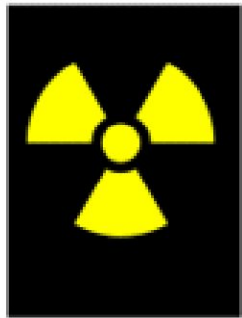
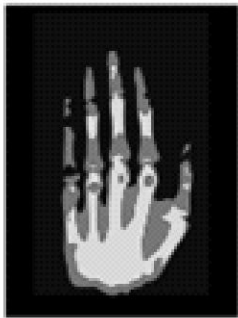


# ИК-спектроскопия

## электромагнитный спектр



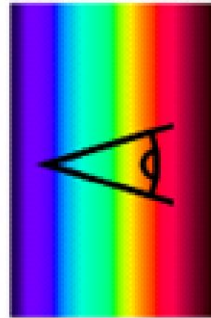
0,01 нм



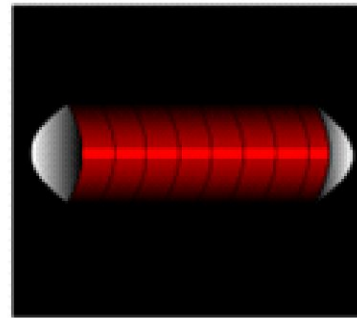
1 нм



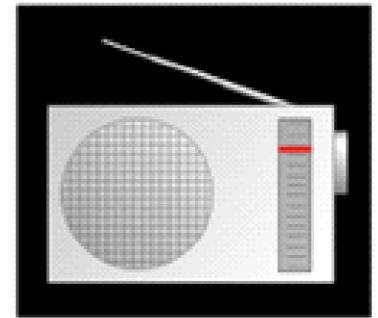
100 нм



400-700 нм



1 мм – 1 см



1 м – 1 км

Инфракрасное излучение — электромагнитное излучение, занимающее спектральную область между красным концом видимого света (с длиной волны  $\lambda = 0,74$  мкм) и микроволновым излучением ( $\lambda \sim 1—2$  мм).

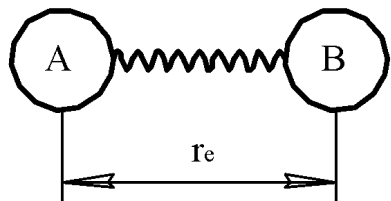
Сейчас весь диапазон инфракрасного излучения делят на три составляющих:

коротковолновая область:  $\lambda = 0,74—2,5$  мкм;

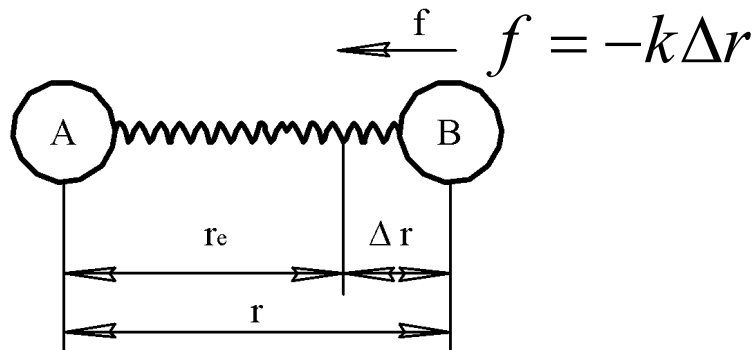
средневолновая область:  $\lambda = 2,5—50$  мкм;

длинноволновая область:  $\lambda = 50—2000$  мкм;

