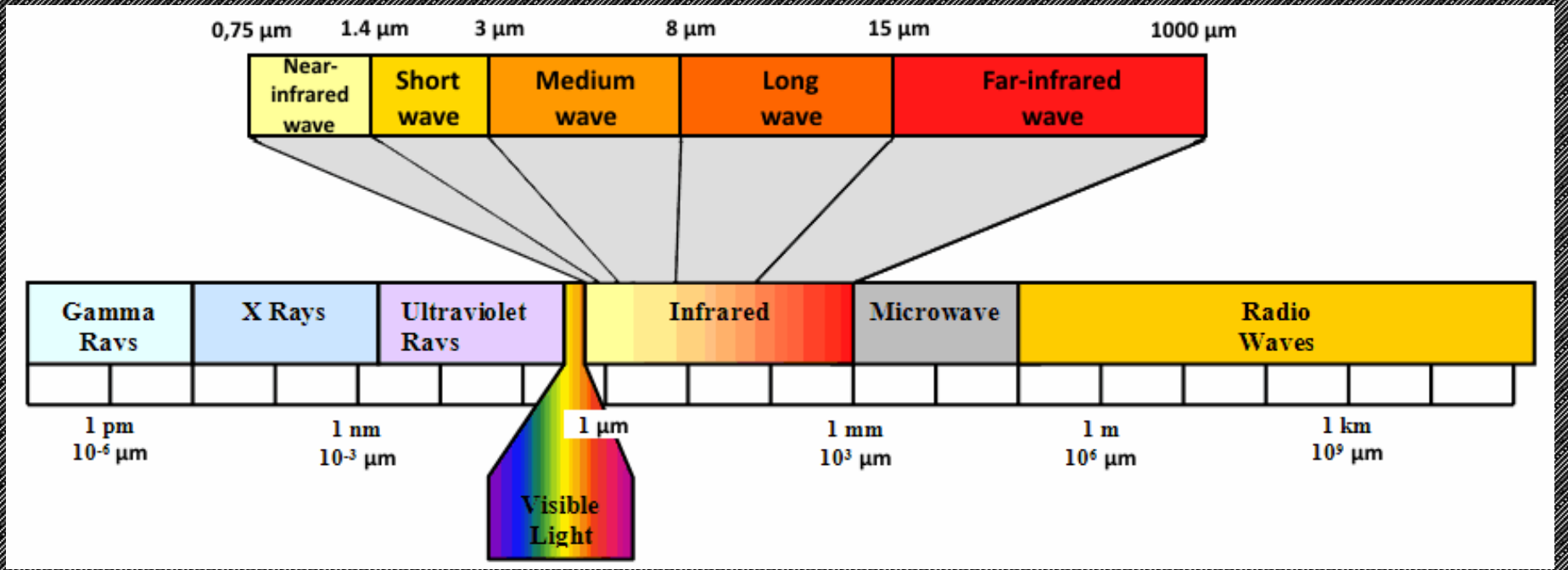
# Infračervená spektrsoksopie

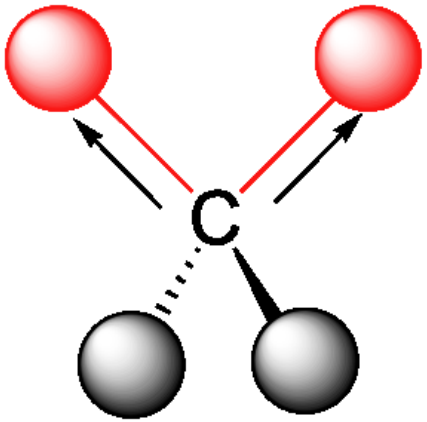
**Infračervená spektroskopie:**

- **analytická technika určená především pro identifikaci a strukturní charakterizaci organických sloučenin a v mneší míře také také pro stanovení anorganických látek.**
- **Tato technika měří pohlcení infračerveného záření o různé vlnové délce analyzovaným materiálem.**
- **Infračerveným zářením je elektromagnetické záření v rozsahu vlnových délek 0.75 – 1000 μm, což odpovídá rozsahu vlnočtů 12800 – 10 $cm^{-1}$.**
- **Standardně ji dělíme na: Near, Mid a Far-infrared spektroskopii**

