

Környezetvédelmi analitika

Az analitikai kémia az anyagok minőségi és mennyiségi elemzésének módszereit, és az eredmények megbízhatóságát tárgyalja.

Környezetvédelemben csak a validált, mennyiségi és minőségi jellemzőket egyaránt megadó elemzési módszereknek van teljes értéke, amik a jogi eljárásokban is megállják helyüket.

A környezetvédelmi analitika problémája rendszerint nem az, hogy a vizsgált komponensek koncentrációja nem éri el a műszer kimutatási határát, hanem, hogy a zavaró komponensek elfedik a keresett komponens jelét.

Környezetvédelemben a mérendő komponensek kiválasztását **több szempont** határozza meg:

- Komponensek mérgező hatása,
- Komponensek előfordulása és koncentrációja,
- Mérendő közeg és környezete,
- Komponensek mérhetősége.

A fenti szempontok között talált **kompromisszum** határozza meg a végzendő méréseket.

A környezetvédelmi analitikát többféle szempontból lehet felosztani:

- Mérések **gyakorisága** szerint: rendszeres mérések, eseti mérések.
- **Komponensek** szerint: komponensek elkülönült mérése, csoportra vagy összegére jellemző adatok.
- Mérés **helye** szerint: helyszíni (terepi) mérések, laboratóriumi mérések.
- Mérendő komponensek **koncentrációja** szerint: makrokomponensek, nyomelemek.
- Alkalmazott **mérési módszer** szerint: klasszikus, elektoranalitikai, molekulaszpektroszkópiái, kromatográfiás, atomspektroszkópi, és biológiai alapú tesztek.

Egy környezetanalitikai elemzés folyamata:

Mintázás

Mintázás szempontjai:

- Reprezentatív legyen,
- Vegye figyelembe a vizsgálandó közeget és a vizsgálandó anyagot,
- Könnyen, gyorsan jól reprodukálhatóan végrehajtható módszer legyen,
- A mintázás a megfelelő helyen és időben történjen,
- Ne okozzon kárt, és biztonságosan lehessen végrehajtani.

A mintázáskor elkövetett hibák később nem helyesbíthetők.

Az elemzés egész folyamata alatt és különösen a mintavételnél, ügyelni kell, hogy a minta ne torzuljon, ne legyen sem mintavesztés, sem keresztzennyezés. A fentiek miatt elengedhetetlenek a vakminták, és a kísérőstandardok alkalmazása.

A minták változatlanságát meg kell őrizni a szállításuk alatt (pl. pH, hűtés, megfelelő edény stb.) mindaddig, amíg minta-előkészítésük vagy mérésük el nem kezdődik.

A nem konzerválható paramétereket (pH, oldott oxigén, zavarosság stb.) helyszínen kell mérni.

Minta-előkészítés

A környezeti minták gyakran nem mérhetőek közvetlenül. A mintákat gyakran, **koncentrál**ni, **tisztít**ni, **oldószerüket megváltoztatni**, és a komponenseket analízishez **átalakít**ni (származékképzés) kell. A makrokomponensek méréséhez nem mindig szükséges minta-előkészítés, de a nyomelemzéseknél (ppm-ppt) majdnem minden esetben.

Gáz és könnyen gőzzé alakítható minták

Illékony komponenseket a minta légteréből (head-space) elemzésével mérhetjük. A paraméterek jól reprodukálhatósága (hőmérséklet, sótartalom, térfogat stb.) fontos követelmény.

A nyomnyi mennyiségű illékony összetevőket adszorbensen kell koncentrálni, amiről gyors lefűtéssel, vagy oldószeres extrahálással nyerjük ki a mintát (purge and trap).

Folyadék minták

Folyadék-folyadék extrahálás

A vízzel nem elegyedő folyadék-folyadék extrahálás gyors, egyszerű, mérsékelt szelektív módszer a vizsgálandó komponensek kivonására vizes közegből.

$$K_d = C_{org}/C_{aqu}$$

Ahol: K_d , megoszlási állandó; c_{org} , komponens koncentrációja szerves fázisban; C_{aqu} , komponens koncentrációja vizes fázisban.

$$E = K_d V / (1 + K_d V)$$

Ahol: E, extrahálási arány; V, fázisarány (org/aqu).

