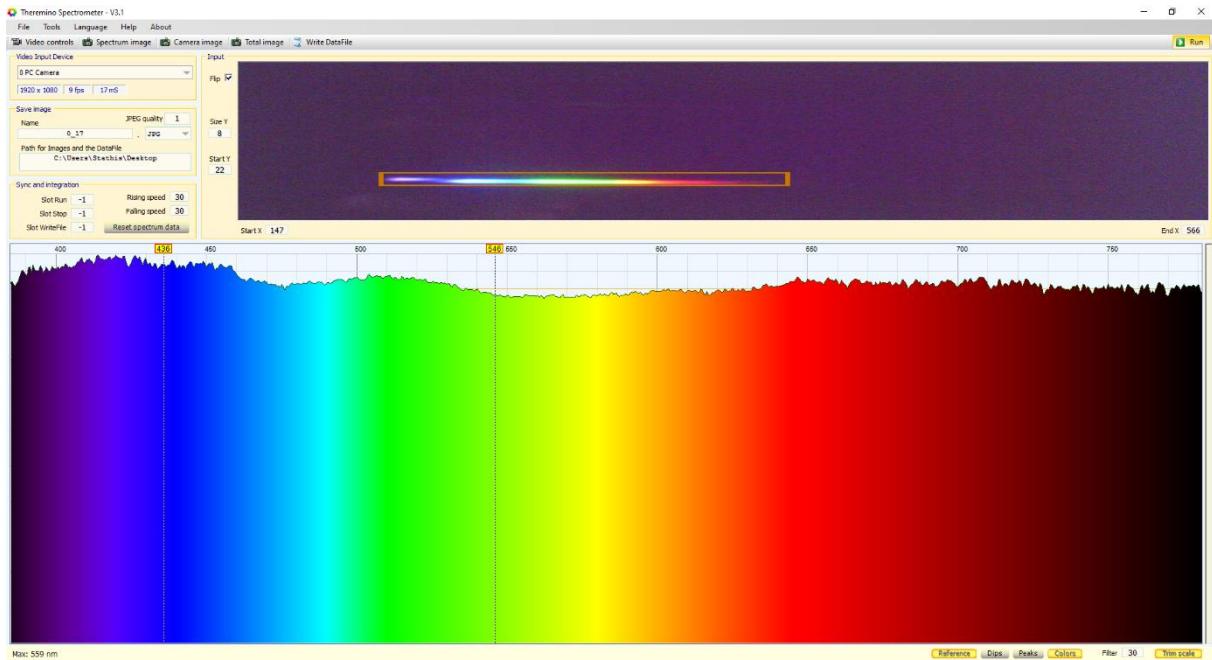


Εικόνα 71. Διαπερατότητα Ουίσκι.

5.10.5 Αιθανόλη

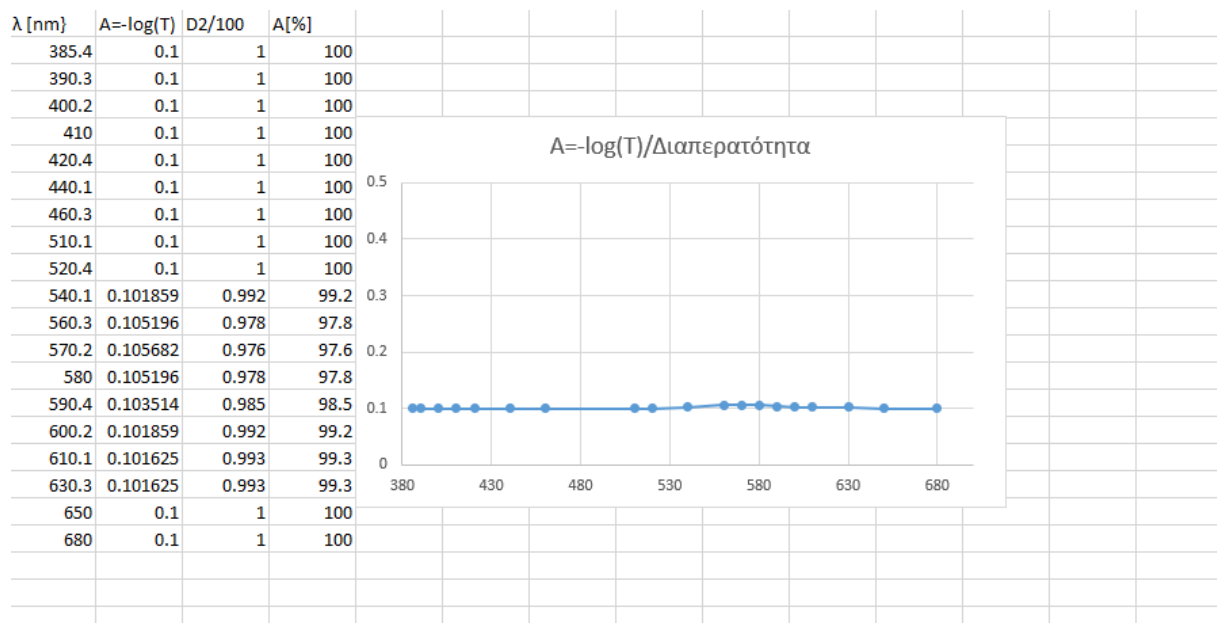
Η αιθανόλη είναι ένα διαφανές υλικό και σε αυτό οφείλεται η μικρές τιμές της απορρόφησης της κυματομορφής της. Βλέπουμε ότι μειώνεται λίγο στο ενδιάμεσο κομμάτι του πράσινου και του κίτρινου.

Κεφάλαιο 5



Εικόνα 72. Απορρόφηση Αιθανόλη.

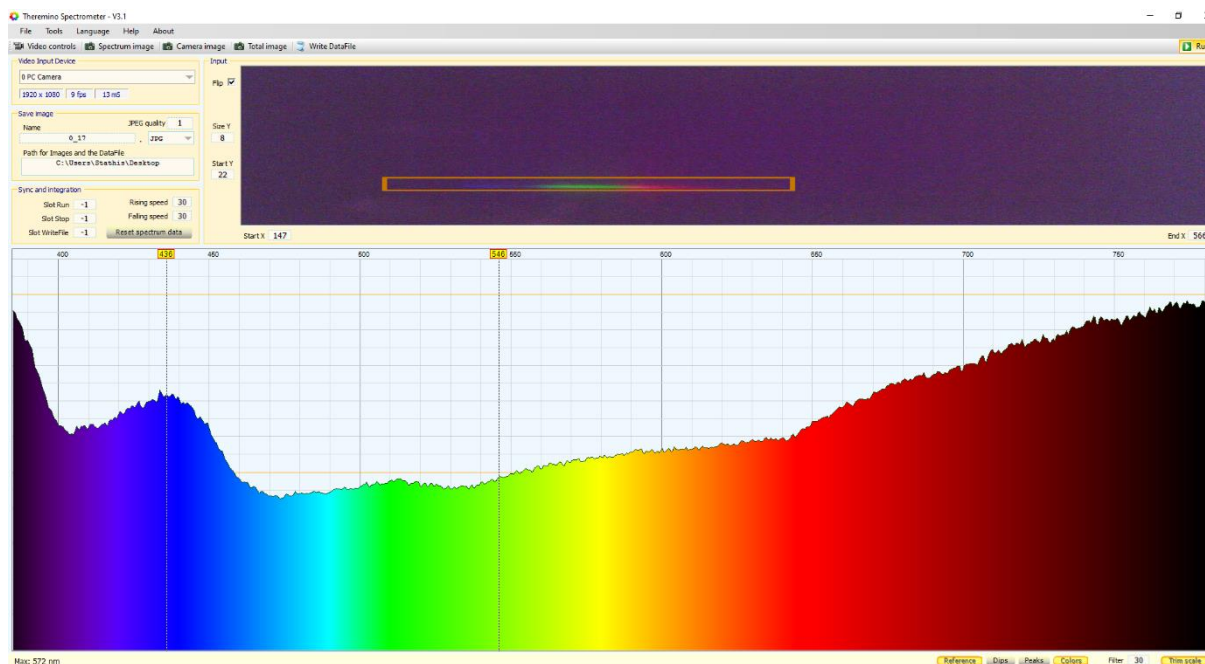
Η διαπερατότητα είναι μια ευθεία γραμμή που κάνει μια μικρή καμπύλη από τα 540nm-630nm.



