

INFRAČERVENÁ SPEKTROSKOPIE

70

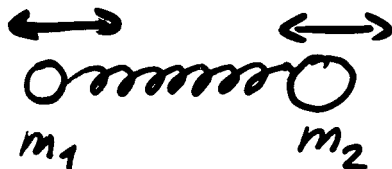
ABSORPCE EL MAG. ZÁŘENÍ: $12500 - 100 \text{ cm}^{-1}$

ZMĚNY VIBRAČNÍCH, ROTAČNĚ-VIBRAČNÍCH A ROTAČNÍCH STAVŮ

IR (IR) ← $\begin{cases} \text{BLÍZKÁ} & 12500 - 5000 \text{ cm}^{-1} \\ \text{STŘEDNÍ} & 5000 - 500 \text{ cm}^{-1} \\ \text{VZDÁLENÁ} & 500 - 100 \text{ cm}^{-1} \end{cases}$

1) VIBRACE MOLEKUL $100 - 4000 \text{ cm}^{-1}$

Lineární harmonický oscilátor



$$F = -k \cdot x$$

pohyb. rovnice $x = x_0 \cos(2\pi\nu t + \varphi)$

φ - fáze posun - počát. vých. v $t=0$

I. Newtonův zákon $F = m \cdot \frac{d^2x}{dt^2}$

diff. rce: $m \cdot \frac{d^2x}{dt^2} = -k \cdot x$

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{řešení dif. rce}$$

PRO VLNOČET $\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \cdot \sqrt{\frac{k}{M}}$
2-atom. md.

$$M = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

reduk. hmotnost

POTENCIÁLNÍ ENERGIE $E_p = \frac{1}{2} kx^2 = 2\pi^2 \cdot M \cdot \nu \cdot x^2$

KLASICKÁ MECHANIKA - LIBOVOLNĚ ZMĚNY ENERGIE
KVANTOVÁ MECH. - DISKRÉTNÍ HODNOTY ENERGIE
CELISTVĚ NÁSOBKY $h \cdot \nu$

MOŽNÉ HODNOTY ENERGIE OSCILÁTORU DÁNY SCHRÖDINGER.

RCÍ - VIBRAČNÍ STAVY - VIBRAČNÍ KVANTOVÉ ČÍSLO ν

$\nu = 0, 1, 2, 3, \dots$, $E = h \cdot \nu \cdot (\nu + \frac{1}{2})$ 79
 energie 2-atomové molekuly ze SCHRODINGEROVY ROVNICE

$$E = \frac{h}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{M}} \cdot (\nu + \frac{1}{2})$$

VIBRAČNÍ VLNOVÁ FUNKCE - VLN. FKCE. LIN. HARM. OSCILÁTORU

$$\psi_\nu = N_\nu \cdot \exp(-y^2/2) \cdot H_\nu(y)$$

N_ν - vibrační konstanta (závisí na ν)

$$y = x \cdot \sqrt{\frac{2\pi}{h}} (k \cdot M)^{1/4} \quad \text{HERMITOV POLYNOM}$$

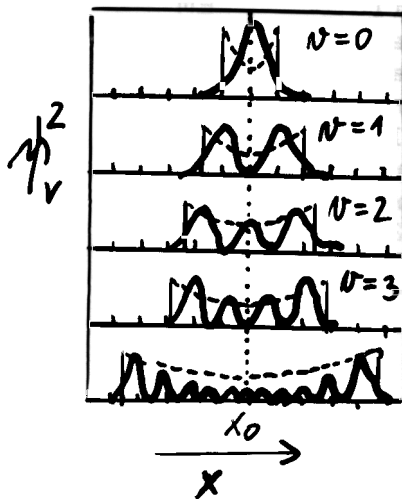
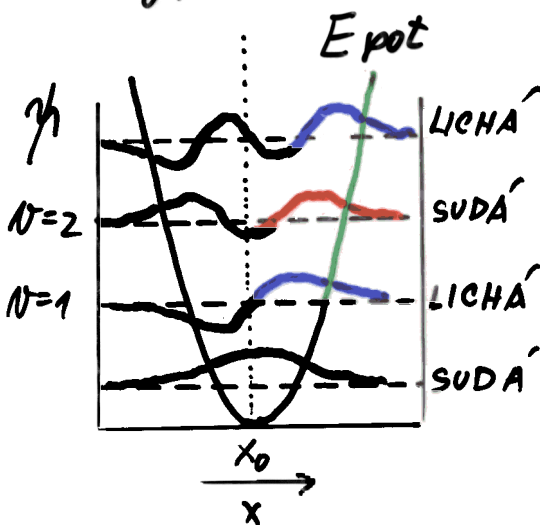
$$H_\nu(y)$$

$H_\nu(y)$ závisí na hodnotě ν :

$\nu = 0 \quad H_0 = 1$ $\nu = 2 \quad H_2 = 4y^2 - 2$

$\nu = 1 \quad H_1 = 2y$ $\nu = 3 \quad H_3 = 8y^3 - 12y$

VIBRAČNÍ KVANT. ČÍSLO = POČET UZLŮ VLN. FUNKCE
 (body, v nichž ψ_ν mění své znaménko)



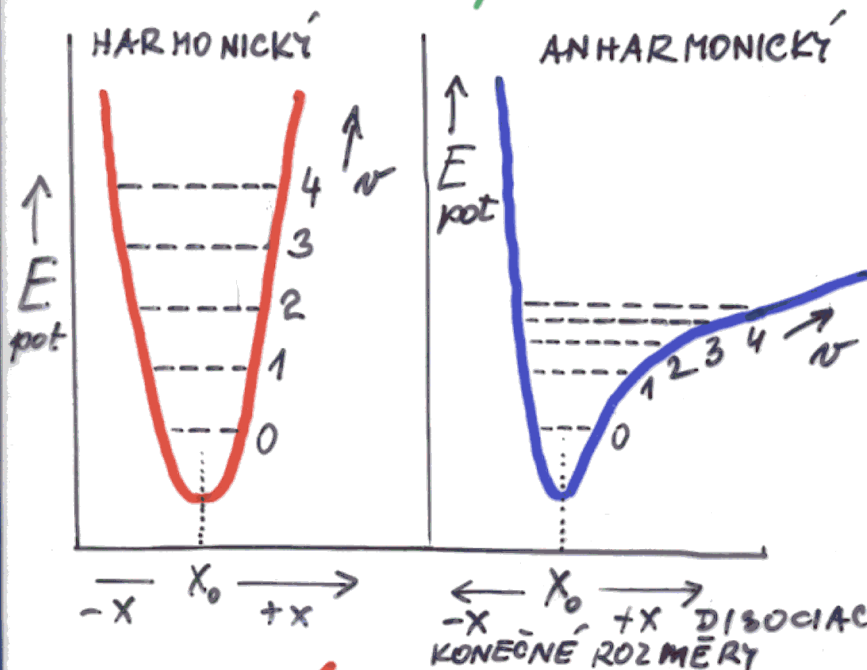
$\psi_\nu^2 dx = \psi_\nu \cdot \psi_\nu^* dx$
 pravděpodobnost
 nalezení molekuly
 ve vzdálenosti
 (v intervalu)
 $\langle x; x+dx \rangle$

— klasický
 oscilátor

ČÍM VYŠŠÍ ν , TÍM VĚTŠÍ PŘÍBLÍŽENÍ KLASICKÉ A KVANTOVÉ MECHANIKY

72

Prostorové rozdělení pravděpodobnosti vlnové funkce pro jednotlivé vibrační hladiny + velikost překryvu funkcí v zákl. a excit. stavu \Rightarrow kvantově mechan. výpočty pravděpodobnosti přechodu mezi různými vib. hladinami těchto stavů \Rightarrow předporádění zvaru absorpčních i emisních (fluorescenčních) pásů.



HARMONICKÝ

$$E_{pot} = -\int_0^x F dx = \frac{1}{2} kx^2$$

ANHARMONICKÝ

$$E = h \cdot \nu \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - h \cdot \nu \chi_a \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 + \dots$$

KONSTANTA ANHARMONICITY FUNDAMENT. NORMALNÍ

$$\nu_f = \nu_h (1 - \chi_a)$$

HARMONICKÝ OSC. - výběrové pravidlo $\Delta \nu = +1$ při absorpci za normální teploty $\nu = 0$. **FUNDAMENTÁLNÍ VIBRACE**

ANHARMONICKÝ OSC. $\Delta \nu = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ vyšší harmonické OVERTONE $\Delta \nu > 1$ - větší excit. energie: $\Delta \nu = 2; E = 2E_1$, $\Delta \nu = 3; E = 3E_1, \dots \Rightarrow$ ABSORPČNÍ PÁSY VYŠŠÍCH HARMONICKÝCH VIBRACÍ JSOU POSUNUTY K VYŠŠÍM VLNOČÍM (KRATŠÍM VLN. DÉLKÁM) \Rightarrow **NIR**, $\tilde{\nu} > 5000 \text{ cm}^{-1}$.

INTENZITA ABSORPCE klesá o 1 až 2 řády s předchodem od zákl. vibrace k vyšším harmonickým.

VIBRACE PROBÍHAJÍ V PROSTORU X, Y, Z,

73

rovina XY ~ LISSAJAUSOVY OBRAZCE



silové konstanty k_x, k_y, k_z , \Rightarrow různé frekvence každé ze 3 fundamentálních vibrací.

N-atomové molekuly

lineární

nelineární

stupně volnosti **3N-5**

3N-6

POČET STUPŇŮ VOLNOSTI URČUJE POČET ZÁKL. VIBRACÍ

VÝPOČTY FREKVENCÍ VIBRACÍ - TEORETICKÉ PŘEDPOVĚDI

- VSTUPNÍ DATA:
- 1) Hmotnosti atomů
 - 2) Valenční úhly
 - 3) Délky vazeb
 - 4) Silové konstanty

Energie a frekvence vibrací omezeny řešeními
SCHRÖDINGEROVY ROVNICE

Při harmonickém pohybu (model) lze považovat E vibrací N-atomové molekuly pro jednotlivé stupně volnosti za navzájem nezávislé

$$\text{Celková vibrační energie } E = \sum_{i=1}^m E_i = \sum_{i=1}^m \nu_i \left(N_i + \frac{1}{2} \right)$$

$$M = 3N - 5 \text{ (lin. mol.)} \quad m = 3N - 6 \text{ (nelin. mol.)}$$

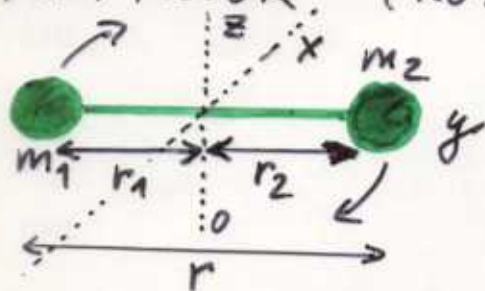
Teoreticky zajímavé, praktická analýza - empirické souvislosti
S počtem atomů roste počet abs. pásů - složitá spektra

2) ROTACE MOLEKUL

100-10 cm⁻¹

74

Rotoční hladiny, rotační spektra
TUHÝ ROTOR (ROTÁTOR) - vzdálenost r se nemění



Klasická mechanika

Moment setrvačnosti: $I = mr^2$

1) vzhledem k y ; $J_y = 0$

2) vzhledem k x, z ; $J_x = J_z$

$$\underline{I_x = I_z = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2}$$