Az extrahálás után az oldószeret betöményítjük, vagy teljesen elpárooljuk. 10^3 - 10^6 nagyságú koncentrációra és a mintához képest nagy polaritású komponensek eltávolítására alkalmas módszer.

Általában többszöri ismétlést, és a vizes mintánál kisebb térfogatú szerves fázist (1/5-1/100) alkalmazunk.

Szilárd fázisú extrahálás (SPE)

- A mintafelvétel előtt a szilárdfázisú adszorbert **kondicionálni** kell.
- A vizes mintát **ráöntjük** az előkezelt adszorberre, és vakummal leszívátjuk az oldószert.
- Egyes mátrixkomponenseket oldószer adagolással **lemossuk** az oszlopról.
- A mintát a megfelelő oldószerral **leoldjuk** az oszlopról és betöményítjük. A leoldás lehet többlépcsős is, ekkor egyes analizálandó komponenseket eltérő frakcióban nyerjük.
- Frakciókat **betöményítjük**, vagy az eluent teljesen elpárologjuk.

10^3 - 10^9 nagyságú koncentrálásra alkalmas módszer. A keresett komponensekhez képest kis polaritás különbségű komponensek eltávolítása is lehetséges.

Gélkromatográfias alapon működő SPE méret szerinti elválasztást végez.

Az ioncserés alapon működő SPE oszlopok is használatosak, amelyek töltésszám és ionerősség különbségek alapján szelektál.

Különleges SPE-k: SPME, diszk.

Szilárd minták

A szilárd mintákat rendszerint oldatba kell vinni, hogy a bennük lévő komponensek mérhetőek legyenek, és hogy elkerüljük a szemcsék inhomogenitásából eredő mérési hibákat.

A szilárd anyagból lehet a komponenseknek csak egy részét kioldani. Evvel a módszerrel megállapítható, hogy a szilárd anyagból mennyire mobilizálhatóak az egyes komponensek (speciációs analízis). Számos, több lépcsős extrahálási folyamatot dolgoztak ki.

A **Soxlet** módszernél valamilyen oldószert elpárologtatunk a szedőből, és ennek a hűtőn lecsapódott gőze csöpög a mintára. Amikor az oldat (oldószer +kioldott anyag)

szintje eléri a szifon szintjét a folyadék átbukik és lecsorog a szedőbe. A folyamat az extrahálás során számos esetben ismétlődik és a szilárd minta „kilúgozódik”, míg a szedőben az oldat egyre töményedik. A Soxlet extrahálás egyszerű mérsékelt hatékony időigényes módszer.

A **mikrohullámú roncsolással** a minták atomjaikra bontva teljesen feloldhatók. A feloldáshoz tömény salétromsavat vagy szilikát tartalmú mintáknál tömény salétromsav és hidrogén fluorid keverékét használják. A roncsolás szabályozott nagy nyomáson, hőmérsékleten időprogramozottan történik teflon bélésű edényekben.

A mikrohullámú feltárás, gyors hatékony módszer.

A gerjesztett oldószeres extrahálás (ASE) zárt edényben emelt hőmérsékleten és nyomáson végzett szerves oldószeres kioldás. A fenti körülmények közt a diffúzió felgyorsul, így a termodinamikailag meghatározott megoszlási egyensúly beállása gyors folyamat.

A származékolás célja lehet:

- Az extrahálás segítése,
- A detektálás javítása,
- Az analízis követelményeinek megfelelő formára hozás,
- Mátrixtól való elválasztás.

A szilárd anyagok összetétele nagyban függhet a szemcsék méretétől is (pl. lebegőanyag).

Gyakran szükséges a víz eltávolítása a mintából a következő módszerekkel: elpárologtatás (hővel, vákuummal), szárítószerrel, liofilezéssel, fordított ozmozissal.