Εικόνα 73. Διαπερατότητα Αιθανόλη.

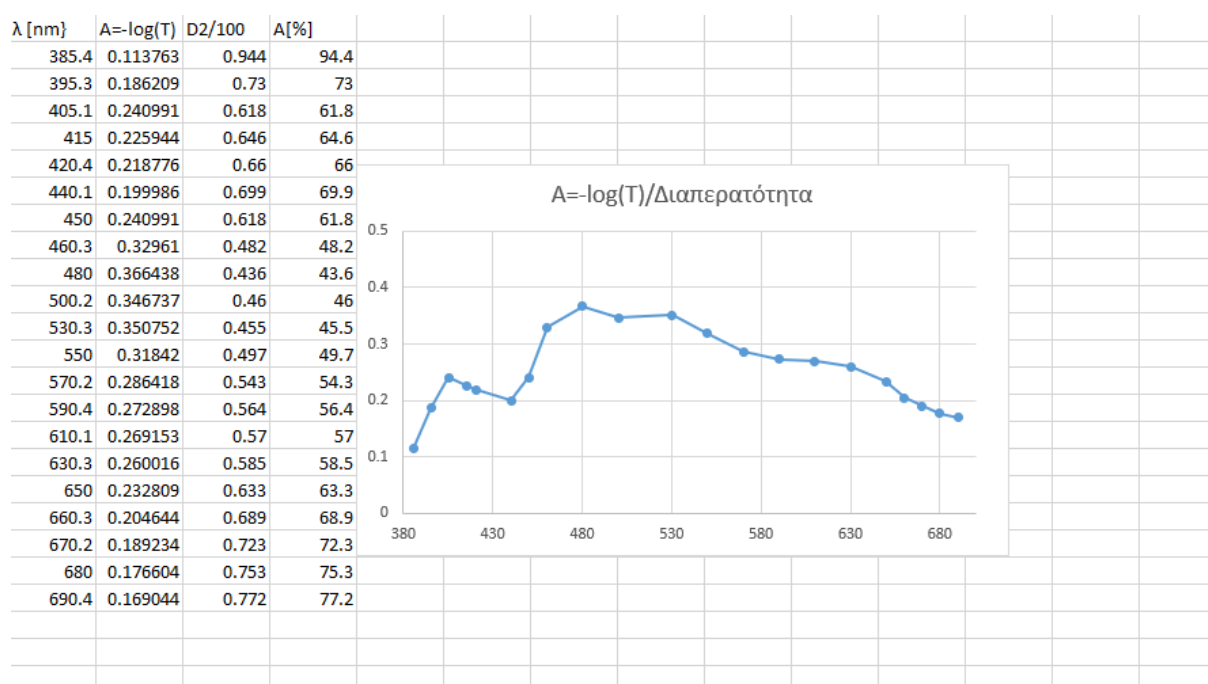
5.10.6 Φρέσκος Χυμός Πορτοκάλι

Ο φρέσκος χυμός πορτοκαλιού είναι και αυτός μια αρκετά πυκνή ουσία όπου απορροφά σε όλα το φάσμα.



Εικόνα 74. Απορρόφηση Φρέσκος Χυμός Πορτοκαλιού.

Η τιμές της διαπερατότητα του είναι υψηλές με τις μεγαλύτερες τιμές να ξεκινάνε μετά το μπλε αλλά να μειώνονται σταδιακά.



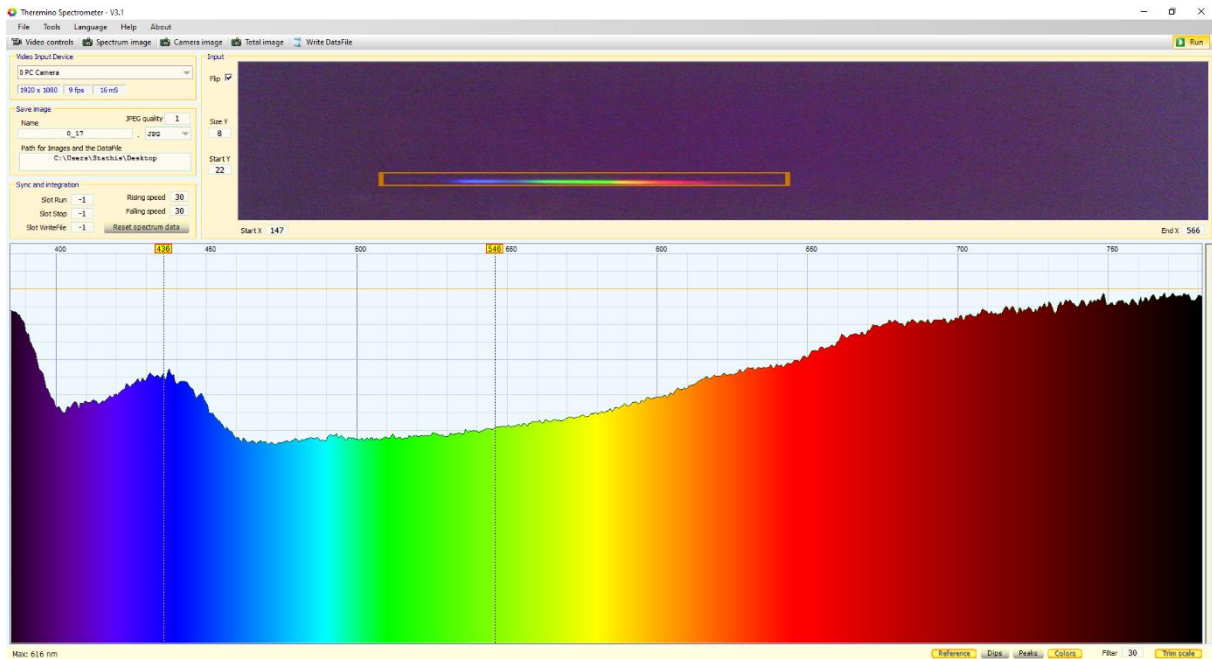
Εικόνα 75. Διαπερατότητα Φρέσκος Χυμός Πορτοκαλιού.