# Теоретические основы инфракрасной спектроскопии



а



б

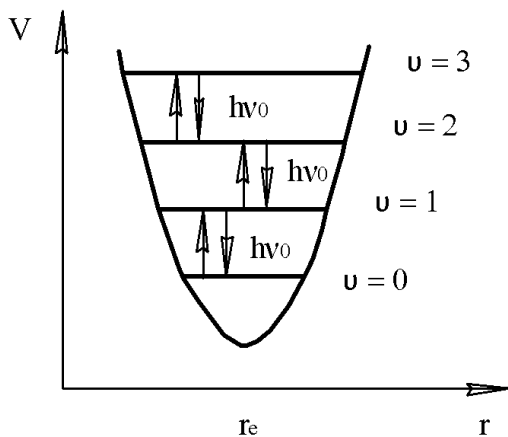
Потенциальная энергия

$$V_{\text{гарм.}} = \frac{1}{2} k \Delta r^2$$

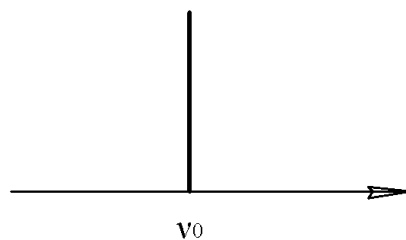
Колебательная энергия гармонического осциллятора

$$E_{\text{кол.}}^{\text{гарм.}} = h\nu_0 \left( \nu + \frac{1}{2} \right)$$

Модель молекулы АВ, состоящей из двух атомов (шариков), соединенных упругой химической связью (пружиной), имеющей равновесное расстояние  $r_e$  (а). Система АВ в состоянии смещения на расстояние  $\Delta r$  (б); появление при этом возвращающей силы  $f$ .



а



б

Кривая потенциальной энергии и уровни колебательной энергии гармонического осциллятора (а). Схематический колебательный спектр гармонического осциллятора (б).

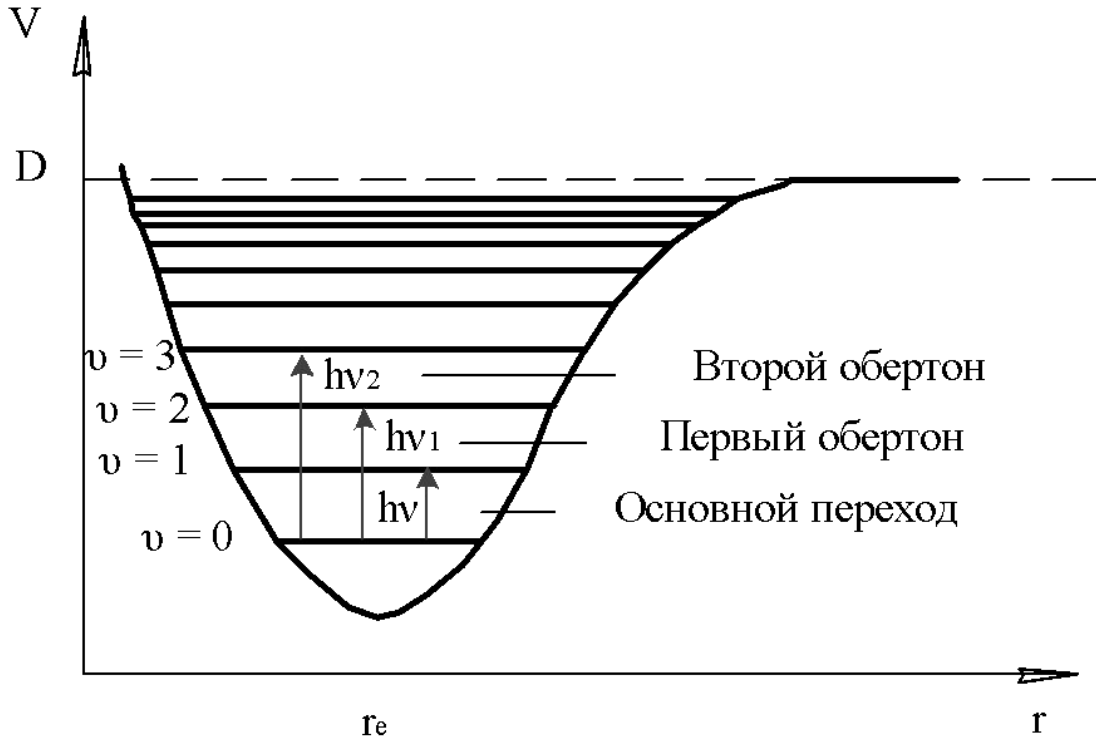
$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}}$$

