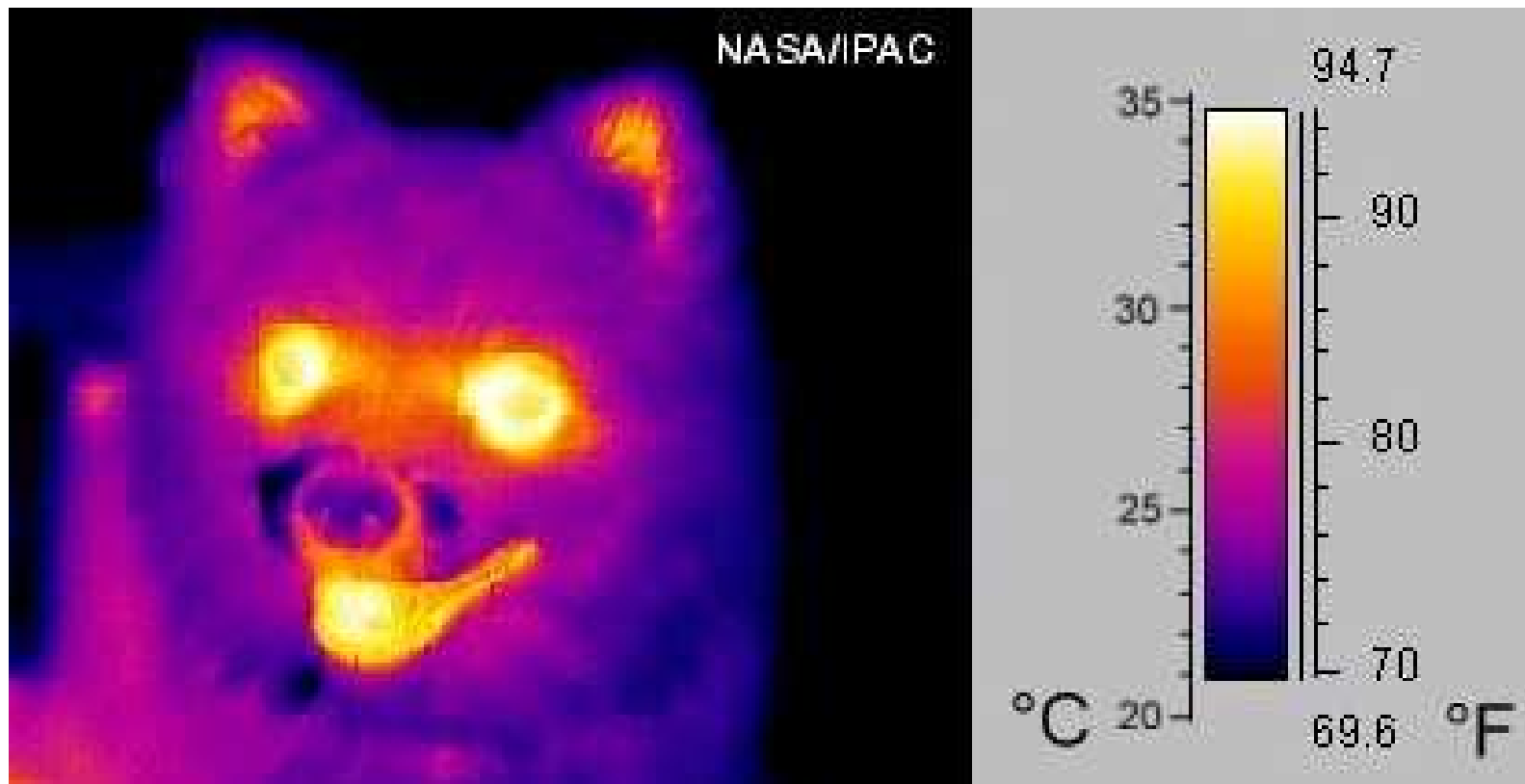


Infračervená spektroskopie

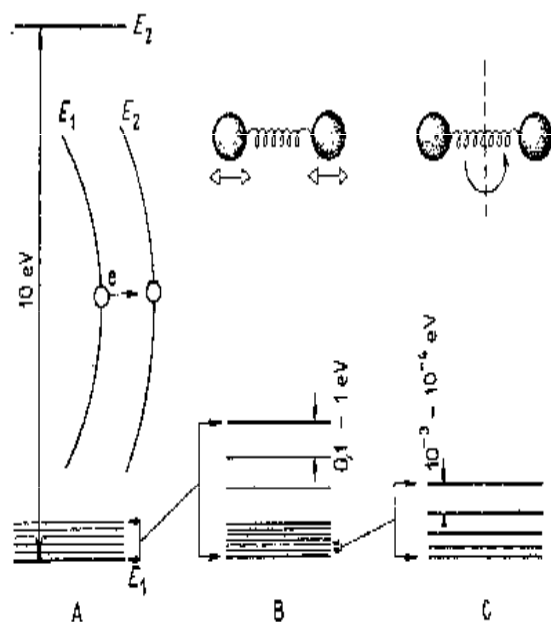


IČ spektroskopie

absorpce záření = absorpce energie

$$E = h \frac{c}{\lambda}$$

Mnohem menší změny energetických stavů, než v UV-Vis spektrometrii : **rotační a vibrační energie 1-300 μm**



vlnočet [cm^{-1}]

$$\tilde{\nu}[\text{cm}^{-1}] = \frac{10^4}{\lambda[\mu\text{m}]} = \frac{10^7}{\lambda[\text{nm}]}$$

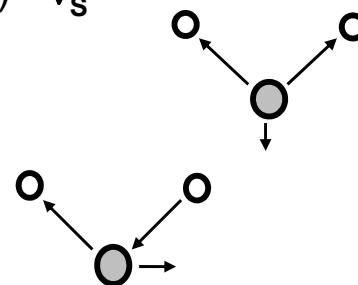
model - kvantový harmonický oscilátor - stejně vzdálené energetické hladiny

přechod dvou vibračních hladin s kvantovým číslem $0 \rightarrow 1$ = **fundamentální frekvence** ($0 \rightarrow 2$ = 2. harmonická, 1. overtone atd.)