5.10.7 Κοκκίνο κρασί με αραιώση 1/1 με απιονισμένο νερό.

Παρακάτω μελετήσαμε ένα δείγμα το οποίο αραιώσαμε στο σύνολο τέσσερις φορές. Επειδή το κόκκινο κρασί είναι ένα πολύ πυκνό δείγμα, δεν θα είχαμε την δυνατότητα να παρατηρήσουμε κάποια ιδιαιτερότητα των χαρακτηριστικών του στην απορρόφηση και άρα ούτε στην διαπερατότητα. Έτσι

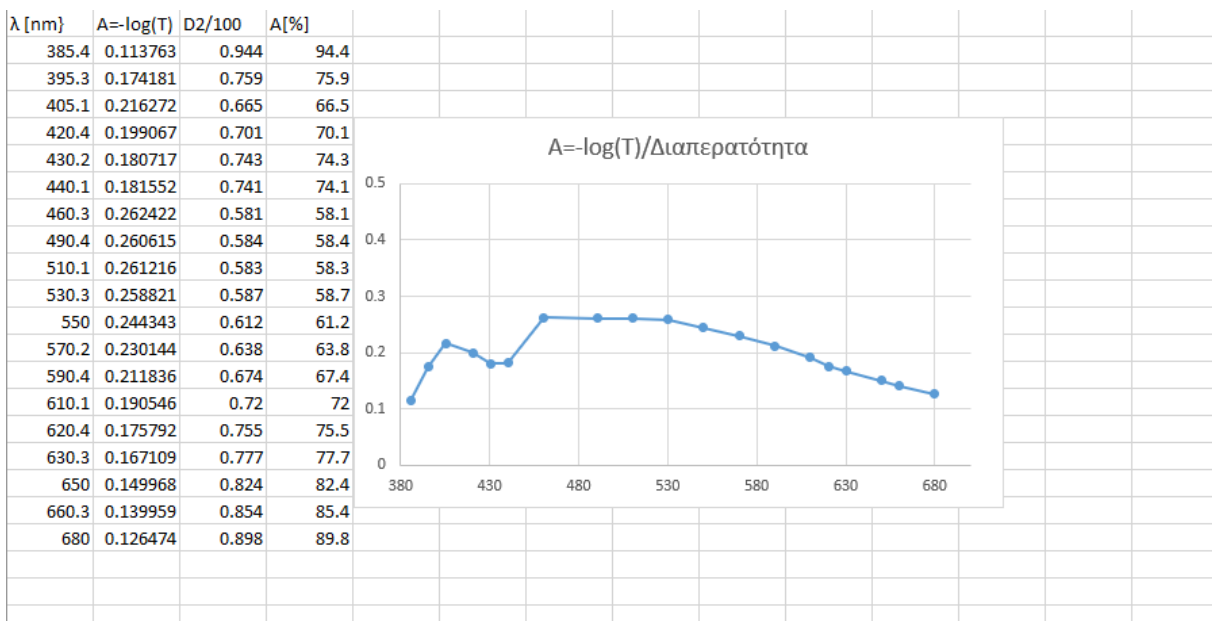
Κεφάλαιο 5

χρησιμοποιώντας απιονισμένο νερό για την πρώτη μέτρηση αραιώσαμε το δείγμα με ποσοστό 1/1, δηλαδή ίσες ποσότητες (50/50) και από τα δύο υλικά. Το φάσμα που παρατηρούμε είναι το ακόλουθο.



Εικόνα 76. Κόκκινο κρασί 1/1.

Έχουμε αύξηση στην μωβ περιοχή με μια μείωση στο μπλε, ωστόσο στο τελείωμα του μπλε έχουμε ξανά αύξηση της τιμής της διαπερατότητας με μια σταδιακή μείωση που παρατηρείται μέχρι το κόκκινο.

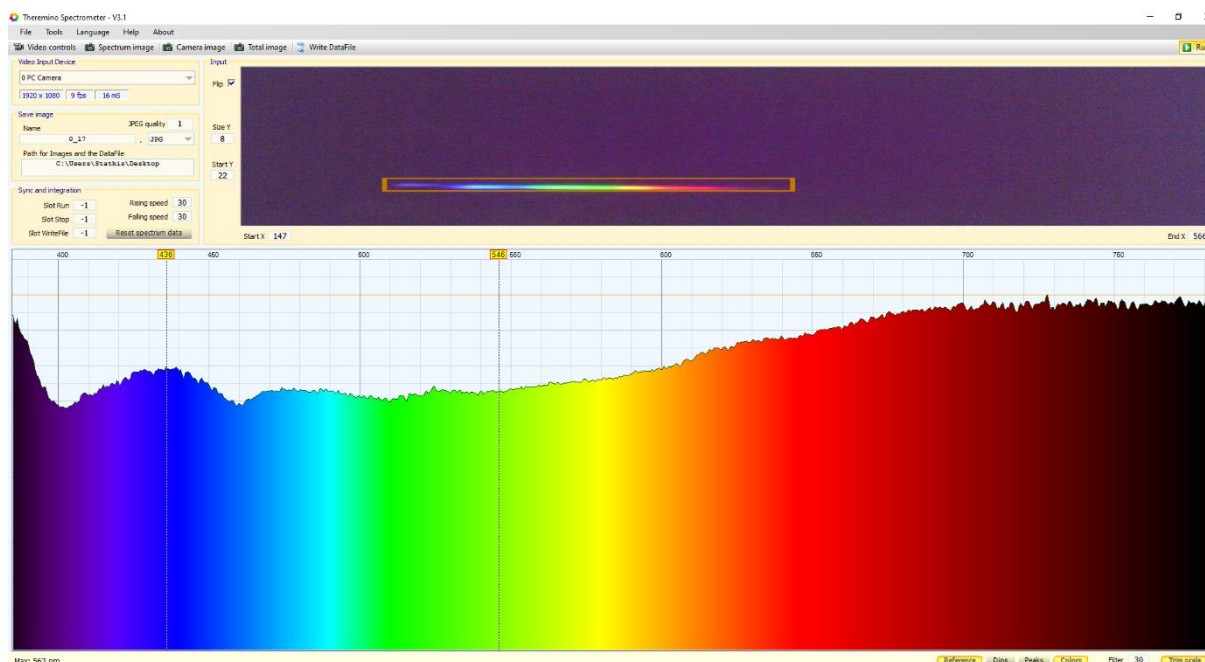


Εικόνα 77. Σχεδιάγραμμα διαπερατότητας κόκκινου κρασιού 1/1.

5.10.8 Κοκκίνο κρασί με αραιώση 1/2 με απιονισμένο νερό.