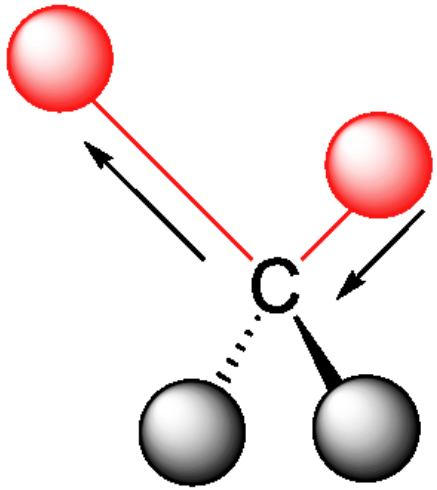


Energie fotonů infračerveného záření (1-60 kJ/mol) nepostačuje pro excitaci elektronů v molekulových orbitalech, ale je dostatečná ke změně vibračního stavu (z klasického pohledu ke zvětšení amplitudy vibrace molekuly) či rotačního stavu molekuly (ke zrychlení rotace molekuly). Uvědomíme-li si, že molekuly jsou tvořeny atomy, které nejsou spojeny rigidními vazbami, ale tyto vazby vykazují určitou pružnost, máme před sebou systém atomů, které mohou různými způsoby vibrovat.

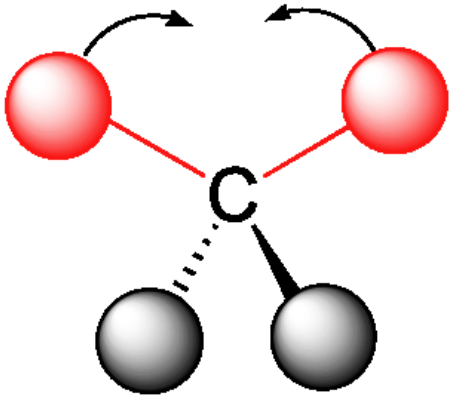
Vibrační problém polyatomových molekul lze pojímat v prvním přiblížení jako problém 3n-6 (v případě lineárních molekul 3n-5) nezávislých harmonických oscilátorů.



