



INSTYTUT ELEKTRONIKI
I SYSTEMÓW STEROWANIA



WYDZIAŁ ELEKTRYCZNY
POLITECHNIKA CZĘSTOCHOWSKA

LABORATORIUM FIZYKI

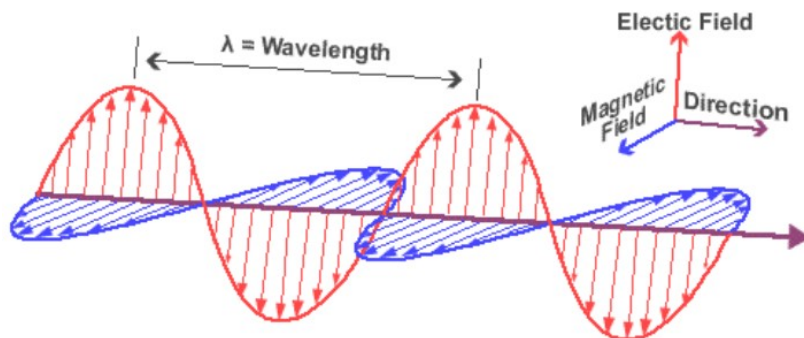
Ćwiczenie NR 0-1

Spektroskopia IR

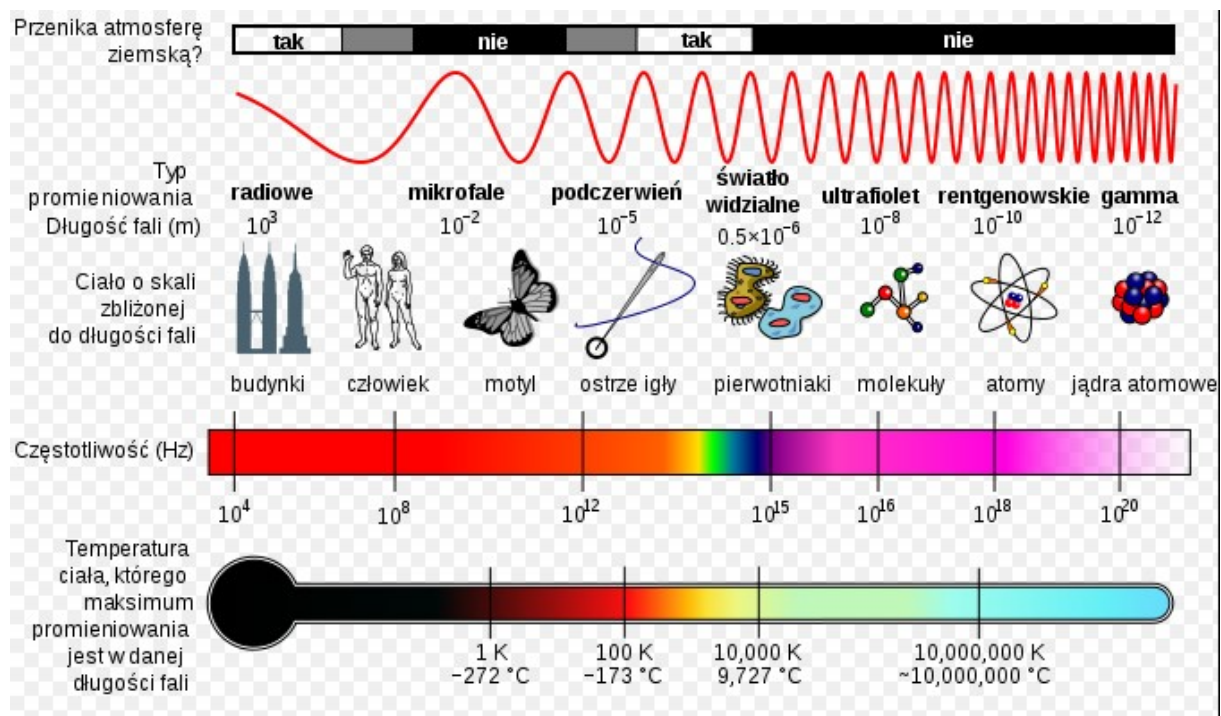
Celem ćwiczenia jest zapoznanie z podstawowymi metodami spektroskopii IR.

Zadaniem jest określenie rodzaju materiałów polimerowych na podstawie otrzymanych spektrów IR oraz bazy IR.

Spektroskopia obejmuje metody badawcze określające oddziaływanie fali elektromagnetycznej z materią.



Rys.1. Fala elektromagnetyczna



Rys.2. Zakres fali elektromagnetycznej

IR

Każde ciało o temperaturze większej od zera bezwzględnego emituje promieniowanie ciepłe 800 nm do 1 mm.

$$x \text{ nm} = 10,000,000 / x \text{ cm}^{-1}$$

$$y \text{ cm}^{-1} = 10,000,000 / y \text{ nm}$$

- bliska podczerwień (ang. *near infrared, NIR*)
- średnia podczerwień (ang. *mid infrared, MIR*)
- daleka podczerwień (ang. *far infrared, FIR*)

Widmo spektroskopowe to zarejestrowany obraz promieniowania rozłożony na częstotliwości (długości fali), które zostało wyemitowane albo weszło w kontakt z analizowaną substancją, przeszło przez nią lub zostało przez nią odbite.

Spektroskopia w podczerwieni pozwala stwierdzić obecność grup funkcyjnych cząsteczek, w których podczas oscylacji zmienia się moment dipolowy.

Moment dipol występuje w przypadku nierównomiernego rozmieszczenia ładunku dodatniego i ujemnego w cząsteczkach. Są to tzw. cząsteczki polarne czyli biegunowe. Wielkość momentu dipolowego określa iloczyn ładunku i odległości między biegunami w cząsteczce dwubiegunowej.

$$m = e \cdot l$$

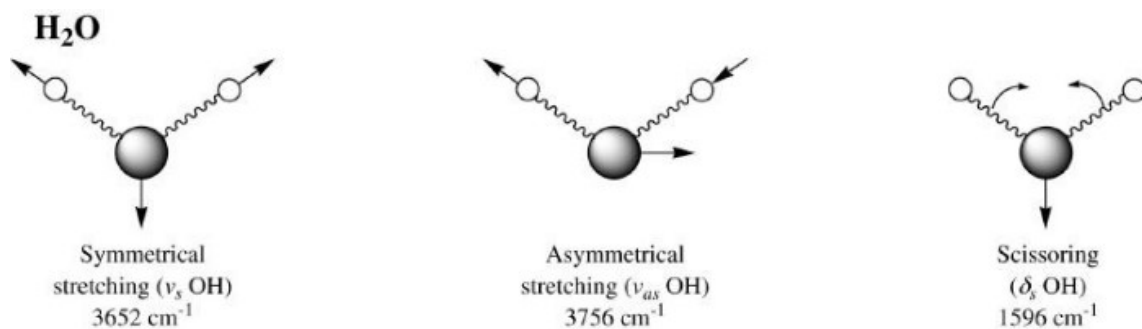
gdzie: m - moment dipolowy

e - wielkość ładunku

l - odległość między biegunami dipolu

W widmie IR obserwuje się pasma:

- wynikające z rozciągania wiązań – stretching
- deformacji kątów między wiązaniami - bending



Rys.3. Oddziaływanie IR na cząsteczkę wody

Obecność w cząsteczce danego ugrupowania atomów, wiąże się z występowaniem w widmie IR charakterystycznych dla niego pasm absorpcyjnych.