Platí: $r_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \cdot r$ $r_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \cdot r$

pak $\underline{I = \frac{m_1 m_2^2 + m_2 m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \cdot r^2 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \cdot r^2 = M \cdot r^2}$

M - redukovaná hmotnost

Steinerova věta - aplikace: Moment setrvačnosti lze vyjádřit pomocí jediného hm. bodu M ve vzdá'l. r od počátku souřadnic; kolem něj se rotace pak uvažuje

Vlnová mechanika - rotační pohyb popsan vlnovou funkcí

SCHRÖDINGEROVA rovnice \Rightarrow hodnoty diskretních energií

$$\underline{E_r = \frac{h^2}{8\pi^2 \cdot I} (J+1) \cdot J} \quad (1)$$

J - rotační kvantové číslo

I - moment setrvačnosti

pro tuhý 2-atomový rotor

úprava: $(1) \cdot \frac{1}{h \cdot c} \Rightarrow \frac{E_r}{h \cdot c} = \frac{h}{8\pi^2 \cdot c \cdot I} \cdot J(J+1) = \underline{B \cdot J(J+1)}$

B - rotační konstanta (charakteristická pro každou molekulu)

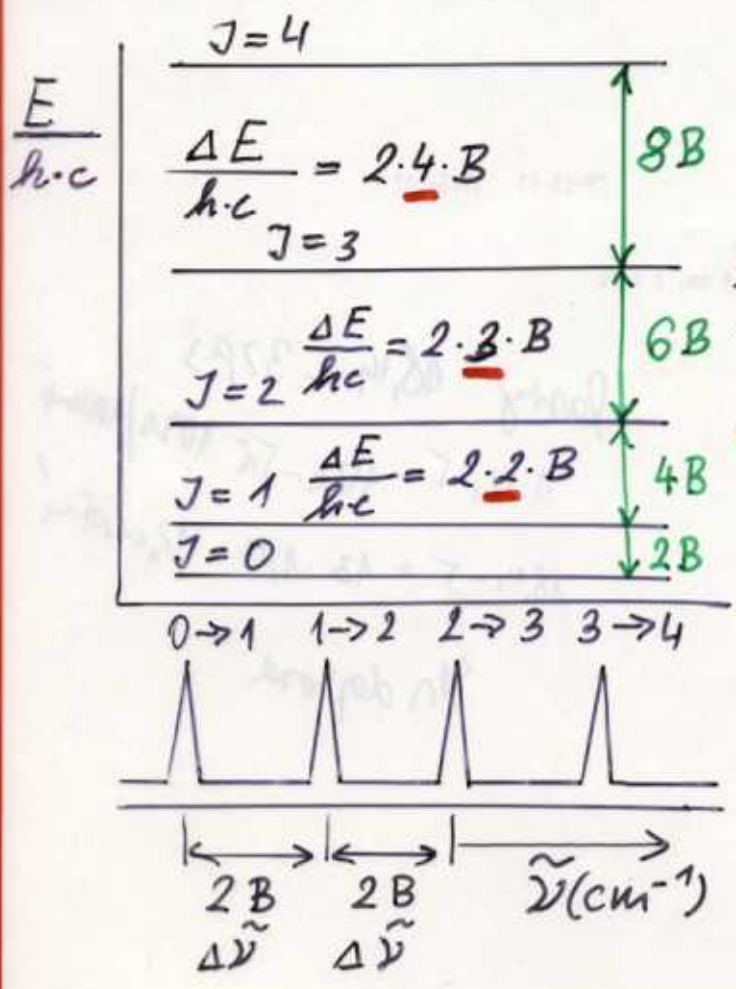
Spektroskopické termy:

$$\tilde{\nu} = \left(\frac{E_r}{h \cdot c}\right)_2 - \left(\frac{E_r}{h \cdot c}\right)_1 = B \cdot J_2(J_2+1) - B \cdot J_1(J_1+1)$$

VÝBĚROVÉ PRAVIDLO: $\Delta J = J_2 - J_1 = \pm 1 \Rightarrow$

VLNOČET ABS. NEBO EMIT. ZÁŘENÍ $\tilde{\nu} = 2B \cdot (J+1)$
 $J = 0, 1, 2, 3, \dots$

E roste s J KVADRATICKY $E_r = \frac{h^2}{8\pi^2 I} \cdot J(J+1)$
 $\tilde{\nu}$ roste s J LINEÁRNĚ $\tilde{\nu} = 2B(J+1)$



ΔE roste LINEÁRNĚ
 $\Delta \tilde{\nu}$ je KONSTANTNÍ

$$\frac{\Delta E}{h \cdot c} = \frac{E_n - E_{n-1}}{h \cdot c} = 2n \cdot B$$

$$\Delta \tilde{\nu} = 2B = \text{konst.}$$

PLATÍ PRO TUHÝ ROTOR

REALNĚ: h roste s J
 (vyšší E , rychlost) \Rightarrow
 větší $I \Rightarrow$ menší B

Relativní intenzity linií závisí na teplotě dle BOLTZMANNOVA vztahu

$$\frac{N_2}{N_1} \cdot \frac{g_2}{g_1} \exp(-\Delta E_r / kT)$$

ŠTĚPENÍ ROTAČNÍCH HLADIN v důsledku:

- * Interakce momentů hybnosti atomů s celkovým momentem hybnosti molekuly
- * Interakce s jadernými spiny
- * Interakce s vnějším el. a mag. polem

⇒ JEMNÁ STRUKTURA ROTAČNÍCH ČAR

NELINEÁRNÍ MOLEKULY - nižší symetrie ⇒
energie rotací kolem 3 prostorových os se vzájemně liší
⇒ další kvantové číslo K

VÝBĚROVÁ PRAVIDLA pro nelineární molekuly

$$\underline{\Delta J = 0; \Delta J = \pm 1} \quad \Delta K = 0$$

3) INTERAKCE MOLEKULOVÝCH ROTACÍ A VIBRACÍ ROTAČNĚ - VIBRAČNÍ SPEKTRA

Současná změna rotačních i vibračních stavů molekuly
VIBRAČNÍ PŘECHOD + ŘADA PŘECHODŮ ROTAČNÍCH
dvouatomová molekula = harmonický oscilátor
+ tuhý rotor

$$\underline{E = E_{VIB} + E_{ROT} = \frac{h}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{M}} \cdot (v + \frac{1}{2}) + \frac{h^2}{8\pi^2 I} \cdot J(J+1)}$$

Energie přechodu ΔE

$$\Delta E = hc \cdot \tilde{\nu} = \frac{h}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{M}} (v_1 - v_0) + hc \cdot B [J_1(J_1+1) - J_0(J_0+1)]$$

$$\Delta E_{ROT} \ll \Delta E_{VIB}$$

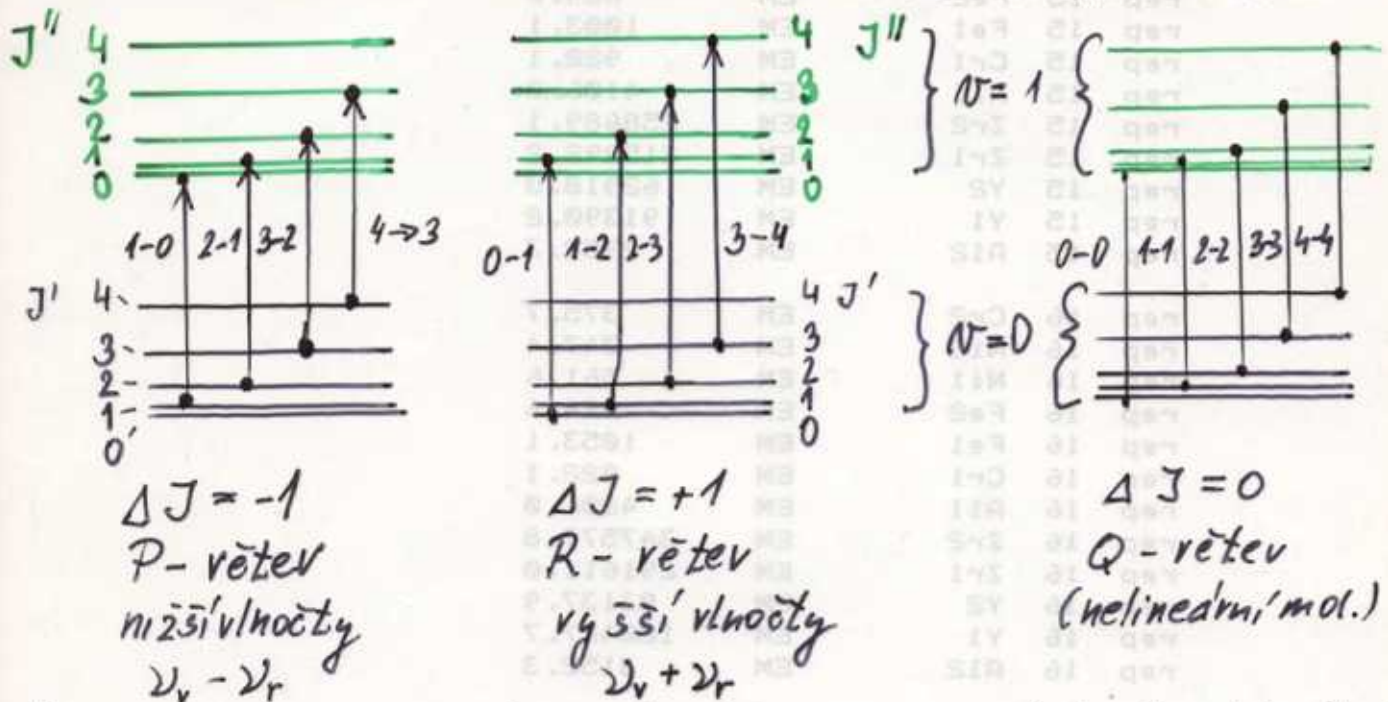
VÝBĚROVÁ PRAVIDLA : $\Delta J = \pm 1$ (lineární molekuly)

$\Delta J = 0, \pm 1$ (nelineární molekuly)

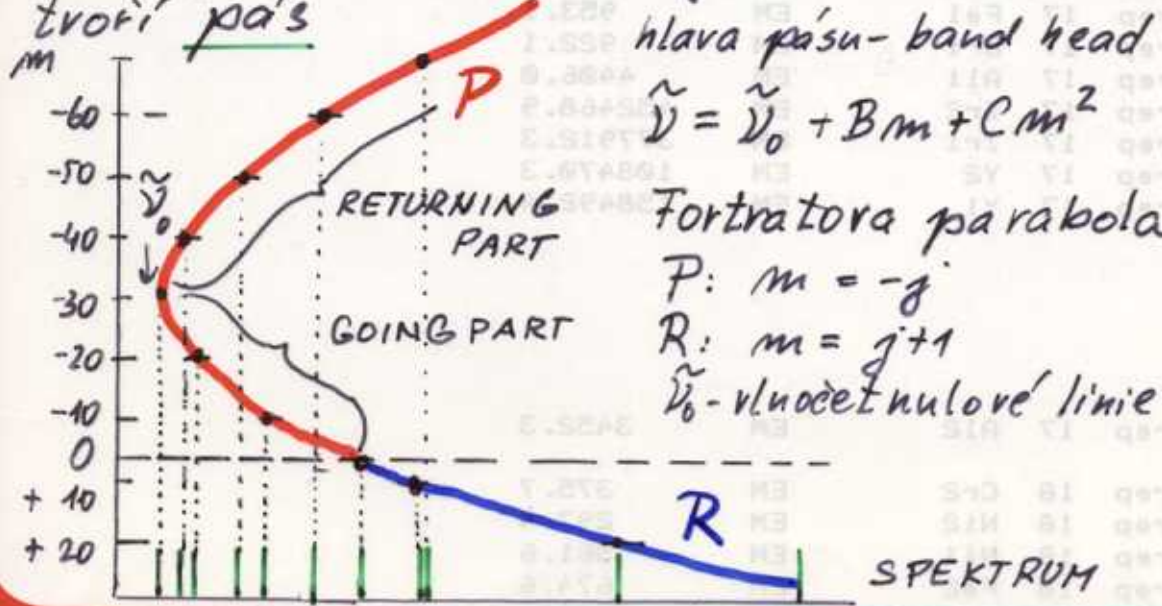
Lineární harmonický osc.: $\nu: 0 \rightarrow 1$ (fundamentální vibrace)