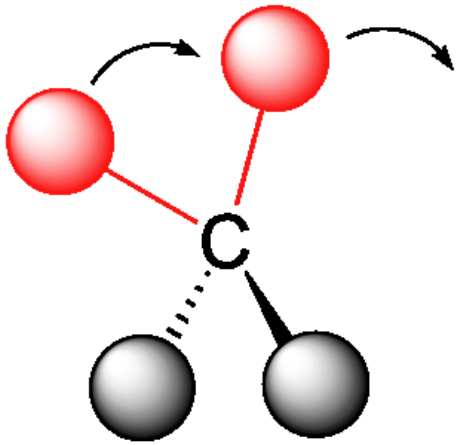

symmetric stretching




asymmetric stretching

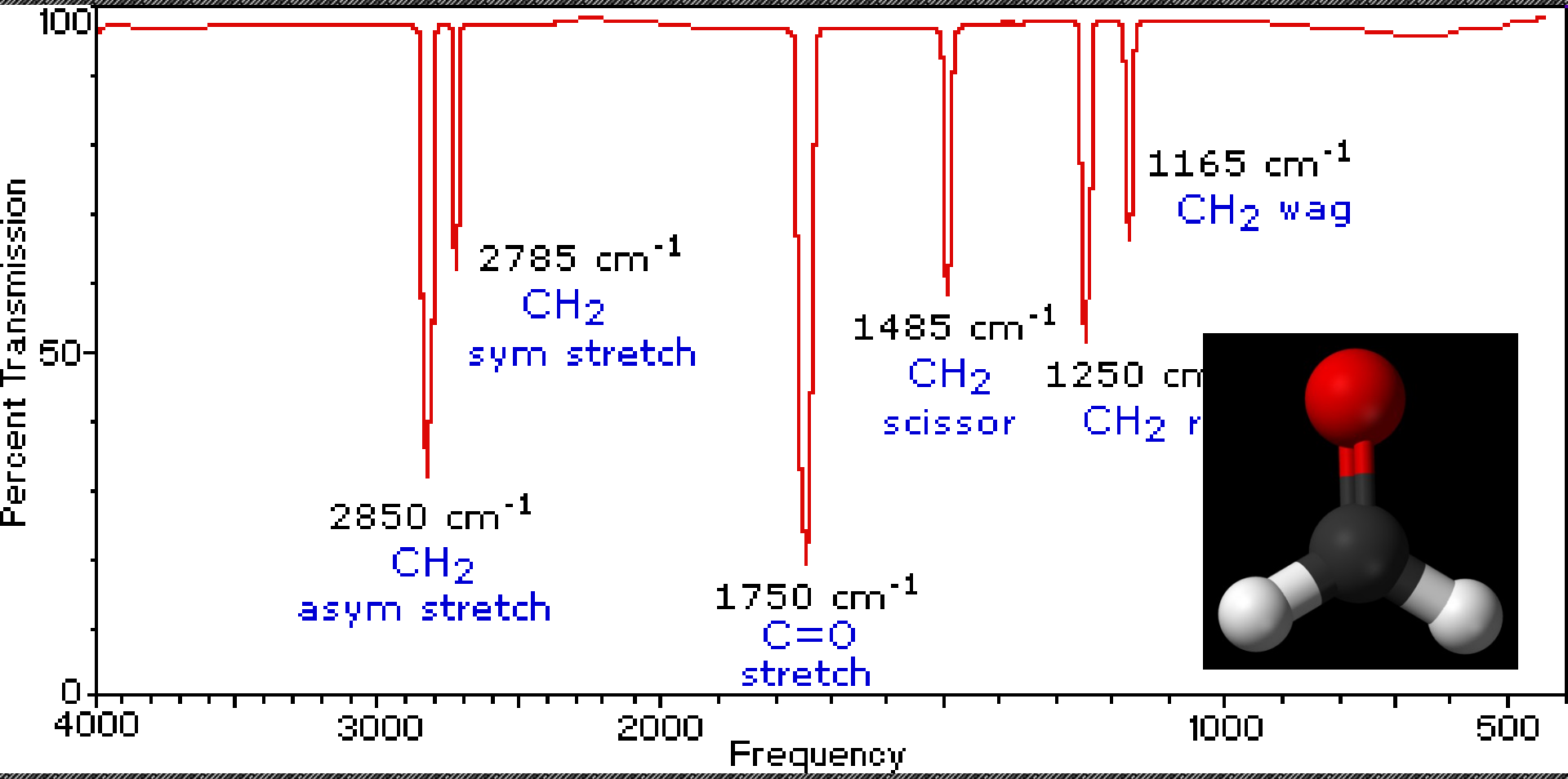



scissoring

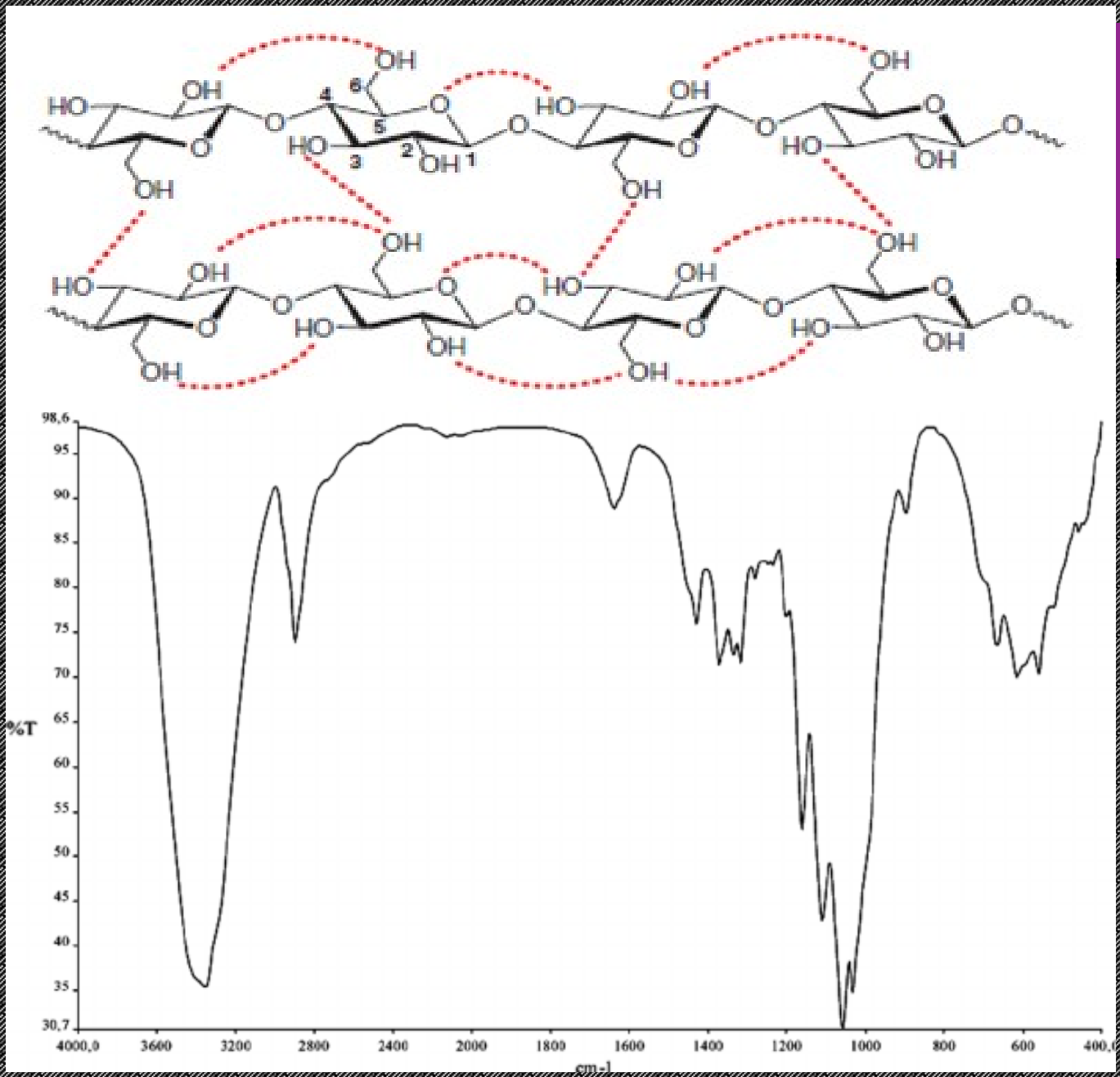



rocking

