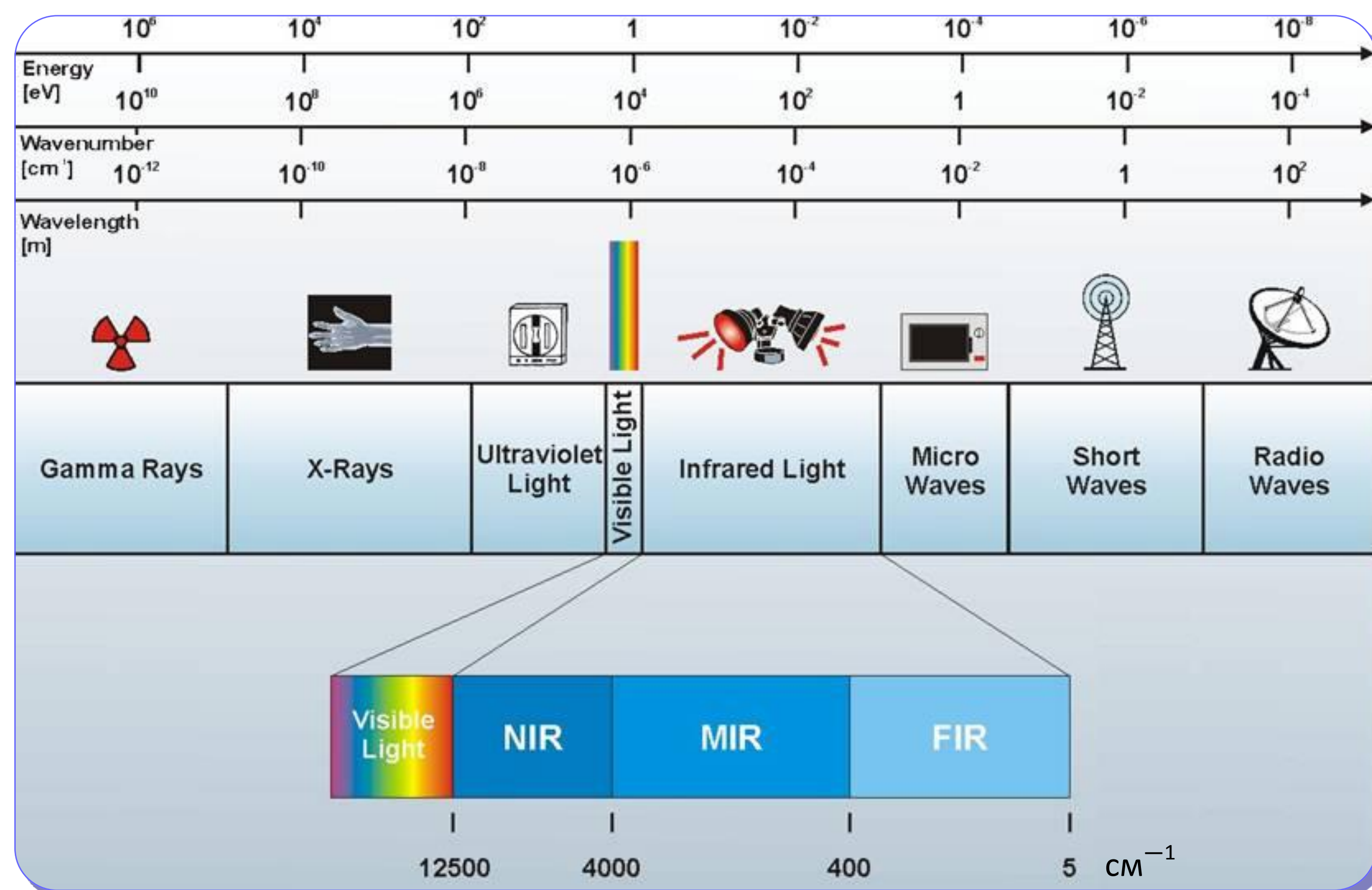


ИНФРАКРАСНАЯ ФУРЬЕ–СПЕКТРОСКОПИЯ



Принцип работы фурье-спектрометра

Основным элементом фурье-спектрометра является *интерферометр Майкельсона* или его улучшенные варианты. В классической схеме инфракрасное излучение от источника (*глобара*) попадает через *светоделительную пластину* на два зеркала, перпендикулярных друг другу. Одно из зеркал совершает периодические колебания вдоль направления распространения света. Отражённые пучки вновь собираются светоделителем и отправляются