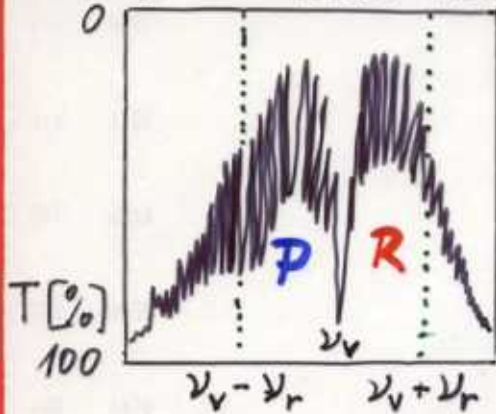
Lin. anharmonický osc.: $\nu: 0 \rightarrow 2, 3..$ (overtony)

VIBRAČNÍ PŘECHOD: ABSORPČNÍ PÁŠ SŘADOU ROTAČNÍCH LINIÍ



Čary odpovídající přechodům mezi rotačními hladinami náležejícími dvěma různým vibračním stavům tvoří páš



ROTAČNĚ-VIBRAČNÍ SPEKTRUM OXIDU UHLNATÉHOcm⁻¹ $\tilde{\nu}$ → 2100 2200

ROTAČNÍ STRUKTURA

je pozorována jen v plynné fázi

ROTAČNÍ LINIE - rozšířené:

srdžky molekul

skupenství = $\left. \begin{array}{l} \text{kapalné} \\ \text{pevné} \end{array} \right\} \text{VYHIZENÍ} \\ \text{ROTAČNÍ} \\ \text{STRUKTURY}$

4) VÝBĚROVÁ PRAVIDLA A INTENZITA ABSORPČNÍCH PÁSMŮ V IR SPEKTRECH

1) $\left(\frac{\partial \mu}{\partial x}\right) \neq 0$ Podmínka: nenulová změna dipólmomentu2) $I = k \cdot \left(\frac{\partial \mu}{\partial x}\right)_{x_0}^2$ Intenzita pásu v pravděpodobnost interakce příslušné vibrace s elmag. zářením. x_0 - rovnovážná polohaVysoká hodnota permanentního dipólu nepostačuje k vysoké intenzitě absorpce, naopak absorbují intenzivně i molekuly s malým dipólmomentem, je-li jeho změna velká, např. CO.* Molekuly H₂, N₂, O₂, ... dva stejné atomy ⇒ dipólmoment = 0
a současně se také nemění ⇒ neabsorbují* Víceatomové molekuly: absorbují intenzivně polární části:
t.j. -NH₂, -OH, -C=O, -C-F, -Si-O, atd.

Vibrace nepolárních částí - uhlíkový skelet - málo intenzivní

* Víceatomové symetrické nepolární molekulyCS₂, CH₄, CCl₄, absorbují i když dipólmoment = 0

mohou probíhat vibrace, při nichž se oddělují těžiště \oplus a \ominus nábojů. \Rightarrow vznik a změna dipólmomentu.

Intenzita absorpce - vyjádření: • transmittance T } jako
• absorptance $(1-T)$ } UV-VIS
• absorbance A }

- ϵ - molární absorpční koeficient
nemá povahu konstanty
závisí na
- typu a kvalitě přístroje
 - šířce štěrbin
 - ztrátě záření rozptylem
 - pozadí spektra

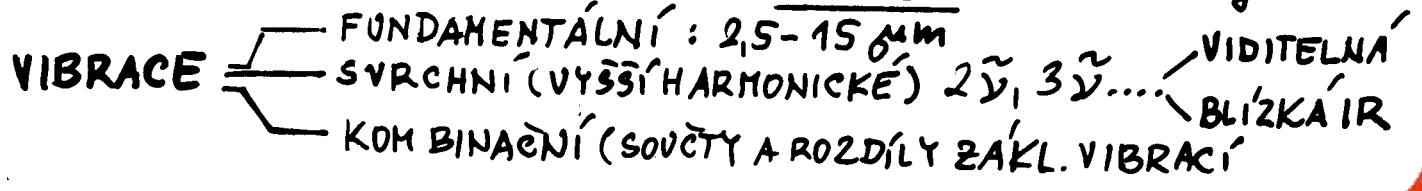
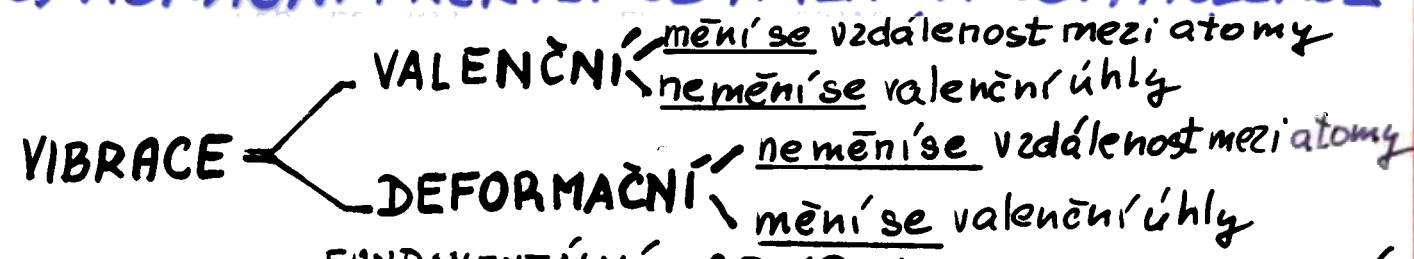
Měně závisí na přístroji a
prac. podmínkách:
**INTEGROVANÁ ABSORPČNÍ
INTENZITA A_c** - plocha pásu
 $c \sim$ koncentrace
 l - délka kyvety

$$A_c = \frac{1}{c \cdot l} \cdot \int_{\tilde{\nu}_1}^{\tilde{\nu}_2} \ln \frac{\Phi_0}{\Phi} d\tilde{\nu} = \int_{\tilde{\nu}_1}^{\tilde{\nu}_2} \epsilon \cdot d\tilde{\nu}$$

udává se také pološířka $\Delta\tilde{\nu}_{1/2}$ = šířka pásu v polovině
výšky, tj. při $A = A_{max} / 2$

TABULKY IR SPEKTER - kvalitativní vyjádření intenzity:
s (strong) - silná; m - (medium) - střední; w - (weak) - slabá;
vs - very strong; vw - very weak.

5) VIBRAČNÍ FREKVENCE A VLASTNOSTI MOLEKUL



N atomů $\approx 3N$ stupňů volnosti (souřadnice x, y, z)

- TRANSLACE $x, y, z \Rightarrow 3$ STUPNĚ VOLNOSTI
- ROTACE • Nelineární molekuly podle $x, y, z \Rightarrow 3$ ST. VOLNOSTI
- LINEÁRNÍ MOLEKULY podle $x, y \equiv z, \Rightarrow 2$ ST. VOLNOSTI

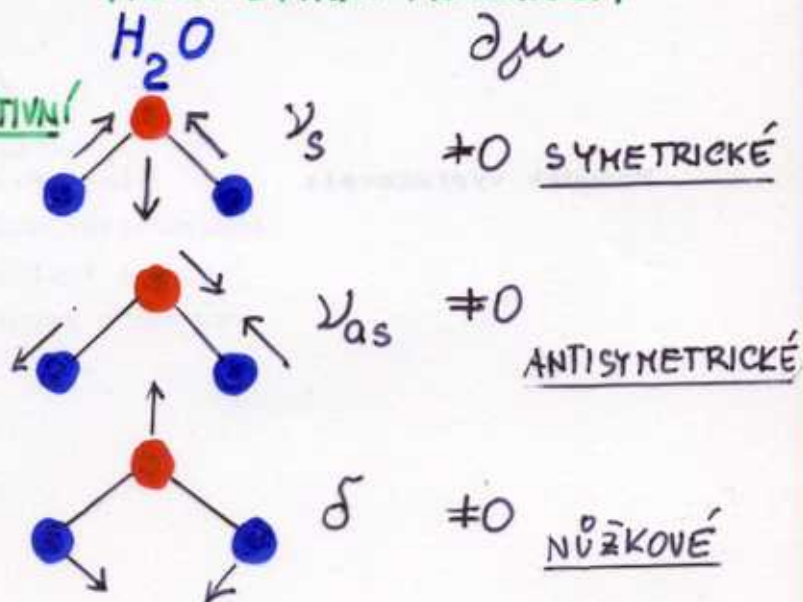
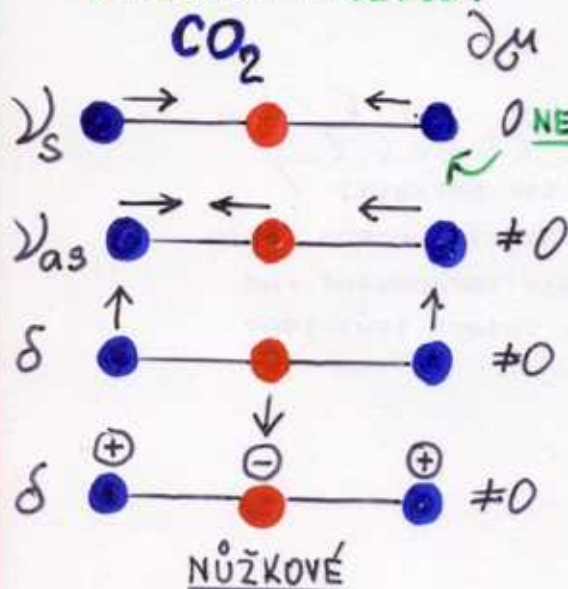
\Rightarrow LINEÁRNÍ MOLEKULA $\left. \vphantom{\begin{matrix} \text{LINEÁRNÍ} \\ \text{MOLEKULA} \end{matrix}} \right\} 3N-5$ Nelineární MOLEKULA $\left. \vphantom{\begin{matrix} \text{Nelineární} \\ \text{MOLEKULA} \end{matrix}} \right\} 3N-6$