# Formaldehyd



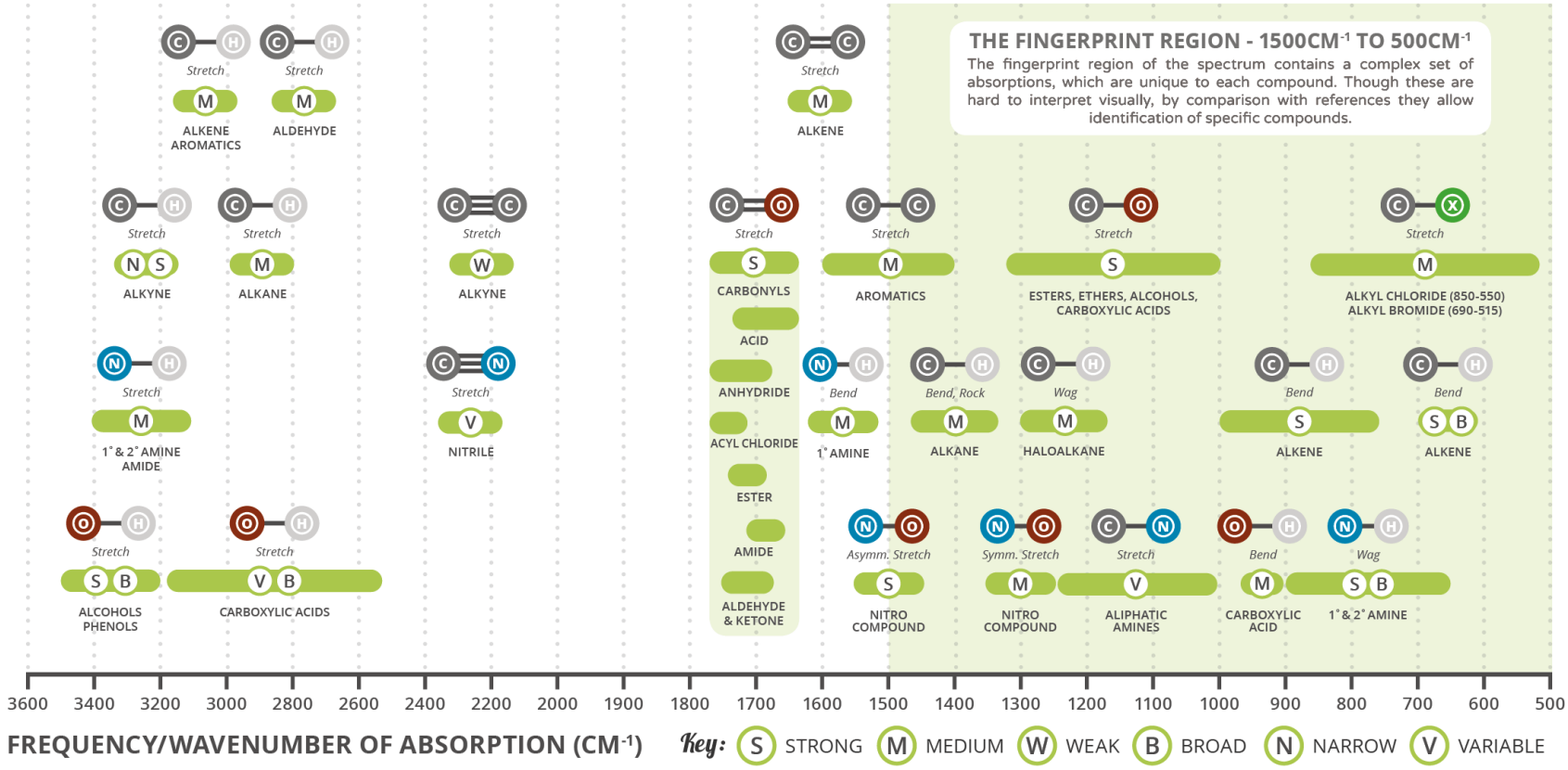
# Celulóza


%T
98,6
95
90
85
80
75
70
65
60
55
50
45
40
35
30,7
4000,0
3600
3200
2800
2400
2000
1800
1600
1400
1200
1000
800
600
cm-1