Klasszikus analitikai módszerek a környezetvédelemben

Csapadékképzéses reakciók

Gravimetria tömeghatározási módszer, ahol a meghatározandó komponenshez fokozatosan reagenst adunk, és a levált csapadék tömegét mérjük.

$$K_{\text{old}} = \frac{[K^{z^+}]^{v^+} [A^{z^-}]^{v^-}}{[K^{v^+} A^{v^-}]}$$

Ahol: K_{old} , oldhatósági egyensúly; K és A, kation és anion; v^+ és v^- , kation és anion sztöchiometriai együtthatói; z^+ és z^- , kation és anion töltése.

Gravimetriánál alkalmazott reakciónál $K_{\text{old}} < 10^{-8}$.

Gravimetria folyamata:

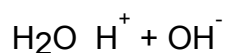
Lecsapás reagenssel → oldat és csapadék elválasztása → csapadék mosása → csapadék hőkezelése → csapadék mérlegelése → eredmény kiszámítása. Gravimetria makrokomponensek meghatározására alkalmas, lassú, olcsó, gyenge szelektivitású módszer.

Csapadékos titrálások

Titráláskor a vizsgált anyag csapadékot ad a reagenssel, és az indikátor csak az vizsgálendő anyag elfogyása után lép reakcióba a reagenssel. A titrálási görbét lehet műszeresen is követni a reagens vagy a mérendő komponens koncentrációjának követésével. A csapadékos titrálás makrokomponensek meghatározására alkalmas, lassú, olcsó, gyenge szelektivitású módszer.

Sav-bázis titrálások

Titrálás alapja a hidrogénion koncentráció változása vizes oldatban, amit indikátorral, vagy a titrálási görbe mérésével észlelünk.



$$\text{Víz ionszorzat: } K_v = [H^+] \times [OH^-] = 10^{-14} \quad \text{pH} + \text{pOH} = 14$$

A titrálási görbéken a pH értékét mérjük a reagens fogyásának függvényében. A görbe inflexiós pontja (átcsapási pont) adja meg a keresett anyag koncentrációját. A mérést indikátorral vagy műszerrel követjük. A különböző indikátoroknak más-és más tartományban van a színváltozásuk.

Erős savak titrálása erős bázissal meredek görbét ad, pH = 7 átcsapási ponttal. Gyenge sav titrálása erős bázissal lapos görbét ad pH > 7 átcsapási ponttal. A pontos mérés érdekében a gyenge savak titrálásánál ismert mennyiségű (a savnál több) erős lúgot adunk az oldathoz, és a maradék lúgot titráljuk erős savval. A hozzáadott lúg és a erős sav fogyásából kapott érték különbsége adja az oldat savtartalmát. A módszert visszatitrálásnak nevezzük.

A sav-bázis titrálások marómutatók meghatározására alkalmas gyors pontos olcsó, de gyenge szelektivitású módszer.

Komplexometriás titrálások

A komplexometriás titrálásoknál a mért anyagot komplexáljuk valamilyen ligandummal. Az indikátor csak a vizsgált anyag elfogyása után lép reakcióba a komplexképzővel színváltozást mutatva. Valamilyen ismert koncentrációjú komplexképző (kelátképző, EDTA) fogyását (térfogatát) mérjük, és ezzel egyenértékű a keresett anyag.

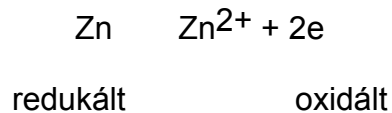
$$K_{ST} = \frac{[MY]}{[M] [Y]}$$

Ahol: K_{ST} , komplex stabilitási állandó; $[MY]$, komplex; $[M]$, szabad fémion; $[Y]$, ligandum.

Alkalmazott módszereknél $K_{ST} > 10^8$. Indikátor legalább két nagyságrenddel kisebb K_{ST} -vel rendelkező színes anyag mint a mért komponens.

Redoxi titrálások

Redoxi titrálásnál az aktuális redoxipotenciál értéket mérjük a mérőoldat függvényében.



A magasabb standard redoxipotenciájú anyaggal mérjük a kisebb redoxipotenciájút, és potenciométert vagy redoxindikátort használunk a végpont

jelzésére. **Elektrokémiai alapfogalmak**

- Ha két különböző fém (elektród) merül elektrolit oldatba, akkor elektromos potenciált mérhetünk a két elektród között.
- Elektród felületének közelében az oldat feldúsul, vagy elszegényedik egyes ionokban töltés szétválasztás közben (polarizáció).
- A töltésszétválasztás hatására egyensúlyi potenciál alakul ki, amely függ az elektrolit oldattól (anyag és koncentráció) és az elektródotól (anyag).
- Elektródpotenciál feszültség hatására eltérhet az egyensúlyi potenciáltól.
- Az ionok feszültség hatására elmozdulnak az ellentétes töltésű elektród irányába.
- A méréseknél mindig két elektródot használunk a **mérő** elektródot és a **referencia** elektródot.

Elektródok típusai

- **Elsőfajú elektródok**, fémelektródok ($\text{Zn} \rightarrow \text{Zn}^{2+}$), amelyek saját ionjaik az oldatába merülnek.
- **Másodfajú elektródok**, fémelektródok, amelyek saját rosszul oldódó sójukkal borítottak ($\text{Ag}/\text{AgCl} \rightarrow \text{Cl}^-$).
- **Redoxi elektródok** inert fémelektródok ($\text{Pt} \rightarrow \text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$), amelyeken más anyagok redoxifolyamatai játszódnak.
- **Ionszelektív elektródok** félvezető vagy ioncserés alapon elektródok (üvegelektród \rightarrow pH, $\text{LaF}_3 \rightarrow \text{F}^-$), amelyeken csak bizonyos anyagok reakciói történnek.

Az elektródok bizonyos pH határok közt működnek, a mérést más ionok zavarhatják.

Környezetvédelemben felhasznált elektroanalitikai módszerek csoportosítása:

Potenciometria

A potenciometriás méréseknél a mért paraméter cellafeszültség ($I=0$). A mért érték lehet egy adott oldat értéke, vagy titrálási görbe.

Potenciometria alapegyenlete a **Nernst** egyenlet:

$$E = E_0 + \ln[c] \cdot R \cdot T / nF$$

Ahol: E, elektródpotenciál; E_0 , standard elektródpotenciál; [c], mért ion koncentrációja; R, egyetemes gázállandó; T, abszolút hőmérséklet; n, elektronszám változás; F, Faraday konstans.

Feszültség hatására az elektródpotenciál eltérhet az egyensúlyi potenciáltól.

Voltametria

Voltametriánál a mért paraméter az áramerősség a feszültség függvényében $E \rightarrow I$. Az ionok diffúzióval - ami függ az ionok koncentrációjától - jutnak az elektródra.

Coulometria,

Coulometriánál a töltésmennyiséget mérik állandó feszültség mellett. Az elektródreakcióban keletkező töltést mérjük.

Az AOX (szerves adszorbeált halogén) mérés menete: Extrahálás \rightarrow Égetés \rightarrow Elnyeletés savas oldatban \rightarrow titrálás elektrolitikusan generált Ag^+ ionokkal.

Vezetőképesség mérés (konduktometria)

Konduktometriánál az ellenállás reciprokát mérik a konstans feszültség mellett.

Elktroforézis

Elektroforézis (Cu^{2+} , ClO_4^- , Fe^{2+}/Fe^{3+} , naftilszulfonátok, fenol, PAH), az ahol az ionok migrációs idejét mérjük állandó feszültség vagy áramerősség mellett. Az egyes komponensekre jellemző migrációs idejük, míg a jel nagysága (csúcsterülete) arányos mennyiségükkel. A környezetvédelemben főleg a kapilláris elektroforézis néz fontos szerep elé.

A kapilláris elektroforézis (CE) előnyei:

- Egy elemzés során számos komponens meghatározható, mivel nagy hatékonyságú módszer:

A nagyhatékonyság okai: Kapillárisnak **nagy a felülete** az elektrolit tömegéhez képest, ami **nagy hőleadást** biztosít lehetővé téve **magas feszültség** (30 kV) alkalmazását **nagy hatékonyságot** eredményezve.

