

## IR spektroskopie

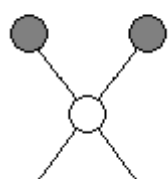
Přechody mezi vibračními (+rotačními) hladinami  
spektra vibrační, vibračně rotační – jemná struktura

Vibrace molekul

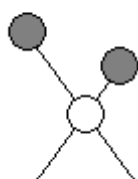
valenční – mění se délka vazby, nikoli úhel

- symetrické
- antisymetrické

### Stretching vibrations



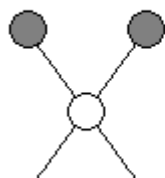
Symmetric



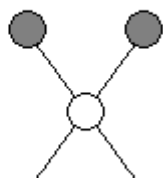
Asymmetric

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

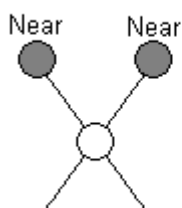
### Bending vibrations



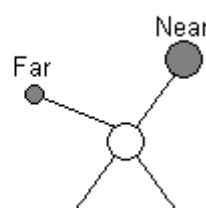
In-plane rocking



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

$$k = f(\text{typu vazby}) \quad \text{C-C ... } 0,5 \text{ kNm}^{-1}, \text{ C=C ... } 0,95, \text{ C}\equiv\text{C ... } 1,5$$

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

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

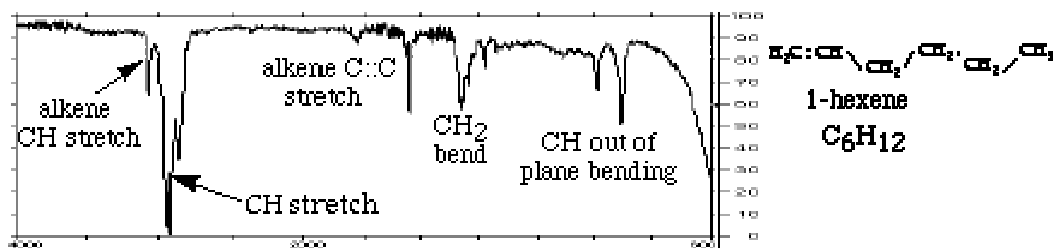
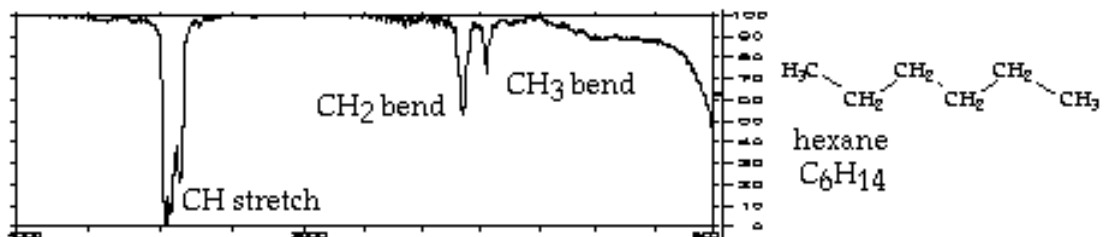
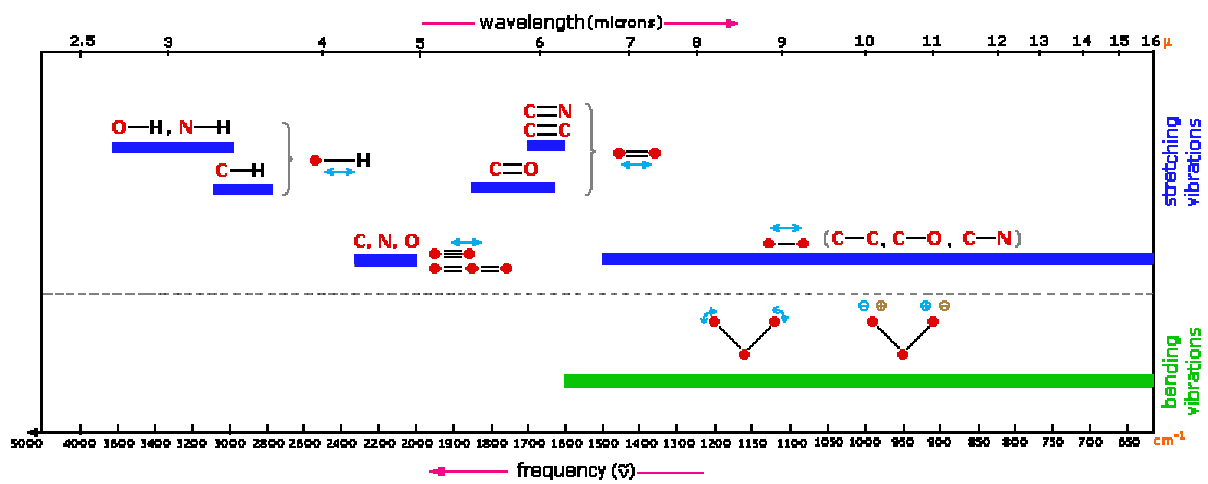
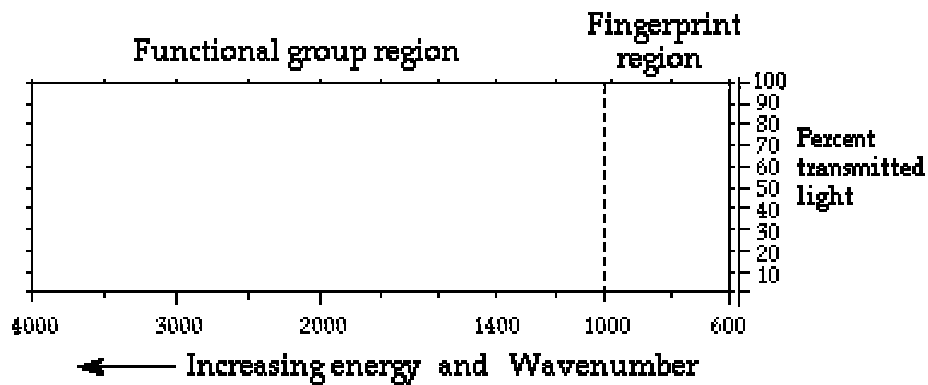
$$E_{v+1} = k/2 (r_1-r_0)^2 = (v + 1/2) \cdot h \nu_0$$