Потенциальная энергия  
ангармонического осциллятора

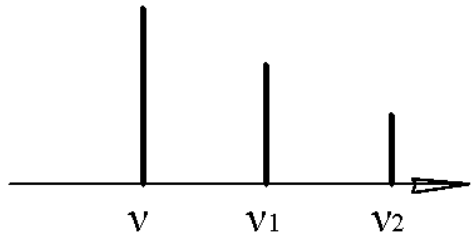
$$V_{\text{ангарм.}} = D \left( 1 - e^{-a\Delta r} \right)^2 \quad a = 2\pi\nu_0 \sqrt{\frac{M}{2D}}$$

Колебательная энергия  
ангармонического осциллятора

$$E_{\text{кол.}}^{\text{гарм.}} = h\nu_0 \left( \nu + \frac{1}{2} \right) - \frac{h^2\nu_0^2}{4D} \left( \nu + \frac{1}{2} \right)$$

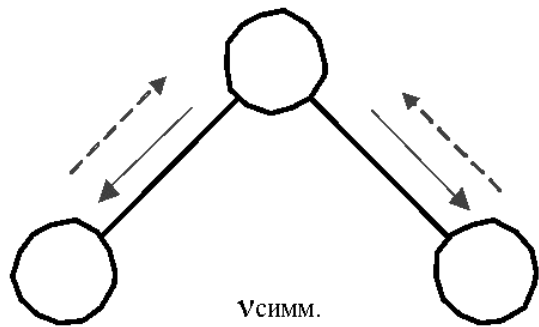


а



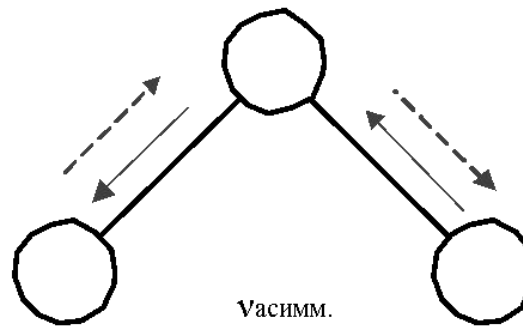
б

Характеристичным по частоте является нормальное колебание атомной группировки, частота которого сохраняется постоянной для ряда структурно родственных молекул, содержащих данную группировку.



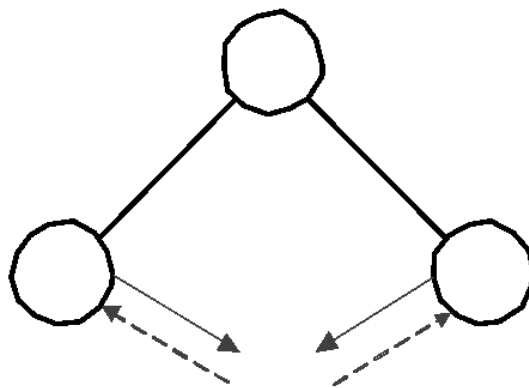
Усимм.  
Валентное симметричное  
колебание