U alakú áramlásprofil,

Nincs anyagátadási ellenállás,

On-column detektálás (UV, FI)

- Nyomnyi mennyiségű anyag nagy mennyiségű mátrix mellett is meghatározható,
- Mérések széles lineáris tartománnyal rendelkeznek,
- Méréseknek minta (0,2-2 nl/mérés) és puffer (0,1-1,0 ml/minta) szüksége csekély,
- Gyors módszer (< 1 min).

A kapilláris elektroforézis folyamata:

- A kvarc oszlop falán negatív elektromos kettősréteg alakul ki, ami elektroosmotikus áramlást (EOF) gerjeszt a katód irányába.
- Az EOF nagyobb, mint az elektrolitban lévő ionok saját sebessége, ezért a kationok és az anionok is a katód felé áramlanak.
- A migrációs sorrend a következő: több töltéssel rendelkező kationok, egy töltéssel rendelkező kationok, semleges molekulák, egy töltéssel rendelkező anionok, többlettöltéssel rendelkező anionok. Azonos töltéssel rendelkező ionoknál a kisebb molekulának (szolvátburokkal együtt) nagyobb az áramlási sebessége, mint a nagyobb térfogatúé), tehát a kisebb kationok érkeznek a detektorhoz előbb.
- Az ionok vándorlási sebessége, migrációs ideje (az ionok vándorlási ideje az injektálási ponttól a detektorig) egy adott ionra állandó azonos körülmények (oszlop, háttér elektrolit, feszültség) között.

- Semleges molekulákat egymástól elektroforézis jelenséggel önmagában nem lehet elválasztani, mert az összes semleges molekula az EOF sebességgel áramlik.
- A semleges molekulákat elektroforézissal csak kromatográfia segítségével lehet meghatározni, egymástól elválasztani. Ilyenkor a semleges molekulák különböző erősséggel komplexálódnak töltött molekulákkal és komplexált asszociátumok sebessége eltér az EOF-tól. A semleges molekulák komplexálási állandójukkal összhangban választhatók el egymástól.
- Az ionok minőségi jellemzője a migrációs idő, mennyiségi jellemzője a csúcsterület.
- A CE módszerrel szerves (fenolok, PAH, naftilszulfonátok) és szervetlen molekulák (NO_2^- , NO_3^- , Cl^- , F^- , Fe^{2+} , Fe^{3+}) egyaránt elválaszthatóak egymástól.
- A CE leggyakrabban használt detektálás az UV (direkt, indirekt), de FI, és MS is használatos.

Molekulaspektroszkópia

Általános fogalmak

Az elektronmágneses hullámok kölcsönhatásba léphetnek a vizsgált anyagokkal.

Molekulák belső energiája csak, diszkrét értéket vehet fel, ezért az energia-felvételek és leadások is kvantáltak. Egy molekulában háromféle módon történhet az energia felvétel és leadás, amelyek csökkenő sorrendben a következők: elektronátmenetek > rezgésiátmenetek > forgásiátmenetek.

A mért jelenség lehet elnyelési (abszorpció) vagy sugárzási (emisszió).

Alapképletek:

$E = h \cdot \nu$, foton energiája; ν , fény frekvenciája; h , Planck állandó.

$c = \lambda \cdot \nu$, fény sebessége az adott közegben; λ , fény

hullámhossza

$$n_x = c_0 / c_x$$

n_x , x közeg törésmutatója; c_0 , fény sebessége vákumban; c_x , fény sebessége x közegben.

Nagyobb hullámhossznak kisebb a törésmutatója és energiája.

Lambert-Beer törvény:

$$A = \lg I_0 / I = \varepsilon \cdot l \cdot c$$

A , abszorbancia; I_0 : bemenő fényintenzitás; I , kimenő fényintenzitás

ε : moláris abszorpciókoefficiens ($\text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$); l , rétegvastagság (fényút a mintában); c , komponens koncentrációja

$$T(\%) = I / I_0 \cdot 100$$

T : transzmittancia

Az energia átmenetek csak vákuumban különíthetők el teljesen egymástól és csak az egyszerűbb molekuláknál.