| Major Functional Group | Absorption Frequency Region | | | |
|---|---|---|---|---|
| O-H | 3650-3590 | | | |
| N-H | 3500-3300 | 1650-1590 | 900-650 | |
| =CH-H | 3100-3070 | 1420-1410 | 900-880 | |
| =C-H | 3100-3000 | 2000-1600 | | |
| C-H | 2900-2700 | 1440-1320 | | |
| =-$CH_3$ | 2880-2860 | 2970-2950 | 1380-1370 | 1470-1430 |
| O-H | 2700-2500 | 1320-1210 | 950-900 | |
| C≡C | 2140-2100 | | | |
| C=O | 1750-1700 | | | |
| C=C | 1600-1500 | | | |
| C-N | 1340-1250 | | | |
| C-O-C | 1200-1180 | | | |
| -C-H | 770-730 | | | |

# ANALYTICAL CHEMISTRY - INFRARED SPECTROSCOPY

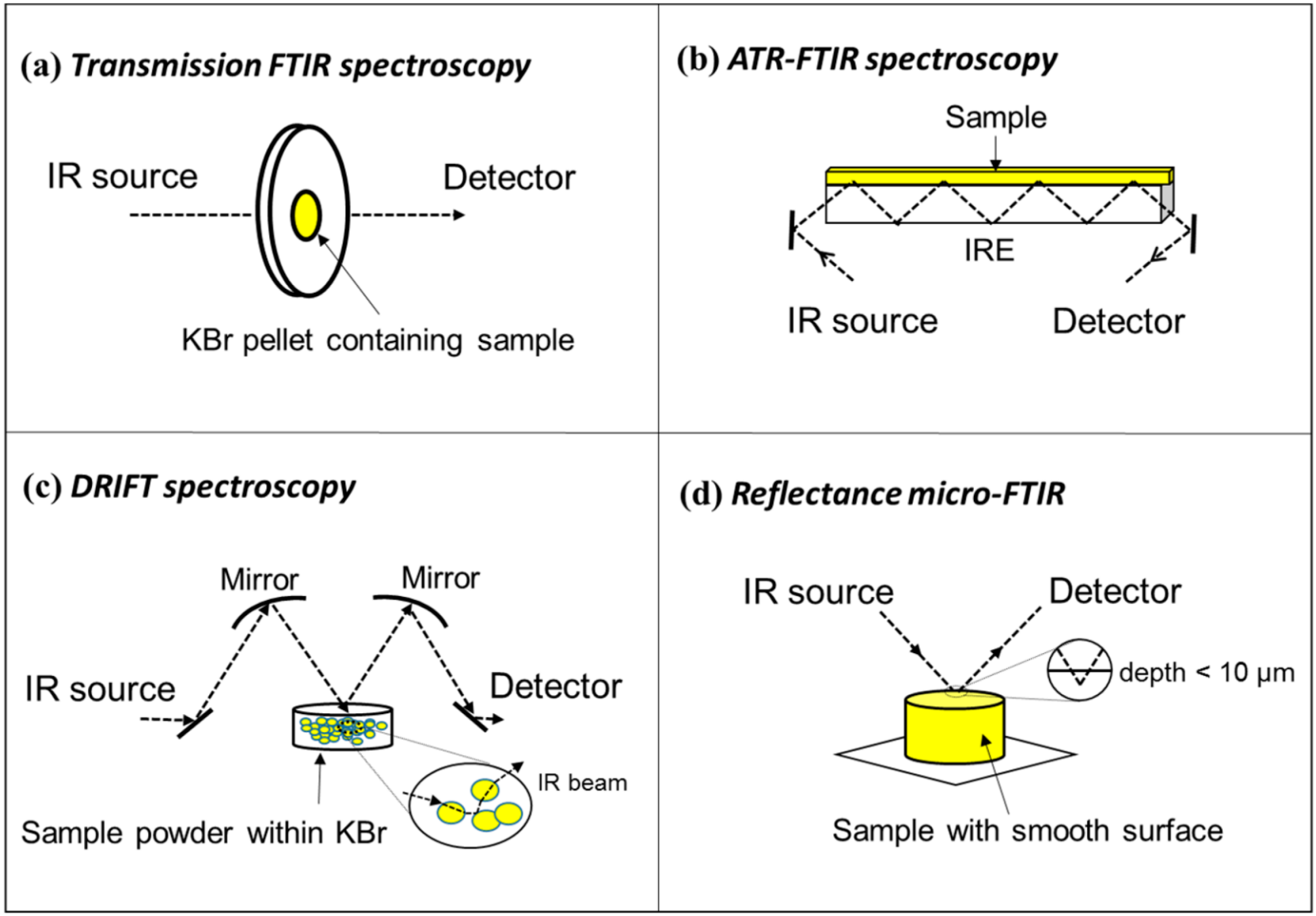
Commonly referred to as IR spectroscopy, this technique allows chemists to identify characteristic groups of atoms (functional groups) present in molecules.