а



Уасимм.  
Валентное асимметричное  
колебание

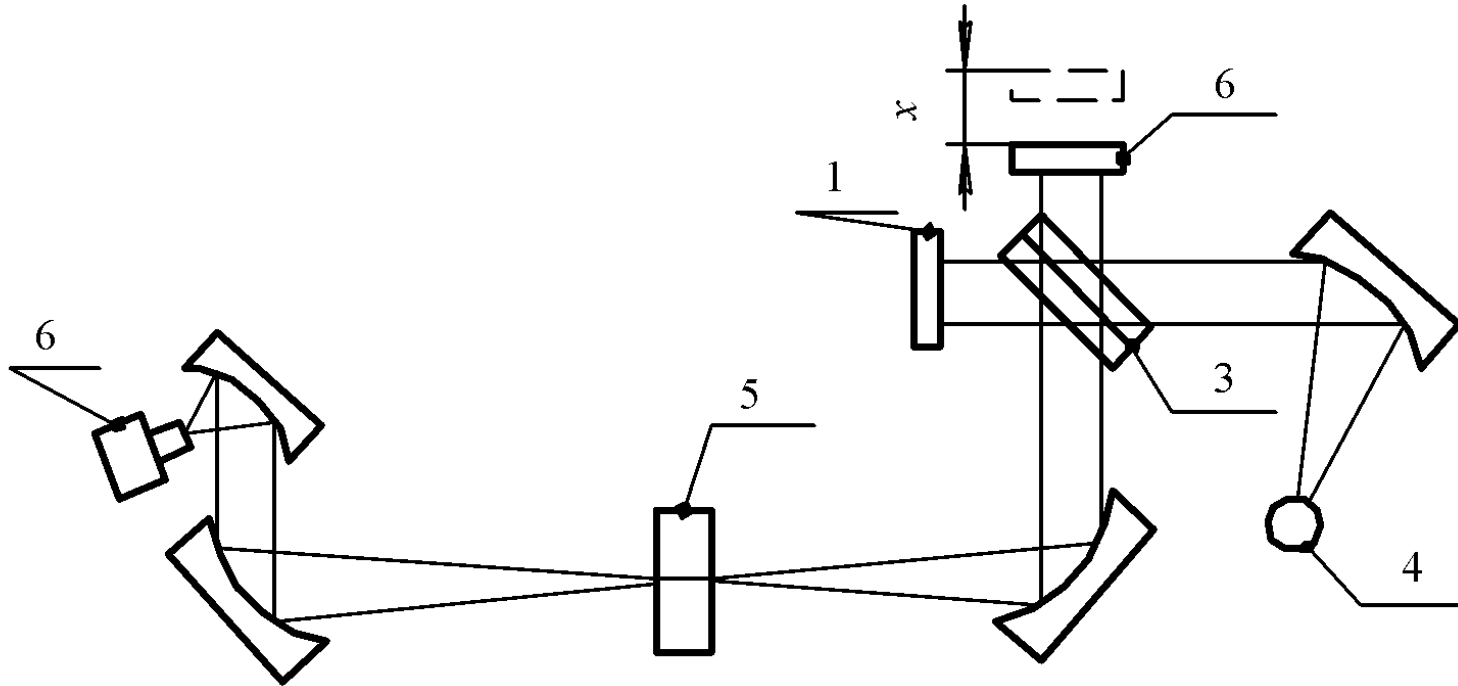
б



$\delta$   
Деформационные  
колебания

в

## Принципиальная схема



Оптическая схема Фурье-спектрометра:

1 – неподвижное зеркало интерферометра; 2 – подвижное зеркало; 3 – светоделительная пластина; 4 – источник излучения; 5 – исследуемый образец; 6 – детектор излучения.