molekuly = anharmonické oscilátory - rozdílné vzdálenosti hladin + více atomů !!!
Složitý vibrační pohyb si lze ROZLOŽIT (vektorově) na několik **NORMÁLNÍCH vibrací (vibračních módů)**, při nichž by všechny atomy kmitaly **stejnou, charakteristickou frekvencí**

valenční vibrace - mění se *převážně* jen mezijaderné vzdálenosti

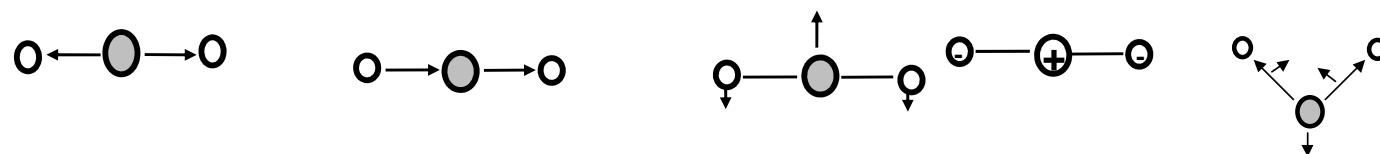
symetrické (symetrie molekuly je zachována) ν_s



antisymetrické (symetrie je porušena)

ν_{AS}

deformační vibrace - mění se převážně velikost valenčních úhlů



δ - nůžkové, ρ - kyvadlové, τ - torzní, ω - vějířové aj.

mají-li normální vibrace stejnou frekvenci (energii) = degenerované

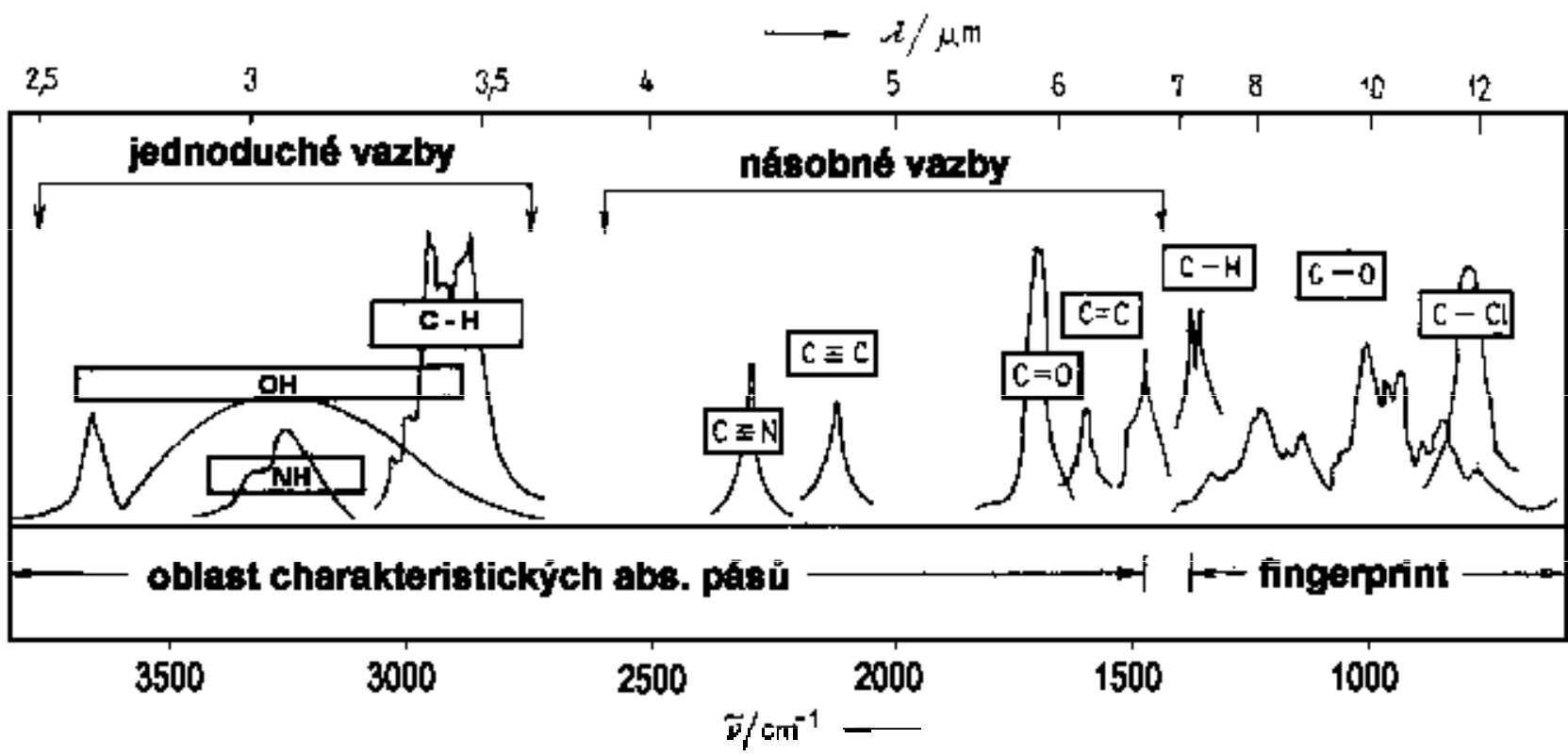
Kolik existuje normálních vibrací ???

3N - 6 (nelineární molekula - např. H_2O \uparrow)

3N - 5 (lineární molekula - např. CO_2 \downarrow)

Projeví se všechny normální vibrace v IČ spektru ???

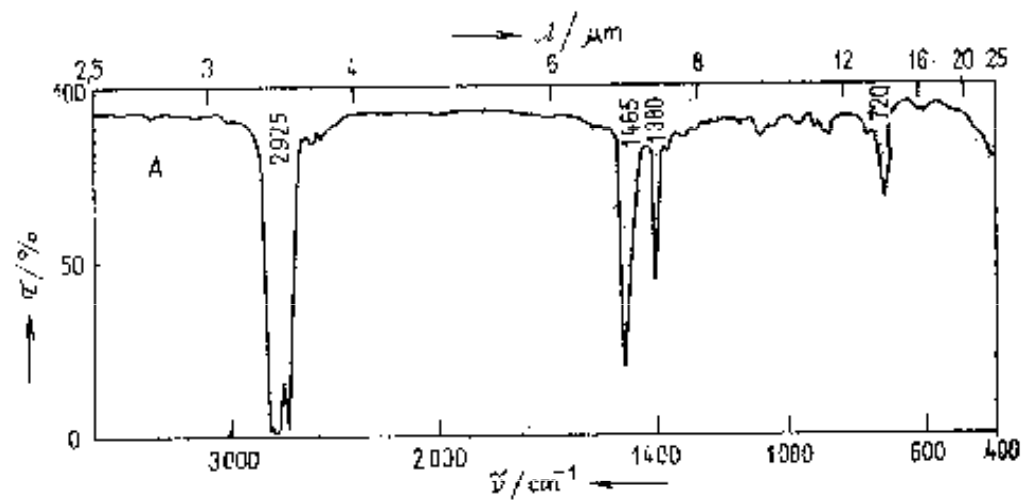
NE - pouze dochází-li k periodické změně dipólového momentu