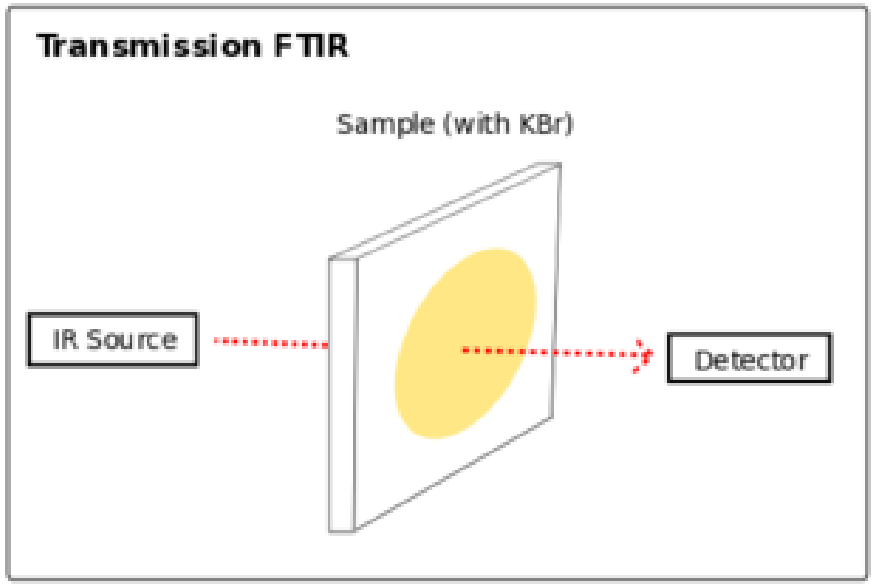

Infrared frequencies make up a portion of the electromagnetic spectrum. If a range of infrared frequencies are shone through an organic compound, some of the frequencies are absorbed by the chemical bonds within the compound. Different chemical bonds absorb different frequencies of infrared radiation. There are a number of characteristic absorptions which allow functional groups (the parts of a compound which give it its particular reactivity) to be identified. This graphic shows a number of these absorptions.

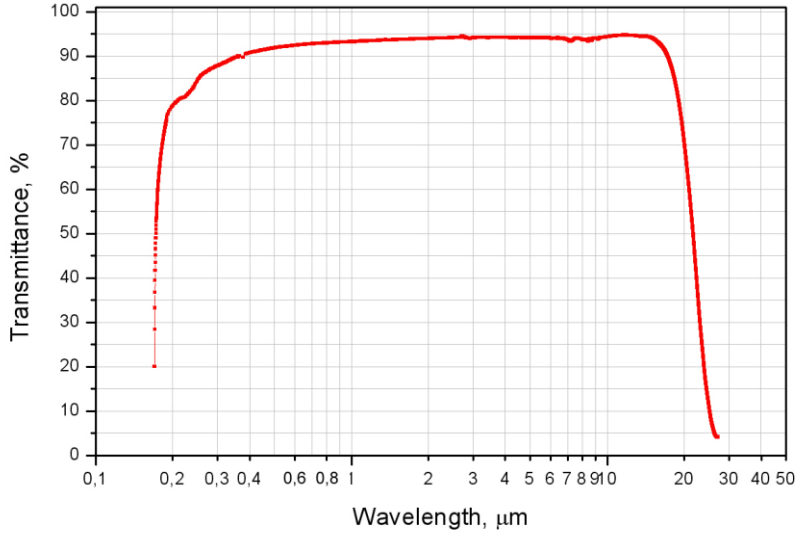
© COMPOUND INTEREST 2015 - WWW.COMPOUNDCHEM.COM | Twitter: @compoundchem | Facebook: www.facebook.com/compoundchem
This graphic is shared under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives licence.