ST. VOLNOSTI PRO VIBRACI

$3N-5$ $3N-6$ = POČTY FUNDAMENTÁLNÍCH FREKVENCÍ

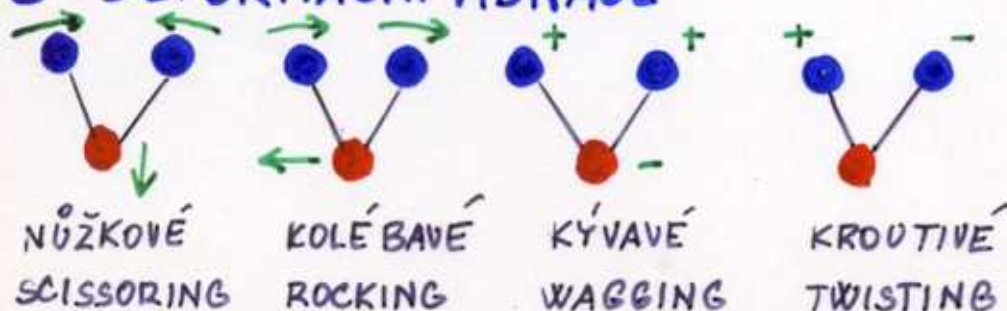
LINEÁRNÍ MOLEKULA

Nelineární MOLEKULA



ν - VALENČNÍ VIBRACE $\left. \begin{matrix} s \text{ SYMETRICKÁ} \\ as \text{ ANTISYMETRICKÁ} \end{matrix} \right\}$ STRETCHING

δ - DEFORMAČNÍ VIBRACE



Frekvence základních vibrací molekuly XY_2 (CO_2) (lineární)

$$\nu_1^2 = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \frac{a_{11} + a_{12}}{m_y} \sim \nu_s \text{ symetrická valenční vibrace}$$

$$\nu_2^2 = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \frac{m_x + 2m_y}{m_x m_y} \cdot (a_{11} - a_{12}) \sim \nu_{as} \text{ asymetrická valenční vibrace}$$

$$\nu_3^2 = \nu_4^2 = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \frac{2(m_x + 2m_y) \cdot a_{33}}{m_x \cdot m_y \cdot l^2} \sim \delta \text{ deformační vib. - DEGENEROVANÉ}$$

l - délka vazby X-Y (C-O)

a_{11} - silová konstanta vazby X-Y

a_{12} - vliv změny délky jedné vazby na sílu vazby druhé

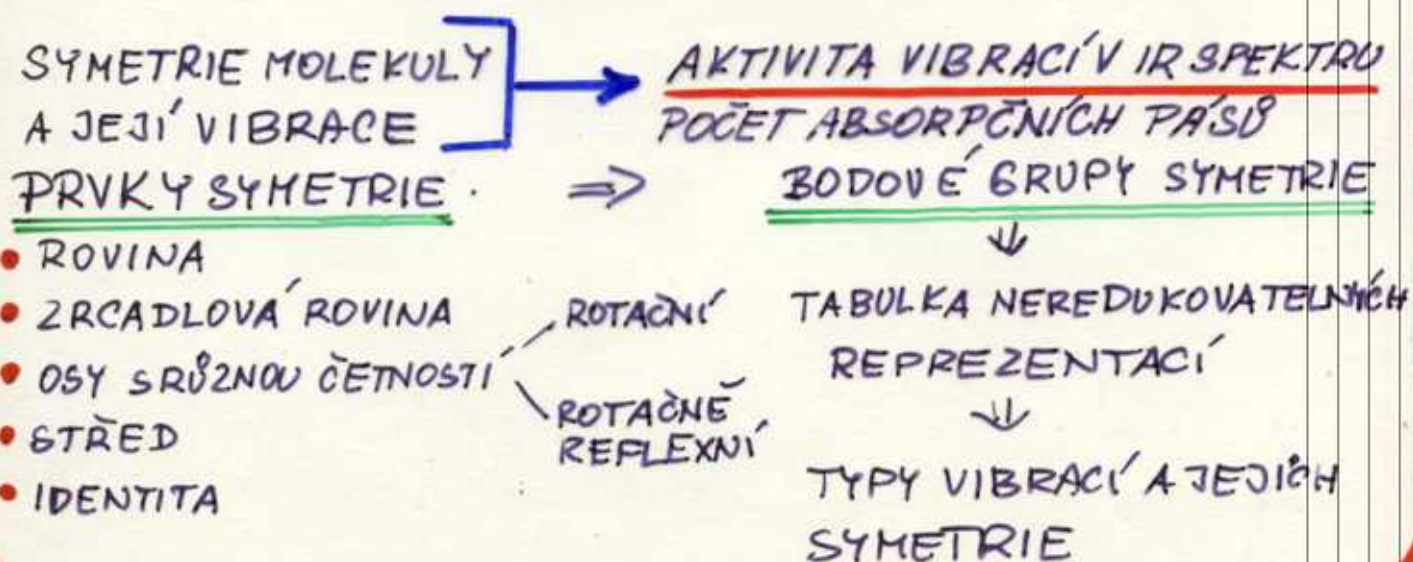
a_{33} - odpor molekuly proti změně valenčního úhlu.

m_x, m_y - hmotnosti atomů X a Y.

n vibrací jediný abs. pás $\Rightarrow n \times$ degenerované

IR spektrum CO_2 : 2 pásy $\left\{ \begin{array}{l} \text{asymetrická valenční} \\ \text{2x degener. deformační} \end{array} \right.$

VYSOCE SYMETRICKÉ MOLEKULY - MAX. 3x DEGENEROVANÉ



URČITÁ SE SKUPENÍ ATOMŮ (FUNKČNÍ SKUPINY A TD.) - DÁVAJÍ
ABS. PÁSY V ÚZKÉM ROZMEZÍ \Rightarrow **CHARAKTERISTICKÉ PÁSY**
CHAR. FREKVENCE, CHAR. VIBRACE

FREKVENCE VIBRACE URČITÉ VAZBY SE MUSÍ VÝRAZNĚ LIŠIT
OD FREKV. SOUSEDNÍCH VAZEB, JINAK **SPŘAŽENÍ VIBRACÍ** \Rightarrow
MOLEKULA KMITÁ JAKO CELEK

PODMÍNKY ROZLIŠENÍ VIBRACÍ

- 1) ROZDÍL HMOTNOSTI ATOMŮ $\geq 100\%$
- 2) ROZDÍL SILOVÝCH KONSTANT $\geq 25\%$

PŘÍKLAD: $X-X$, $X=X$, $X\equiv X$ $\approx 1:2:3 \Rightarrow$ NÁSOBNÉ VAZBY
MAJÍ ODLIŠNÉ VIBRACE

PŘÍKLAD: C-H, N-H, O-H, S-H, C-Cl, C-Br, C-I, C-S

PŘÍKLAD: $C\sim O\sim N \Rightarrow$ NELZE C-N, C-O

CHARAKTERISTICKÉ VIBRACE

FREKVENCE ROSTOU $\left\{ \begin{array}{l} \text{S KLESAJÍCÍ HMOTNOSTÍ ATOMŮ} \\ \text{KTERÉ SE PODÍLEJÍ NA VAZBĚ} \\ \underline{\nu = (1/2\pi) \cdot (k/M)^{1/2}} \\ \text{S ROSTOUCÍ SILOVOU KONSTANTOU VAZBY} \end{array} \right.$

VAZBA	$\tilde{\nu}$ (cm^{-1})		
CH, N-H, O-H	3700 - 2400	} <u>VALEČNÍ VIBRACE</u>	} OBLAST CHARAKTERIST. FREKVENCÍ
TROJNÁ VAZBA	2400 - 1900		
DVOJNÁ VAZBA	1900 - 1500		

$\tilde{\nu}$ (cm^{-1})

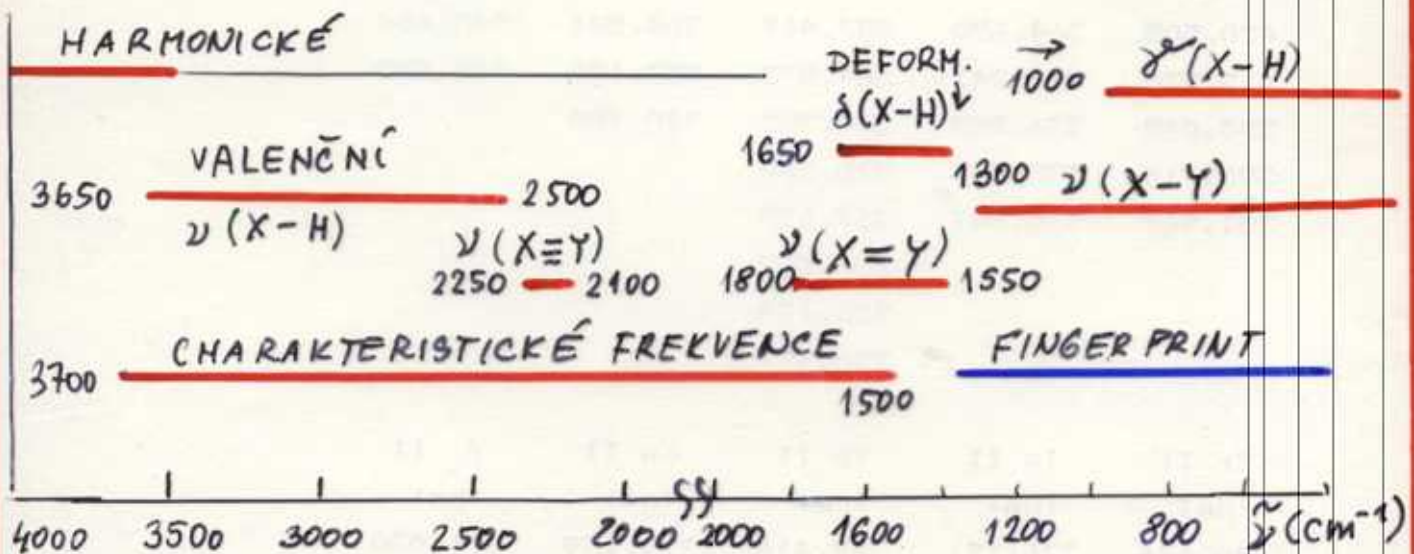
- > 3700 VYŠŠÍ HARMONICKÉ
- < 1500
- VALENČNÍ VIBRACE TĚŽŠÍCH ATOMŮ
 - DEFORMAČNÍ VIBRACE (NIŽŠÍ SIL. KONST. NEŽ VAL. VIB.)
 - SKELETÁLNÍ VIBRACE (VIB. Z BYTKU-SKELETU)
 - KOMBINAČNÍ (SOČTY A ROZDÍLY ZÁKL. FREKVENCÍ)

< 1500 cm^{-1} FINGERPRINTS

OBLAST OTISKU PRSTU - VHODNÉ PRO

IDENTIFIKACI ORGANICKÝCH LÁTEK

NEEXISTUJÍ 2 MOLEKULY (LÁTKY) SE STEJNÝM SPEKTRUM



3700	2400	1900	1500 (cm^{-1})
✓ VALENČNÍ VIBRACE	✓ VALENČNÍ VIBRACE	✓ VALENČNÍ VIBRACE	✓ DEFORMAČNÍ
C-H, O-H, N-H	C=C, C≡N	C=C, C=O	✓ VAL. VIB. TĚŽŠÍCH ATOMŮ
		C=N, N=N	✓ SKELETÁLNÍ
		N=O	✓ KOMBINAČNÍ
			✓ NEIDENTIFIKOVA TELNÉ
			✓ OBLAST OTISKU PRSTU

FAKTORY OVLIVŇUJÍCÍ CHARAKTER. VIBRACE

ROZMEZÍ VLNOČTŮ \sim VLIV ZBYKU MOLEKULY \Rightarrow INFORMACE
O KONSTITUCI MOLEKULY

- DALŠÍ VLIVY -
- SKUPENSTVÍ A ROZPOUŠTĚDLA
 - VODÍKOVÉ VAZBY
 - HMOTNOSTI ATOMŮ
 - ELEKTRICKÉ V.
 - STERICKÉ V., PŇUTÍ KRUHU, KONFORMACE
 - VIBRAČNÍ INTERAKCE (VIBRAČNÍ SPŘAŽENÍ)

