

## IR spektroskopie

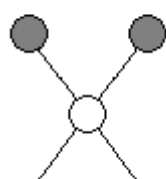
Přechody mezi vibračními (+rotačními) hladinami  
spektra vibrační, vibračně rotační – jemná struktura

Vibrace molekul

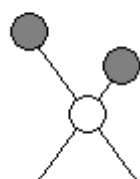
valenční – mění se délka vazby, nikoli úhel

- symetrické
- antisymetrické

### Stretching vibrations



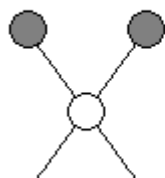
Symmetric



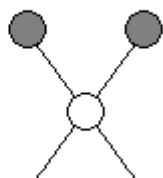
Asymmetric

deformační – mění se úhel – nůžkové, krouživé, kývavé, houpavé

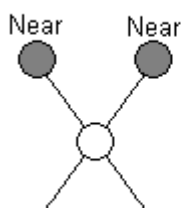
### Bending vibrations



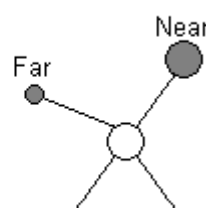
In-plane rocking



In-plane scissoring



Out-of-plane wagging



Out-of-plane twisting

Počet základních vibračních modů =  $3N - 6$  (5 u lineárních – odečet rotací molekuly)

N = počet atomů v molekule, počet stupňů volnosti je 3

Absorpce záření jen u molekul s dipolmomentem, který se mění absorbcí kvant  
 Vektor el. pole vibrující molekuly se periodicky mění – absorpce záření s nímž  
 je v resonanci:

$$\nu = 1/2\pi \cdot \sqrt{k/\mu} \quad \text{Hookův zákon}$$

silová konstanta / redukováná hmotnost

$k = f(\text{typu vazby})$  C-C ... 0,5 kNm<sup>-1</sup>, C=C ... 0,95, C≡C ... 1,5

$$\mu = m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$$

$$E_v = k/2 (r-r_0)^2 = (v + 1/2) \cdot h \nu_0 \quad (\text{aplik. Sch. rovnice})$$

$$E_{v+1} = k/2 (r_1-r_0)^2 = (v + 1/2) \cdot h \nu_0$$

$$\Delta E = h \nu = E_{v+1} - E_v = h \nu_0$$

Neaktivní molekuly – jednoatomové  
 - symetrické nepolární (H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> ...)  
 - mající symetrické valenční vibrace (CO<sub>2</sub>)

Oblasti spektra – fingerprint – 900 – 1300 cm<sup>-1</sup>  
 - charakteristické pásy vazeb – 1300 – 3700

Vlivy  
 - skupenství  
 - vodíkové vazby – rostou dipolární interakce  
 - konjugace – menší  $\nu$   
 -