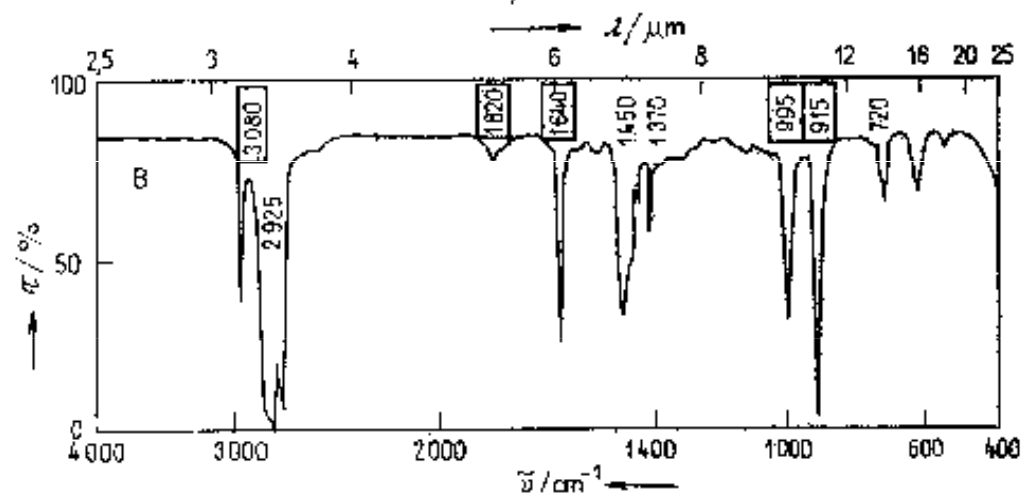
skupina (vazba)	typ sloučeniny	Oblast vlnočtů (cm ⁻¹)	intenzita a pásu
C-H	alkany (-CH ₃ , -CH ₂ -) -CH ₃	2965-2840 1450, 1380 1465	silná střední střední
	alkeny (=C(H)H_2)	3095-3010 1000-700	střední silná
	aldehydy	2850-2700	slabá
	na benzenovém kruhu	900-650	silná
C-C	alkany	1200-700	slabá
C=C	alkeny	1680-1620	variab.
C≡C	alkiny	2260-2100	variab.
C=C	aromáty	1670-1450	střední
C=O	amidy	~1650	silná
	karboxylové kyseliny	~1710	silná
	ketony	~1715	silná
	aldehydy	~1725	silná
	estery	~1735	silná

C-OH	alkoholy	1150-1040	silná
O=C-O-	estery karbox. kyselin	1300-1100	silná
	ethery	1150-1070	silná
O-H	alkohol volný	3650-3590	var. (ostrý pás)
	alkohol s vodíkovým můstkem	3400-3200	silná (široký pás)
N-H	prim. amin, amid	3500-3300	střední
	sekundární amin, amid	3500	střední
	terciární amin, amid	-	
C-N	aminy	1350-1000	střední
C≡N	nitrily	2280-2200	silná
NO ₂	nitro skupina	1550,1370	silná

n-oktan



1-okten



poloha maxima	oktan		poloha maxima	1-okten	
(cm ⁻¹)	vazba	vibrace	(cm ⁻¹)	vazba	vibrace
2925	C-H	valenční	3080	C-H v CH ₂	valenční
1465	C-H v CH ₂ , CH ₃	deformační rovinná, nůžková	1640	C=C	valenční
1380	C-H v CH ₃	deformační rovinná, nůžková	1450	C-H v CH ₂ a CH ₃	deformační rovinná, nůžková
720	C-H v CH ₂		1370	C-H v CH ₃	deformační rovinná, kyvadlová
			995 915 720	alkenická C-H	deformační mimorovinná