1) VLIV SKUPENSTVÍ A ROZPOUŠTĚDLA

VTUHÉ KRYST. LÁTKY: vzájn. interakce mezi polárními skup.
sousedních molekul \Rightarrow OMEZENÁ
POHYBLIVOST \Rightarrow NOVÉ ABS. PÁSY, CHYBÍ JINÉ
ABS. PÁSY \times kapalné a plynné skup.
CHYBÍ ROTAČNÍ STRUKTURA

VTAVENINÝ ROZTOKY: větší pohyblivost než v. tuhých látkách
mezimolekulární interakce
CHYBÍ ROTAČNÍ STRUKTURA

SKUPENSKÁ ZMĚNA: $G \rightarrow L \rightarrow S$

- POTLAČENÍ ROTAČNÍ STRUKTURY
- ZÚŽENÍ ABSORPČNÍCH PÁSŮ
- POSUN ABS. MAXIM KE KRATŠÍM VLNOČTŮM

INTERMOLEK. PŮSOBENÍ DIPŮLŮ \Rightarrow SNÍŽENÍ SÍLY VAZBY \Rightarrow SNÍŽ. E

PŘÍKLAD: $\nu(C=O)$, G, $\tilde{\nu} = 1742 \text{ cm}^{-1}$ ACETON
 $\nu(C=O)$, L, $\tilde{\nu} = 1718 \text{ cm}^{-1}$

POLARITA ROZPOUŠTĚDLA ROSTE
 $\tilde{\nu}$ CHARAKTER. VIBRACE KLEBÁ
 (DIPÓL-DIPÓL. INTERAKCE, VODÍKOVÁ VAZBA)

$\nu(C=O)$ ACETON	PROSTŘEDÍ
1728 cm^{-1}	CYKLOHEXAN
1724 cm^{-1}	CCl_4
1720 cm^{-1}	DIOXAN
1717 cm^{-1}	HCCl_3

VLIV ROZPOUŠTĚDLA NA

NEPOLÁRNÍ V. C-C, MALÝ
 POLÁRNÍ VAZ. C=O, O-H, VELKÝ

POLÁRNÍ SKUPINY

$C=O, C=N, N=O, NO_2, S=O$

ROZPOUŠTĚDLA

- PROTON-DONOROVÁ
 TVOŘÍ STŘEDNÍ A SILNÉ ASOCIÁTY
 ($\text{CHCl}_3, \text{CH}_3\text{NO}_2$)
 POKLES $\tilde{\nu}_{\text{MAX}}$ ROZŠÍŘENÍ PÁSU
- PROTON-AKCEPTOROVÁ
 NEDOCHÁZÍ K ASOCIACI
 ($(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{O}, \text{C}_6\text{H}_5\text{N}, \text{THF}$)
 $\tilde{\nu}_{\text{MAX}}$ STEJNÉ JAKO V CCl_4
- PROTON-DONOROVÁ
 SLABÉ ASOCIÁTY
 POKLES $\tilde{\nu}_{\text{MAX}}$
- PROTON-AKCEPTOROVÁ
 SILNĚJŠÍ ASOCIÁTY —
 ROSTE ŠÍŘKA PÁSU I INTENZ., VÝRAZNĚJŠÍ POKLES $\tilde{\nu}_{\text{MAX}}$

$-OH, -NH_2, -NH, -SH$

VÝPOČET $\tilde{\nu}$ PÁSŮ VALENČNÍCH VIBRACÍ POLÁRNÍCH SKUPIN VE SLABĚ POLÁRNÍCH ROZPOUŠTĚDLECH

KIRKWOOD - BAUER - MAGATOVA ROVNICE

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{\tilde{\nu}_g - \tilde{\nu}_{sl}}{\tilde{\nu}_g} = \frac{K(\epsilon - 1)}{2\epsilon + 1}$$

$\tilde{\nu}_g, \tilde{\nu}_{sl}$ vlnočty maxim v plynné f. a v. roztoku

ϵ permisivita rozp.

n index lomu rozp.

K, K_1, K_2 konst. závislé na rozpouštědle

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{K_1(\epsilon - 1)}{2\epsilon + 1} + \frac{K_2(n^2 - 1)}{2n^2 + 1}$$

2) VLIV VODÍKOVÉ VAZBY

SILNÁ INTERAKCE MEZI **KYSELÝMI** SKUPINAMI (DONORY H^+)
ZÁSADITÝMI CENTRY (ELETRONEGATIVNÍ
 ATOMY (O, N, X))

INTRA-
 MOLEKULÁRNÍ

INTER-
 MOLEKULÁRNÍ

H-vazba \Rightarrow OSLABENÍ PŮVODNÍ VAZBY V PROTON-DONOR. SKUP.

např. $O-H, X-H \Rightarrow$ POKLES $\tilde{\nu}$ VALENČNÍ VIBRACE

NEJSILNĚJŠÍ H-VAZBA - skupina $-OH$

\nearrow VOLNÁ SKUPINA $\tilde{\nu} = 3640 \text{ cm}^{-1}$

PŘÍKLAD: $CH_3-OH \searrow$ INTERMOLEKULÁRNÍ V.V. $\tilde{\nu} = 3300 \text{ cm}^{-1}$

také ROZŠÍŘENÍ PÁSŮ asociovaných skupin \sim ŘADA ASOCIÁTŮ
 S RŮZNĚ SILNÝMI H-VAZBAMI.

PŘÍKLAD: KARBONOVÉ KYSELINY - DIMERY \Rightarrow ŠIROKÝ
 PÁS $-OH$: $2400 - 3300 \text{ cm}^{-1}$

ROZLIŠENÍ INTRA - A INTERMOLEKULÁRNÍCH H-VAZEB

ŘEDĚNÍ ROZTOKU



POHĚR ABS. PÁŤŮ
MONOMERU A ASOCIÁTU
KONSTANTNÍ

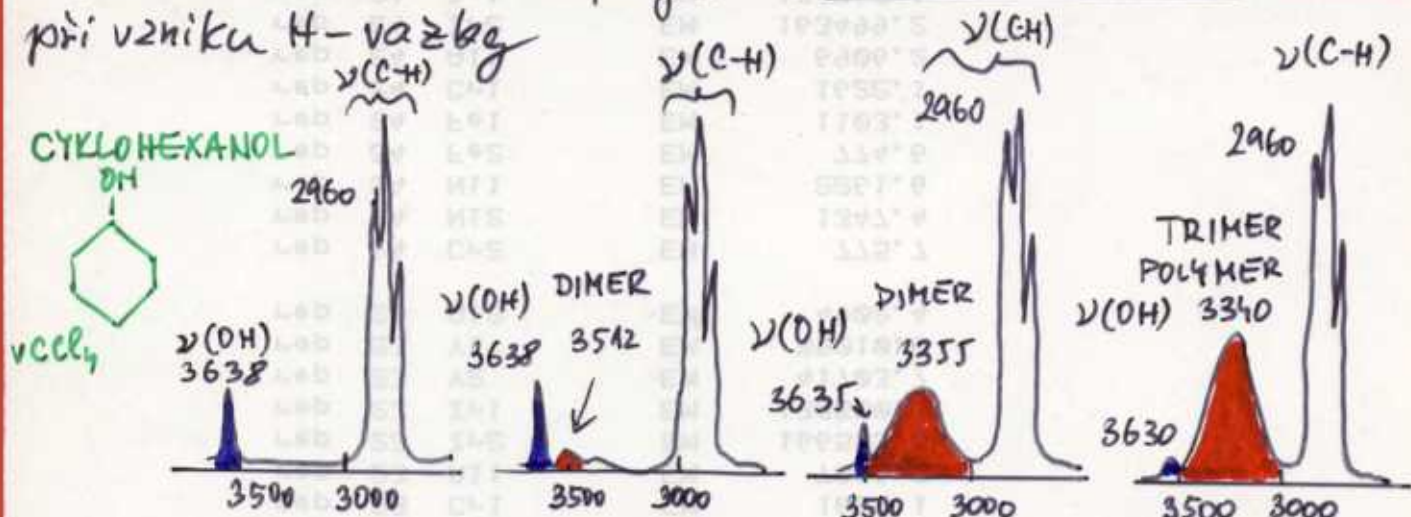
INTRAMOLEKULÁRNÍ V. →

INTERMOLEKULÁRNÍ V. →

ROSTE (rozpad asociátů)

H-vazba ⇒ POKLES \int_{MAX} $\nu(C=O)$ AKCEPTORU PROTONU
cca jen 5-50 cm^{-1}

u PROTON-DONOROVÉ skupiny (X-H): deformační vibrace RŮST \int
při vzniku H-vazeb



C ₆ H ₁₁ OH	0,01M	0,1M	0,5M	2M
KVĚTA (mm)	5	0,5	0,125	0,03

POKLES \int $\nu(O-H)$ s rostoucí koncentrací a pokles konc. monomeru; POKLES SIGNÁLU $\nu(OH)$ 3638
NARŮST SIGNÁLU DI-, TRI-, POLYMERU s rost. koncentrací,
A POKLES \int $\nu(OH)$ POLYMERU

3) VLIV HMOTNOSTI ATOMŮ

ZMĚNA VLNOČTU PŘI NÁHRADĚ IZOTOPEM:

NEJVĚTŠÍ PŘI NÁHRADĚ H ZAD

$$\nu(\text{OH}) \sim \tilde{\nu} = 3600 \text{ cm}^{-1} \quad \nu(\text{OD}) \sim \tilde{\nu} = 2650 \text{ cm}^{-1}$$

Cl, Br, J \sim SNÍŽENÍ VLNOČTU PŘI SUBSTITUCI TĚŽŠÍM X

IZOTOPOVÉ ZÁMĚNY O, N, C - MĚNĚ VÝRAZNĚ

PŘÍKLAD: VALENČNÍ VIBRACE ($\text{C}=\text{O}$) V DIISOPROPYLKETONU

IZOTOPY	$\tilde{\nu}$ (cm^{-1})	VYUŽITÍ: PŘÍŘAZOVÁNÍ CHARAKT. FREKVENCÍ URČITÝM SKUPINAM NA ZÁKLADĚ MĚŘENÍ S IZOTOPOVÝMI ZÁMĚNAMI
$^{12}\text{C} = ^{16}\text{O}$	1712	
$^{13}\text{C} = ^{16}\text{O}$	1675	
$^{12}\text{C} = ^{18}\text{O}$	1681	