на детектор (*пириоприёмник*). Изменение интенсивности сигнала от времени формирует *интерференционную картину*. К ней применяется программно реализуемое *Фурье-преобразование*, в результате которого получается спектральная зависимость интенсивности излучения, попавшего на детектор, т.е. ИК-спектр.

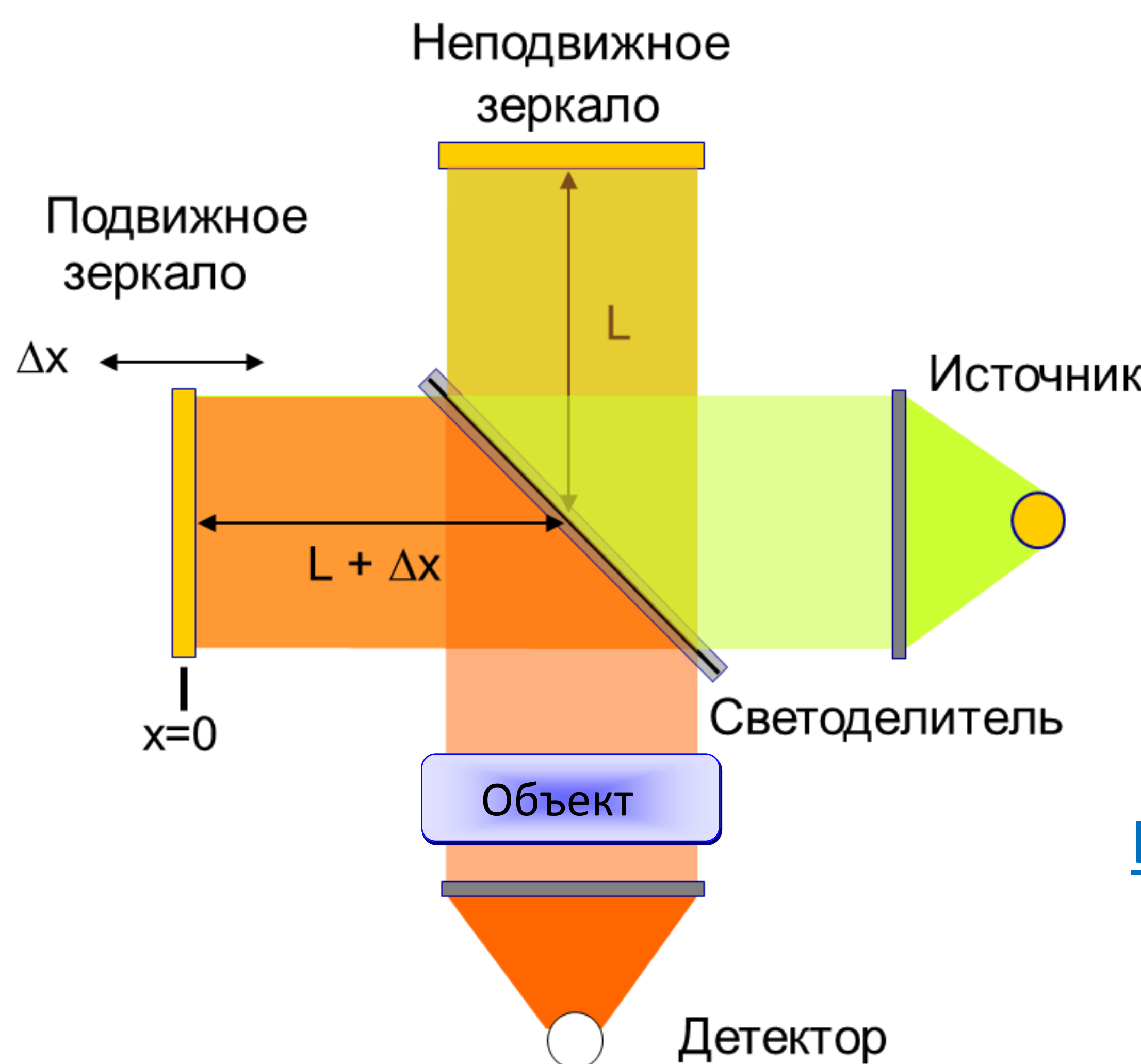
Между светоделителем и приёмником устанавливается *объект исследования*, избирательно поглощающий ИК-излучение, что проявляется на спектре в виде характерных полос поглощения.