výklad vibrací oktanu a 1-oktenu: takovéto detailní přiřazení je obvykle možné u molekul, které mají do cca 20 atomů

alkany=parafiny

valenční vibrace + deformační vibrace C-C, C-H

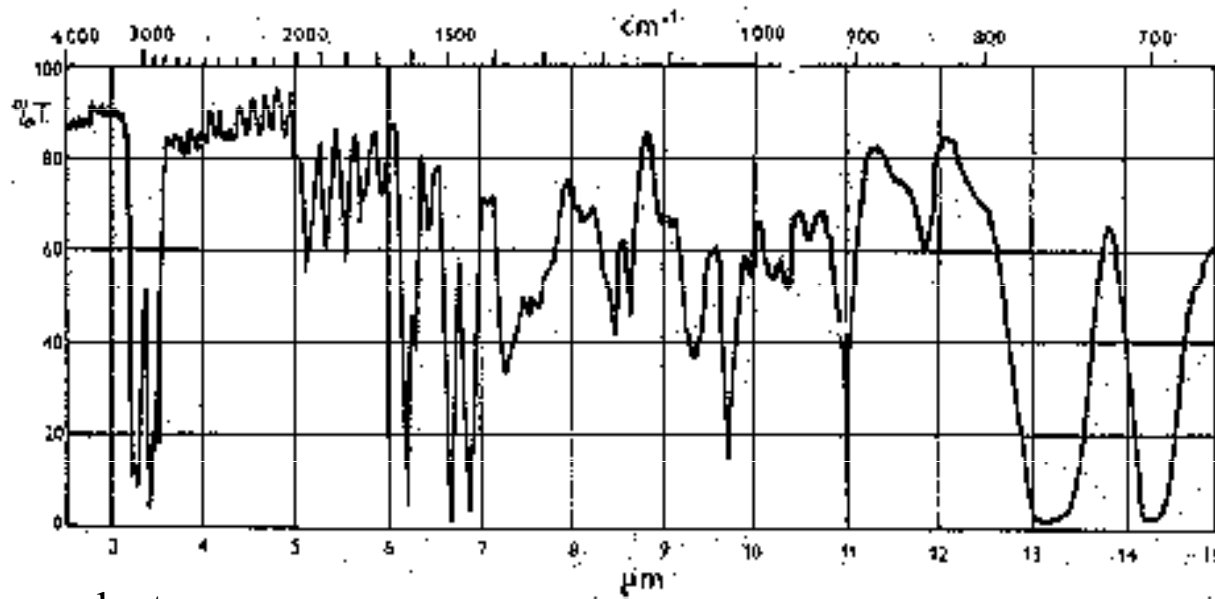
cm ⁻¹	valenční		deformační	
CH ₂	as	2925	rovinná nůžková	1465
	s	2850	rovinná kyvadlová	720
			mimorovinná vějířová	1300
			mimorovinná torzní	1250
CH ₃	as	2960	as	1460
	s	2870	s	1375
			rovinná kyvadlová	1045

alkeny=olefiny $\nu(\text{C}=\text{C})$ 1640-1670 cm⁻¹ $\nu(\text{C}-\text{H})$ >3000 cm⁻¹ $\delta(\text{C}-\text{H})$ 1416, 650-1000 cm⁻¹ (viz okten)**alkiny** $\nu(\text{C}\equiv\text{C})$ 2260-2100 cm⁻¹ $\nu(\text{C}-\text{H})$ 3333-3267 cm⁻¹ (úzký) $\delta(\text{C}-\text{H})$ 700-610, overtone 1370-1220 (široký)

Aromáty

C=C 1670 -1450 cm^{-1}

C-H deformační vibrace 900-650 cm^{-1}



polystyren

empiricky bylo zjištěno, že počet a relativní intenzita pásů

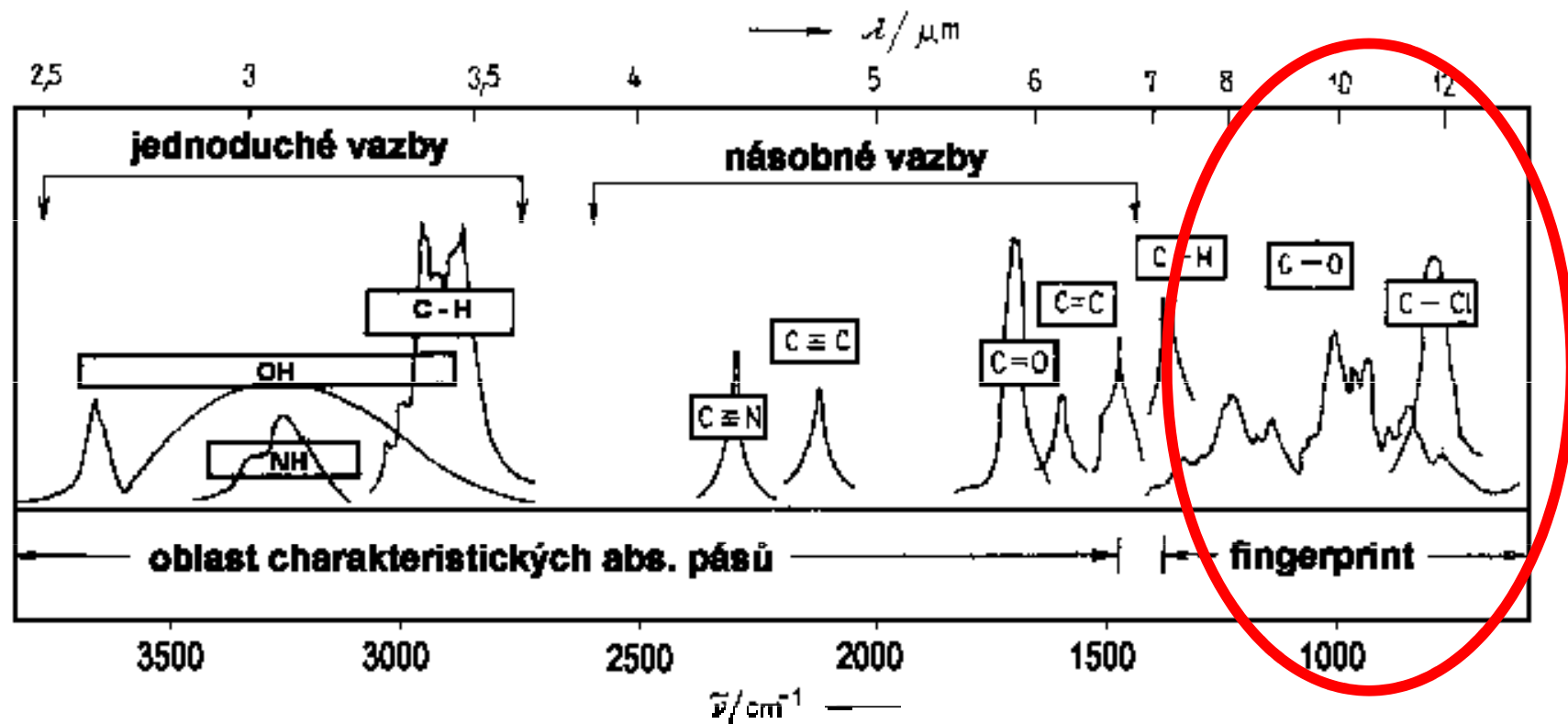
2000-1650 cm^{-1} ZÁVISÍ JEN NA TYPU SUBSTITUCE, nikoli na druhu substituentů

- u monosubstituovaných (1900 -1700) cm^{-1} - 4 pásy

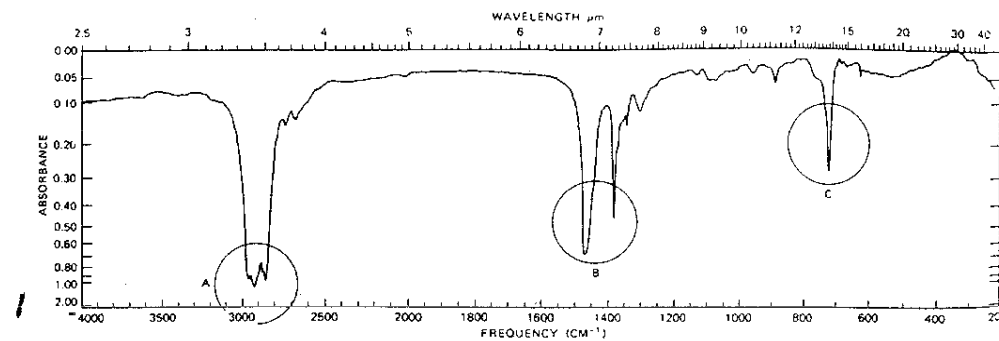
- u disubstituovaných - *ortho*- 4 pásy, *meta*- 3 pásy, *para* - 2 pásy atd.