- A közeg sűrűsödésével és a molekulák szerkezetének bonyolódásával a sávok összeolvadnak és folytonossá válnak burkológörbét adva.
- A burkológörbe maximuma, **hullámhossza** (λ) jellemző az adott molekulára, vagy egy adott funkciós csoportra.
- A maximum nagysága, az **intenzitás** függ az anyag **koncentrációjától** és a molekula **szerkezetétől**.

Egy oldatban különböző molekulák elnyelése és sugárzási intenzitása összeadódik.

Infravörös spektroszkópia (IR)

- Az elektromágnes sugárzás abszorpcióján alapuló módszer a 0,7-300 mm hullámhossz (1,7–0,005 eV) tartományban.
- A molekulában lévő atomok és csoportok **rezgési** (vibrációs) és **forgó** (rotációját) normál frekvenciáit, elnyelési sávjainak **hullámszámát** ($1/l, \text{cm}^{-1}$) méri.
- Az elnyelés **intenzitása koncentráció és anyag függő**.
- Közepesen érzékeny, csoport specifikus módszer.
- Környezetvédelmi alkalmazási területek: kőolaj, fenol szennyezések, légszennyező gázok ($\text{SO}_2, \text{CO}, \text{CO}_2, \text{NH}_3$).

IR rezgések fajtái:

síkban	szimmetrikus nyújtó, aszimmetrikus nyújtó, ollózó hajlító
térben	csavaró csóváló

Rezgések energiái:

- A rezgési erők nagyobbak, mint a forgásiak.
- Nagyobb mozgásoknak (táv, szög) nagyobb az energiája mint a kisebbek mozgásoknak.
- A nyújtó erők nagyobbak, mint a hajlító erők

- A hidrogén nyújtó rezgései magasabb frekvenciájúak, mint más atomoké.
- Kötésrendek frekvenciája: hármás > kettős > egyes. IR vizsgálatok közege: •

Gáz Jól elvált sávok, 1 méteres küvetták (fényút a küvettahossz többszöröse is lehet tükrök segítségével). •**Folyadék:** Inert hordozóra felvitt folyadékfilm (0,02- 1 mm) alakjában. A víz oldószerként nem jó.

•**Szilárd** Az anyagot KBr pasztillába keverik (0,2-1%). Mérsékelt quantitativitású eljárás..

IR spektrométer alkatrészei:

Fényforrások: Közeli IR, wolfrám
 Analitikai IR, SiC, Zr-Th-Y, NiCr, szabályozható lézer
 Távoli IR, Hg

Cellák, tükrök, lencsék az IR-ben áteresztő LiF, NaCl, KBr anyagúak, nedveség érzékenyek.

Fényosztók: szűrők, prizmák, rácsok, rések, interferométerek.

Az interferométerek használata lehetővé teszi a Fourier transzformáció (FTIR) alkalmazását. AZ FTIR technika sok felvételt hasonlít össze, így a véletlenszerű jelek egymást kioltják, és a hasznos jelek pedig erősítik egymást.

Detektorok: HgCdTe, InSb, NiCr-Ni, fotocella, fotocella-sor, termisztorok (félvezetők).

Fényszóráson, alapuló technika, ahol a bemenő fénnel ellentétes oldalon kijövő fény intenzitását mérjük.

- Ha az oldatban részecskék található, akkor a bemenettel szemközt kijövő fény intenzitását csak részben határozza meg a Lambert –Beer törvény.
- Az oldatban lévő részecskék szórják a fényt, ami szintén csökkenti a kijövő fény intenzitását.
- A kijövő fény intenzitása nem csak a részecskék koncentrációjától függ, de az alkalmazott fény hullámhosszától és a fényútba kerülő részecskék szemcseméretétől is.

A mérésekhez kalibrálás szükséges standard szemcseméretű oldatokkal.

Környezetvédelmi alkalmazások: szulfáttartalom, zavarosság, lebegőanyag meghatározások. Fényszóráson, alapuló technika, ahol a bemenő fényrel mérőlegesen kijövő fény intenzitását és spektrumát mérjük. A kijövő fény függ a részecskék koncentrációjától, anyagától, és az alkalmazott fényforrástól.

Környezetvédelmi alkalmazásai megegyeznek a turbidimetriával.

Ultravörös-látható spektrofotometria (UV-VIS)

Az ultraibolya (UV, 180-400 nm) és látható fény (VIS, 380-800 nm) spektrofotometriás módszerek az elektromágneses sugárzás szelektív abszorpcióján alapulnak. Leggyakrabban olyan műszert használunk, amely mindkét tartomány mérésére alkalmas.

Elektronátmenetek energiatartalma: $\sigma \rightarrow \sigma^* > \pi \rightarrow \pi^* \approx n \rightarrow \sigma^* > n \rightarrow \pi^*$.

A kromof (fényelnyelő) csoportok hullámhosszát más szubsztituens csoportok eltolhatják. Fényelnyelés moláris extinciókoefficiensét (ϵ) befolyásolhatja a hőmérséklet, pH és az oldószer.

Egy oldószert csak a cut-off feletti hullámhosszú méréseknél lehet használni.

UV –VIS mérési tartománya: $10^{-5} - 10^{-3}$ mol/l.

Javasolt működési tartomány: $20\% < T < 60\%$ és $0,7 < A < 0,2$.

Az eredő abszorpció a komponensek lineáris kombinációja.

Zavaró komponenseket tartalmazó mátrix esetén addíciós kalibrációt alkalmazunk, ahol a hozzáadott ismert koncentrációból számítjuk az ismeretlen koncentrációt.

UV-VIS műszerek:

- Lámpák: deutérium, halogén (WJ), Xe,
- Fényfelbontók: szűrők (5-50 nm felbontás), prizmák, rácsok, interferométerek (0,1 nm felbontás lehetséges).
- Egy és két utas készülékek.
- Küvetták: kvarc (UV-VIS), üveg (VIS), gáz (50-200 mm), folyadék (10- 50 mm).
- Detektorok: fény sokszorozók, fotocellák, diódasorok (InGaAs).

Környezetkémiai alkalmazások: fémek komplex alakban, BTEX, fenol, ammónia, jóformán összes szennyezőre van színreakció.

Fluoreszcencia

- A fényelnyeléshez és a kibocsátáshoz kvantált energiák tartoznak.
- A kibocsátott energia kisebb, mint a felvett, ezért a fluoreszcens sugárzásnak nagyobb a hullámhossza, mint az abszorpciójának.
- Az elnyelési sávoknak csak kis hányada okoz fluoreszcenciát.
- Fluoreszcens spektrumon egyszerűbbek, mint az abszorpciók.

- Fluoreszcens sugárzás 10^{-9} sec-on belül követi a gerjesztést (besugárzás).
- Foszforencia sugárzás 10^{-6} sec – hét időtartamon belül követi a gerjesztést.

$$I_F = I_0 * \Phi * \epsilon * l * c$$

I_F , fluoreszcencia intenzitása; I_0 , gerjesztő fény intenzitása; Φ , kvantumhasznosítási tényező; ϵ , moláris abszorpciós koefficiens ($\text{dm}^3 * \text{mol}^{-1} * \text{cm}^{-1}$), l , rétegvastagság (fényút a mintában); c , komponens koncentrációja.

A Fluoreszcencia mindazon paramétereiktől függ, amelyektől az UV-VIS, de oldószertől még hangsúlyozottabban. Poláros oldószerek kioltják a sugárzást (quenching).

Fluoreszcens spektrofotométer alkatrészei.

- Fényforrás: Xe, Hg lámpák, gyakran pulzáló fénnel.
- Optika: kvarc
- Állítható rések
- Detektor : fénysokszorozó (fotomultiplayer), dióda
- Oldószer: szerves, apoláris

A besugárzás és a fénykibocsátás mérése rendszerint egymásra merőleges elrendezésű.

Érzékeny (ppb), közepesen jó szelektivitású módszer.

Fluoreszcencia környezetanalitikai felhasználásai: olajszennyezés (PAH), levegő kéndioxid tartalmának meghatározása ózonnal, levegő NO_x tartalmának meghatározása, kromatográfiás detektorok, immunesszék.