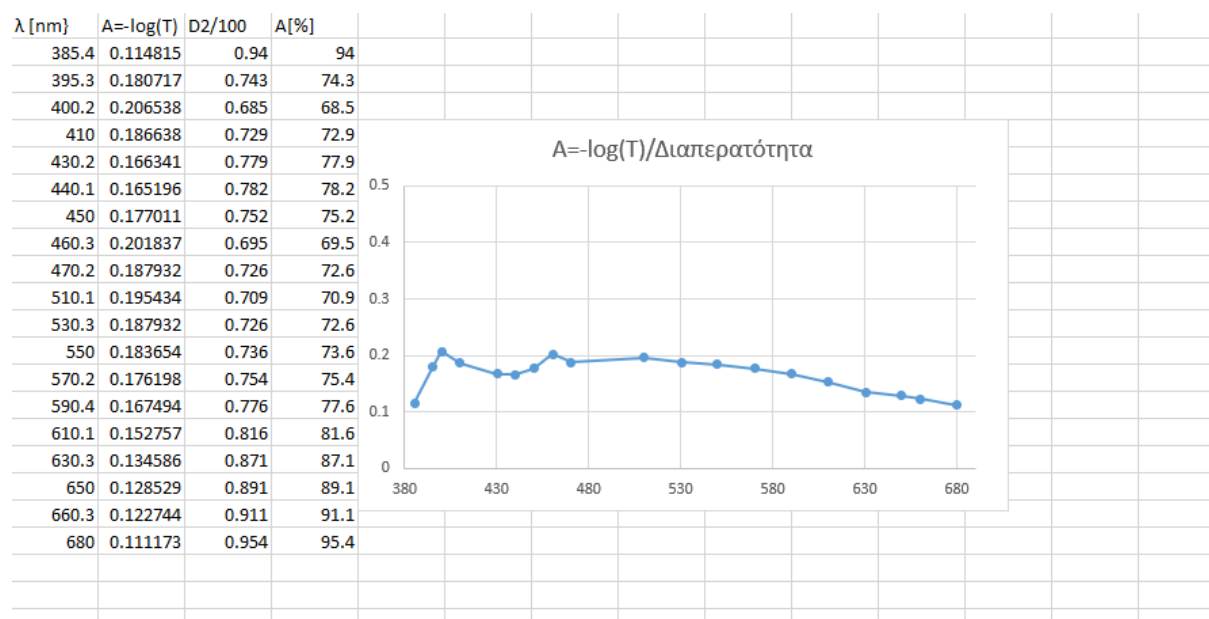
Έχοντας πάρει τις προηγούμενες μετρήσεις, ξανά αραιώσαμε το δείγμα γεμίζοντας την μισή ποσότητα της κυβέτας με το προηγούμενο δείγμα και συμπληρώσαμε το αντίστοιχο πάλι με απεικονισμένο νερό.

Έτσι καταφέραμε να έχουμε αραίωση 75/25, παρατηρώντας τα ποσοστά της απορρόφησης να μειώνονται σε ολόκληρο το φάσμα.



Εικόνα 78. Κόκκινο κρασί 1/2.

Σε αυτό το σημείο βλέπουμε πως έχουμε παρόμοια κυματομορφή με την προηγούμενη μόνο που σε αυτήν την μέτρηση οι τιμές της διαπερατότητας είναι μικρότερες από τις αρχικές.

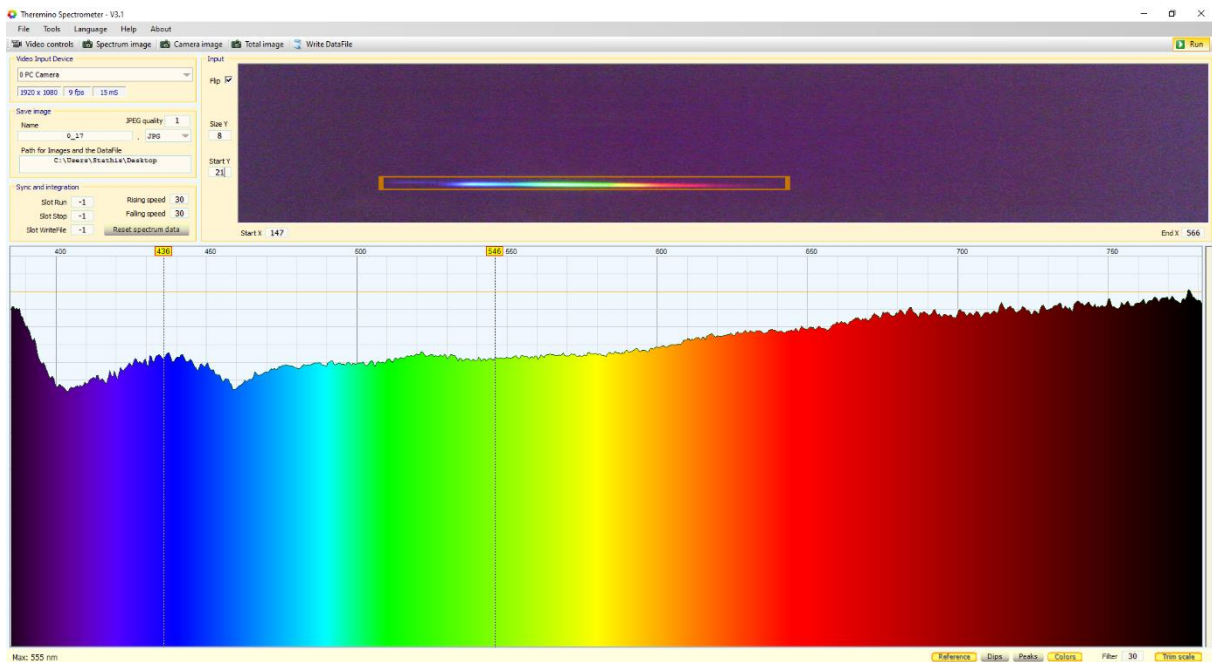


Εικόνα 79. Σχεδιάγραμμα διαπερατότητας κόκκινου κρασιού 1/2.

5.10.9 Κοκκίνο κρασί με αραίωση 1/4 με απιονισμένο νερό.

