

Лекція 2.

Тема. Інфрачервона спектроскопія.

Мета. Передбачає надання студентам теоретичних знань з ІЧ-спектроскопії з Фур'є-перетворенням. Студенти також отримають практичні знання щодо застосування методів ідентифікації органічних і полімерних сполук та інтерпретації ІЧ-спектрів.

Вступ. ІЧ-спектроскопія є одним із найбільш потужних аналітичних методів, яка часто використовується у фундаментальних і прикладних дослідженнях, а також для контролю виробничих процесів. Метод використовується для вивчення речовин найрізноманітнішої природи. Цим методом можна досліджувати газоподібні, рідкі і тверді речовини. Найчастіше використовують ІЧ-спектроскопія в органічній хімії та хімії високомолекулярних сполук для встановлення структури молекул чи наявності функціональних груп, а також для ідентифікації речовин. Завдяки простоті методу і можливості його автоматизації інфрачервона спектроскопія широко застосовується в наукових лабораторіях та є надійним засобом контролю хімічних виробництв.

Зараз найактивніше використовують ІЧ фур'є-спектроскопію, яка є наслідком оригінального синтезу нових досягнень в оптиці, механіці, електроніці, в лазерній та обчислювальній техніці. Метод ІЧ фур'є-спектроскопії поглинання та відбивання дає можливість одержати найбільш повну інформацію про будову і склад аналізованої речовини.

План.

1. Історія відкриття методу.
2. Теоретичні основи інфрачервоної спектроскопії.
3. Інструментальне обладнання.
4. Підготовка зразку до аналізу.
5. Ідентифікація органічних сполук.
6. Сфера застосування.

Зміст лекції

1. Історія відкриття методу

Інфрачервоне випромінювання відкрив у 1800 році астроном Вільям Гершель. За допомогою призми, він спостерігав підвищення температури в області, що розташована за червоною межею спектру видимого світла. У 1882–1900 роках Вільям Ебней і Едвард Фестінг записали інфрачервоні спектри 52 сполук у ділянці до 1,2 мкм та порівняли одержані смуги поглинання з функціональними групами молекул.

У 1903 році американський фізик Вільям Кобленц працюючи з призмою з натрій хлориду, отримав досить повні та правильні ІЧ-спектри для багатьох хімічних сполук.

Відсутність необхідного обладнання робила перші експерименти з реєстрації ІЧ-спектрів трудомісткими, оскільки змушувало дослідників збирати власні прилади, шліфувати та полірувати призми, вкривати сріблом дзеркала, гра-дувати прилади за показниками заломлення кам'яної солі. Побудовані власними силами прилади були чутливі до вібрацій, тому дослідження виконували вночі, щоб уникнути додаткових негативних впливів. Час реєстрації спектру однієї речовини складав у середньому від 3 до 4 годин. Перші роботи з даної проблематики показали, що ІЧ-спектри різних органічних та неорганічних сполук мають індивідуальні риси.

Метод ІЧ-спектроскопії набував поширення серед дослідників. Але у той же час природа поглинання ІЧ випромінювання не була достатньо вивчена. У першій чверті ХХ ст. була створена теорія, яка пояснювала поглинання інфрачервоного випромінення внаслідок коливань молекул досліджуваної речовини і встановлено, що характер цього поглинання пов'язаний зі зміною дипольного моменту, правилами відбору, симетрією молекул тощо.

У 1940 році інженерами Dow Chemical і American Cyanamid створено промислові однопроменеві прилади для вивчення органічних сполук (вуглеводнів). Комерційні спектрометри почали випускати Cyanamid у співпраці з Perkin-Elmer у 1946 році. Доступність приладів на ринку призвела до створення таблиць кореляції смуг поглинання зі структурою поглинальних функціональних груп.

Подальшого розвитку інфрачервона спектроскопія отримала після Другої світової війни: було підсилено сигнал спектрометрів, що, в свою чергу, зменшило час проведення експерименту в 2–4 рази; було вдосконалено техніку виготовлення термоелектричних приймачів з малим часом відгуку, що дозволяло уникнути зсуву показів у часі. Останнє призвело до створення двопробних приладів, у яких шкала калібрувалася у відсотках пропускання по відношенню до шкали довжин хвиль або хвильових чисел.

Подальші роботи у створенні більш точних та сучасних спектрометрів були пов'язані з одержанням якісних кристалів галогенідів лужних металів, які були необхідні для створення оптичних елементів приладів. Наприклад, синтетично одержаний калій бромід, на відміну від натрій хлориду (кам'яної солі), який використовувався раніше, дозволив реєструвати ІЧ-спектри до 400 см^{-1} , в той час як попередня межа становила 650 см^{-1} .

Поява ІЧ-інтерферометрів, розробка швидких методів конвертування інтерферограм у спектри (перетворення Фур'є) та зменшення часу сканування дозволила створити нові спектрометри, які дозволяли одночасно збирати інформацію про поглинання усіх довжин хвиль. Крім того, перевагою приладів нового типу була в їх продуктивності:

- дисперсійні прилади мали вхід і вихід, які обмежували кількість світла, яке проходило крізь них, продуктивність інтерферометра визначалася товщиною пучка світла від джерела;
- ІЧ-інтерферометри дозволили отримувати спектри в дальній ІЧ-області, спостерігати ґраткові коливання кристалів, а також, дозволяли більш точно інтегрувати спектри органічних сполук;
- дозволяли цифрову обробку спектрів, а саме вилучення смуг поглинання розчинників, визначення ступеню чистоти й характеру домішок.

У 80-ті роки ХХ ст. було створені комбіновані методи спектроскопії, які об'єднували в собі газову хроматографію та ІЧ-спектроскопію; мініатюаризація спектрометрів призвела до створення компактних моделей; з'явилась можливість ступінчастого сканування тощо.

2. Теоретичні основи інфрачервоної спектроскопії

Інфрачервона спектроскопія (коливальна спектроскопія, середня інфрачервона спектроскопія, ІЧ-спектроскопія) – різновид молекулярної оптичної спектроскопії з довжиною хвиль від 0,5 до 1000 мкм, оснований на взаємодії речовини з електромагнітним випромінюванням в ІЧ діапазоні: між червоним краєм видимого спектра (хвильове число 14000 см^{-1}) і початком короткохвильового радіодіапазону (20 см^{-1}). Основні області ІЧ-спектроскопії:

- $4000\text{--}2500\text{ см}^{-1}$. Область валентних коливань простих зв'язків: О–Н, N–H, С–Н, S–H;
- $2500\text{--}1500\text{ см}^{-1}$. Область валентних коливань кратних зв'язків: С=C, С=O, С=N, С≡C, С≡N;
- $1500\text{--}500\text{ см}^{-1}$. Область валентних коливань простих зв'язків: С–С, С–N, С–O і деформаційних коливань простих зв'язків: С–Н, О–Н, N–H. Інтенсивність ліній поглинання в цьому діапазоні індивідуальні для кожної конкретної органічної сполуки.

Інфрачервоні спектри утворюються при поглинанні ІЧ променів з частотами, що співпадають з власними коливальними і обертальними частотами молекул або з частотами коливань кристалічної ґратки. Коливальні рухи та хімічні зв'язки в молекулах взаємопов'язані. Подібно до електронів у молекулах, коливальна енергія молекул має квантову природу, тому поглинаюча енергія змінюється не непереривно, а стрибком.

Таким чином, поглинута енергія витрачається на збудження коливальних рівнів або перетворюється у кінетичну енергію молекули.

У випадку багатоатомних молекул коливання досить складні та описуються як комбінація коливань різних фрагментів молекули. В основному це трьохатомні фрагменти молекули, наприклад, метиленова група $-\text{CH}_2-$.

Виділяють наступні типи коливань трьохатомного фрагменту молекули: валентні (синфазні або симетричні та антифазні або асиметричні), деформаційні (ножичні, маятникові, віялові та обертальні) коливання.

Для молекул, що містять лише три атома, наприклад, молекули води, маятникові, віялові та обертальні типи коливань не існують, оскільки вони відповідають простому обертанню молекул відносно трьох взаємноперпендикулярних осей (для цих вібрацій відстань між трьома атомами фрагмента не змінюється).