# IR - spektroskopie



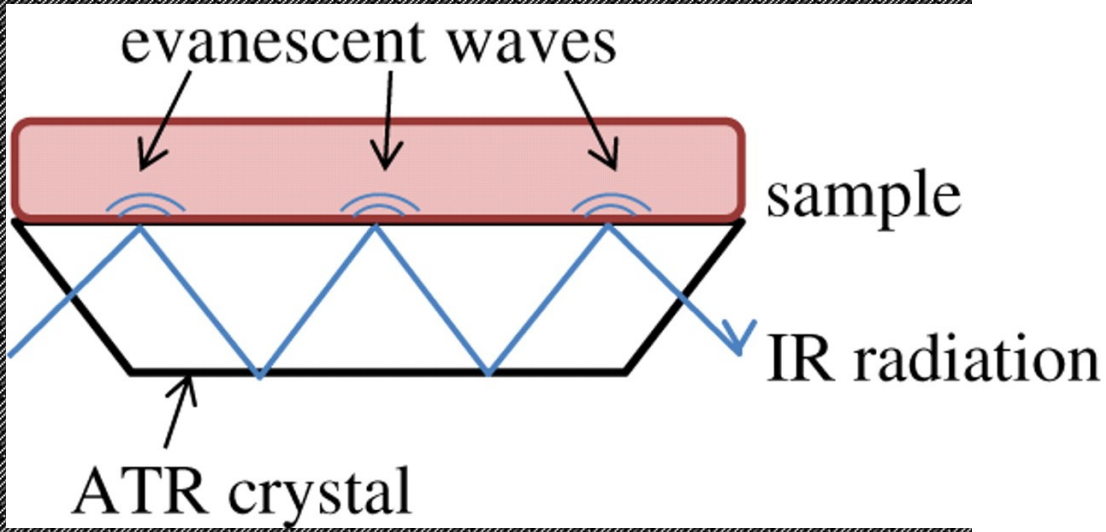
# IR - Transmisní



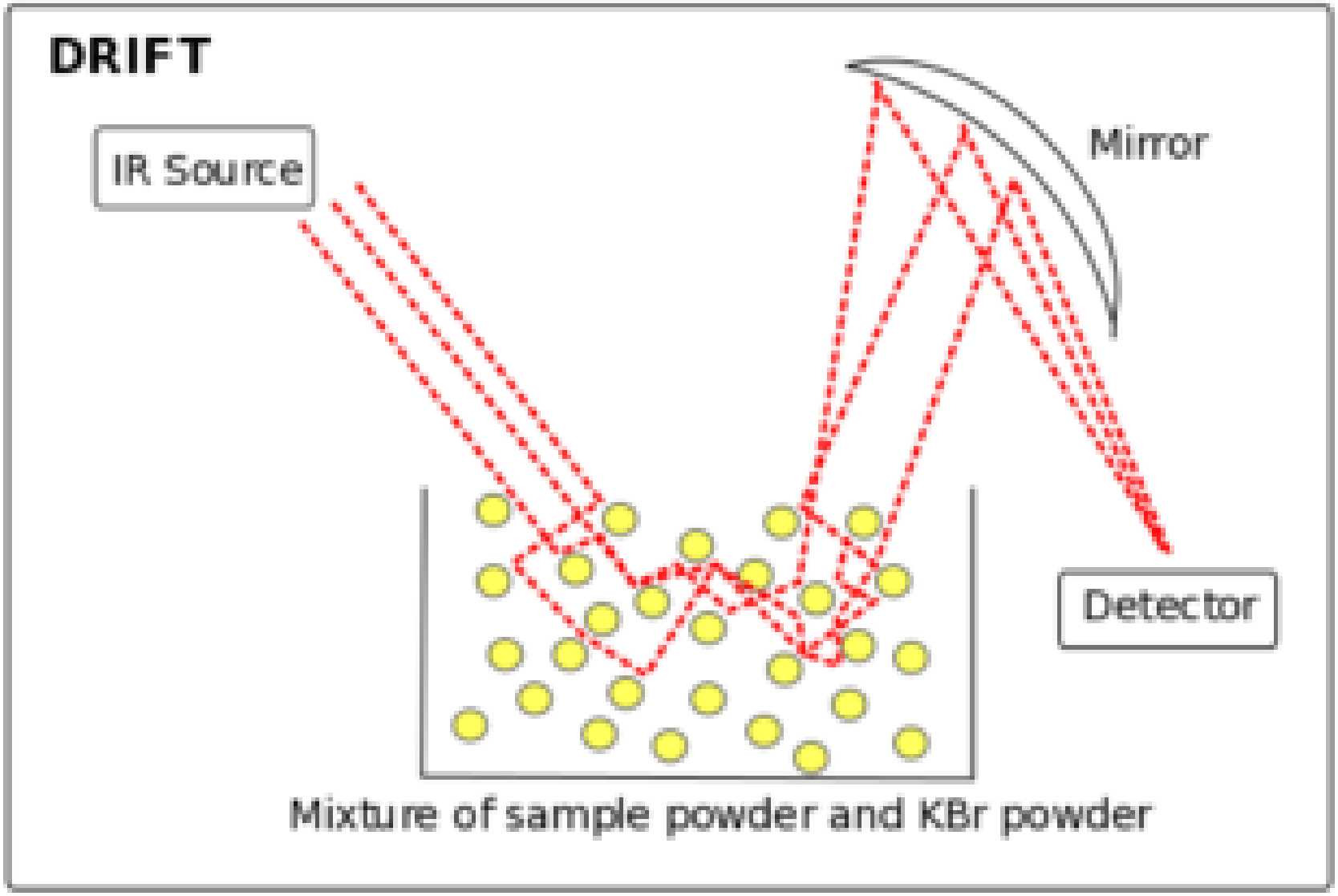
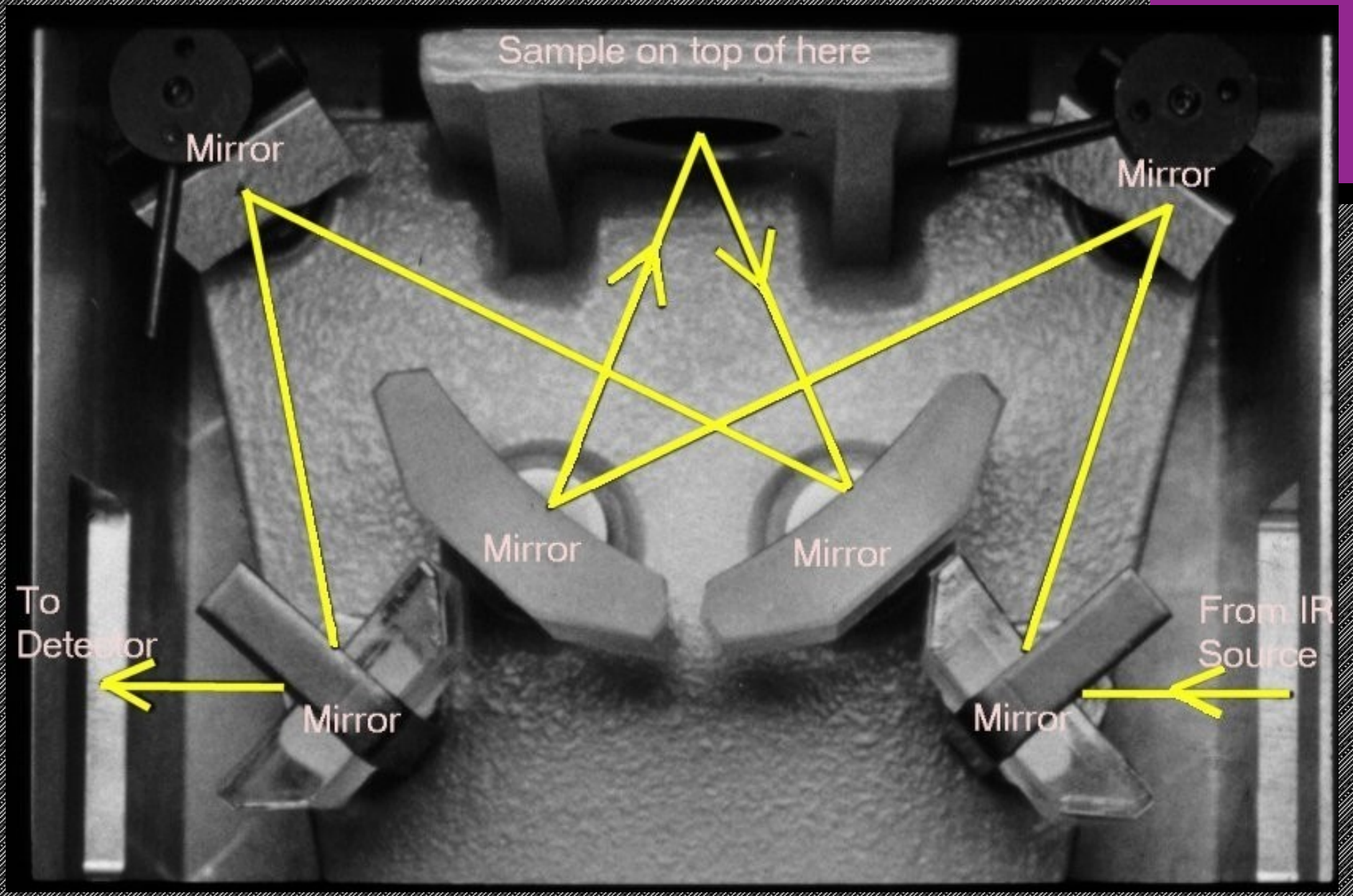



# ATR-FTIR spektroskopie

Technika zeslabeného úplného odrazu (ATR - Attenuated Total Reflect založena na principu jednoduch vícenásobného úplného odrazu na fázovém rozhraní měřeného v měřícího krystalu s dostatečně v indexem lomu.



# DRIFT spektroskopie



# IR - Reflectance (odrazivost)