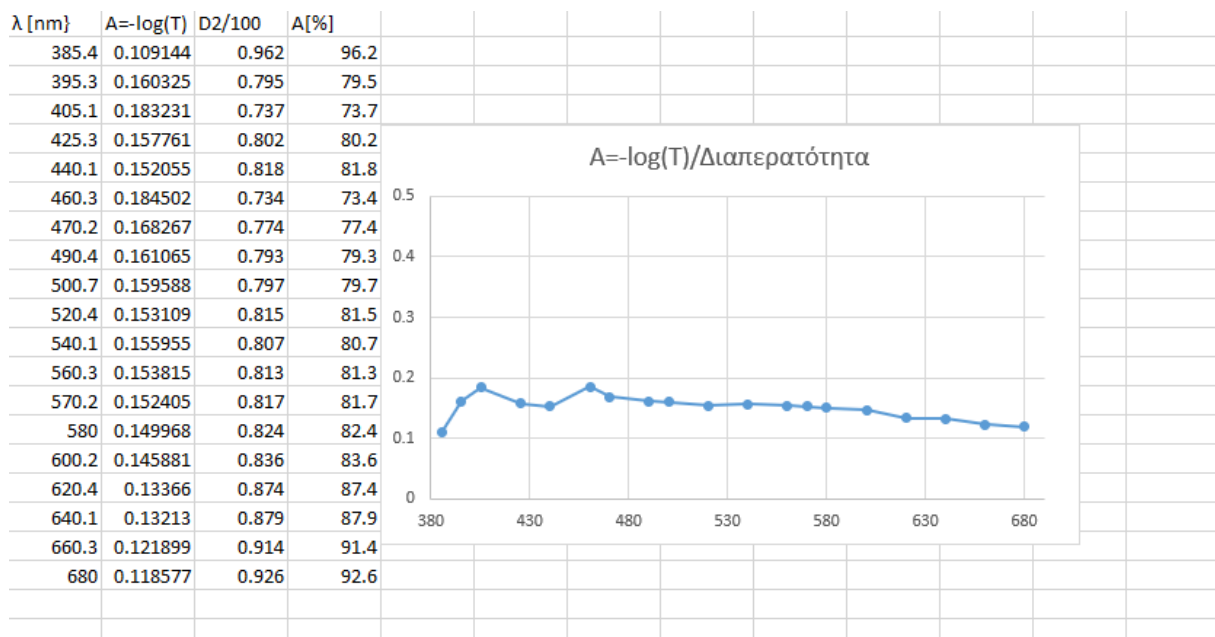
Για την επόμενη μέτρηση πήραμε πάλι την ποσότητα για να γεμίσουμε την μισή κυβέτα από το προηγούμενο αραιωμένο δείγμα και συμπληρώσαμε απιονισμένο νερό επιτυγχάνοντας αραίωση 1/4 δηλαδή 87,5/12,5. Οι τιμές της απορρόφησης μειώθηκαν και αρχίζουμε να παρατηρούμε τον χρωματικό κώδικα πιο έντονα.

Κεφάλαιο 5



Εικόνα 80. Κόκκινο κρασί 1/4.

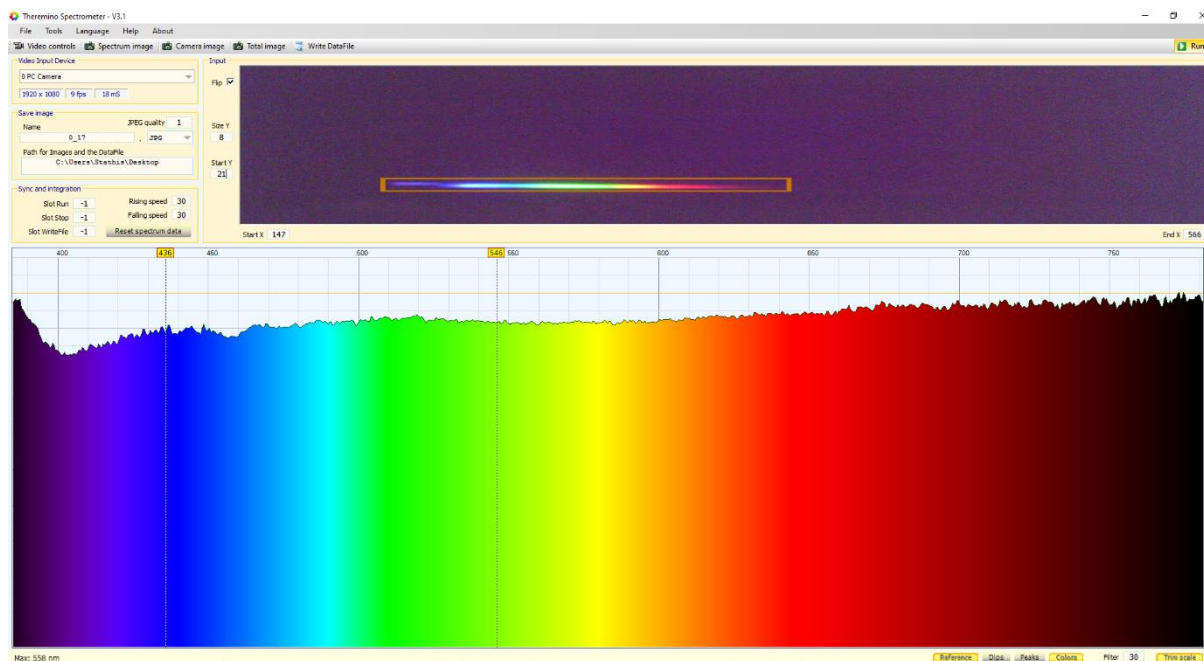
Έχοντας ακόμη την ίδια ομοιότητα με την πρώτη κυματομορφή βλέπουμε πως έχουμε ακόμη χαμηλότερες τιμές.



Εικόνα 81. Σχεδιάγραμμα διαπερατότητας κόκκινου κρασιού 1/4.

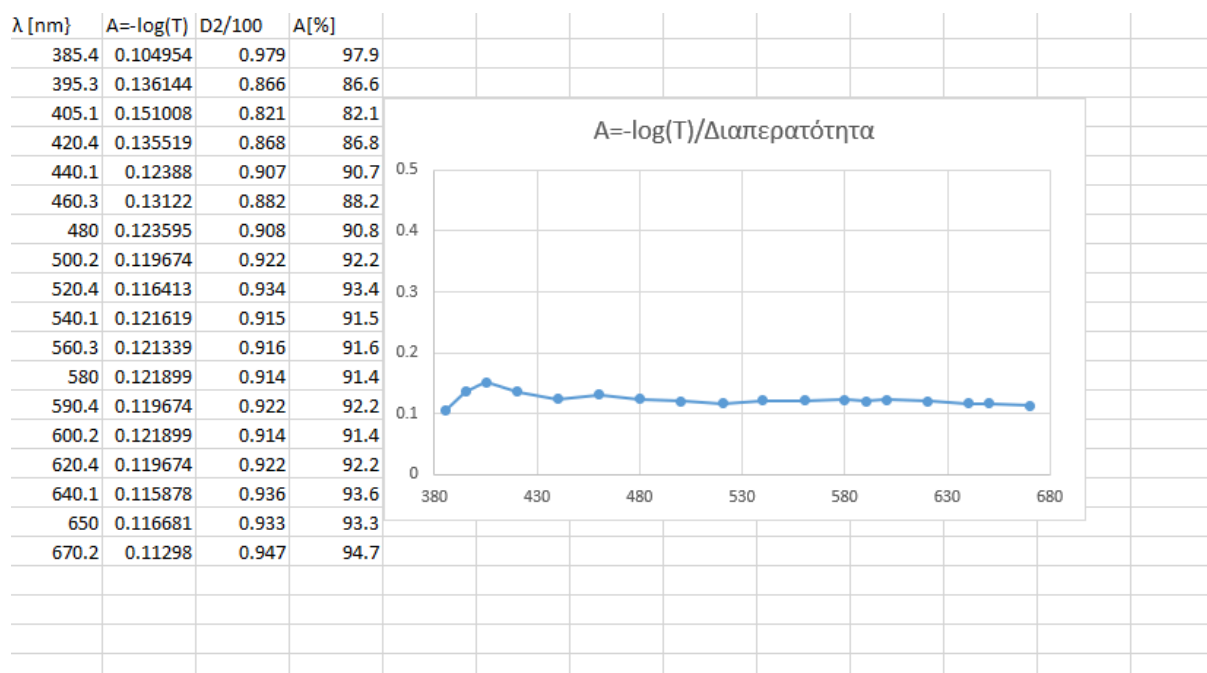
5.10.10 Κοκκίνο κρασί με αραιώση 1/8 με απιονισμένο νερό.

Στην τελευταία δειγματοληψία αραιώσαμε ξανά το δείγμα μας με 93,75/6,25. Οι τιμές σε όλο το μήκος κύματος αρχίσαν να μειώνονται και να απεικονίζονται σχεδόν σαν ευθεία γραμμή.



Εικόνα 82. Κόκκινο κρασί 1/8.

Τέλος, απεικονίζουμε την κυματομορφή με τις μικρότερες τιμές από όλες τις μετρήσεις στην αραιώση του κόκκινου κρασιού.



Εικόνα 83. Σχεδιάγραμμα διαπερατότητας κόκκινου κρασιού 1/8.

Κεφάλαιο 6ο: Συμπεράσματα και Προτάσεις Βελτίωσης

Συμπερασματικά, η παρούσα διπλωματική καταφέρει με επιτυχία την περάτωση του σχεδιασμού και της υλοποίησης ενός φασματοφωτόμετρου UV-Vis, επιτυγχάνοντας τον πρωταρχικό στόχο για την δημιουργία ενός προσιτού και αξιόπιστου επιστημονικού οργάνου. Με τα αποτελέσματα επιβεβαιώνεται οι ικανότητες της συσκευής για την μέτρηση με ακρίβεια των φασμάτων απορρόφησης και διαπερατότητας, σε σύγκριση με τα εμπορικά μοντέλα.

Για την περαιτέρω βελτίωση του φασματοφωτόμετρου, μπορούν να ληφθούν υπόψη αρκετές βελτιώσεις. Πρώτον, με ενσωμάτωση προηγμένων αλγορίθμων λογισμικού για την ανάλυση δεδομένων ώστε να μπορεί να βελτιωθεί η ακρίβεια και η χρηστικότητα της συσκευής. Δεύτερον, η χρήση πιο εξελιγμένων πηγών φωτός και ανιχνευτών θα μπορούσε να επεκτείνει το εύρος και την ευαισθησία των μετρήσεων. Η εφαρμογή αυτοματοποιημένων ρουτινών βαθμονόμησης και πιο φιλικών προς τον χρήστη διεπαφών θα βελτίωνε τη λειτουργία και τη συντήρηση του φασματοφωτόμετρου, καθιστώντας το πιο αποτελεσματικό και πιο εύκολο στη χρήση για διάφορες εφαρμογές. Με τις βελτιώσεις αυτές θα ενισχύονταν η απόδοση της συσκευής αλλά επίσης θα διευρύνονταν και το εύρος της εφαρμογή της σε διάφορα επιστημονικά πεδία.

Κεφάλαιο 7ο: Βιβλιογραφία

- [1] M. R. E. M. K. B. S. G. G. E. A. M. G. David Pohl, «An integrated broadband spectrometer on,» *Nature photonics*, p. 7, 07 October 2019.
- [2] Α. Ελπινίκη, «ΑΤΟΜΙΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ,» 9 Σεπτεμβρίου 2010. [Ηλεκτρονικό]. Available: <http://archive.eclass.uth.gr/eclass/modules/document/file.php/>. [Πρόσβαση 4 Νοεμβρίου 2023].
- [3] Θ. Σπανός, «Ατομική Φασματοσκοπία, Ατομική Απορρόφηση (AAS),» 18 Απρίλιος 2018. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://eclass.emt.ihu.gr/modules/document/file.php/>. [Πρόσβαση 5 Νοέμβριος 2023].
- [4] J. M. Andrade-Garda, «1.2 Atomic Optical Spectrometry,» σε *Basic chemometric techniques in atomic spectroscopy*, Spain, RSC Publishing, 2013, p. 430.
- [5] Δ. Κονταρίδης, «eclass.upatras.gr,» 27 Απρίλιος 2015. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://eclass.upatras.gr/modules/document/file.php/>. [Πρόσβαση 5 Νοέμβριος 2023].
- [6] wikipedia, «wikipedia,» 19 Σεπτεμβρίου 2020. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://el.wikipedia.org/wiki/>. [Πρόσβαση 6 Νοεμβρίου 2023].
- [7] ΕΛΙΝΥΑΕ, «ΕΛΙΝΥΑΕ,» [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://www.elinyae.gr/index.php/themata-yae/aktinobolia/page/ilektromagnitiko-fasma>. [Πρόσβαση 6 Νοεμβρίου 2023].
- [8] Α. Αξιώτης, «Ανάλυση της κυματοδότησης στις οπτικές ίνες με την ηλεκτρομαγνητική θεωρία,» 2017. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://docplayer.gr/67753803-Analysi-tis-kymatodigisis-stis-optikes-ines-me-tin-ilektromagnitiki-theoria.html>. [Πρόσβαση 6 Νοεμβρίου 2023].
- [9] Smouf, «Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία,» Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, 22 Οκτώβριος 2018. [Ηλεκτρονικό]. Available: <http://archive.eclass.uth.gr/eclass/modules/document/file.php/> [Πρόσβαση 6 Νοέμβριος 2023].
- [10] B. P. Kafle, «Introduction to electromagnetic radiation,» σε *Chemical Analysis and Material Characterization by Spectrophotometry*, Dhulikhel, Kavre, Nepal, Elsevier, 2019, p. 336.
- [11] WikiSnell, «Νόμος του Snell,» wikipedia, 7 Φεβρουαρίου 2020. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://el.wikipedia.org/wiki/>. [Πρόσβαση 7 Νοεμβρίου 2023].
- [12] Α. Χατζηχριστοφί, «Περίθλαση- Αρχή Huygens,» 27 3 2020. [Ηλεκτρονικό]. Available: https://tech-scholi-paf.schools.ac.cy/data/uploads/yliko_martios_20/fysiki_theoritiko3/perithlasi_arxi_huygens.pdf. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [13] W. Q. Haade, «Wikimedia Commons,» 20 4 2010. [Ηλεκτρονικό].

- Available: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Interference_of_two_waves.svg. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [14] E. INSTRUMENTS, «EDINBURGH INSTRUMENTS,» 2024. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://www.edinst.com/measuring-fluorescence-and-phosphorescence-spectra-at-low-temperature-using-the-fls1000-photoluminescence-spectrometer/>. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [15] S. Player, «Slide Player,» 2015. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://slideplayer.com/slide/5194048/>. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [16] P. a. Cloudy, «Τι είναι οι φασματικές γραμμές,» Popeye and Cloudy, 2024. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://popeyeandcloudy.com/ti-einai-oi-fasmatikes-grammes>. [Πρόσβαση 4 3 2024].
- [17] X. T. M. Φούντζουλα, «Φασματοσκοπία απορρόφησης ορατού-υπεριώδους,» 19 Φεβρουαριος 2023. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://repository.kallipos.gr/bitstream/11419/9081/1/210-TRAPALI-Experimental-Biochemistry-CH05.pdf>. [Πρόσβαση 4 Δεκεμβριου 2023].
- [18] M. N. MN, «Beer-Lambert Law – Definition, Derivation and Limitations,» Microbiology Notes MN, 2023. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://microbiologynote.com/el/>. [Πρόσβαση 4 3 2024].
- [19] T. ICSU, «TROP ICSU,» [Ηλεκτρονικό].
Available: (<https://climatescienceteaching.org/lesson/beer-lambert-law/intro>). [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [20] Thpanorama, «Beer-Lambert's law in what it makes up, applications and exercises solved,» Thpanorama, 2024. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://el.thpanorama.com/articles/> [Πρόσβαση 4 3 2024].
- [21] S. P. J. P. Thomas G.Mayerhofer, «The Bouguer-Beer-LambertLaw: ShiningLighton theObscure,» ChemPhysChem, 2020. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/>. [Πρόσβαση 4 3 2024].
- [22] A. Chodos, «August 15, 1758: Death of Pierre Bouguer,» Advancing Physics, 8 2011. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://www.aps.org/publications/apsnews/201108/physicshistory.cfm>. [Πρόσβαση 4 3 2024].
- [23] Θ. Νικόλαος, «Ενόργανη Ανάλυση ΙΙ,» 10 3 2016. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://opencourses.uoa.gr/modules/document/file.php/>. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [24] M. O. R. A. κ. S. M. T. C. Lotti Tajouri, «HealthyLiving.gr,» 20 4 2023. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://www.healthyliving.gr/2023/04/20/>. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [25] IMPLN, «IMPLN,» 2024. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://www.implen.de/uv-vis-spectrophotometer/>. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [26] D. A. o. science, « Major Functions and Applications of UV-Visible Spectrophotometry,» 18 9 2023. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://www.drawellanalytical.com/3-major-functions-and-applications>. [Πρόσβαση 5 3 2024].

- [27] Agilent, «The Basics of UV-Vis Spectrophotometry,» 23 7 2021. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://www.agilent.com/cs/library/primers/public/>. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [28] U. O. T. SCARBOROUGH, «UNIVERSITY OF TORONTO SCARBOROUGH,» [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://www.utoronto.ca/webapps/chemistryonline/production/uv/index.php>.
[Πρόσβαση 5 3 2024].
- [29] J. Hon, «Chemistry,» 6 2019. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://chemistry.stackexchange.com/questions/115895/why-should-aas-use-element-lamps>.
[Πρόσβαση 5 3 2024].
- [30] J. B. P. J. N. J. V. A. R. B. L. F. N. S. M. N. J. S. C. R. N. & D. M. Ricardo,
«Dysprosium optogalvanic spectroscopy in a hollow cathode lamp.,»
Journal of the Optical Society of America B, 20 3 2023.
- [31] W. hollow, «Wikipedia,» 30 1 2010. [Ηλεκτρονικό].
Available: https://en.wikipedia.org/wiki/Hollow-cathode_lamp. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [32] A. T. a. C. P. Paul Worsfold, «Encyclopedia of Analytical Science (Second Edition),» Elsevier, 2005.
- [33] M. S. H. A. & K. Rehman, «Atomic Absorption Spectroscopy,» 18 12 2019. [Ηλεκτρονικό].
Available: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-981-15-1547-7_6. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [34] W. Soutter, «Azo opricts,» 17 8 2012. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://www.azooptics.com/Article.aspx?ArticleID=380>. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [35] «ThermoFisher scientific,» 2024. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://www.thermofisher.com/gr/en/home/industrial/>. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [36] D. Visser, «Atomic Absorption Spectroscopy, Principles and Applications,» 16 12 2021. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://www.technologynetworks.com/analysis/articles/>. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [37] N. Bader, «Research Gate,» 1 2011. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://www.researchgate.net/publication/>. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [38] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 150-155.
- [39] J. F. E. & F. I. G. Robinson, «Undergraduate Instrumental Analysis. 7th edition.,»
σε *Undergraduate Instrumental Analysis. 7th edition.*, CRC Press, 2014, pp. 115-120.
- [40] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 180-185.

- [41] D. Harris, σε *Quantitative Chemical Analysis. 8th edition.*, W.H. Freeman and Company., 2010, pp. 155-160.
- [42] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning, 2017, pp. 200-205 .
- [43] J. F. E. & F. I. G. Robinson, σε *Undergraduate Instrumental Analysis. 7th edition.*, CRC Press., 2014, pp. 123-128.
- [44] D. H. F. & C. S. Skoog, «Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.,» σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 160-165.
- [45] J. F. E. & F. I. G. Robinson, « Undergraduate Instrumental Analysis. 7th edition.,» σε *Undergraduate Instrumental Analysis. 7th edition.*, CRC Press, 2014, pp. 130-135.
- [46] SHIMADZU, «What types of light sources are used in a typical spectrophotometer?,» 2024. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://www.ssi.shimadzu.com/service-support/faq/uv-vis/instrument-design/3/index.html#top>.
[Πρόσβαση 5 3 2024].
- [47] Lab-training.com, «Dispersion of Light in Spectroscopy,» 2024. [Ηλεκτρονικό].
Available: <https://lab-training.com/dispersion-of-light-in-spectroscopy/>. [Πρόσβαση 5 3 2024].
- [48] P. Natalie, «Airekacells,» 29 12 2019. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://airekacells.com/blog/cuvette-guide>.
[Πρόσβαση 5 3 2024].
- [49] R. W. World, «Difference Between Photodiode And Photomultiplier | Photodiode Vs Photomultiplier,» [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://www.rfwireless-world.com/Terminology/Photodiode-vs-Photomultiplier.html>.
[Πρόσβαση 5 3 2024].
- [50] D. Harris, σε *Quantitative Chemical Analysis. 8th edition.*, W.H. Freeman and Company., 2010, pp. 160-165.
- [51] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 175-180.
- [52] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 170-175.
- [53] J. F. E. & F. I. G. Robinson, σε *Undergraduate Instrumental Analysis. 7th edition.*, CRC Press., 2014, pp. 120-125.
- [54] D. Harris, σε *Quantitative Chemical Analysis. 8th edition.*, W.H. Freeman and Company., 2010, pp. 170-175.
- [55] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 185-190.

- [56] D. Harris, σε *Quantitative Chemical Analysis. 8th edition.*, W.H. Freeman and Company., 2010, pp. 160-170.
- [57] D. H. F. & C. S. Skoog, «Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.» Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 230-235.
- [58] H. M. L. D. J. & S. F. Willard, σε *Instrumental Methods of Analysis. 7th edition.*, Wadsworth., 1988, pp. 300-305.
- [59] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 275-280.
- [60] B. S. M. Welz, σε *Atomic Absorption Spectrometry. 3rd Edition.*, Wiley-VCH., 1999, pp. 85-90.
- [61] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 265-270.
- [62] B. S. M. Welz, σε *Atomic Absorption Spectrometry. 3rd Edition.*, Wiley-VCH., 1999, pp. 95-100.
- [63] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 260-265.
- [64] B. S. M. Welz, σε *Atomic Absorption Spectrometry. 3rd Edition.*, Wiley-VCH., 1999, pp. 90-95.
- [65] B. S. M. Welz, σε *Atomic Absorption Spectrometry. 3rd Edition.*, Wiley-VCH., 1999, pp. 100-105.
- [66] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 280-285.
- [67] B. S. M. Welz, σε *Atomic Absorption Spectrometry. 3rd Edition.*, Wiley-VCH., 1999, pp. 110-115.
- [68] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 270-275.
- [69] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 300-305.
- [70] B. S. M. Welz, σε *Atomic Absorption Spectrometry. 3rd Edition.*, Wiley-VCH., 1999, pp. 125-130.
- [71] B. S. M. Welz, σε *Atomic Absorption Spectrometry. 3rd Edition.*, Wiley-VCH., 1999, pp. 105-110.
- [72] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 305-310.
- [73] B. S. M. Welz, σε *Atomic Absorption Spectrometry. 3rd Edition.*, Wiley-VCH, 1999, pp. 130-135.
- [74] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 310-315.
- [75] B. S. M. Welz, σε *Atomic Absorption Spectrometry. 3rd Edition.*, Wiley-VCH., 1999, pp. 135-140.

- [76] E. Perkin, «Principles and Applications of Spectrophotometry in the Clinical Laboratory,» Academic Press, New York, 2017.
- [77] J. A. & J. M. B. Smith, «Clinical Applications of Spectrophotometry: Detection and Quantification of Biomarkers. Clinical Chemistry,» 65(4), 567-575, 2019.
- [78] M. & K. H. Lee, «Spectrophotometry in Medical Science: Opportunities and Challenges.,» Biochemical Medicine, 28(2), 020501., 2018.
- [79] Dr. Bozema N, «Translational Biomarkers Core,» Montana State University, Montana State, 2024.
- [80] C. A. E. & B. D. Burtis, «Tietz Textbook of Clinical Chemistry and Molecular Diagnostics.,» Elsevier Health Sciences, 2012.
- [81] A. & P. A. Kaplan, «Clinical Chemistry: Theory, Analysis, Correlation.,» Mosby Inc, 2003.
- [82] C. & S. K. Price, «Principles and Practice of Clinical Biochemistry.,» Wiley-Blackwell, 2013.
- [83] G. & P. M. Lippi, «Laboratory Medicine in the 21st Century.,» Elsevier, 2020.
- [84] L. Kricka, «Clinical Chemistry: Principles, Techniques, and Correlations.,» Wolters Kluwer Health., 2019.
- [85] N. H. A. & W. C. Rifai, «Tietz Textbook of Clinical Chemistry and Molecular Diagnostics.,» Elsevier, 2018.
- [86] M. L. Turgeon, «Clinical Hematology: Theory and Procedures,» 1988.
- [87] E. J. B. L. E. S. H. H. J. W. M. E. S. S. A. A. Ronald Hoffman, «Hematology: Basic Principles and Practice,» Elsevier, 2022.
- [88] P. & L. A. Stevens, «Evaluation and management of chronic kidney disease: synopsis of the kidney disease: improving global outcomes 2012 clinical practice guideline.,» Annals of Internal Medicine., 2013.
- [89] D. & F. P. Randerson, «Clinical Chemistry in Diagnosis and Treatment.,» Lloyd-Luke Medical Books., 1980.
- [90] B. S. D. & W. A. Forbes, «Bailey & Scott's Diagnostic Microbiology.,» Mosby Elsevier., 2007.
- [91] J. & P. M. Jorgensen, «Manual of Clinical Microbiology.,» American Society for Microbiology., 2015.
- [92] J. Versalovic, «Manual of Clinical Microbiology.,» American Society for Microbiology., 2011.
- [93] J. & W. S. Westgard, «Quality Management in the Laboratory.,» Clinical Chemistry and Laboratory Medicine., 2016.
- [94] C. a. L. S. I. (CLSI), «Guidelines for Laboratory Quality Control and Standard Procedures.,» CLSI., 2020.
- [95] L. & T. C. Hood, «Laboratory Safety and Management.,» American Society for Microbiology., 2019.
- [96] Steliosft, «Φασματοφωτόμετρο,» el.wikipedia.org, 5 Μαΐου 2010. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://el.wikipedia.org/wiki/>. [Πρόσβαση 3 Νοεμβρίου 2023].

- [97] ΧΑΡΑΛΑΜΠΙΟΣ, «ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΛΑΜΠΗΡΩΝ ΦΩΤΙΣΜΟΥ-ΑΡΧΗ,» *GREEN LOGISTICS*, p. 77, 7 Ιούλιος 2016.
- [98] B. & F. B. Frier, «Diabetes Mellitus: Diagnosis and Treatment.,» Wiley-Blackwell., 2019.
- [99] V. B. D. B. K. K. P. & W. P. Rodwell, «Harper's Illustrated Biochemistry.,» McGraw-Hill Education, 2018.
- [100] N. B. C. & A. E. Tietz, «Tietz Fundamentals of Clinical Chemistry and Molecular Diagnostics.,» Elsevier Health Sciences., 2012.
- [101] B. Clarke, « Normal bone anatomy and physiology.,» *Clinical Journal of the American Society of Nephrology*, 3 (Supplement 3), S131-S139., 2008.
- [102] M. Demay, «Mechanism of vitamin D receptor action.,» *Annals of the New York Academy of Sciences*, 98(1), 204-213, 2003.
- [103] P. & D. P. Garnero, «Assessment of the serum levels of bone alkaline phosphatase with a new immunoradiometric assay in patients with metabolic bone disease.,» *The Journal of Clinical Endocrinology & Metabolism*, 77(4), 1046-1053., 1993.
- [104] C. T. P. W. M. & S. M. Janeway, «Immunobiology: The Immune System in Health and Disease.,» Garland Science., 2017.
- [105] K. & W. C. Murphy, «Janeway's Immunobiology.,» Garland Science., 2016.
- [106] R. & S. G. Coico, «Immunology: A Short Course.,» Wiley-Blackwell., 2015.
- [107] D. Harris, σε *Quantitative Chemical Analysis. 8th edition.*, W.H. Freeman and Company., 2010, pp. 150-155.
- [108] D. H. F. & C. S. Skoog, σε *Principles of Instrumental Analysis. 7th edition.*, Brooks/Cole, Cengage Learning., 2017, pp. 190-195.
- [109] D. Harris, σε *Quantitative Chemical Analysis. 8th edition.*, W.H. Freeman and Company., 2010, pp. 145-150.