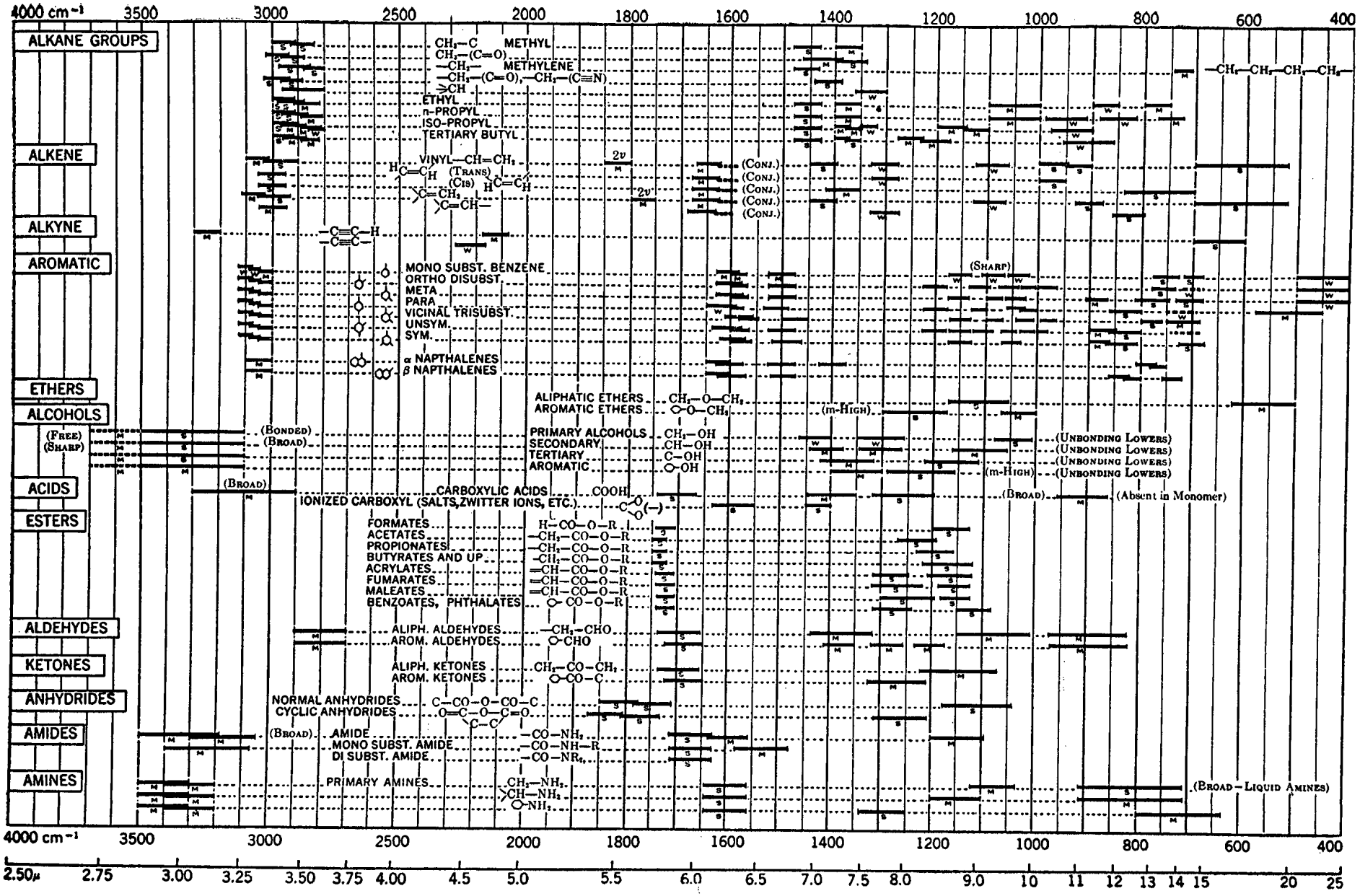
Interpretace spekter

- Oblast otisku prstu – 500 – 1500 cm-1
  - valenční vibrace většiny anorganických molekul
  - deformační vibrace organických molekul – δ HCH, δ CCH, δ COH
  - některé valenční vibrace organických molekul ν C-C, ν C-O
- Charakteristické vibrace – poloha spektrálních pásů funkčních skupin je relativně málo závislá na zbytku molekuly, proto je možné jejich vlnočty tabelovat