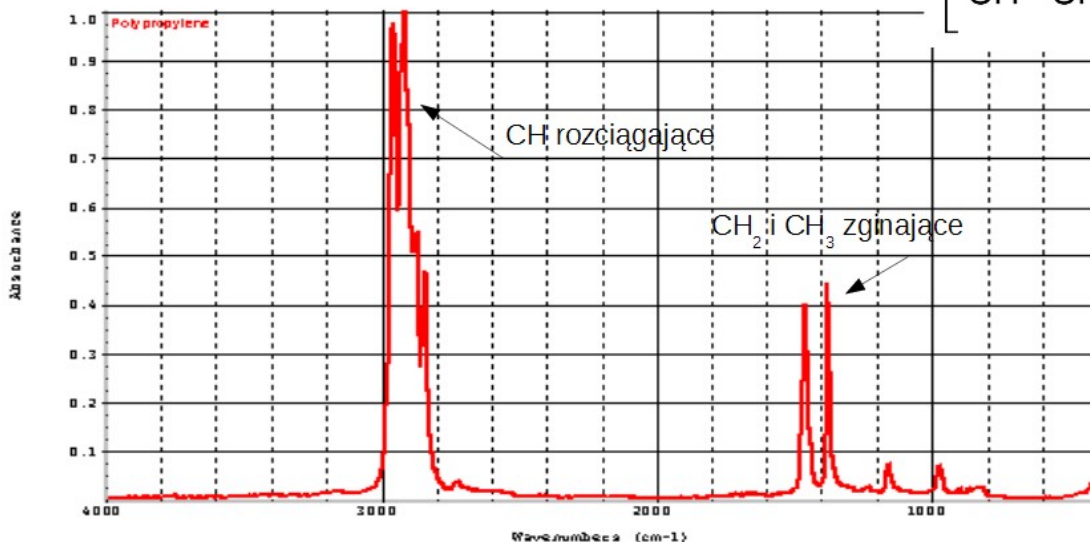
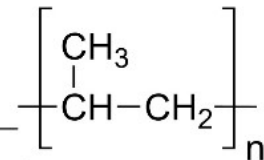
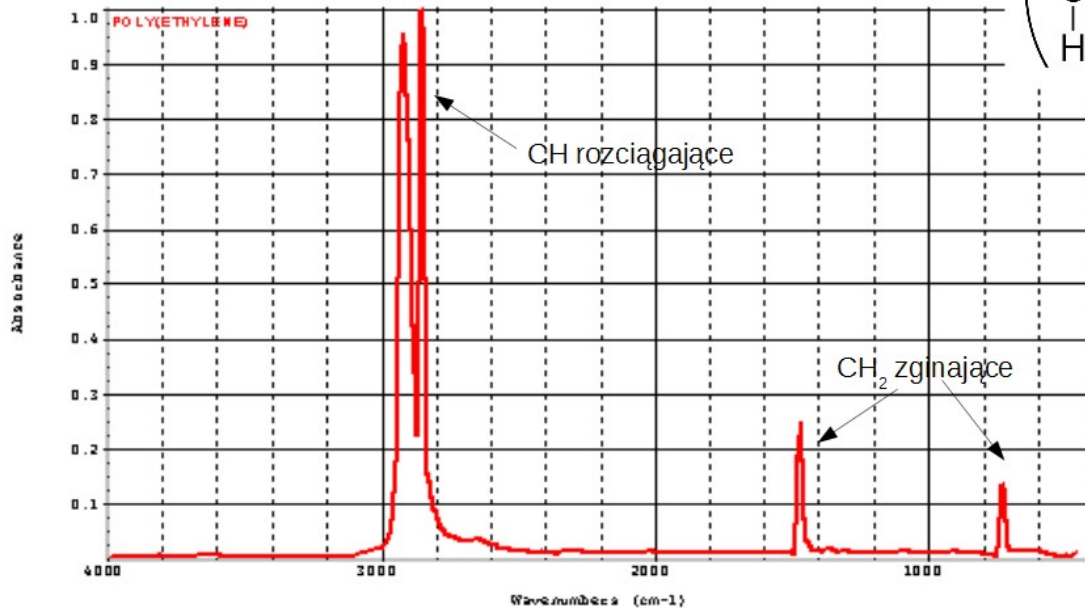
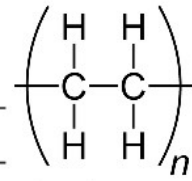
Tab.1. Typy drgań i ich zakresy absorpcji dla wybranych cząsteczek

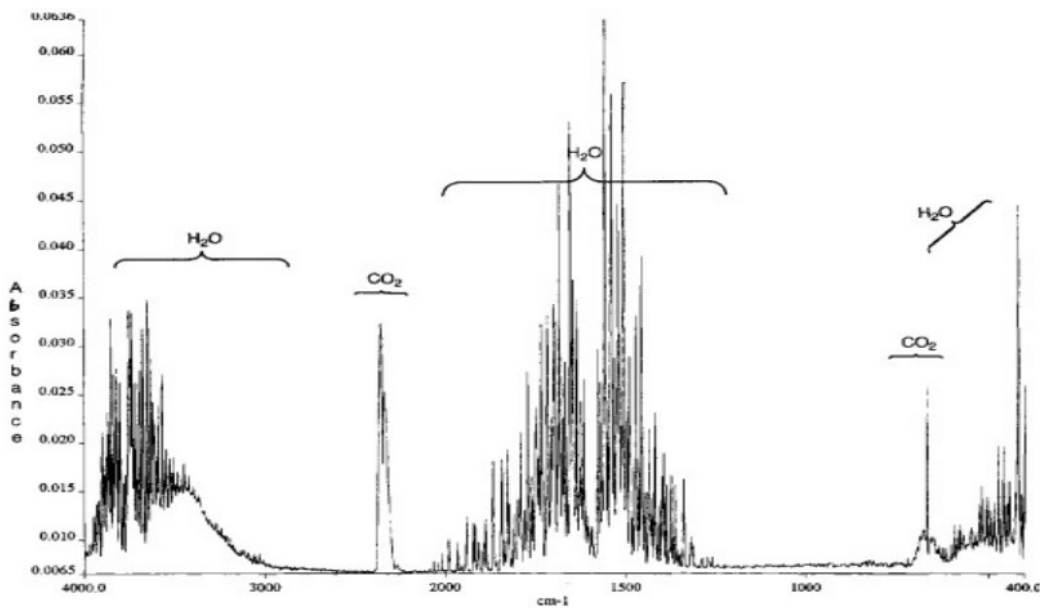
Wiązanie	Typ drgania	Zakres absorpcji [cm ⁻¹]
O-H <i>alkohole, fenole</i> (OH niezasocjowana)	rozciągające	3500 - 3700
O-H <i>alkohole, fenole</i> (OH tworząca wiązanie wodorowe)	rozciągające	3200 - 3500
O-H <i>kwasy</i> (OH niezasocjowana)	rozciągające	3500 - 3550
O-H <i>kwasy</i> (OH tworząca wiązanie wodorowe)	rozciągające	Szerokie pasmo 2500 - 3300
N-H <i>aminy</i>	rozciągające	3200 - 3600
C-H <i>aromat.</i>	rozciągające	3030
C-H <i>olefin.</i>	rozciągające	3010 - 3100
C-H <i>alifat.</i>	rozciągające	2850 - 3000
S-H <i>tirole</i>	rozciągające	2550 - 2600
C≡N <i>nitryle</i>	rozciągające	2200 - 2400
C≡C <i>alkiny</i>	rozciągające	2100 - 2270
C=O <i>aldehydy, ketony, kwasy, estry</i>	rozciągające	1650 - 1780
C=C <i>alkeny</i>	rozciągające	1600 - 1680
C=C <i>aromat.</i>	rozciągające	1500 - 1610
C=N <i>iminy, oksymy</i>	rozciągające	1500 - 1650
N-H	deformacyjne	1500-1650
O-H	deformacyjne	1200-1450
C-O	rozciągające	1050-1430
C-Cl	rozciągające	600-800