## Преобразование Фурье

Благодаря преобразованию Фурье, возможно одновременно подавать излучение на образец различной частоты

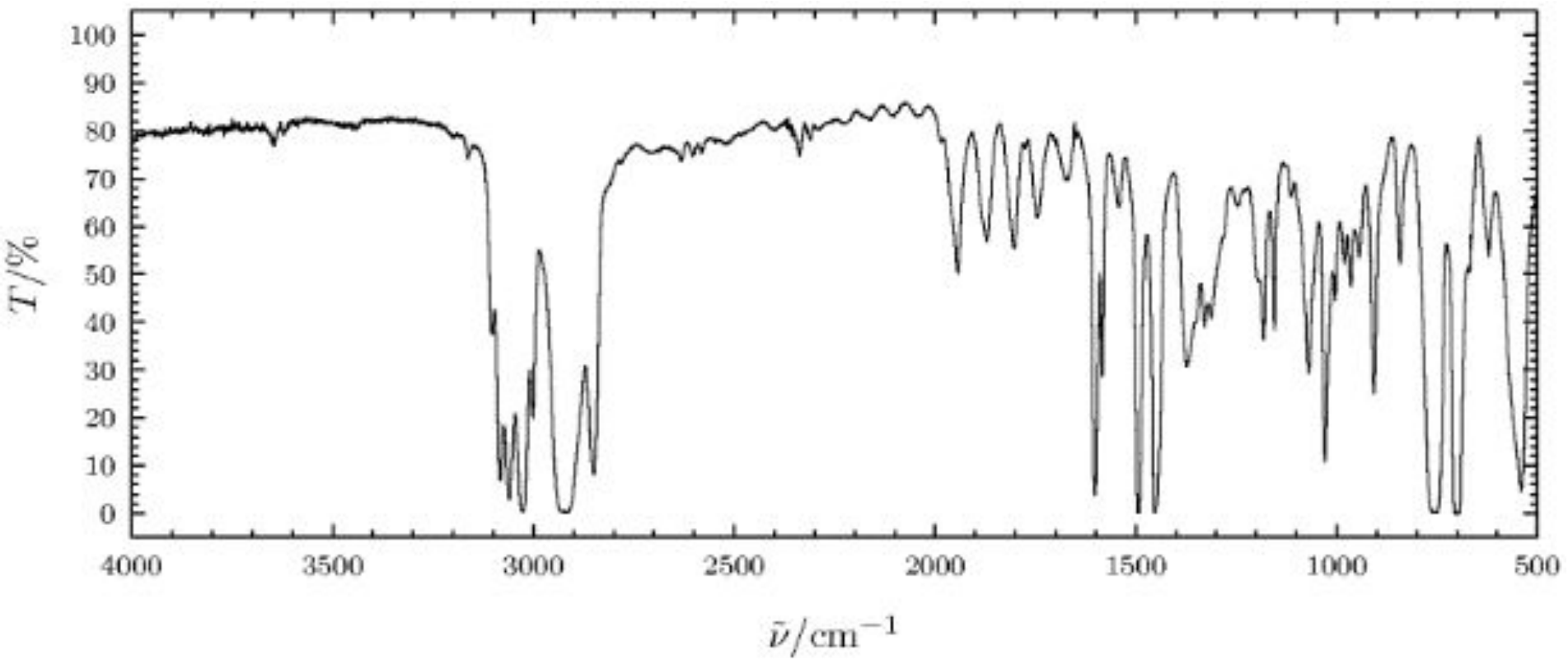
$$I(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(x) \cos(2\pi x\nu) dx$$