Oblast tzv. fingerprintu (otisku prstu)

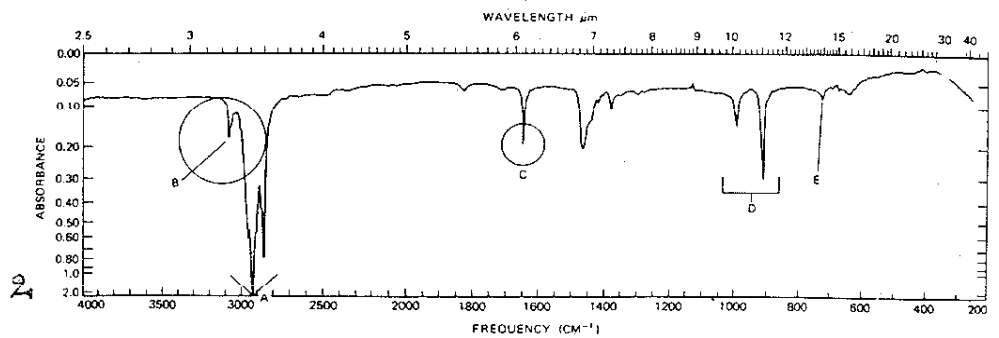
1500 - 500 cm^{-1} velké vzájemné ovlivňování skupin = nelze přímo přiřazovat skupiny, ale můžeme najít charakteristický otisk molekuly = **fingerprint**.



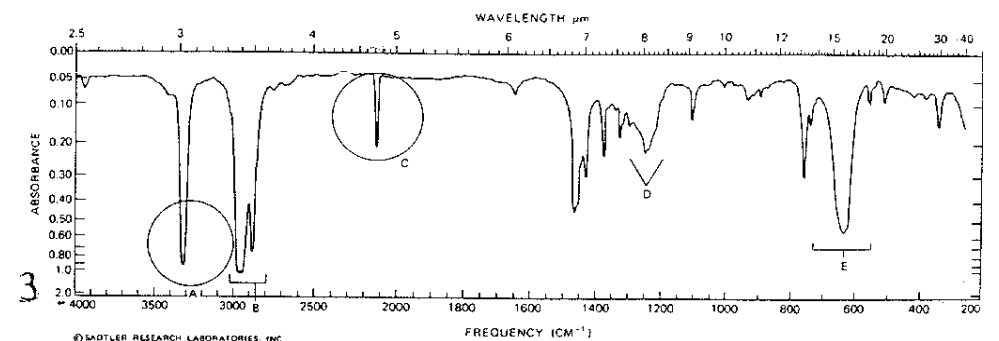
Příklady



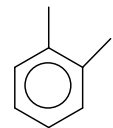
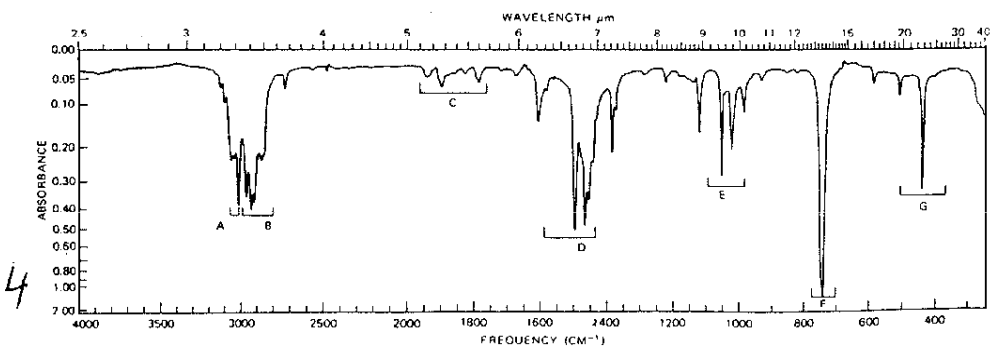
n-dodekan



1-deken



1-hexin



o-xylen