Валентні коливання (ν) – коливання атомів уздовж зв'язку з частотою ν , яка визначається масою атомів та енергією зв'язку. Валентні коливання, які відбуваються уздовж між'ядерного зв'язку, поділяються на: синфазні (ν_s) і антифазні (ν_{as}) (рис. 1).

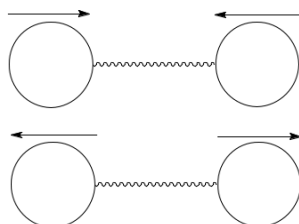


Рис.1 . Механічні моделі двоатомної молекули (рис. 1 а, б).

Синфазні (ν_s) коливання – коливання які зумовлені одночасним скороченням та розтягуванням зв'язків. Антифазні (ν_{as}) коливання (рис. 1 б) – характеризуються чергуванням скорочення та розтягування зв'язків.

Деформаційні коливання – відбуваються поза лінією між 'ядерного зв'язку та поділяються на ножичні, маятникові, крутильні та віялові (рис. 2). Деформаційні коливання (δ) пов'язані зі зміною валентних кутів. Для появи деформаційних коливань необхідно витратити меншу енергію, ніж для валентних, тому вони мають меншу частоту. Збільшення маси зменшує частоту.

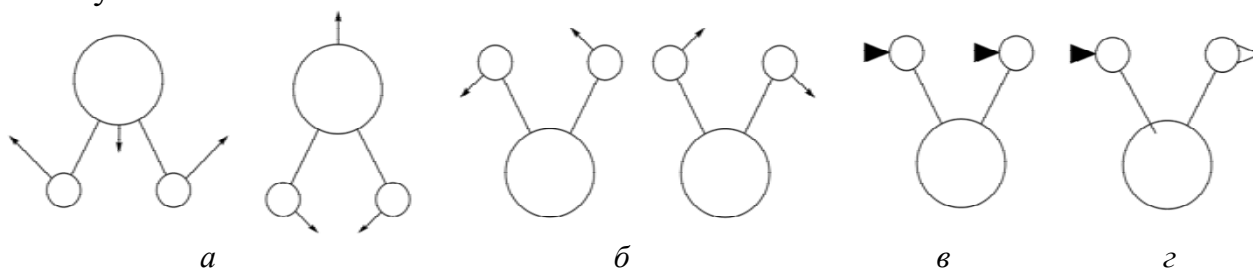


Рис. 2. Геометричні моделі деформаційних коливань: а – ножичні; б – маятникові; в – крутильні; г – віялові; чорні трикутники – до спостерігача, прямовисно до цієї площини; прозорі

– від спостерігача, прямовисно до цієї площини.

У результаті ІЧ-спектр молекули являє собою низку піків або смуг поглинання, які описують відповідні коливальні енергетичні переходи (див. рис. 3).

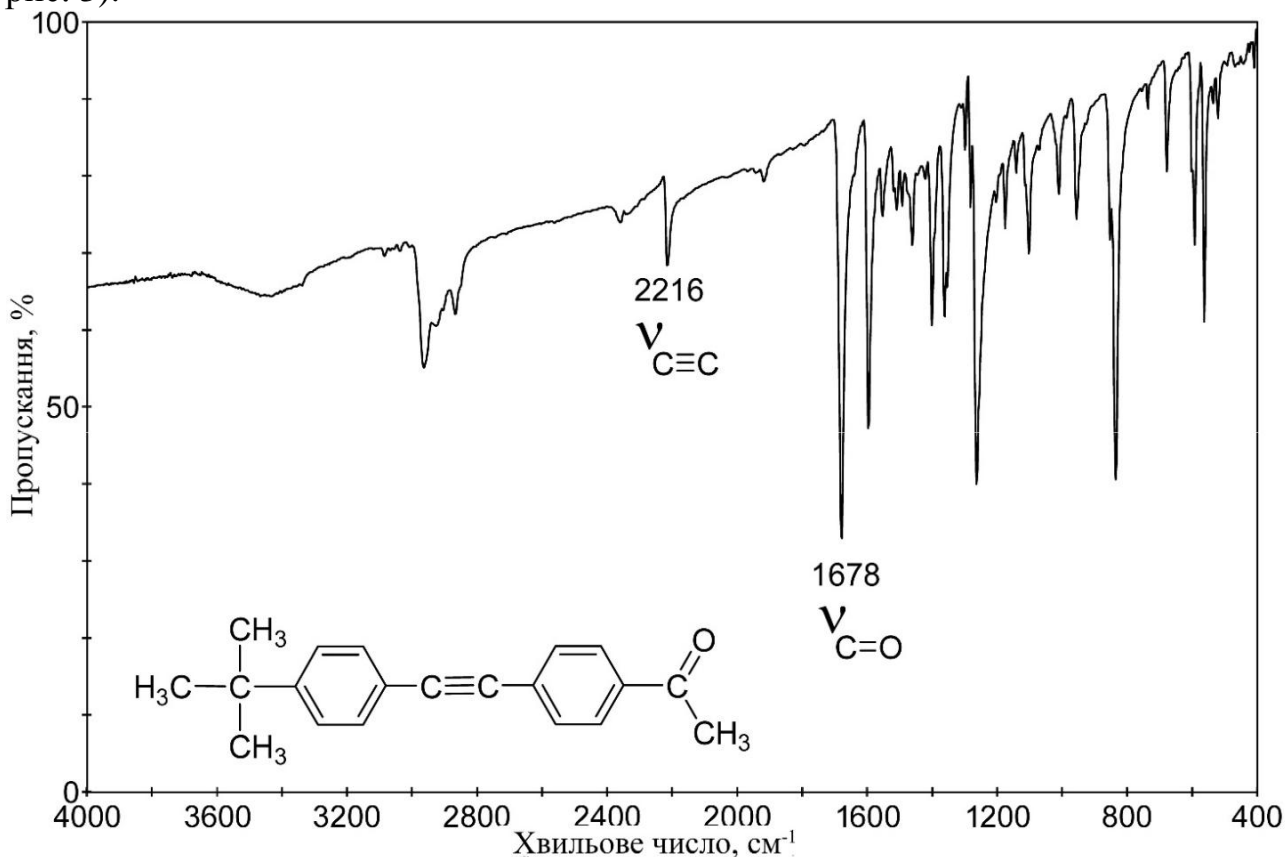


Рис.3 . Приклади ІЧ-спектру

Висновки, щодо складу та будови речовини за її ІЧ-спектром базуються на характеристичних коливаннях. Коливання атомів та груп атомів у реальній молекулі ковалентно зв'язані між собою взаємним впливом, тому спектри сполук являють собою набори різних коливань, кожне з яких проявляє в певному інтервалі частот. Відповідні таким коливанням смуги поглинання називаються характеристичними смугами, а частоти їх максимумів – характеристичними частотами. Наявність характеристичних смуг в ІЧ-спектрі зумовлено індивідуальними особливостями структури молекул досліджуваної речовини.

Аналіз ІЧ-спектрів досліджуваної речовини зводиться до пошуку характеристичних смуг поглинання та їх співставлення до відповідних структурних елементів з врахуванням значень частот максимумів поглинання, форми та інтенсивності смуг. Інтенсивність смуг зображають, як поглинання (J) або пропускання (R) світла у відсотках (%). Смуги поглинання порівнюють між собою і групують на сильні, середні та слабкі.

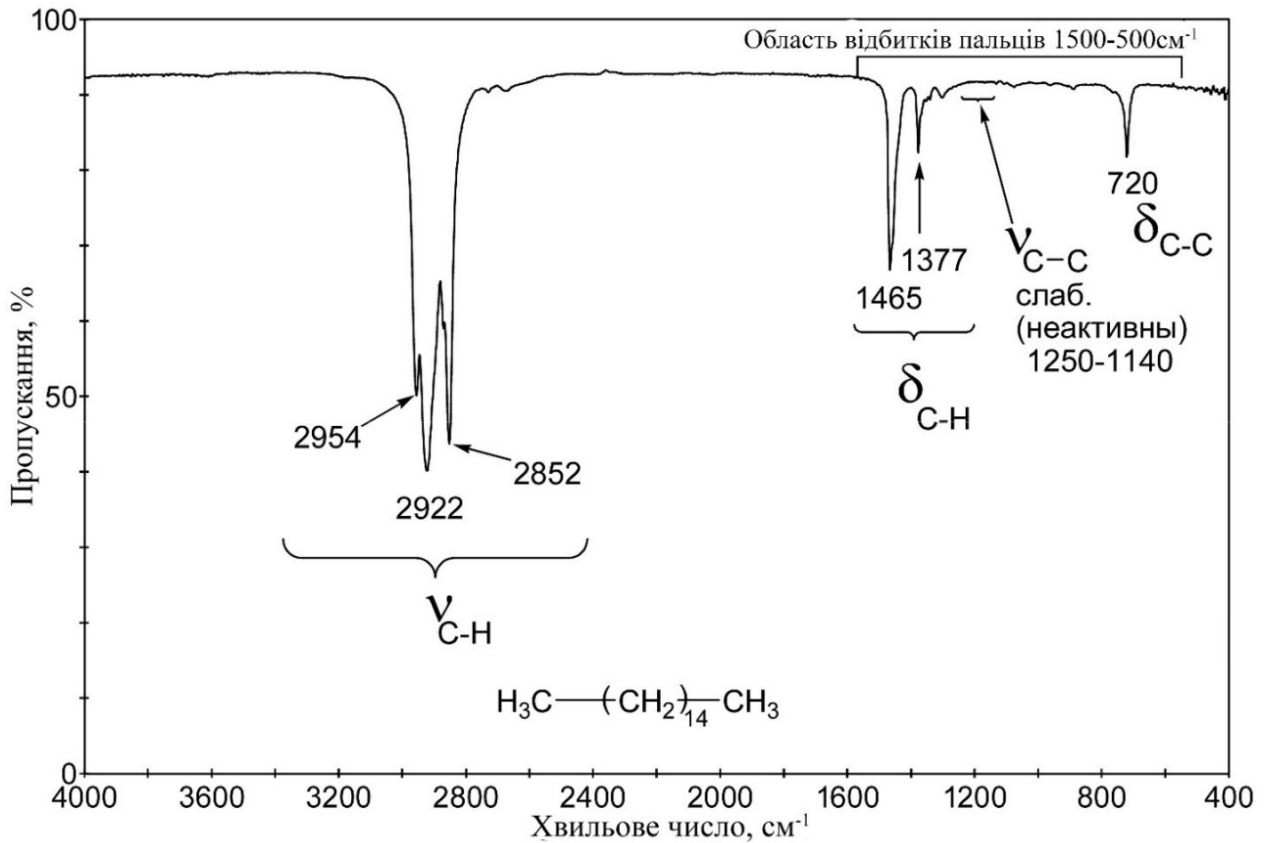


Рис. 4. Інфрачервоний спектр органічної речовини.

ІЧ-спектри будь-якої речовини складаються із смуг двох типів – характеристичні і нехарактеристичні:

- характеристичним – такі, яким відповідають валентні коливання певних груп атомів, зв'язків і не залежать від виліву всієї молекули (кожна група атомів має свою індивідуальну частоту поглинання). Серед них можна відмітити C–H, O–H, N–H, C=O, C=C, C≡N тощо;

- нехарактеристичні – такі, яким відповідають смуги валентних та деформаційних коливань, які не відносяться до конкретних груп атомів або зв'язків, наприклад смуги коливання зв'язків C–C, C–N усієї молекули, а не окремих фрагментів. Тому, незначні зміни в структурі молекули приводять до істотних змін вигляду спектра. Цю частину ІЧ-спектра називають "областю відбитків пальців" (рис. 4).

"Область відбитків пальців" в ІЧ-спектрах використовують для підтвердження характеристичних смуг та для визначення груп із важких атомів або великої кількості легких атомів. Проте опис частот у даній ділянці спектру може бути ускладнений можливістю накладання нехарактеристичних смуг, які зменшують точність ідентифікації і вимагає залучення додаткової інформації про природу досліджуваної речовини.

Основні характеристичні смуги поглинання знаходяться в короткохвильовій (високочастотній) частині спектру частот та довжин хвиль

основних коливань молекул ν від 4000 до 1430 cm^{-1}) та від 2,5 до 7 μm (довжин хвиль) (рис. 5).

Для успішного аналізу за ІЧ-спектрами необхідно мати високоякісні спектрограми, які точно передають положення і контур смуг поглинання та не містять викривлення, які спричинені неправильним вибором умов реєстрації спектру та ненадійним станом спектрометрів.

Отже, ІЧ-спектроскопія широко використовується для ідентифікації органічних сполук, але, як і більшість спектроскопічних методів аналізу, вимагає застосування у комплексі з іншими методами.

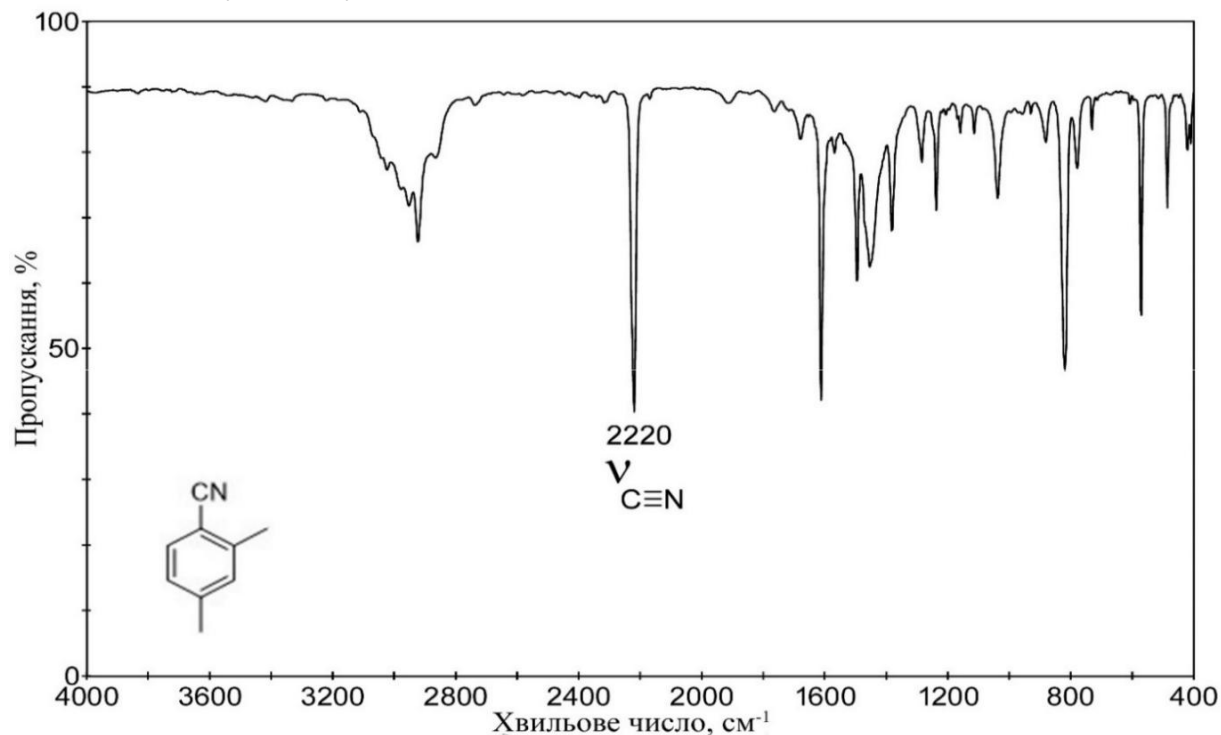


Рис.5. Основні характеристичні смуги поглинання, cm^{-1}

3. Інструментальне обладнання

ІЧ спектри отримують за допомогою спектрометрів різних типів, робочий діапазон яких знаходиться в межах так званої фундаментальної ІЧ області ($400 \text{ cm}^{-1} - 4000 \text{ cm}^{-1}$). За принципом одержання спектра, пристрої для ІЧ-спектроскопії, можна поділити на дві основні групи: диспергуючі та недиспергуючі.

Диспергуючі спектрометри

Як диспергуючий пристрій використовують призми із матеріалу, дисперсія якого відповідає певному ІЧ-діапазону і дифракційні ґратки. Зазвичай для середнього ІЧ-діапазону ($400-5000 \text{ cm}^{-1}$) застосовують призми з монокристалів KBr , NaCl і LiF . Останнім часом призми знаходять незначне застосування і практично витіснені дифракційними ґратками. Принципова схема двопробного скануючого ІЧ-спектрометра наведена на (рис.6).

Скануючі диспергуючі ІЧ-спектрометри за схемою освітлення бувають однопроменевими і двопробовими. При однопроменевій схемі досліджуваний спектр поглинання реєструється на співпадаючій з довжиною хвилі кривій інтенсивності разом з фоновим поглинанням. Зазвичай використовується двопробова схема, яка дозволяє вирівнювати фон, тобто лінію повного пропускання і компенсувати поглинання атмосферних парів H₂O і CO₂.

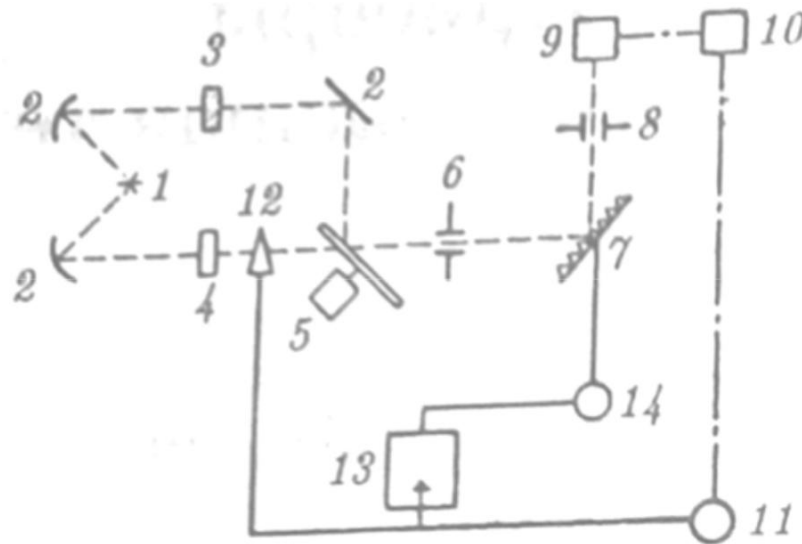


Рис.6. Блок-схема двопробового скануючого ІЧ-спектрометра: 1 – джерело ІЧ-випромінювання; 2 – система дзеркал; 3 – робочий пучок і зразок; 4 – пучок порівняння і компенсатор фону; 5 – переривник-модулятор; 6 – вхідна щілина монохроматора; 7 – диспергуючий елемент (дифракційна решітка або призма з дзеркалом Літрова); 9 – приймач; 10 – підсилювач; 11 – двигун відпрацювання; 12– фотометричний клин; 13 – самописець; 14 – двигун розгортки.

Реєстрація спектра здійснюється наступним чином : ІЧ-випромінювання від джерела 1 розділяється на два пучки. Робочий пучок проходить крізь зразок, а пучок порівняння – крізь компенсатор (кювета з розчинником). За допомогою переривника 5 пучки по черзі направляються на вхідну щілину 6 монохроматора і через неї на диспергуючий елемент 7. При повільному його повороті, що здійснюється двигуном розгортки 14, через вихідну щілину 8 монохроматора на приймач 9 послідовно проходять вирізаються щілиною вузькі по інтервалу довжин хвиль, в ідеалі монохроматичні, промені. Якщо випромінювання даної довжини хвилі в робочому пучку та пучку порівняння має різну інтенсивність, наприклад, ослаблене в робочому пучку поглинанням зразка, то на приймачі виникає змінний електричний сигнал. Після посилення і перетворення, цей сигнал надходить на двигун відпрацювання 11, який надає рух фотометричну клину 12 (діафрагмі) до зрівнювання потоків випромінювання (метод оптичного нуля). Рух фотометричного клина

пов'язаний з рухом пера самописця 13 по ординаті, а поворот диспергуючого елемента – протяжністю паперової стрічки або рухом пера по абсцисі. Таким чином, в залежності від градування в процесі сканування може здійснюватися реєстрація спектральної кривої залежності пропускання (поглинання) у відсотках або оптичної щільності зразка від хвильового числа (або довжини хвилі).

Монохроматори

Важливою частиною скануючих спектрометрів є монохроматор. Як диспергуючий пристрій в ньому є призма з прозорих в ІЧ-області матеріалів (табл.3 відповідною дисперсією або дифракцією ґратки. Оскільки дисперсія матеріалів є найбільшою у довгохвильовій межі, то прозорість та швидко падає зі зменшенням довжини хвилі, в середній ІЧ-області використовують змінні призми, що виготовлені з монокристалів LiF, NaCl, KBr, а для області 200–400 cm^{-1} – з CsI.

Таблиця 1

Оптичні властивості матеріалів, які можливо застосовувати в техніці ІЧ-спектроскопічних досліджень

№ п/п	Матеріал призми	Ділянки пропус- кання за довжиною хвилі λ , мкм	Показник заломлення	Додаткові відомості
1	Скло	0,35–2,0	1,5–1,9	–
2	SO ₂ (кварц)	0,2–4,0+ \geq 59	1,43	–
3	LiF	0,2–7,0+ \geq 200	1,39	–
4	Al ₂ O ₃ (сапфір)	0,2–6,0	1,77	твердий, некрихкий
5	MgF ₂ (іртран-1)	2,0–8,0	1,30	полікристаліч- ний
6	Zn ₂ S (іртран-2)	1–14	2,24	нерозчинний у більшості розчинників

7	CaF ₂ (іртран-3)	0,2–11	1,34	полікристалічний, некрихкий
8	Zn ₂ Se (іртран-4)	1–21	2,5	–
9	CaF ₂ (флюорит)	0,2–10	1,4	–
10	NaCl (кам'яна сіль)	0,2–16	1,52	гігроскопічний
11	AgCl	0,4–20	2,00	дуже м'який
12	KCl (сильвін)	0,3–21	1,49	гігроскопічний
13	KBr	0,2–27	1,53	гігроскопічний
14	CsBr	0,3–40	1,66	гігроскопічний, м'який
15	CsI	0,3–50	1,74	гігроскопічний, м'який
16	TlBr+TlI=42:58 (KRS-5)	1–40	2,38	токсичний, м'який
17	TlBr+TlCl=40:60 (KRS-6)	0,4–25	2,2	–
18	Ge (германій)	2–20	4,0	–
19	Si (силіцій)	2–6+40–300	3,5	довгохвильова межа визначається ступенем чистоти матеріалу
20	–(CH ₂ –CH ₂) _n поліетилен	20–200	1,52	дуже м'який, смуга поглинання 720 см ⁻¹
21	C (алмаз, тип II)	0,7–1000		надміцний, існують смуги поглинання

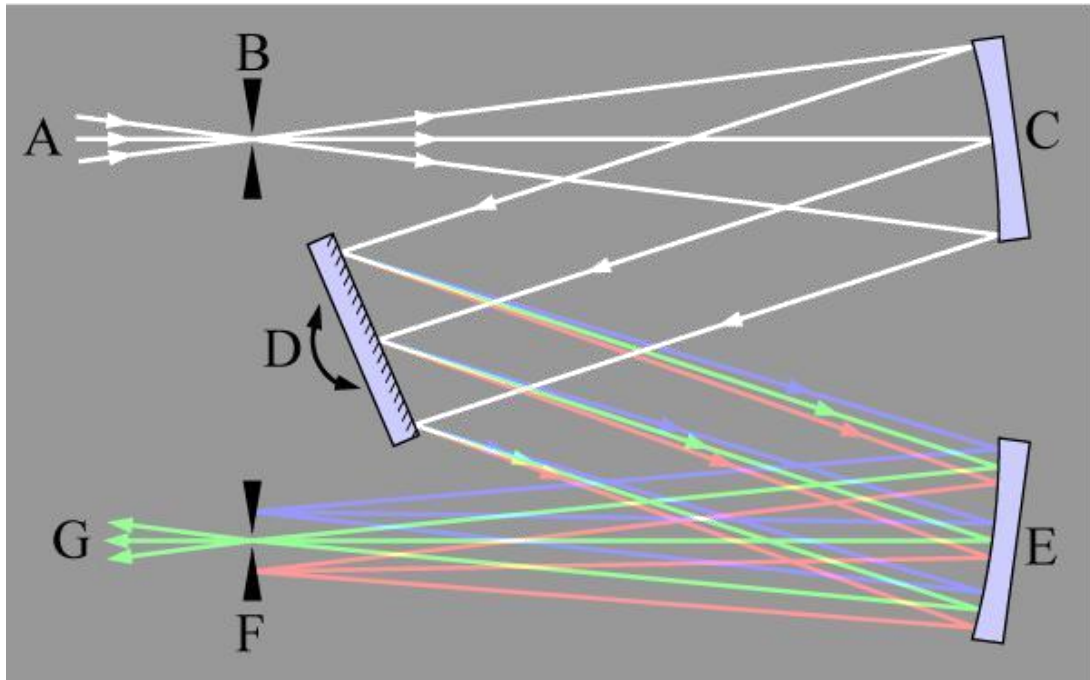


Рис.7 . Схема та принцип дії монохроматора

Випромінювання від джерела А проходить через вхідну щілину В, яка знаходиться у фокусі коліматорного об'єктиву С, формує паралельний пучок світла на дифракційну ґратку D. Внаслідок дифракції, ґратка відбиває промені з різними довжинами хвиль під різними кутами. Промені фокусуються в різних точках фокальної площини камерного об'єктиву Е. Вихідна щілина F, яка розташована в цій площині, пропускає вузьку ділянку спектра з довжиною хвилі G. Для настройки монохроматора на іншу довжину хвилі слід повернути диф-ракційну ґратку і буде виходити вже хвиля з іншого довжиною хвилі (рис. 1.7).

Діапазон частот, що попадають на щілину F, визначається шириною вхідної щілини В і диспергуючою здатністю (дисперсією) ґратки; ділянка спектра диспергуючого пучка, сфокусована дзеркалом Е на щілину F, визначається ку-том повороту дифракційної ґратки D; обертання дифракційної ґратки D приво-дить до розгортки (скануванню) спектру перед вихідною щілиною F, що знахо-диться перед приймачем. У процесі сканування спектру в пучок випроміню-вання, що знаходиться перед вихідною щілиною F, автоматично вводяться фільтри, щоби виключити небажане випромінювання, яке обумовлене іншими порядками спектру від дифракційної ґратки, що кратні виміряній довжині хвилі.

Максимальний результат отримується тільки в обмеженій ділянці спектру, яка зв'язана з найбільшою концентрацією випромінювання дифракційної ґратки.

Чим вужча щілина, тим вищий результат. Але з пониженням частоти енергія джерела випромінювання падає. Більшість сучасних приладів мають про-грамну установку, яка регулює ширину щілин, щоби енергія пучка

порівняння, що виходить із монохроматора, залишились приблизно сталою під час вимірювання довжини хвиль.

Недиспергуючі прилади

В основі дії Фур'є-спектрометрів лежить явище інтерференції електромагнітного випромінювання. Для виготовлення цих приладів використовують інтерферометри декількох типів. Найбільшого поширення набув інтерферометр Майкельсона. В цьому приладі потік інфрачервоного випромінювання від дже-рела перетворюється в паралельний пучок і потім розділяється на два промені за допомогою розділювача світла (рис. 8). Один промінь потрапляє на рухоме дзеркало, другий – на нерухоме. Відбиті від дзеркал промені повертаються тим же оптичним шляхом на розділювач світла. Ці промені інтерферують завдяки різниці ходу та різниці фаз, що створюється рухомим дзеркалом. В результаті інтерференції виходить складна інтерференційна картина, яка є накладенням інтерферограми, якій відповідають певна різниця ходу і довжина хвилі випромінювання. Об'єднаний світловий потік проходить через зразок і потрапляє на приймач випромінювання. Посилений сигнал надходить на вхід комп'ютера, який здійснює Фур'є-перетворення інтерферограми і одержується спектр поглинання досліджуваного зразка.

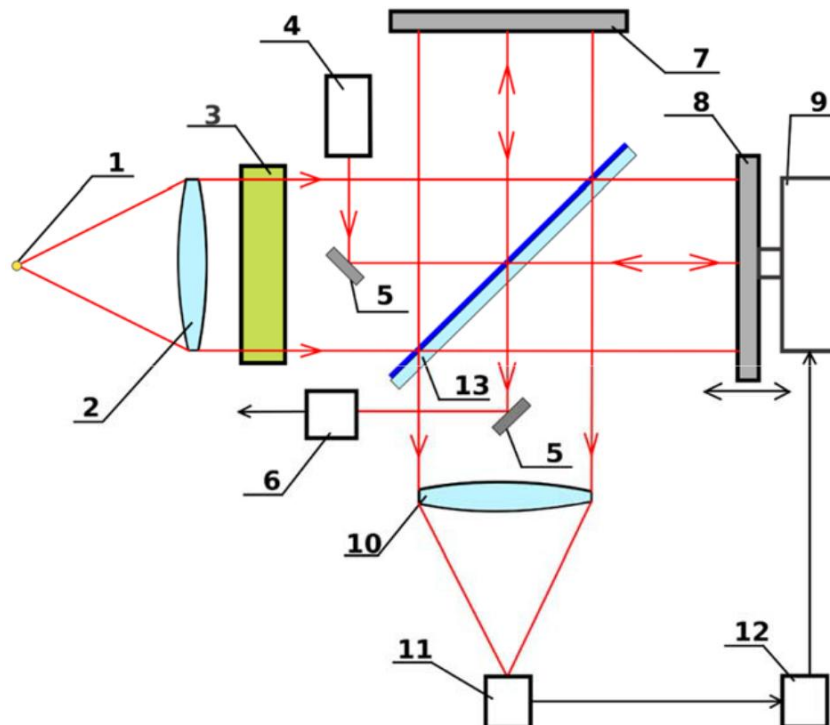


Рис.8 Схема оптичного Фур'є-спектрометра (інтерферометр Майкельсона, в якому одне із дзеркал є рухомим, що дозволяє варіювати різницю ходу променів. Зміщення дзеркала відбувається за допомогою механічного приводу, який контролюється ПК:) 1 – Джерело білого світла чи досліджуване джерело; 2 – Лінза коліматора; 3 – Кювета з досліджуваною речовиною; 4 – Опорний лазер; 5 – Допоміжне дзеркало опорного пучка від лазера; 6 –

Фотоприймач опороного пучка; 7 – Нерухоме дзеркало; 8 – Рухоме дзеркало; 9 – Механічний привід рухомого дзеркала; 10 – Об'єктив фотоприймача; 11 – Фотоприймач; 12 – Управляючий та обробляючий інтерферограму комп'ютер; 13 – Світлорозділювальна пластинка.

Фур'є-перетворення є складною обчислювальною процедурою, однак інтенсивний розвиток обчислювальної техніки призвело до створення невеликих за розмірами швидкодіючих комп'ютерів, вбудованих в спектрометр, які дозволяють за короткий час отримати спектр і провести його обробку.

У Фур'є-спектроскопії використовуються в основному три типи інтерферометрів: Фабрі-Перо, Майкельсона і ламелярний інтерферометр.

На рис. 9 представлена принципова оптична схема Фур'є-спектрометра, побудованого за принципом Майкельсона. Потік інфрачервоного випромінювання від джерела 1, модульований переривачем 2, ділиться світлоділником 4 на два пучка. Один з них спрямовується на дзеркало 3, яке пов'язане мікрометричною передачею з двигуном і може поступально переміщатися з певною довжиною пробігу і повертатися у вихідне положення. Відбитий від цього дзеркала пучок інтерферує, маючи задану дзеркалом 3 різницю ходу, з пучком, відбитим від закріпленого дзеркала 5. Далі випромінювання фокусується лінзами 6 на приймачі 8, проходячи через досліджуваний зразок, поміщений в кюветне відділення 7. При русі дзеркала 3 і інтерференції пучків з змінюючою різницею ходу відбувається сканування в певному спектральному діапазоні.

Реєстрована інтерферограма представляє залежність сигналу від різниці ходу пучків і є функцією енергії джерела, видозміненої поглинанням зразка. Фур'є-перетворення отриманої інтерферограми проводиться за заданою програмою ПК, що входить в комплект сучасних Фур'є-спектрометрів, дає ре-результативний спектр поглинання досліджуваного зразка. Спектральний інтервал, який доступний для вивчення, визначається розділювачем світла. З метою охопити всю ІЧ-область, необхідно кілька змінних розділювачів світла, які виконані у вигляді металевих сіток, плівок або діелектричних покриттів на підкладках.

Фур'є-спектроскопія має ряд істотних переваг. Дві головних переваги перед звичайними спектрометрами полягають в наступному:

- вираш в енергії за рахунок того, що при скануванні в кожен момент часу на приймач потрапляє випромінювання всього досліджуваного спектрального діапазону довжин хвиль, а не вузька його ділянка, який визначається в монохроматорі звичайного приладу диспергуючою системою і щілинами.

- можливість підвищення роздільної сили інтерферометра без зменшення потоку променевої енергії. Роздільна здатність Фур'є-спектрометра пропорційна максимальній різниці ходу пучків і, щоб підвищити, наприклад, удвічі розділюючи здатність спектру, потрібно просто подвоїти довжину переміщення дзеркала, а відповідно, і час реєстрації.

Таким чином Фур'є-спектроскопія забезпечує більш високу чутливість та точність вимірювання та можливість дослідження широкої спектральної області.

4. Підготовка зразку до аналізу

ІЧ-спектрометри дозволяють реєструвати спектри газів, рідких та твердих речовин. Для одержання ІЧ-спектрів необхідно від 1 до 10 мг досліджуваної речовини. Реєстрацію ІЧ-спектрів проводять у кюветі, які виготовлені з калій броміду KBr або натрій хлориду NaCl – матеріалів, які не поглинають ІЧ-ви-проміння в досліджуваному діапазоні. ІЧ-спектри реєструють як залежність пропускання ІЧ-випромінення (%) від хвильового числа $\nu = 1/\lambda$ (см^{-1}). Тому максимуми піків поглинання, ІЧ-випромінення напрямлені до низу.

Інфрачервоні спектри для структурного аналізу переважно знімають в ін-тервалі частот між $\nu = 4000\text{--}667 \text{ см}^{-1}$ (діапазоні довжин хвиль $\lambda = 2,5\text{--}15$ мкм), але довгохвильовий кінець спектру, у випадку необхідності, може бути про-довжений до $\nu = 400 \text{ см}^{-1}$ ($\lambda = 25$ мкм) на приладах, укомплектованих призмиами із калій броміду, і, навіть, до $\nu = 200 \text{ см}^{-1}$ ($\lambda = 50$ мкм) на спектрофотометрах, які укомплектовані призмиами із цезій броміду або дифракційними ґратками.

ІЧ-спектри органічних сполук реєструють у вигляді розчинів речовин у хлороформі CHCl_3 , тетрахлорметані CCl_4 , сірковуглеці CS_2 , рідин – у вигляді тонкої плівки на поверхні скла із NaCl або KBr, у вигляді твердих прозорих пігулок, одержаних пресуванням тонко подрібненої суміші досліджуваної речовини з калій бромідом або у вигляді суспензії в вазеліновій або мінеральній оливах.

Існує багато різноманітних методик підготовки зразків для знімання ІЧ-спектрів, тому під час дослідження потрібно вибрати одну із них, яка найкраще підходить для розв'язання відповідного завдання. Для рідких зразків можна вибрати наступні методики: 1) розчин; 2) нерозбавлена рідина в тонкій кюветі, якщо речовина нерозчинна; 3) рідина, стиснута між сольовими пластинками ("рідка плівка", "роздавлена крапля"). Для порошків і твердих зразків викори-стовують наступні методики: 1) розчин; 2) суспензія у вазеліновій оливі; 3) таблетки з KBr.

Дослідження у розчинах. У більшості випадків надають перевагу зразкам у вигляді розчинів. Оскільки всі загальноприйняті розчинники поглинають в ІЧ-ділянці спектру, доцільно використати тонкі шари і вибрати ті розчинники, які мають вікна прозорості в ділянці спектру, що цікавого але не завжди легко знайти такий прозорий розчинник, в якому зразок був би достатньо розчинений для отримання потрібної концентрації. Іноді аналіз сумішей може бути значно спрощений, якщо використати переваги селективної екстракції ІЧ-розчинником.

Розчинник повинен бути хімічно інертним до зразка. Наприклад, первинні та вторинні аміни реагують з CS_2 з утворенням тіокарбаматів, тому для них найкращим способом є приготування рідких плівок; аліфатичні аміни також піддаються повільній фотохімічній взаємодії з CCl_4 з утворенням гідрохлоридів амінів. Речовини, чутливі до вологи, можуть реагувати з водою, яка залишається у будь-якому розчиннику, особливо під час великого розведення.

Для роботи у ділянці частот $\nu = 625 - 4000 \text{ см}^{-1}$ загальноприйняте викорис-тання CCl_4 або C_2Cl_4 при $1330-4000 \text{ см}^{-1}$ і CS_2 за $\nu=625-1333 \text{ см}^{-1}$. Не існує розчинників, які б повністю не впливали на розчинену речовину, але вказані неполярні розчинники дають мінімальний ефект внаслідок їх відносно однорідного діелектричного поля.

Як пару малотоксичних розчинників (але з високим фоновим поглинанням) можна використовувати C_2Cl_4 у ділянці спектру $\nu=1000-4000 \text{ см}^{-1}$ та *n*-гептан у ділянці $\nu=250-1000 \text{ см}^{-1}$.

Іншими розчинниками, що застосовуються в більш обмежених спектральних ділянках, NCCl_3 , діоксан і дифенілформамід. Розчинна дія таких речовин обумовлена їх полярною природою, що приводить до сильного ІЧ-поглинання до взаємодії з розчиненою речовиною. Дейтеровані розчинники мають вікна прозорості, що відрізняються від їх протонованих аналогів, і відносно дешеві в тих малих кількостях, які необхідні для ІЧ-спектроскопії.

Для довгохвильової ділянки вибір доступних розчинників ширший. В інтервалі частот $\nu=263-625 \text{ см}^{-1}$ можна використовувати CCl_4 , дихлорметан або гексан. Багато інших розчинників виявляють на ІЧ-спектрі тільки одну-дві смуги і їх можна застосувати в обмежених спектральних ділянках.

Для мінімізації інтерферентних смуг, які виникають як фон, розчинники та матеріали віконцець повинні мати близькі значення показників заломлення.

У деяких випадках, як розчинник, можна використовувати H_2O або D_2O . Використовуючи дуже тонкі кювети (приблизно $0,02 \text{ мм}$) із KRS-5 , BaF_2 , AgCl і регулюючи щілини спектрометра так, щоб скомпенсувати втрату енергії, можна отримувати повністю задовільні спектри водних розчинів у ділянці

спектру $\nu=833-1538\text{ см}^{-1}$. З D₂O можна працювати в іншій спектральній ділянці, але якщо цей розчинник використовується зі зразками, що мають рухливий про-тон, то буде спостерігатися обмін.

Вологість зразків впливає не тільки на їх розчинність, але може призводити до помутніння вікон кювети. Вологий зразок можна висушити перед розчиненням, добавляючи 2,2-диметоксипропан, який реагує з водою в кислому середовищі з утворенням метанолу і ацетону. Як реагент, так і леткі продукти можуть бути видалені нагріванням.

Розчини найчастіше готують, зважуючи кількість зразка в мірній колбі, а потім добавляють розчинник до мітки. Більшість органічних речовин дають якісні спектри за концентрацією $1\text{ г}/10\text{ см}^3$ у кюветі товщиною $0,1\text{ мм}$ в інтервалі $\nu = 625-4000\text{ см}^{-1}$. Такі сильно поглинаючі речовини, як флуор і силіційорганічні сполуки, розводять до $0,2\text{ г}/10\text{ см}^3$ для одержання спектру в ділянці $= 625-1333\text{ см}^{-1}$. Вищі концентрації і товщини кювети придатні у разі необ-хідності отримати ІЧ-спектри в ділянці нижче $\nu=600\text{ см}^{-1}$, за винятком дуже сильно поглинаючих зразків.

Реакційноздатні або леткі речовини можна зважувати в колбі з притертим корком, наполовину заповненій розчинником. Аналогічно можна приготувати зразки навіть таких речовин, які киплять за кімнатної температури, за умови їх охолодження нижче температури кипіння.

Товщина зразка. На вибір товщини кювети може впливати наявна кількість зразка або його розчинність. Дуже тонкі кювети ($< 0,05\text{ мм}$) не тільки важко виготовляти, але й заповнювати і спорожнювати, в той час як кювети товщиною $0,2\text{ мм}$ можуть приводити до дуже великого поглинання розчинника (зручним компромісом виявляється кювети товщиною $0,1\text{ мм}$). Однак, перед тим як приготувати зразок з великою товщиною поглинаючого шару, необхідно перевірити наскільки задовільне пропускання розчинника в зацікавленій ділянці спектру.

З часом кювети стають мутними або покриваються шаром адсорбуючих забруднень. Про стан вікон не завжди можна судити за їх зовнішнім виглядом. Через це доцільно контролювати кювети, записуючи скомпенсований спектр чистого розчинника.

Дослідження у плівках. Одним із простих методів приготування зразків є метод рідких плівок. Він застосовується до нелетких, нерадіаційноздатних зразків і корисний у випадку нерозчинних рідин або для отримання кількісних зразкових спектрів. Метод полягає в тому, що крапля зразка стискується між двома сольовими пластинками або поміщається на плоску скляну поверхню, а потім «витирається» сольовою пластинкою, при цьому бажано, щоб у межах розсічення світлового променя спектрометра товщина зразка була однаковою. Спектри, одержані таким променем, не точні, щоб

отримати задовільний результат, потрібно провести експериментальний пошук.

Під час дослідження смол, лаків та інших подібних матеріалів, розчинних у летких розчинниках, плівки можна отримати випаровуванням розчинника. Тонкий шар розчину смоли, нанесеного на вікно, швидко висушується під тепловою лампою, і отримані таким чином спектри є вільні від негативного впливу розчинника.

Зразки для зняття ІЧ-спектрів водних емульсій часто одержують, висушуванням декількох крапель емульсії на вікні з AgCl.

Розчини полімерів можна поміщати на скло, гладку поверхню пластику або ртуті, а після випаровування розчинника реєструвати спектри вільних плівок. У спектрах пропускання таких плівок часто спостерігається інтерференційна картина, яка ускладнює спектр.

Дослідження в суспензіях. Складності приготування зразків твердих речовин, які нерозчинні у звичайних розчинниках для ІЧ-спектроскопії, найчастіше виникають під час їх розтирання до дрібнодисперсних порошоків, які утворюють суспензії у вазеліновій оліві або KBr. В обох випадках мета полягає здійсненні однорідного розподілу частинок у промені і в покращенні пропускання світла частинками в середовищі, яке має близький показник заломлення зі зразком.

Вазелінова олива широко використовується для приготування суспензій, але її недоліком є сильне поглинання у ділянці спектру валентних і деформаційних коливань Н–С-зв'язків. Цей недолік можна усунути шляхом використання хлорованих олив у ділянці спектру $\nu=1333-4000 \text{ см}^{-1}$.

Важливим також є і розмір розтертих частинок – їх розмір повинен бути меншим від довжини хвилі ІЧ-випромінювання. Для цього невелику кількість речовини (чим менше, тим краще, звичайно не більше 10-20 мг) розтирають спочатку обережно в агатовій ступці, а потім перетирають у високодисперсний порошок. Далі порошок збирають на дні ступки в щільну масу, додають краплю вазелінової оливи, після чого продовжують розтирання до отримання однорідної маси, а після цього напівпрозора паста переноситься на сольове вікно за допомогою пластмасового шпателя і розтирається іншим вікном.

Джерелом випромінювання використовують – штиф Нернста із оксидів цирконія, церія, торія, ітербія або «глобар» із карбіду кремнія, нагріті до 950 °С дають ІЧ-випромінювання в діапазоні $5000 - 400 \text{ см}^{-1}$.

5. Ідентифікація органічних сполук

При реєстрації ІЧ-спектрів органічних сполук у розчині чи суспензії необхідно враховувати та віднімати пікі поглинання розчинника або суспендуючого середовища. Якщо ІЧ-спектри були отримані в розчинах

CHCl_3 і CCl_4 , то необхідно врахувати той факт, що в зонах власного поглинання цих розчинників результати спектроскопії можуть бути неоднозначні. Наприклад, хлороформ CHCl_3 має інтенсивне поглинання в діапазонах: $3100\text{--}3000$, $1250\text{--}1200$, $800\text{--}650\text{ cm}^{-1}$ (рис. 9 а,б); тетрахлорметан CCl_4 – $1560\text{--}1540$, $800\text{--}700\text{ cm}^{-1}$ (рис.9 в, г). У цих межах поглинання розчинник може маскувати пікі поглинання досліджуваних речовин. Пікі поглинання калій бромідом починаються нижче 450 cm^{-1} і тому він не маскує пікі поглинання органічних сполук (рис. 9 д).

При реєстрації ІЧ-спектрів органічних сполук слід враховувати наявність домішок у зразках, оскільки їх лінії поглинання можуть маскувати досліджувані речовини. Наприклад, вода має смуги поглинання біля 3450 cm^{-1} , а коливання карбон (IV) оксиду (домішка з атмосфери) – $2360\text{--}2325\text{ cm}^{-1}$. Іноді зразки забруднені силіконовими мастилами з полосами поглинання 1625 cm^{-1} і $1100\text{--}1000\text{ cm}^{-1}$, або фталатами – 1725 cm^{-1} . Крім того, необхідно врахувати, що кювети для ІЧ-спектроскопії, які виготовлені з KBr і NaCl , чутливі до дії вологи і, з часом, виходять з ладу (рис. 9).

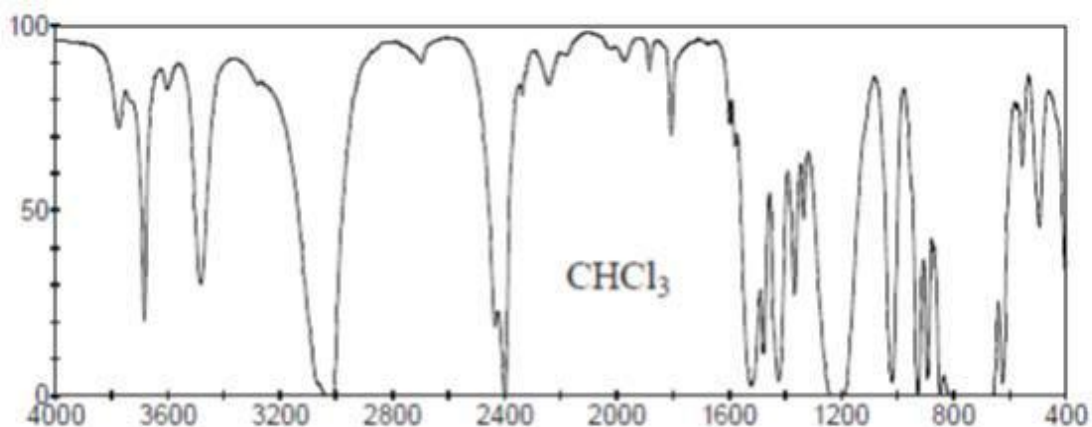
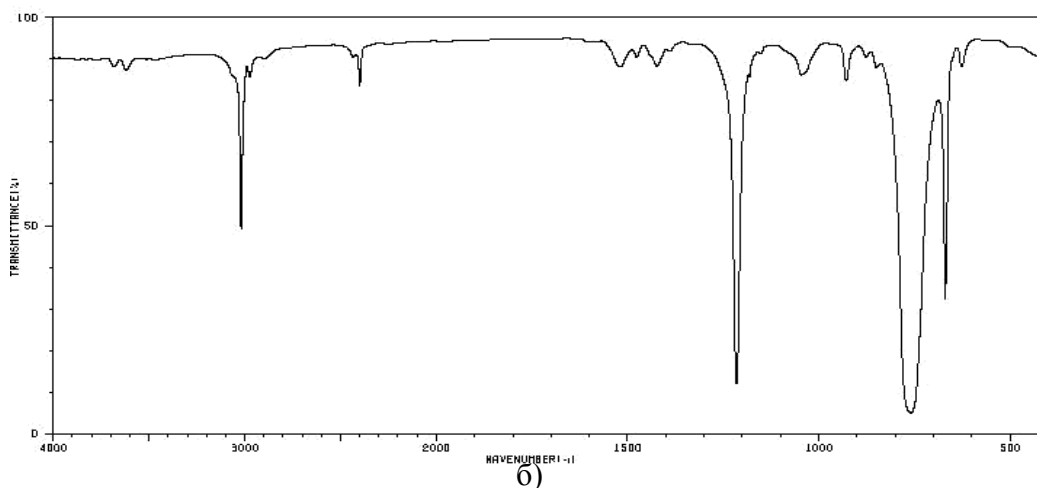
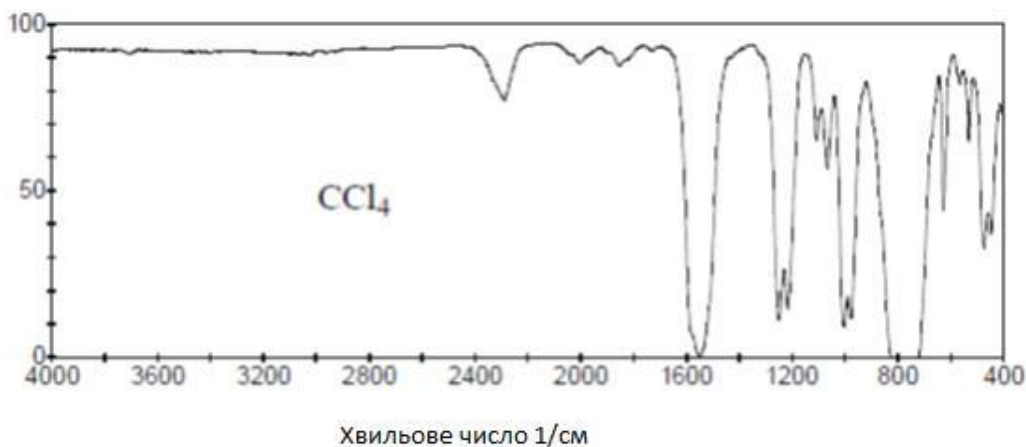