Преимущества фурье-спектроскопии:

- 1) в отличие от монохроматоров, в которые свет попадает через узкую щель, в интерферометрах входное отверстие намного шире, что во много раз повышает чувствительность прибора;
- 2) Время регистрации всего спектрального диапазона определяется скоростью движения подвижного элемента интерферометра и обычно составляет всего несколько секунд.



Схема интерферометра Майкельсона



Основы инфракрасной спектроскопии

Молекулой поглощаются только те частоты ИК-излучения, энергия которых соответствует разности между двумя квантовыми уровнями энергии связи, при этом поглощающееся излучение соответствующей частоты вызывает растяжение (*валентные колебания*) или изгиб (*деформационные колебания*) молекулярных связей. На частоты колебаний отдельных связей в молекуле влияет всё её окружение, однако некоторые связи (O—H, C—H, N—H) имеют практически сходные свойства и, соответственно, похожие линии в спектрах поглощения для различных веществ. Положение полосы поглощения определяется силой связи и массой связываемых атомов. Чем сильнее связь и чем меньше массы атомов, тем выше частота поглощения. Деформационные колебания всегда требуют меньшей энергии, нежели валентные. Вращательные линии поглощения молекул обычно расположены в спектральной области ниже 500 cm^{-1} .

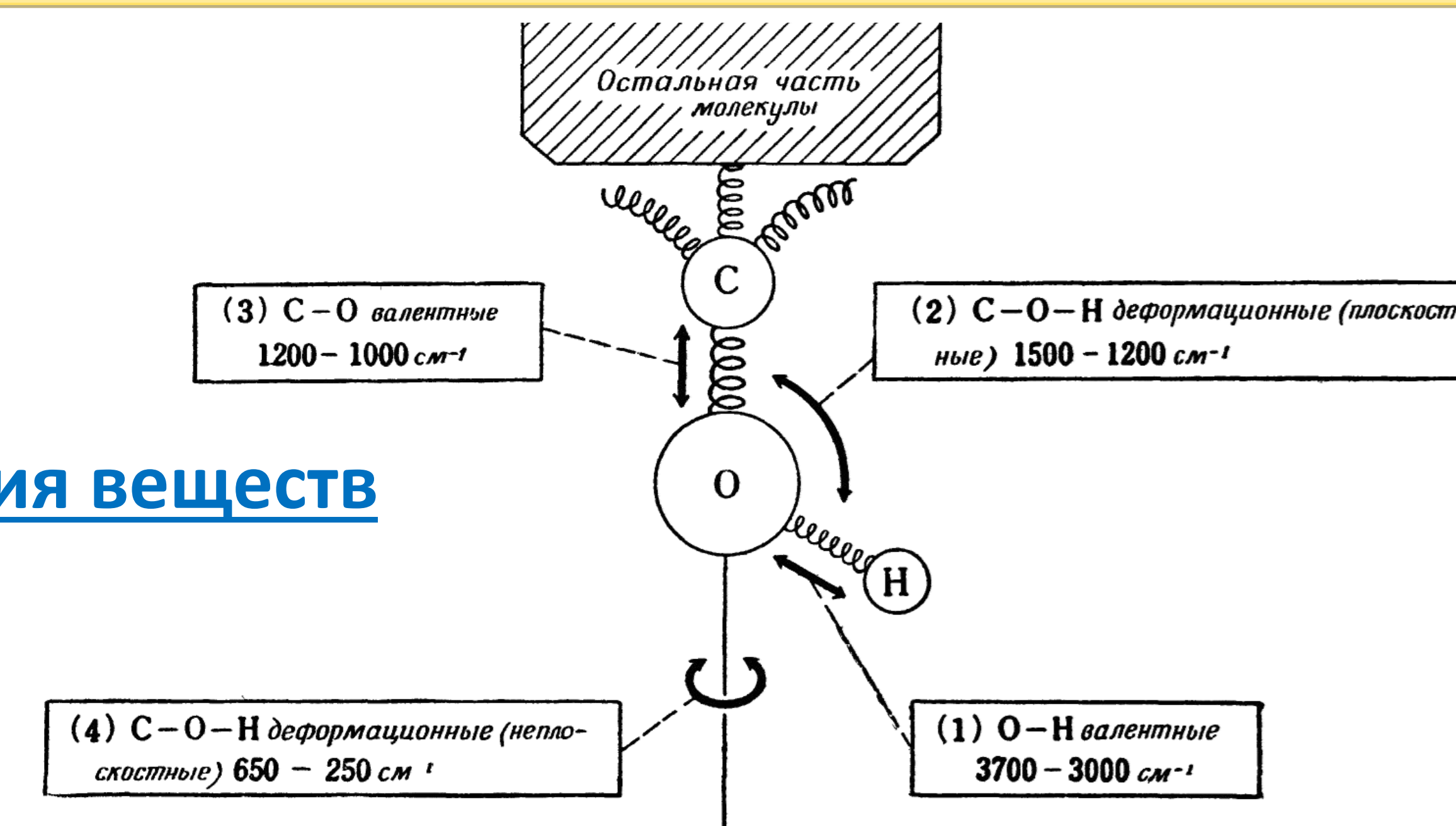
Чем сложнее химическая формула вещества, тем более сложным является спектр поглощения, и тем более точной становится идентификация данного вещества. Дополнительные линии в спектрах поглощения могут также давать молекулы, *адсорбированные* на поверхности или связанные в объёме исследуемого образца, например, обычная вода. Исследуемые объекты могут быть твёрдыми, жидкими, газообразными.

Однако не все молекулы и не все химические связи поглощают ИК-излучение. Для взаимодействия излучения с веществом требуется, чтобы колеблющаяся связь обладала собственным *дипольным моментом*. Так, простые двухатомные молекулы (водород, кислород, азот) не обладают дипольным моментом и не поглощают ИК-излучение.

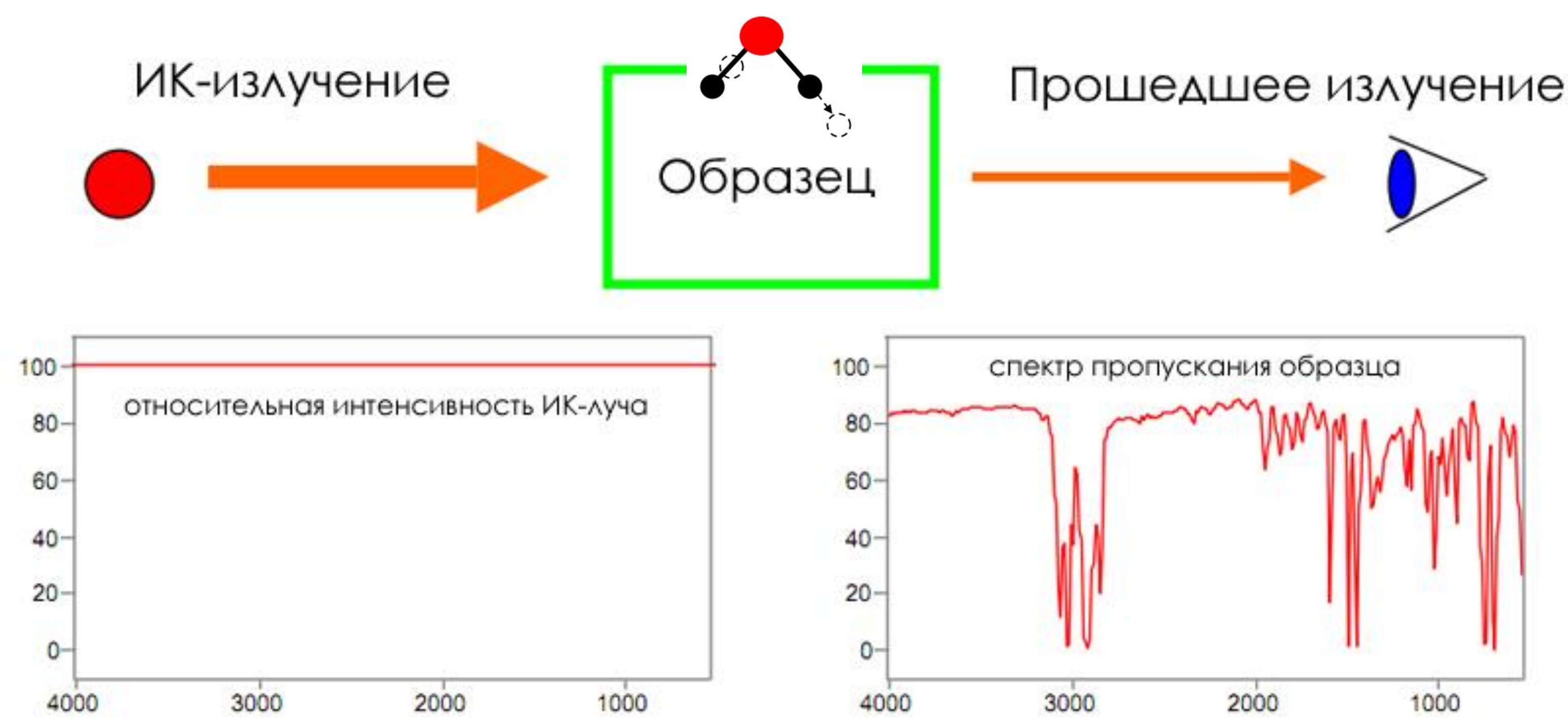
Характеристики ФТ-801

Спектральный диапазон достоверных измерений: 550–5500 cm^{-1} , предельный: 470–6200 cm^{-1}
 Спектральное разрешение: 0.5, 1, 2, 4, 8 cm^{-1} ; скорость сканирования при разрешении 4 cm^{-1} : 50 спектров в минуту
 Погрешность измерения положения пиков $\pm 0.05 \text{ cm}^{-1}$; отношение сигнал/шум: 25000
 Оптика ZnSe, возможно подключение ИК-микроскопа, универсальная приставка на отражение и НПВО