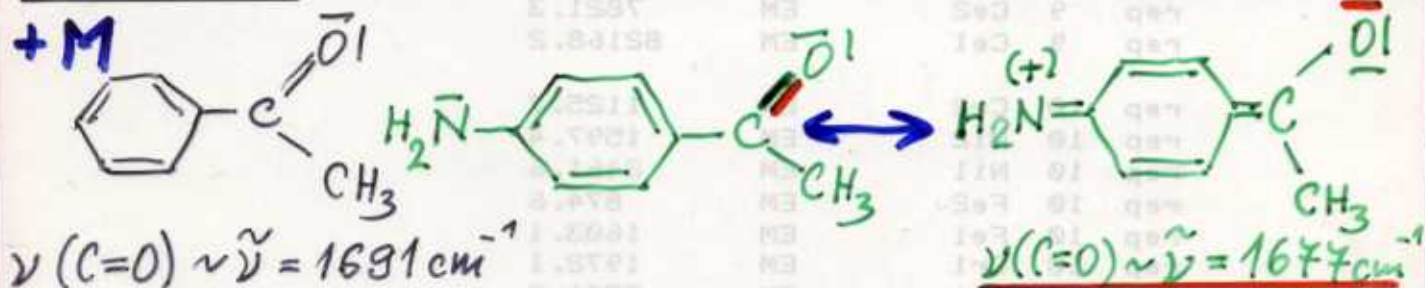
4) ELEKTRICKÉ VLIVY

EFEKTY: ● INDUKTIVNÍ, ● MEZOMERNÍ, ● KONJUGAČNÍ

a) MEZOMERNÍ EFEKT $\begin{cases} +M \Rightarrow \text{ZVÝŠENÍ} \\ -M \Rightarrow \text{SNÍŽENÍ} \end{cases}$ } ELEKTRONOVĚ HUSTOTY \Rightarrow

ZMĚNA CHARAKTERU VAZBY \Rightarrow ZMĚNA SILOVÉ KONST. \Rightarrow ZMĚNA $\tilde{\nu}$

PŘÍKLAD: ACETOFENON X p-AMINO ACETOFENON

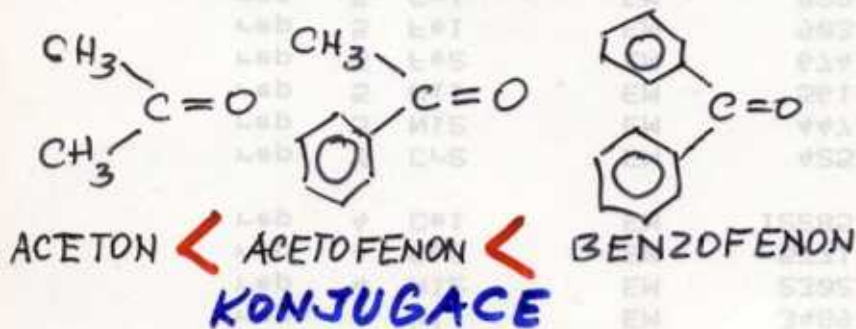


$+M \Rightarrow$ zvýšení polarizace $\text{C}=\text{O}$ vazby \sim zeslabení charakt. dvoj. vazby \Rightarrow snížení silové konst. \Rightarrow snížení vlnočtu

- **M** p-nitroacetofenon - snížení el. hustoty na benz. jádře
 ⇒ snížení polarizability vazby C=O ~ posílení char. dvojit. vazby
 ⇒ zvýšení silové konstanty ⇒ $\nu(C=O) \approx \underline{\underline{1700 \text{ cm}^{-1}}}$

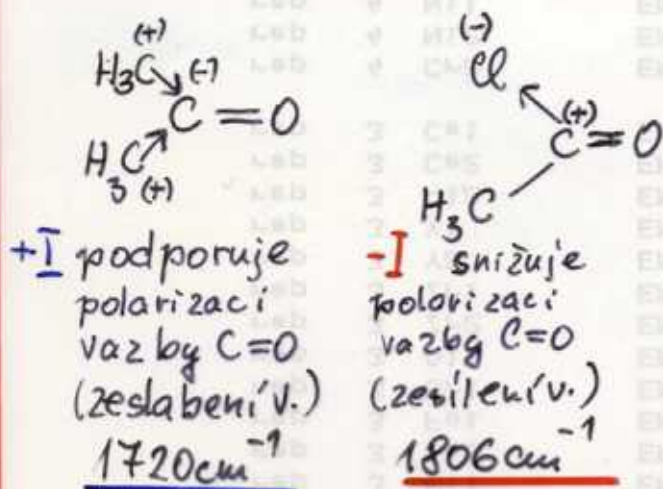
b) KONJUGACE

KONJUGACE ROSTE ⇒ DVOJNÝ CHARAKTER KONJUG. VAZBY KLESA ⇒
 ⇒ SIL. KONSTANTA KLESA ⇒ POSUN K NIŽŠÍM $\tilde{\nu}$



$$1720 \text{ cm}^{-1} > 1691 \text{ cm}^{-1} > 1650 \text{ cm}^{-1}$$

c) INDUKTIVNÍ EFEKT



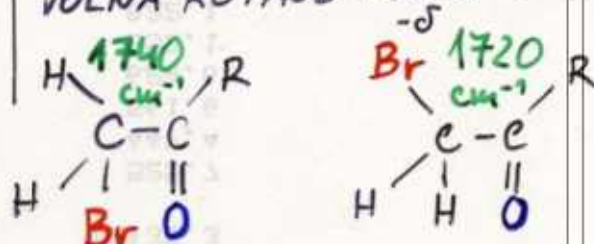
d) ELEKTROSTATICKÝ EFEKT

Působení silně elektronegat. atomů a elektronodorních atomů **ELEKTRICKÝM POLEM**

≈ jako interakce polárních skupin s rozpuštědlem

PŘÍKLAD: α -halogen ketony

VOLNÁ ROTACE KOLEM C-C VAZBY



Br odpuzuje el. O

5) STERICKÉ VLIVY, PŮVTÍ KRUHU, KONFORMACE

3-, 4-, 5-člankové cykly - změna valenčních úhlů ve srovnání s acyklickými systémy a 6- a vícečetnými cykly. Hybridizace sp^3 - endocyklické vaz. - více char. ρ
 \ exocyklické vaz. - více char. s

VĚTŠÍ PODÍL $s \Rightarrow$ ZKRÁČENÍ VAZBY \Rightarrow ZVÝŠENÍ SIL. KONS.
 $\rho \Rightarrow$ PRODLOUŽENÍ VAZBY \Rightarrow SNÍŽENÍ

\Rightarrow PŘI POKLESU POČTU ČLÁNKŮ KRUHU $\left\{ \begin{array}{l} \text{EXO-VAZBY - VYŠŠÍ} \\ \text{ENDO-VAZBY - NÍŽŠÍ} \end{array} \right.$

PODOBĚ V hybridizace sp^2 :

PŘÍKLAD: $\nu(C=O)$ v cykl. ketonech a $\nu(C=C)$ v cykloalkenech

CYKLOALKENY	$\nu(C=C)$	CYKL. KETONY	$\nu(C=O)$ (EXO CYKL.)
cyklohexen	1646	cyklohexanon	1718
cyklopenten	1611	cyklopentanon	1742
cyklobuten	1566	cyklobutanon	1784

VYUŽITÍ: URČOVÁNÍ VELIKOSTI KRUHU Z INFRAČERVENÉHO SPEKTRA

KONFORMAČNÍ IZOMERY:

EKVATORIÁLNÍ \rangle VAZBY \langle SMŘŠT. A ROZTAH. KRUHU \Rightarrow VĚTŠÍ E
 AXIÁLNÍ \langle VAZBY \rangle SMŘŠT. A ROZTAH. KRUHU \Rightarrow MENŠÍ $E \Rightarrow$ NÍŽŠÍ ν

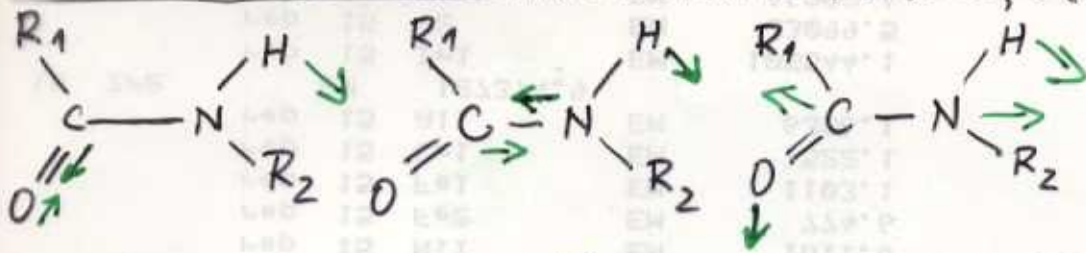
VYUŽITÍ: URČOVÁNÍ KONSTITUCE, NAPŘ. STEROIDY

6) VIBRAČNÍ INTERAKCE (VIBRAČNÍ SPŘAŽENÍ)

PODMÍNKY CHARAKTERISTICKÉ VIBRACE VAZBY - NEZÁVISLE
VIBRACE NA ZBYTKU MOLEKULY:

- 1) ODLIŠNÉ HMOTNOSTI ATOMŮ OD ZBYTKU MOLEKULY (C-H)
- 2) ODLIŠNÁ SILOVÁ KONSTANTA - ν (C=C, C=O)

SPŘAŽENÉ VIBRACE: NAPŘ. AMID: $\nu(\text{C=O})$, $\delta(\text{N-H})$, $\nu(\text{C-N})$



AMID I	AMID II	AMID III
1630-1690 cm^{-1}	1520-1570 cm^{-1}	1200-1310 cm^{-1}
$\nu(\text{C=O}) + \delta(\text{N-H})$	$\delta(\text{N-H}) + \nu(\text{C-N})$	$\nu(\text{C=O}) + \delta(\text{N-H}) + \nu(\text{C-N})$
převažuje	převažuje	

FERMIHO REZONANCE $\left\{ \begin{array}{l} \text{spřažení} \\ \text{ZÁKL. VIBRACE SKUPINY} \\ \text{HARMON. VIBRACE JINÉ SKUPINY} \end{array} \right.$

KOMBINACE ENERGETICKÝCH HLADIN \Rightarrow Z NOVĚ HLADIN
 OBA PŘECHODY MAJÍ PODOBNOU INTENZITU \times HARMONICKÉ V. NESPR.

INFRAČERVENÁ SPEKTRA ORGANICKÝCH PŘÍKLAD: SLOUČENIN

UHLOVODÍKY

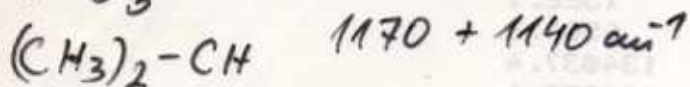
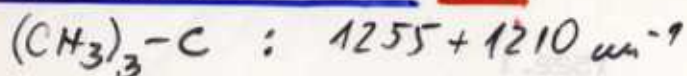
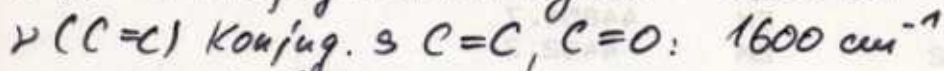
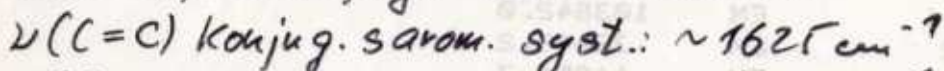
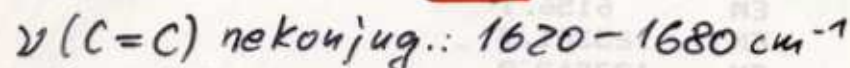
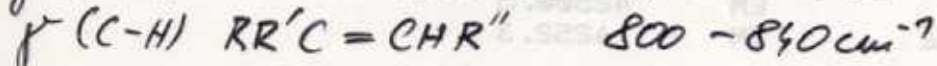
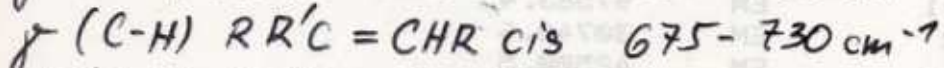
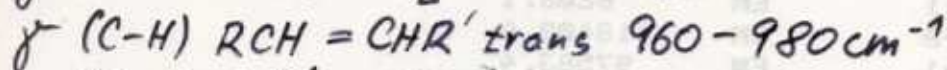
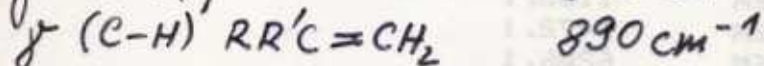
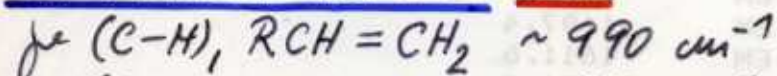
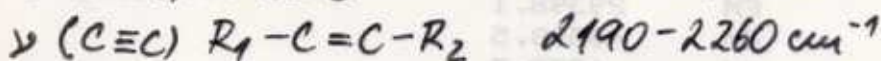
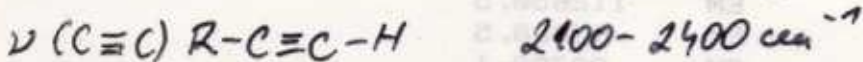
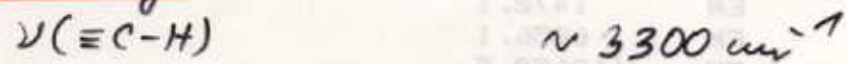
alkany