Interpretace spekter



Izotopicky substituované molekuly

- Interpretaci IR a RA spekter lze usnadnit izotopickou substitucí ve zkoumané molekule.
- Nedojde ke změně geometrie molekuly, ale změní se hmotnosti atomů.
- Dojde k poklesu frekvencí všech vibrací, jichž se substituovaný atom účastní.

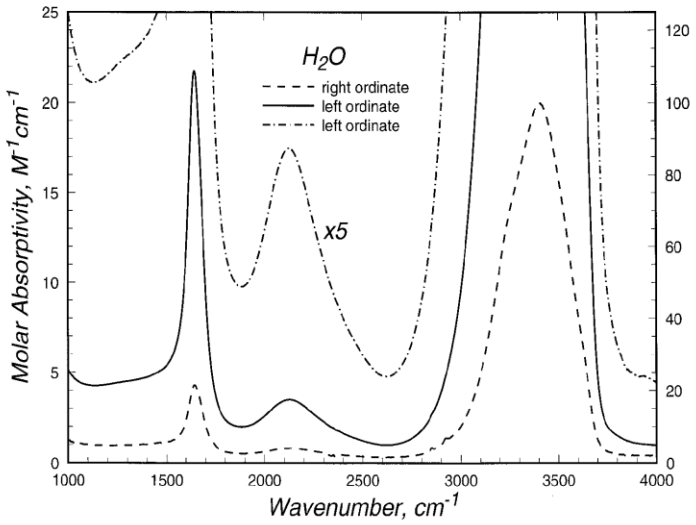


FIG. 1. Molar absorptivity of H_2O in the 1000–4000 cm^{-1} spectral range at 25°C.

cal studies, are the water absorptions at 1550 and 1650 cm^{-1}, the characteristic wavenumbers of protein amide II (H_2O) and amide I′ (D_2O) bands. D_2O never is 100% pure and usually includes HOD molecules from the traces of H_2O. The absorbance bands at 3404 cm^{-1} (intensity is proportional to content of OH groups) and at 3840 cm^{-1} (intensity is proportional to D_2O content) can be used for quick and precise determination of D_2O

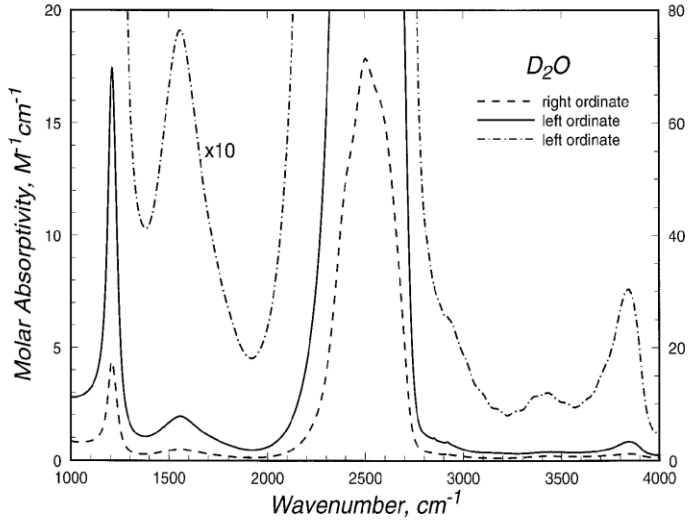


FIG. 2. Molar absorptivity of D_2O in the 1000–4000 cm^{-1} spectral range at 25°C.

Knihovny spekter

- http://sdbs.riodb.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi