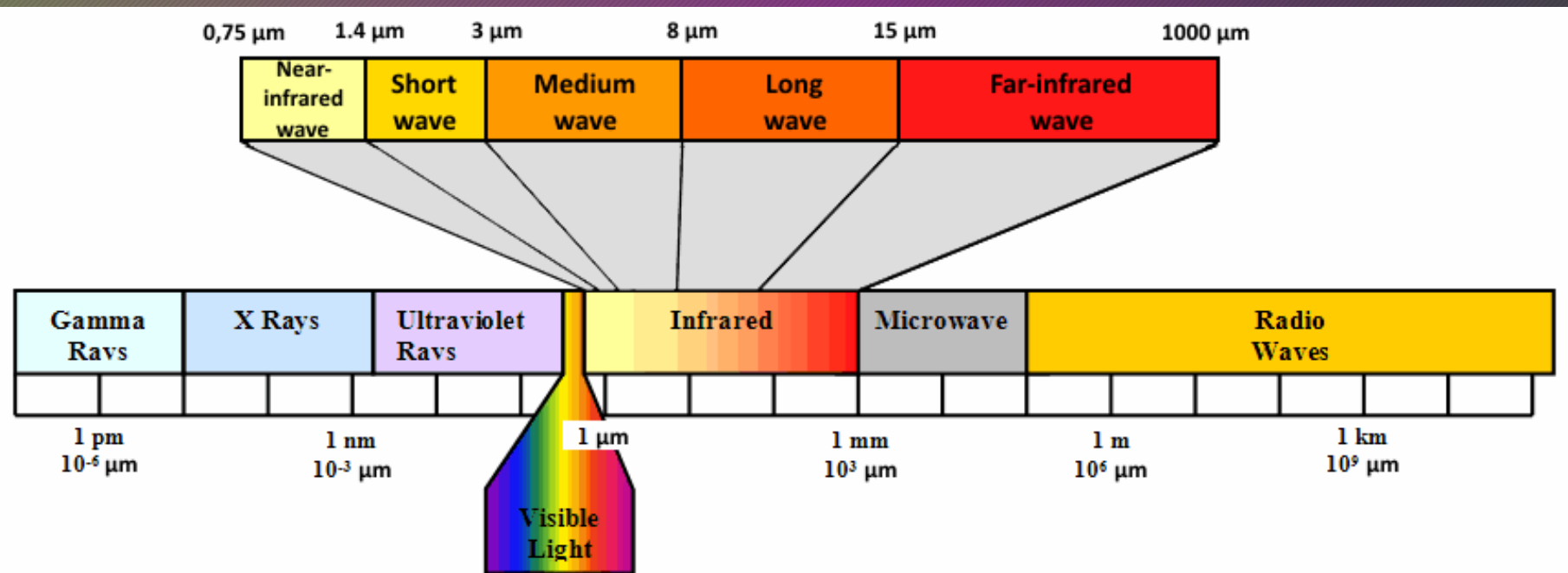


Infračervená spektrální absorpcie

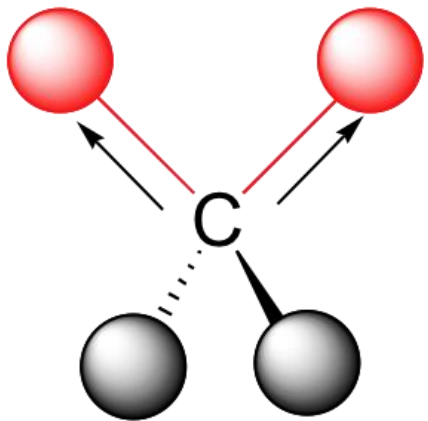
Infračervená spektroskopie:

- analytická technika určená především pro identifikaci a strukturní charakterizaci organických sloučenin a v menší 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

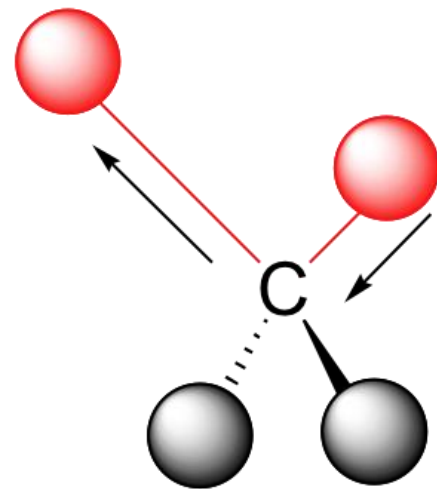


Energie fotonů infračerveného záření (1-60 kJ/mol) nepostačuje pro excitaci elektronů v molekulových orbitalech, ale je dostatečná ke změně vibračního stavu (z klasického pohledu ke zvětšení amplitudy vibrace molekuly) či rotačního stavu molekuly (ke zrychlení rotace molekuly). Uvědomíme-li si, že molekuly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

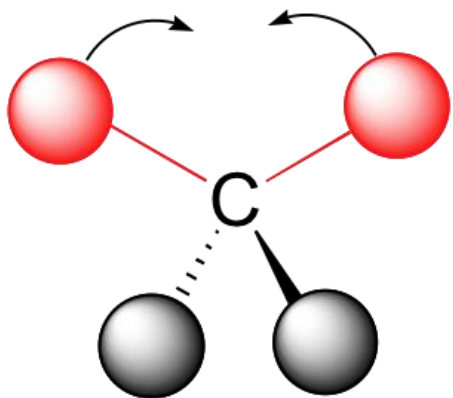
Vibrační problém polyatomových molekul lze pojímat v prvním přiblížení jako problém $3n-6$ (v případě lineárních molekul $3n-5$) nezávislých harmonických oscilátorů.



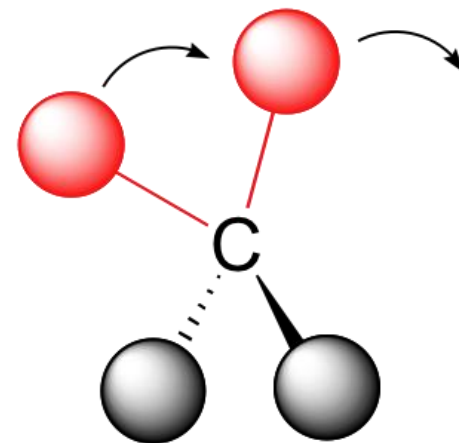
symmetric stretching



asymmetric stretching

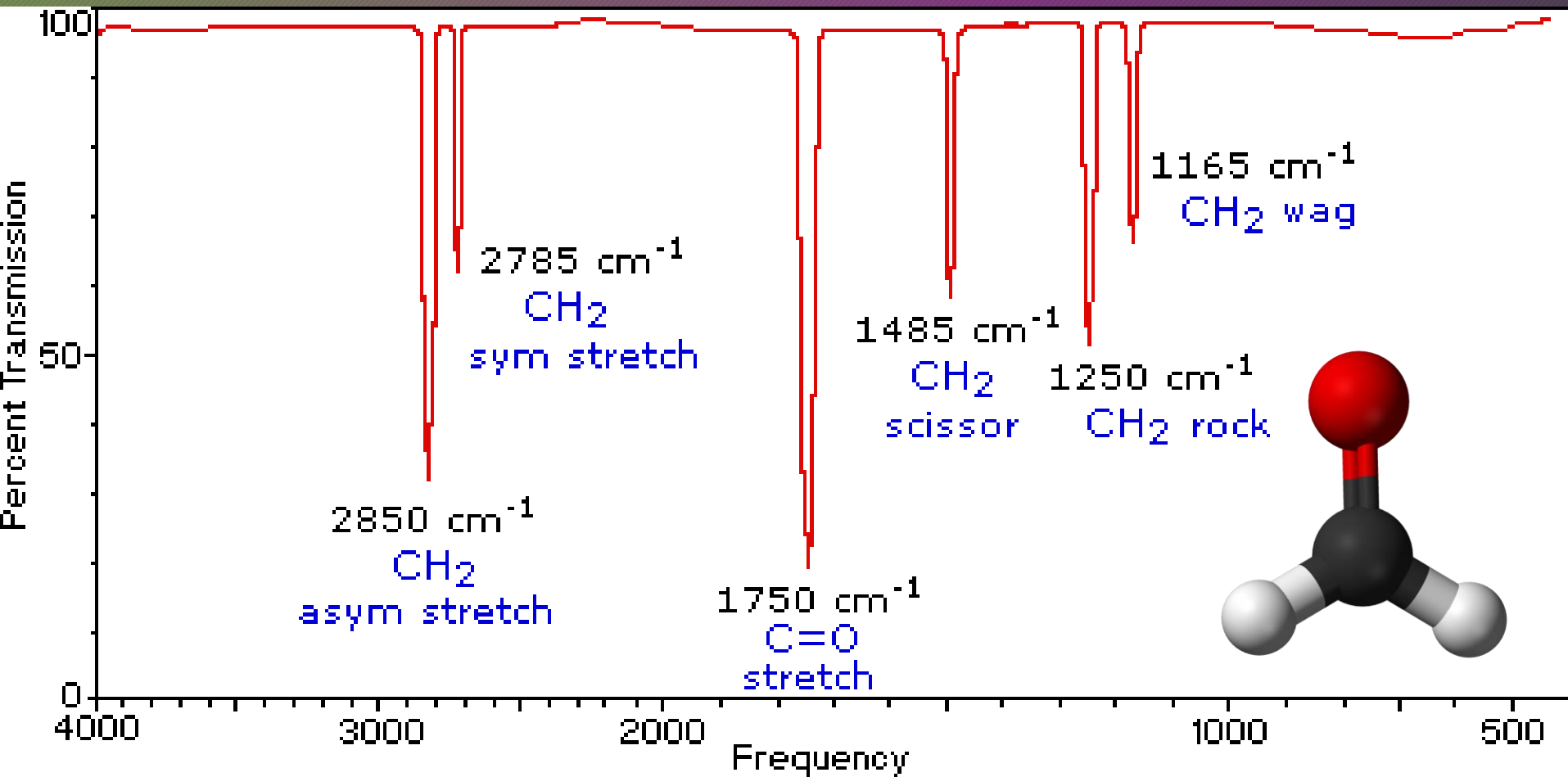
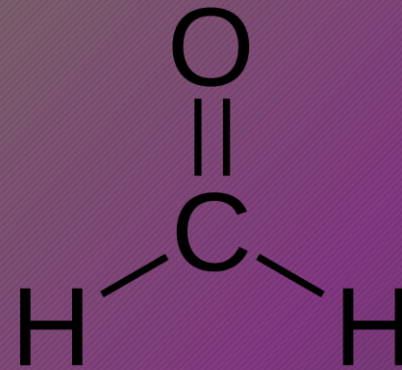


scissoring

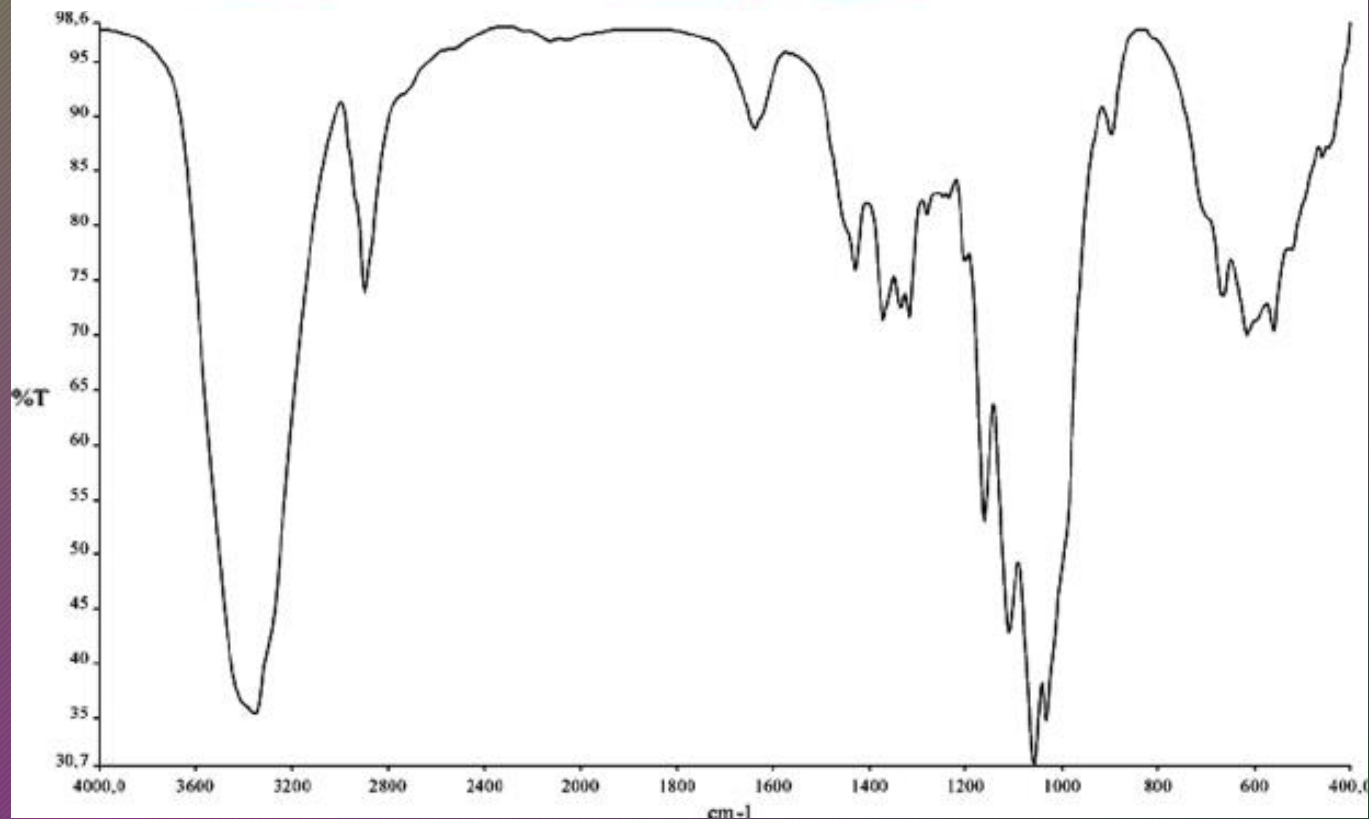
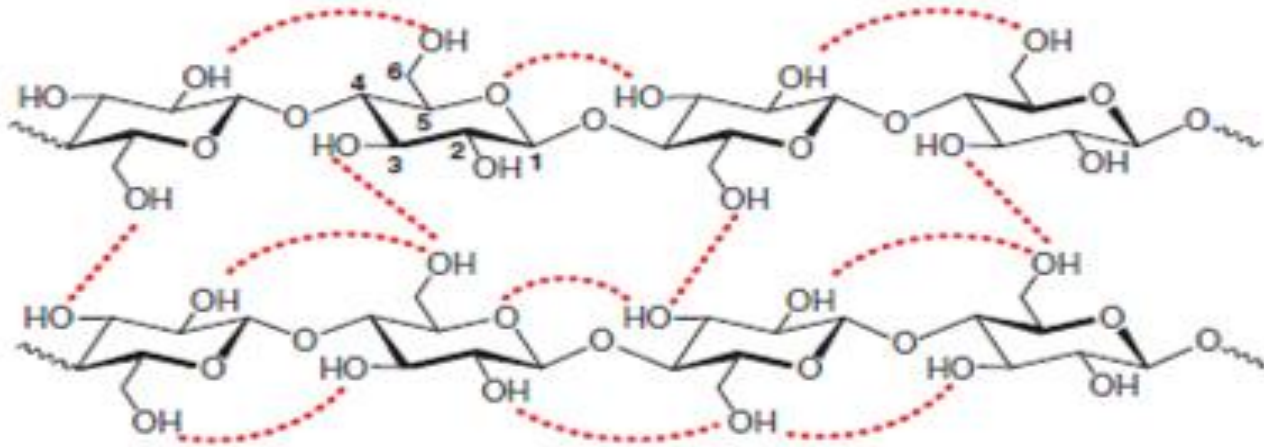


rocking

Formaldehyd



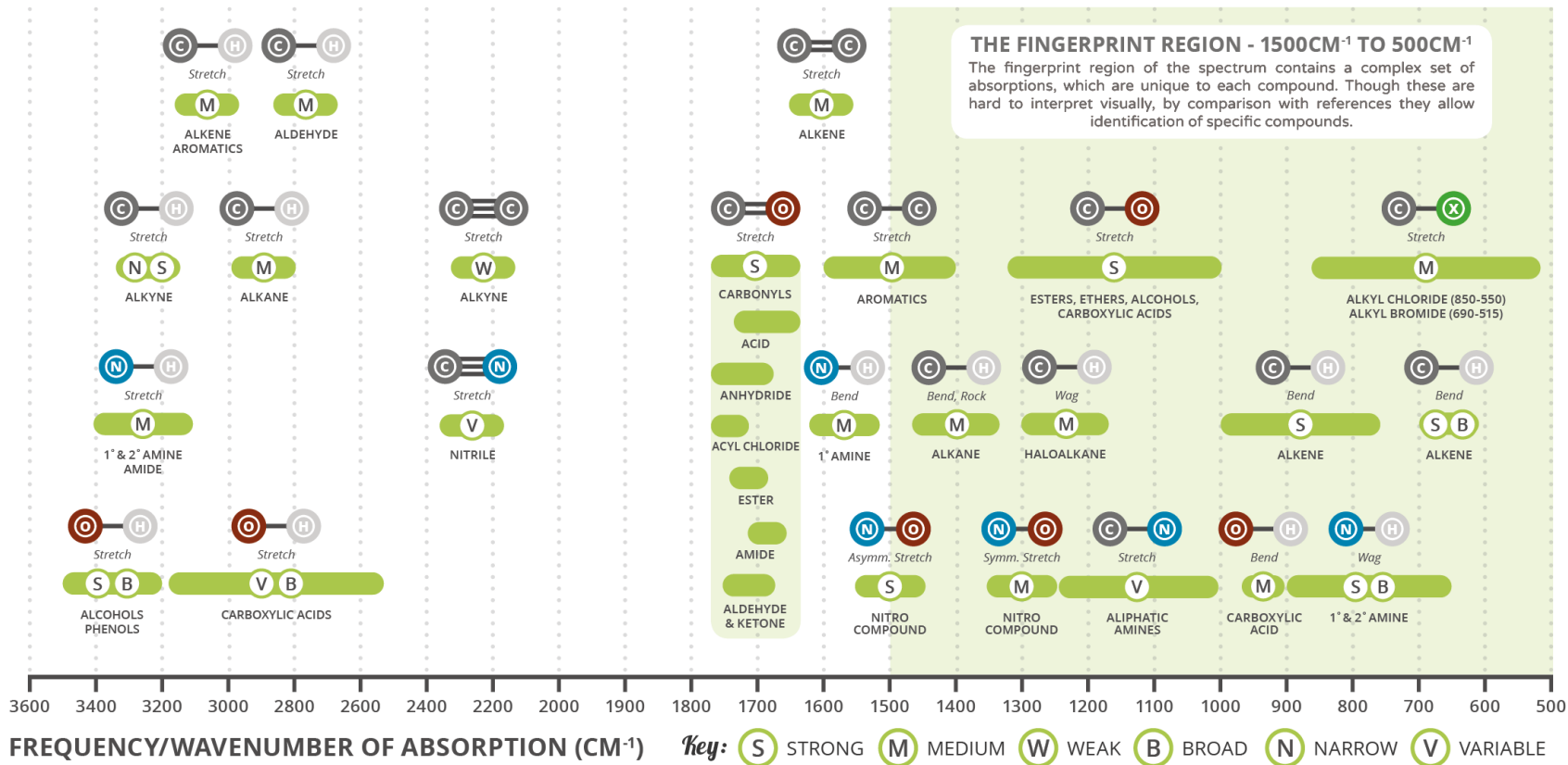
Celulóza



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

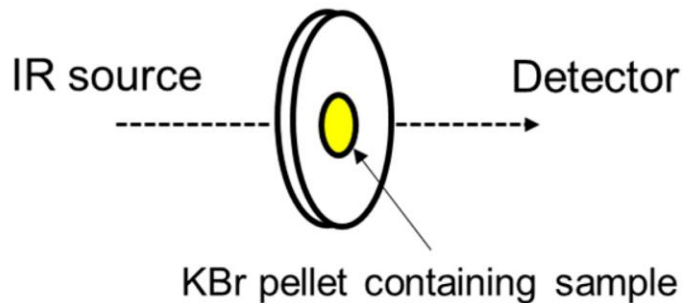
Commonly referred to as IR spectroscopy, this technique allows chemists to identify characteristic groups of atoms (functional groups) present in molecules.



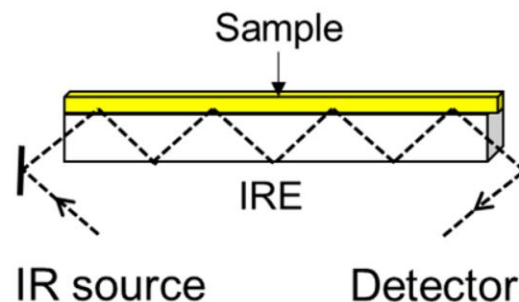
Infrared frequencies make up a portion of the electromagnetic spectrum. If a range of infrared frequencies are shone through an organic compound, some of the frequencies are absorbed by the chemical bonds within the compound. Different chemical bonds absorb different frequencies of infrared radiation. 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.

IR - spektroskopie

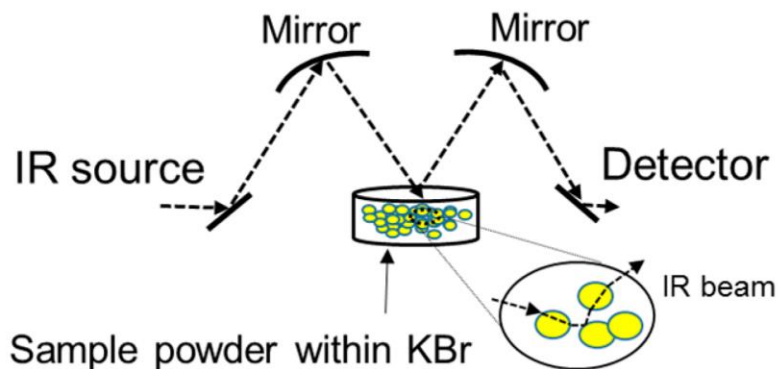
(a) Transmission FTIR spectroscopy



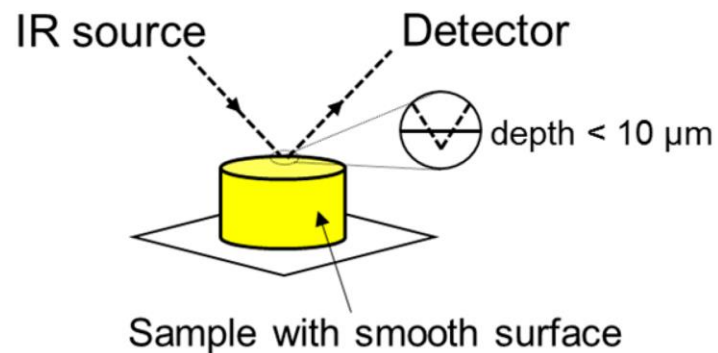
(b) ATR-FTIR spectroscopy



(c) DRIFT spectroscopy

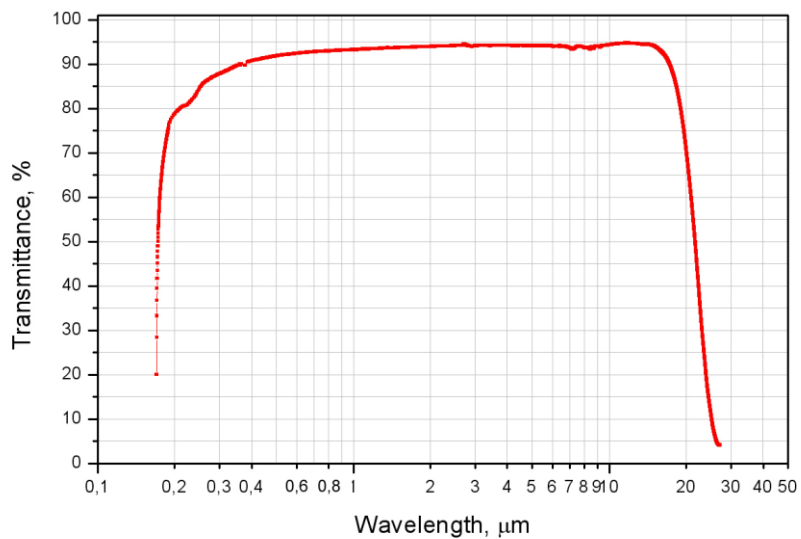
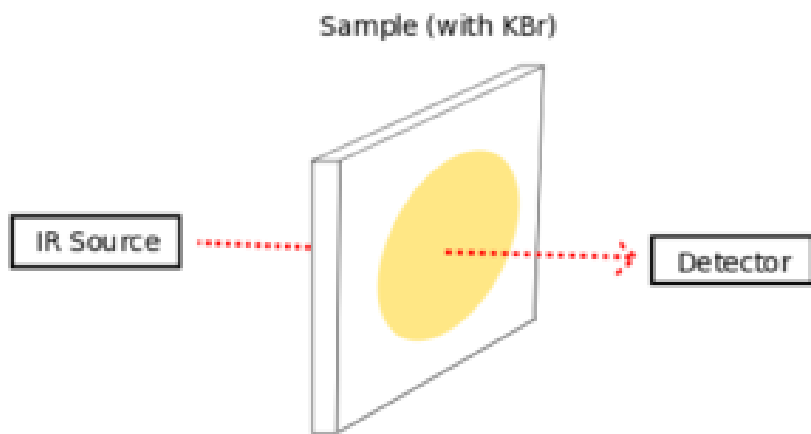


(d) Reflectance micro-FTIR



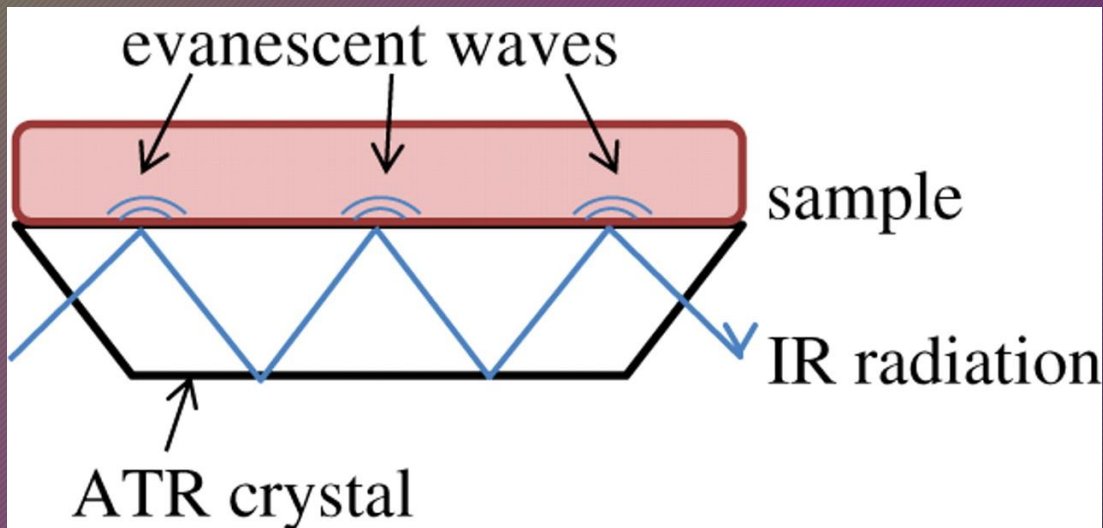
IR - Transmisní

Transmission FTIR



ATR-FTIR spektroskopie

Technika zeslabeného úplného odrazu (ATR - Attenuated Total Reflection) je založena na principu jednoduchého či vícenásobného úplného odrazu záření na fázovém rozhraní měřeného vzorku a měřicího krystalu s dostatečně vysokým indexem lomu.



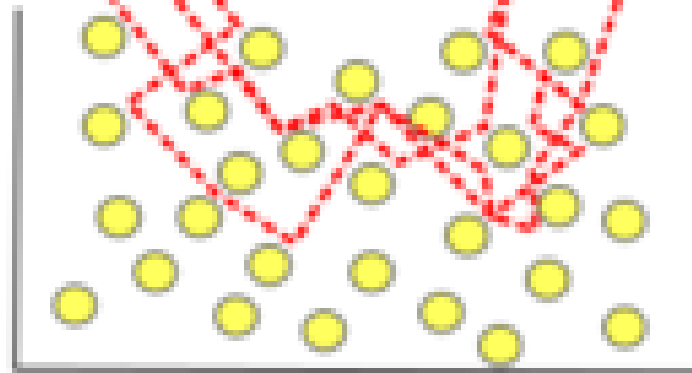
DRIFT spektroskopie

DRIFT

IR Source

Mirror

Detector



Mixture of sample powder and KBr powder

IR - Reflectance (odrazivost)