VALENČNÍ VIBRACE C-H:

$\nu(\text{CH}_3)$: 2960 cm^{-1} ν_{as}	$\nu(\text{CH}_2)$: 2925 cm^{-1} ν_{as}
$\nu(\text{CH}_3)$: 2870 cm^{-1} ν_{s}	$\nu(\text{CH}_2)$: 2850 cm^{-1} ν_{s}
$\nu(\text{CH})$: 2890 cm^{-1}	$\nu(\text{CH})$ cyklopropan: $> 3000 \text{ cm}^{-1}$

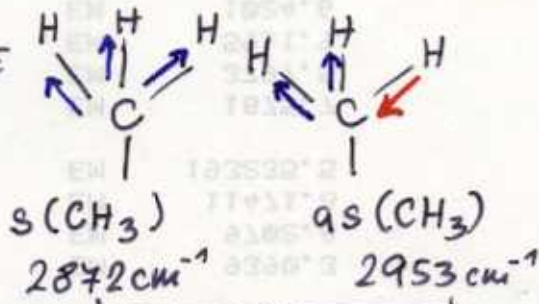
DEFORMAČNÍ VIBRACE C-H:

$\delta(\text{CH}_3)$: 1460 cm^{-1} δ_{as}	$\delta(\text{CH}_3)$, $-\text{CH}-\begin{array}{l} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array}$: 1365 + 1385
$\delta(\text{CH}_3)$: 1370-1380 δ_{s}	duplet dimethyln
$\delta(\text{CH}_2)$: 1470 cm^{-1}	$(\text{CH}_2)_n$: 720-790 cm^{-1}
$\delta(\text{CH})$: 1340 cm^{-1}	

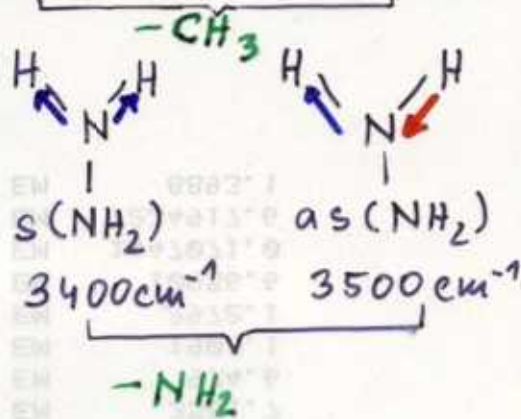
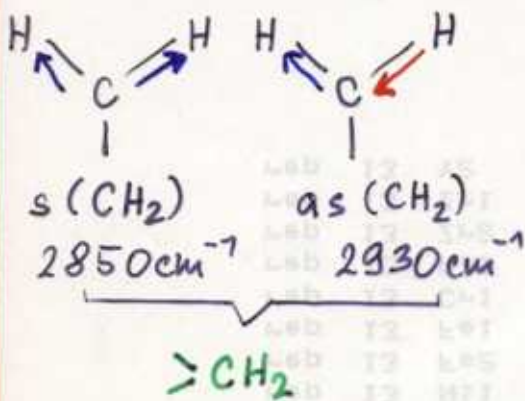
SKELETÁLNÍ VIBRACE C-H:alkenyVALENČNÍ VIBRACE C-HVALENČNÍ VIBRACE C=CDEFORMAČNÍ VIBRACE C-H:alkiny

JE-LI VÍCE STEJNÝCH ATOMŮ ZE SPOLEČNÉHO ATOMU
 (N-H v -NH₂, -NH₃, C-H v CH₂, CH₃, CH₄) =>
REZONANCE VIBRACÍ - VIBRAČNÍ SPŘAŽENÍ =>
VIBRACE SKUPINY JAKO CELKU: $\left\{ \begin{array}{l} \text{VE FÁZI} \\ \text{MIMO FÁZI} \end{array} \right\} \Rightarrow 2 \text{ PÁSY}$

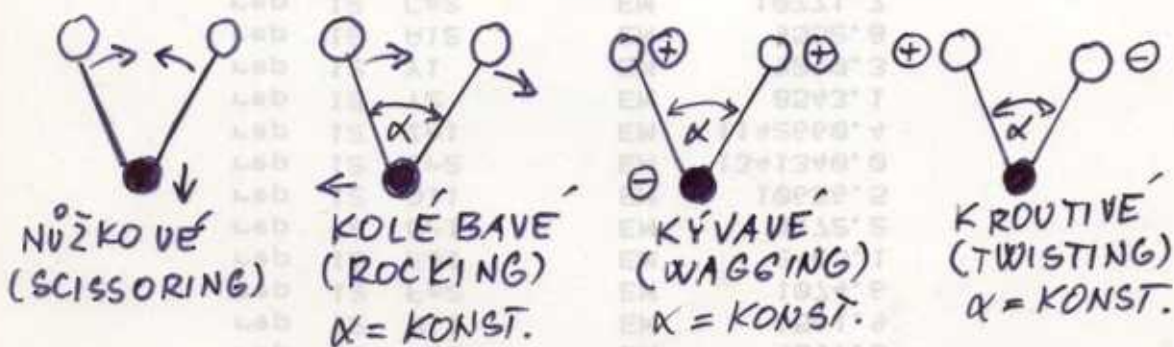
SYMETRICKÁ } VIBRACE
 ASYMETRICKÁ }



VALENCNÍ VIBRACE



DEFORMAČNÍ VIBRACE

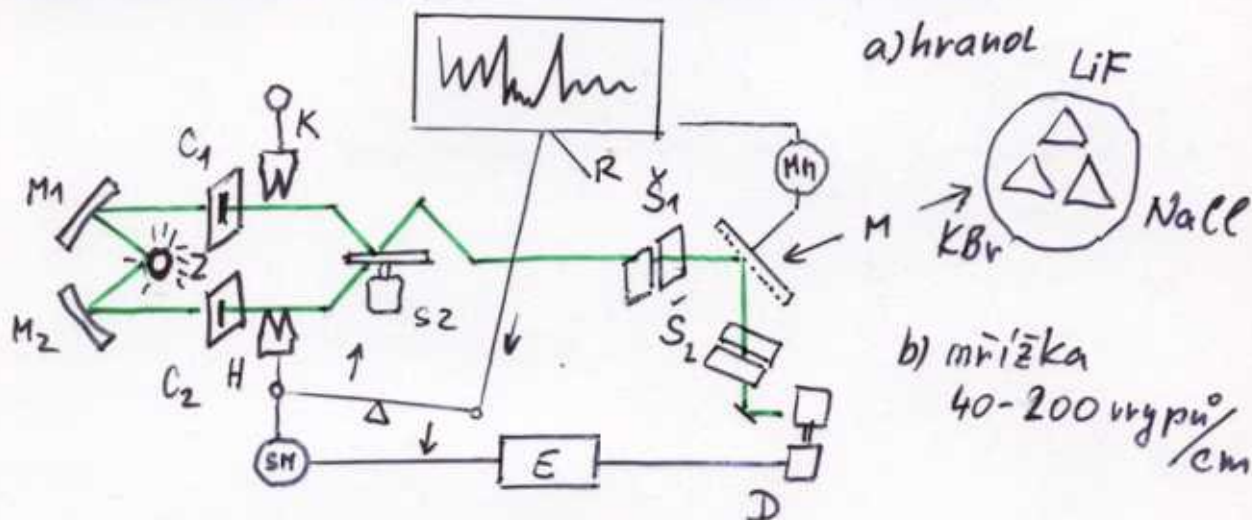


VAZBA Z ROVINNĚ USPOŘÁDANÉHO OKOLÍ (σ(C-H) in plane)
 MIMOROVINNÉ OKOLÍ (σ(C-H) out of plane)

VIBRAČNÍ SPŘAŽENÍ 2 DVOJNÝCH VAZEB: 1,3 BUTADIEN
 $\nu_{as} = 1630$ $\nu_s = 1590 \text{ cm}^{-1}$

INSTRUMENTACE IR SPEKTROSKOPIE

- DVOUPAPRSKOVÉ PŘÍSTROJE S OPTICKOU KOMPENZACÍ
- AUTOMATICKÁ REGISTRACE SPEKTRA
- HRANOVÉ NEBO MŘÍŽKOVÉ MONOCHROMÁTORY



Z - zdroj, C_1 - celá se vzorkem, C_2 - srovnávací (rozpouš f.)
 S_2 - rotující sektorové zrcadlo, - 10-12 Hz, \tilde{S}_1 - vstupní štěrbinu
 M - monochromátor, M_1, M_2 zrcadla, \tilde{S}_2 - výstupní štěrbinu
 D - detektor, E - elektronika, SM - servomotor, H - hřebčenná
 olona, R - zapisovač, MH - motor monochromátoru.

PŘÍSTROJ PRACUJE V OPTICKÉ ROVNOVÁŽE

MONOCHROMÁTORY MŘÍŽKY NAODRAŽ, ROVINNÉ LEPŠÍ DISPERZE
 LITROW (ZRCADLO ZA HRANOLEM) KONKÁVNÍ A ROZLIŠENÍ NEŽ HRANOL

MATERIÁL HRANOLŮ: LiF 1800cm^{-1} , CaF_2 1400cm^{-1} , NaCl 650cm^{-1}
 KBr 380cm^{-1} , CsBr 250cm^{-1} , CaF_2 200cm^{-1} klesá rozliš. schopnost.

ZDROJ - KERAMICKÁ TYČINKA - GLOBAL (1500°C) SiC

NERNST. TYČ REM oxidy

DETEKTORY: 1) BOLOMETR - odporový teploměr

2) BOLAYOVA CELA - pneumaticky, zrcadla + fotočlánek

3) TERMOČLÁNEK

TECHNIKA SNÍMÁNÍ SPEKTER

VŠECHNA SKUPENSTVÍ

1) PLYNY (10 cm kyvety), PÁRY TĚKAVÝCH KAPALIN, nastavení tlaku
 => nastavení propustnosti (optimální), násobky průřehod

2) KAPALINY - kyvety, okénka  - distanční kroužek

* okénka NaCl, chráněné polymery KRS, AgCl

* distanční folie (kroužek Pb, Al, Ag 0,01-0,1 mm) také Au

Rozpouštědla: a) nesmí narušovat materiál okének

b) nesmí reagovat se vzorkem

c) musí mít dostatečnou propustnost ve zvoleném intervalu vlnových

d) nemají ovlivňovat spektra látek

e) musí dobře rozpouštět vzorek

Nejlépejší rozpouštědla: malá, symetrická molekula ~ CCl_4 , CS_2 => malý počet absorpčních pásů

* Spektra látek ve více rozpouštědlech.