# Аппаратное оформление

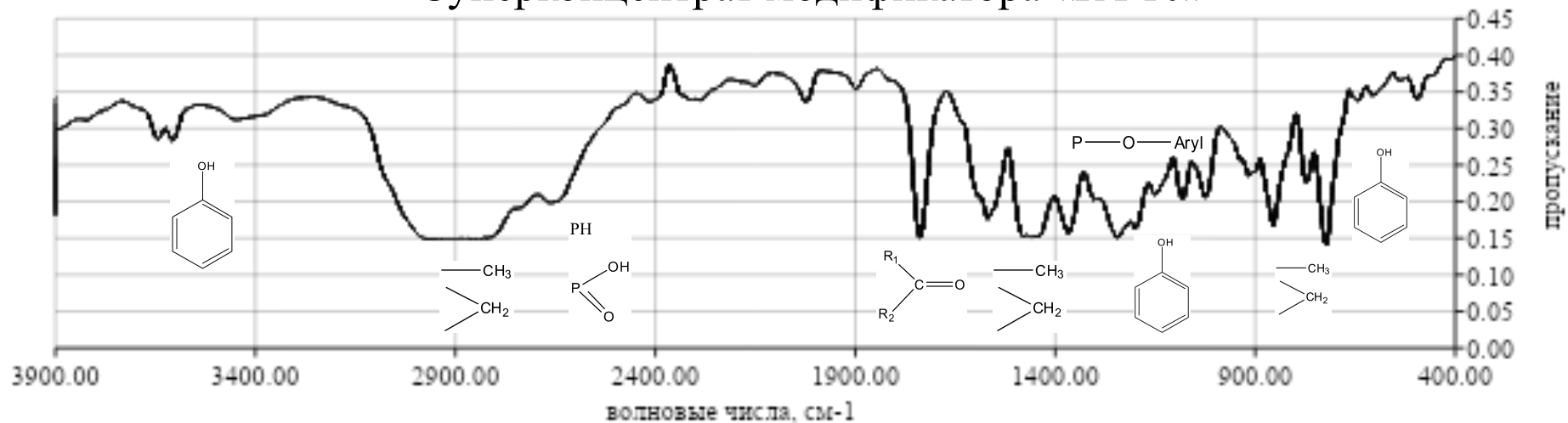


Характеристика	Значения, для прибора FT/IR-6100
Рабочий спектральный диапазон	от 7,800 до 350 см <sup>-1</sup>
Расширение спектрального диапазона	от 15,000 до 20 см <sup>-1</sup>
Отображаемый спектральный диапазон	от 15,000 до 0 см <sup>-1</sup>
Точность	в пределах $\pm 0.01$ см <sup>-1</sup>
Разрешение	0.5 см <sup>-1</sup>
Оптическая схема	Однолучевая
Кюветное отделение	Размер: 200 мм × 260 мм × 185 мм
Отношение сигнал/шум	42000:1
Детектор	DLATGS (дополнительно MCT, Si, InSb, InGaAs, PAS)
Источник излучения	Высокоинтенсивный керамический (галогеновая лампа, охлаждаемая ртутная лампа)
Покрытие зеркал	Al
Скорости интерферометра	от 0.5 до 8 мм/сек
Быстрое сканирование	дополнительно, 20 Гц
Интерфейс с компьютером	USB

# ИК-спектр полистирола



# Суперконцентрат модификатора «РА 10»



3644,34	колебания OH группы когда водородная связь отсутствует		
3606,84	колебания OH группы когда водородная связь отсутствует		
2967,75	CH <sub>3</sub> ассиметричные	валентные колебания в CH <sub>2</sub> связях	
2662,67	POOH валентные колебания	или NH NH <sub>2</sub>	или COOH
2412,38	PH валентные колебания	или NH NH <sub>2</sub>	или COOH
2289,2	PH валентные колебания	или NH NH <sub>2</sub>	или COOH
2023,8			
1898,66	COOH		
1737,93	RRC=O		
1568,61	карбоксилат		
1461,45	CH <sub>2</sub> симетричные	P-O-Alkyl	
1367,04	CH <sub>3</sub> ассиметричные	P-O-Alkyl	ОСОСН <sub>3</sub> СОСН <sub>3</sub>
1243,67	область отпечатков пальцев C-F	или- - - P=O	
1150,05	область отпечатков пальцев POOH	или фенолы	или- - - P=O
1081,58	отпечатки пальцев СО или С-Сl	или фенолы	PO-Aryl
1024,14	отпечатки пальцев СО или С-Сl		
916,13	C=C-H		
854,92	ароматические атом водорода		
772	ароматические атом водорода		
722,99	ароматические атом водорода		
641,92	ароматические атом водорода		