Идентификация веществ

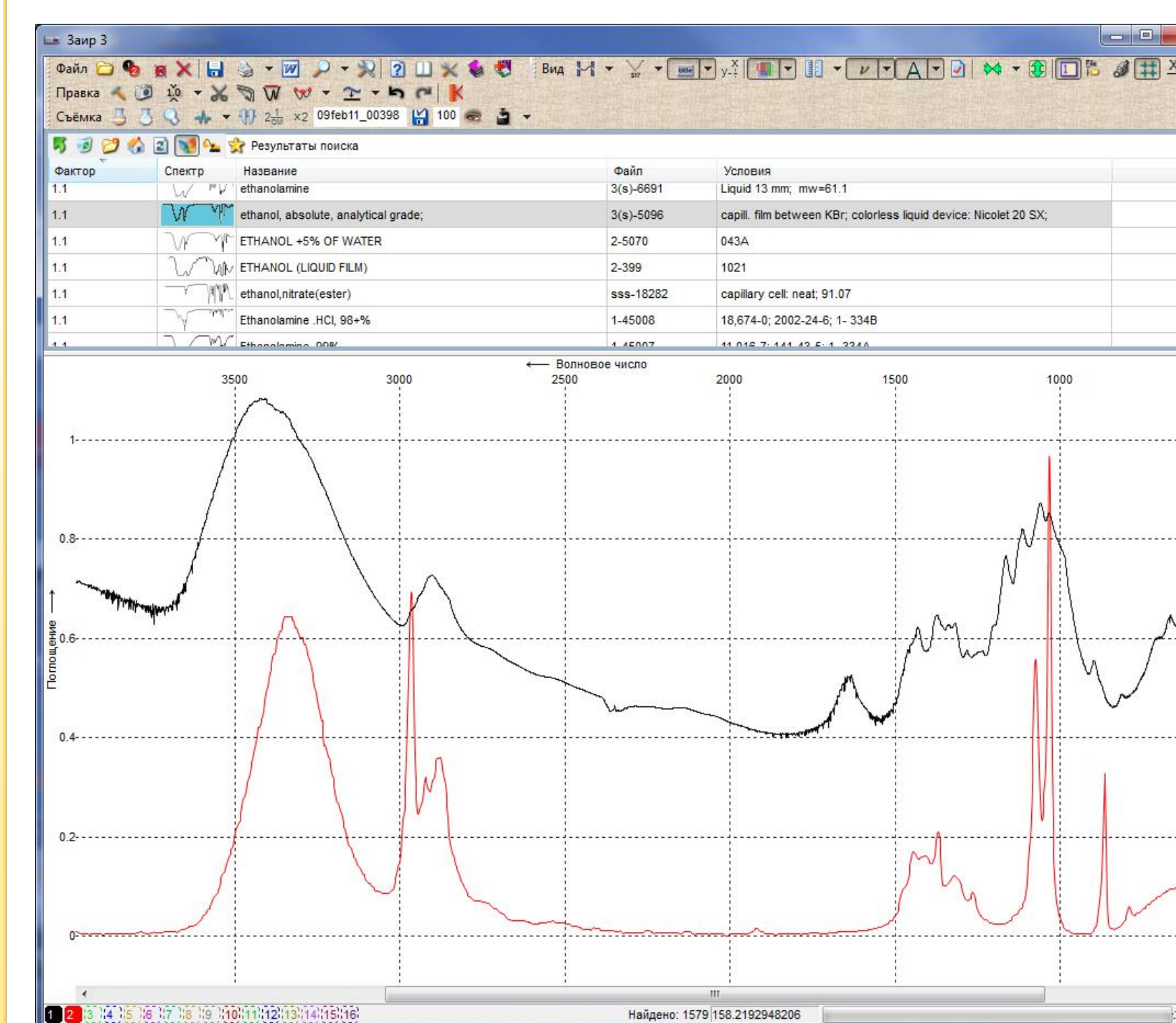


Получение спектра ИК-поглощения



Наиболее известные сферы применения ИК-спектроскопии:

- 1) Исследование химического состава новых материалов, в т.ч. фуллеренов, нанокмозитов
- 2) Анализ и контроль качества фармацевтических препаратов
- 3) Контроль состава и качества пищевых продуктов, идентификация бактерий
- 4) Исследование произведений искусства в реставрационном деле
- 5) Характеризация свойств материалов в бумажной и текстильной индустрии
- 6) Экспертно-криминалистический анализ, в т.ч. идентификация взрывчатых и наркотических веществ
- 7) Исследования космического пространства
- 8) Контроль качества полупроводниковых материалов, пассивирующих и эпитаксиальных покрытий



Качественный анализ

ИК-спектроскопия является мощным методом идентификации химических соединений, позволяющий не только определить какое-либо из известных веществ, но и узнать примерный состав неизвестного соединения, если его спектр содержит линии характерных групповых колебаний.

Программа ZAIR, управляющая спектрометром ФТ-801, поддерживает возможность сравнения полученного экспериментального спектра в спектральных библиотеках, содержащих информацию практически для любого известного химического соединения или вещества.

Интенсивность полос в ИК-спектрах зависит не только от количества вещества, но сложно связана с изменениями электронной конфигурации молекул в процессе колебания. Однако в некоторых случаях качественный анализ по ИК-спектрам вполне возможен, например если исследуются стадии одного химического процесса.

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ МЕТОД ИДЕНТИФИКАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ В ВЕЩЕСТВЕ