Tab.2. Zakresy IR wykorzystywane do identyfikacji substancji

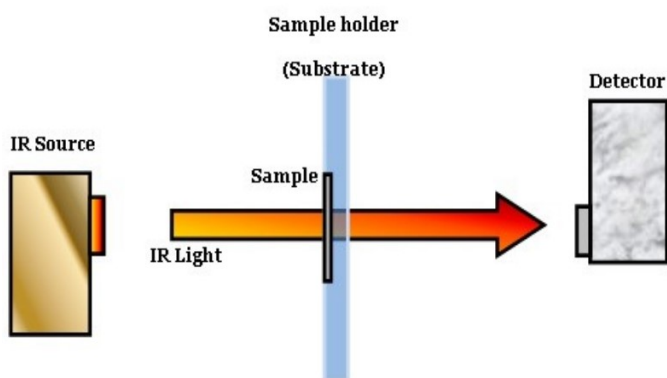
obszar 1 ok. 4000-2500 cm ⁻¹	obszar 2 ok. 2500-2000 cm ⁻¹	obszar 3 ok. 2000-1500 cm ⁻¹	obszar 4 poniżej 1500 cm ⁻¹
N-H O-H C-H	C≡C C≡N	C=O C=N C=C	zakres daktyloskopowy

- Obszar 4000-2500 cm⁻¹ odpowiada absorpcji wynikającej najczęściej z obecności w cząsteczce grup N-H, C-H, O-H. Pasma w tym zakresie odpowiadają drganiom rozciągającym.
- Obszar 2500-2000 cm⁻¹, sygnały w tym zakresie wskazują na obecność w związku grup zawierających wiązania potrójne np. alkiny C≡C, nitryle C≡N.
- Obszar 2000-1500 cm⁻¹, pasma w tym zakresie pochodzą głównie od różnego rodzaju wiązań podwójnych (C=O, C=C, C=N).
- zakres poniżej 1500 cm⁻¹ nazwany "zakresem daktyloskopowym" (fingerprint region), posiada układ pasm charakterystycznych dla danej cząsteczki. Są tutaj pasma drgań rozciągających wiązań pojedynczych np. C-C, C-O, C-N oraz wiele pasm odpowiadających drganiom deformacyjnym. Zakres ten wykorzystywany jest do identyfikacji badanej substancji na podstawie porównania jej widma IR z widmem związku wzorcowego.

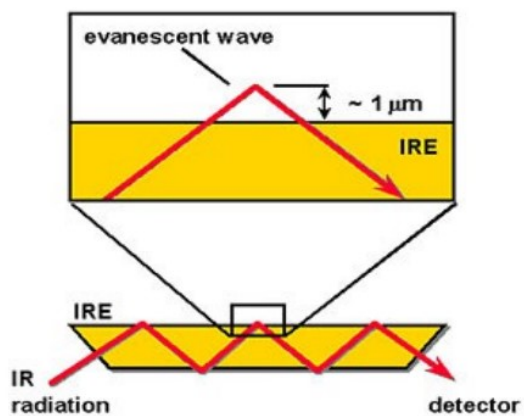




Rys.4. Widma IR



Rys.5. Metoda detekcji IR (absorpcyjna/transmisyjna)



Rys.6. Metoda detekcji IR (odbiciowa ATR)

Zadaniem jest określenie materiałów polimerowych na podstawie otrzymanych spektrów IR oraz bazy IR.

Baza IR - http://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre_index.cgi?lang=eng