* Koncentrace roztoků 5-10% při tloušťce 0,1 mm

Voda - narušuje okénka z halogenidů alk. kovů

Kyvety pro práci v H_2O : AgCl, BaF₂, CaF₂, sliedla

$H_2O + D_2O \sim 500-4000 \text{ cm}^{-1}$

Srovnávací roztok - čisté rozpouštědlo

Dvou paprskový přístroj - absorpce < 30% pro kvant. měř.
 -II- < 40% pro kompenzaci

3) PEVNÉ LÁTKY ~~X~~ ROZPTYL ZÁŘENÍ NA PRACH. ČÁSTICÍCH =>

a) NUJOLOVÁ TECHNIKA

suspenze vž. + parafin. oleje (nujol) cca 5 mg vž.

také hexachlorbutadien 2 destičky z NaCl

absorpce NUJOLU: $3030-2860 \text{ cm}^{-1}$ (valenční vib.) CH

$1460 + 1374 \text{ cm}^{-1}$ (deformační vib.)

b) TECHNIKA VYLISKŮ

1-2 mg vz. + KBr (spektr. čistý) cca 100-200 mg
 lisování za vakua - transparentní tableta, 500 MPa
 měření proti referenční tabletě KBr
 LISOVÁNÍ \Rightarrow DEFORMACE \times PŮVODNÍ STRUKTURA
 odstranění vlhkosti 300°C, infra lampa

c) ROZTAVENÉ TUHÉ LÁTKY

Vyhřívané kyvety, stanovení, analýza POLYMERŮ

d) REFLEXNÍ TECHNIKA

Pasty, pěny, laky, lepidla (nelze rozpustit, lisovat, tavit)

1) ATR (Attenuated Total Reflection)

úhel dopadu $>$ mezní úhel \Rightarrow

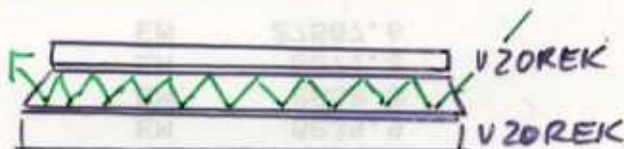
TOTÁLNÍ REFLEXE = $f(\tilde{\nu})$

SPEKTRUM



2) MIR (Multiple Internal Reflection)

násobné odrazy



KALIBRACE

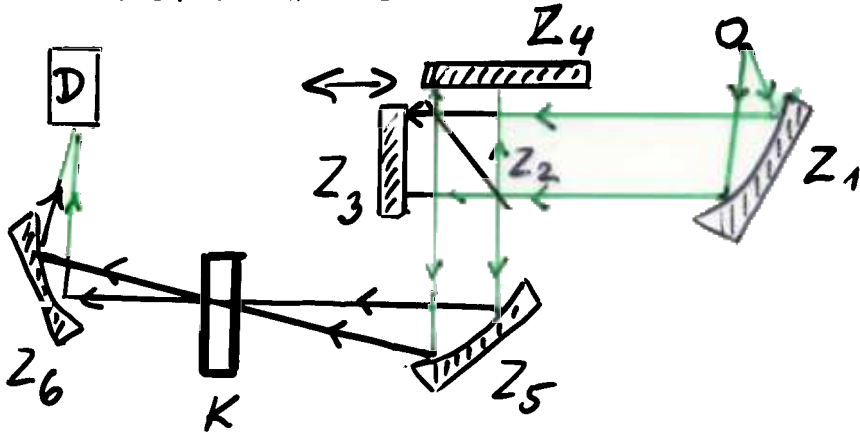
- 1) VLNOČTŮ (pára H_2O , NH_3 , CH_4 , CO_2 , polystyren, inden, HCl)
- 2) INTENZITA - (definovaná změna intenzity paprsku)
- 3) TLOUŠŤKY KYVET Y (měření vzdálenosti mezi interferenčními pásy při průchodu záření prázdnou kv.)

VZDÁLENÁ IR OBLAST ($\tilde{\nu} < 200 \text{ cm}^{-1}$ $\lambda > 50 \mu\text{m}$)

VLIV ABSORPCE PAR H_2O A CO_2 (SUŠENÍ, EVAKUOVÁNÍ)
 NĚKOLIK MŘÍŽEK, MALE VLNOČTŮ \sim MALE ROZLIŠENÍ

INTERFEROMETRICKE SPEKTROMETRY

- LEPŠÍ ROZLIŠENÍ VE SPEKTRU
 - VĚTŠÍ ZÁŘIVÁ ENERGIE NA DETEKTOR
- } NEŽ MŘÍŽKOVÝ PŘÍSTROJ



ZRCADLA

Z₁, Z₅, Z₆ - PARABOL.

Z₂ - POLO PROPUSTNÉ

Z₃ - POKYBLIVÉ

Z₄ - FIXNÍ

K - KYVETA + VZOREK

MICHELSONŮV INTERFEROMETR - FÁZOVÝ POSUN, INTERF.

DOBRY POMĚR S/N

SPEKTRUM = ZÁŘIVÁ ENERGIE OBOU PAPSŮ PO INTERFERENCI V ZÁVISLOSTI NA POLOZE POKYBLIVÉHO ZRCADLA

FTS, FTIR SPEKTROMETRY S FOURIE ROVOU TRANSF.

ZDROJ ZÁŘENÍ - VYSOKOTLAKÁ HG VÝBOJKA

DETEKTOR: 1) GOLAYOVA CELA

2) TGS = TRIGLYCINSULFÁTOVÝ PYROELEKTRICKÝ BOLOMETR

KYVETA: POLYETYLEN, POLYPROPYLEN

VYHODNOCOVÁNÍ SPEKTER, APLIKACE

IDENTIFIKACE
URČOVÁNÍ STRUKTURY
KVANTITATIVNÍ STANOV.

> ORGANICKÝCH LÁTEK

IDENTIFIKACE - porovnávání spekter, knihovny, výpoč. tab.

- PRAVIDLO: je-li ve spektru čistého standardu VÍCE ABSORPČNÍCH PÁSU NEŽ VE VZORKU, jedná se o RŮZNÉ LÁTKY

IDENTIFIKACE VE SMĚSÍCH JE OBTÍŽNÁ BEZ PŘEDCHOZÍHO DĚLENÍ

"SPEKTROMETRICKÁ NEUTRALIZACE" - do srovnávací kvantity roztok se složkou ve vzorku již identifikovanou - pokusné nastá vení koncentrace \Rightarrow DIFERENČNÍ SPEKTRUM
POSTUPNĚ ZJEDNODUŠENÍ SPEKTRA

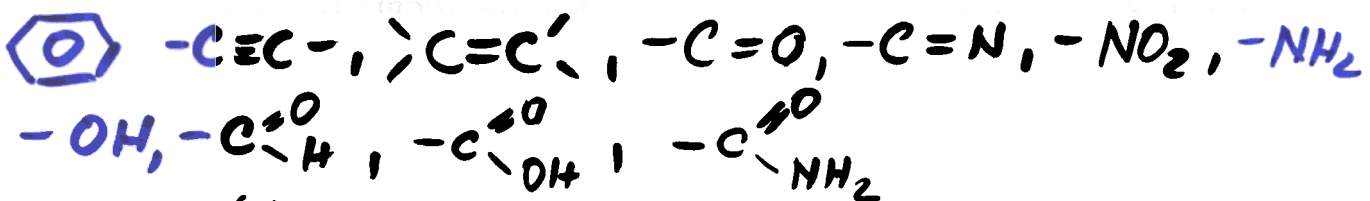
URČOVÁNÍ STRUKTURY

TABULKY CHARAKTERISTICKÝCH FREKVENCÍ

URČITÁ TRÍDA LÁTEK - CHARAKT. ABS. PÁSY NA NĚKOLIKA MÍSTECH VE SPEKTRU

- "FINGER PRINT" - JEN INTENZIVNÍ PÁSY

VÝRAZNĚ SE PROJEVUJÍ FUNKČNÍ SKUPINY A STRUKTURNÍ JEDN.



- JEMNĚJŠÍ ÚDAJE:
- TYP SUBSTITUCE NA AROMAT. KROUVU
 - VELIKOST KROUVU V CYKL. SYST.
 - KONCOVÉ ROZVĚTVENÍ ALKYLŮ

! PRAVIDLO ● NEPŘÍTOMNOST PÁSU CHARAKT. VIB. PRO URČITOU STRUKTURNÍ JEDNOTKU = DŮKAZ NEPŘÍTOMNOSTI TĚTO JEDNOTKY V MOLEKULE

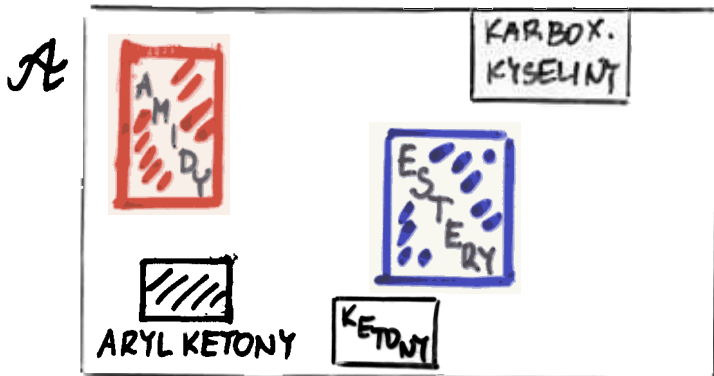
- VÝSKYT PÁSU CHAR. VIB. PRO URČ. STRUKT. JEDNOTKU V URČITÉ OBLASTI SPEKTRA = NUTNĚ PROKÁZAT DALE

INTENZITNÍ SPEKTROSKOPIE:

absorpční pás je charakterizován: ✓ VLNOČETEM

✓ INTENZITOU ABSORPCE

(A - integrovaná abs. intenzita)



← KARBOXYLOVÉ SLOUČENINY

URČOVÁNÍ ČISTOTY LÁTEK

pouze nečistoty s velmi intenzivními absorpčními pásy

! PRAVIDLO: ZE 2 VZORKŮ ČISTŠÍ TEN, KTERÝ MÁ MÉNĚ ABSORPČNÍCH PÁSŮ

KVANTITATIVNÍ ANALÝZA

✓ NÍZKÁ STABILITA

✓ VYSOKÁ HODNOTA NULOVÉ LINIE

✓ VELKÉ ODCHYLKY OD LAMBERT-BEEROVA ZÁKONA

✓ ZÁVISLOST MOLÁR. ABS. KOEF. NA PŘÍSTROJI A PODMÍNKÁCH

Metoda kalibrační křivky

SEPARAČNÍ METODY: GC a LC (jednoduchá rozpouštědla)

STANOVENÍ: V ROZVĚTVENÍ POLYMERŮ V KONKRETNÍ SKUPINĚ

Studium: v kinetice reakcí

✓ konformaci

✓ H-vazeb