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

Neaktivní molekuly – jednoatomové  
 - symetrické nepolární ( $\text{H}_2, \text{N}_2, \text{O}_2 \dots$ )  
 - mající symetrické valenční vibrace ( $\text{CO}_2$ )

oblasti spektra – fingerprint –  $900 - 1300 \text{ cm}^{-1}$   
 – charakteristické pásy vazeb –  $1300 - 3700$

Vlivy  
 - skupenství –  $\nu_g > \nu_l > \nu_s$  (s – vhodné na určení struktury, ne změny)  
 - vodíkové vazby – rostou dipolární interakce  
 - konjugace – menší  $\nu$   
 - isotopová záměna  $\nu = f(1/\mu)$  – D za H apod.



## Charakteristické pásy

Group	Frequency Range (cm <sup>-1</sup> )
OH stretching vibrations	
Free OH	3610-3645 (sharp)
Intramolecular H bonds	3450-3600 (sharp)
Intermolecular H Bonds	3200-3550 (broad)
Chelate Compounds	2500-3200 (very broad)
NH Stretching vibrations	
Free NH	3300-3500
H bonded NH	3070-3350
CH Stretching vibrations	
=C-H	3280-3340
=C-H	3000-3100
C-CH <sub>3</sub>	2862-2882, 2652-2972
O-CH <sub>3</sub>	2815-2832

N-CH <sub>3</sub> (aromatic)	2810-2820
N-CH <sub>3</sub> (aliphatic)	2780-2805
CH <sub>2</sub>	2843-2863, 2916-2936
CH	2880-2900
SH Stretching Vibrations	
Free SH	2550-2600
C=N Stretching Vibrations	
Nonconjugated	2240-2260
Conjugated	2215-2240
C=C Stretching Vibrations	
C=CH (terminal)	2100-2140
C-C=C-C	2190-2260
C-C=C-C-CH	2040-2200
C=O Stretching Vibrations	
Nonconjugated	1700-1900
Conjugated	1590-1750
Amides	~1650
C=C Stretching Vibrations	
Nonconjugated	1620-1680
Conjugated	1585-1625
CH Bending Vibrations	
CH <sub>2</sub>	1405-1465
CH <sub>3</sub>	1355-1395, 1430-1470
C-O-C Vibrations in Esters	
Formates	~1175
Acetates	~1240, 1010-1040
Benzoates	~1275
C-OH Stretching Vibrations	
Secondary Cyclic Alcohols	990-1060
CH out-of-plane bending vibrations in substituted ethylenic systems	
-CH=CH <sub>2</sub>	905-915, 985-995
-CH=CH-(cis)	650-750
-CH=CH-(trans)	960-970

C=CH <sub>2</sub>	885-895