Рис. 8. Хвильове число. cm^{-1}

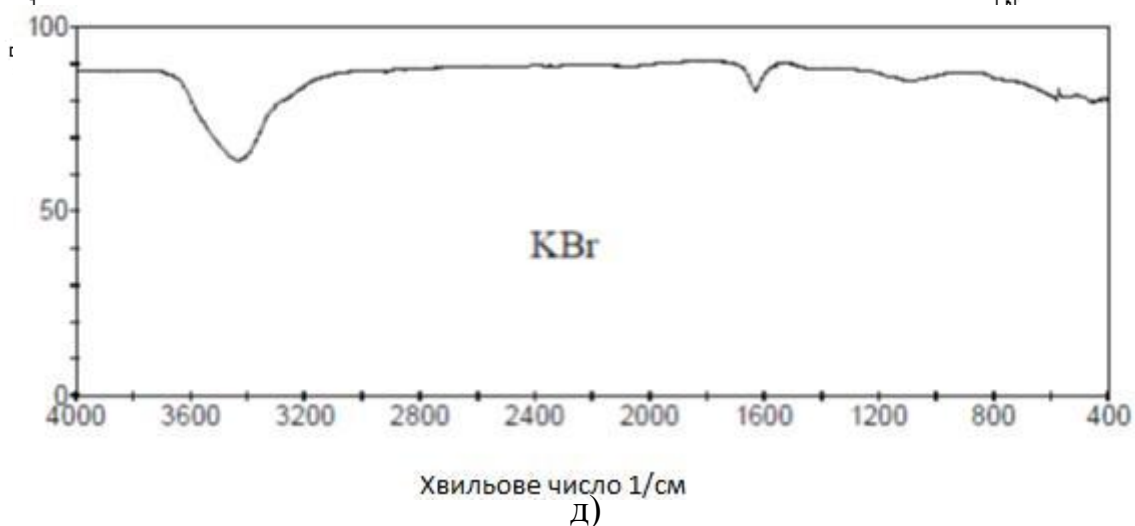
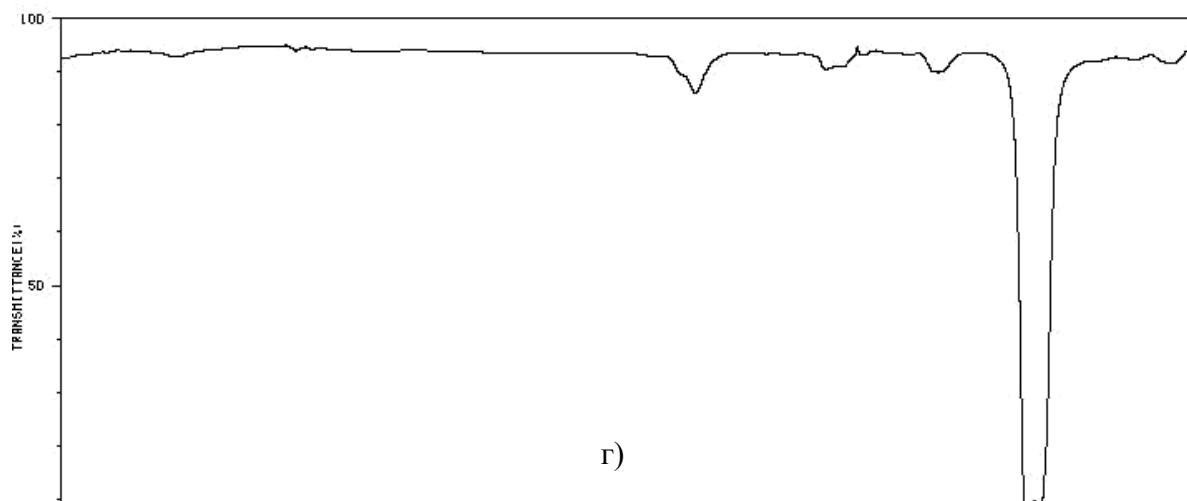
а)



б)



в)



д)

Рис. 9. ІЧ-спектри CHCl_3 (а, б), CCl_4 (в, г), які зареєстровані в кюветі товщиною 1мм, та ІЧ-спектр таблетки KBr (д). Спектри а, в – зняті відносно повітря, а б, г – спектри за ідеальних умов.

На ІЧ-спектри сильно впливають міжмолекулярні зв'язки та наявність сольватної оболонки. Кожна функціональна група характеризується наявністю смуг в інфрачервоній області, завдяки яким можна встановити структурну формулу органічної сполуки.

Наприклад, в ІЧ-спектрах алкенів проявляються смуги поглинання, обумовлені коливаннями зв'язків $=C-H$ і $C=C$. Положення смуг, відповідають даним коливань, визначається ступенем заміщення. При наявності групи $=CH_2$, $=C-H$ частота дорівнює $3060 - 3095\text{ см}^{-1}$, при наявності радикала $=CH-R$ $3010 - 3040\text{ см}^{-1}$, а при наявності $C=C$ – від 1640 до 1680 см^{-1} .

У симетрично двозаміщених алкенів коливання $C=C$ в ІЧ-діапазоні не проявляється. Заміщення Гідрогену на Флуор викликає зміщення смуги поглинання у бік більших частот. Хлор, Бром і Йод обумовлюють протилежний ефект. Смуги позаплощинних деформаційних коливань $1000 - 650\text{ см}^{-1}$ є характеристичними і інтенсивними.

В ІЧ-спектрі алкінів наявність потрійного зв'язку ідентифікується за появою смуги поглинання від 3200 до 3300 см^{-1} і від 2100 до 2300 см^{-1} . У ацетилені і його симетричних гомологах коливання потрійного зв'язку не виявляються. Інтенсивність смуги потрійного зв'язку найбільша при її кінцевому розташуванні і слабка у дизаміщених алкінах (рис. 10, 11).

В ІЧ-спектрах ароматичних сполук спостерігаються смуги поглинання в чотирьох спектральних областях. Валентні коливання $C-H$ зв'язків проявляються у вигляді двох трьох смуг середньої інтенсивності в області від 3100 до 3000 см^{-1} . Коливанням $C-C$ зв'язків ароматичного кільця відповідають чотири смуги поглинання $1600, 1580, 1500, 1450\text{ см}^{-1}$. Характеристична смуга на 1580 см^{-1} проявляється в спектрах похідних бензену, що мають замісник, пов'язаний з ароматичним кільцем. Позаплощинні деформаційні коливання зумовлюють появу смуг поглинання в діапазоні від 900 до 670 см^{-1} . Це найбільш інтенсивні смуги поглинання. За кількістю і положенням смуг в цій області можна визначити тип заміщення бензольного кільця (рис. 12).

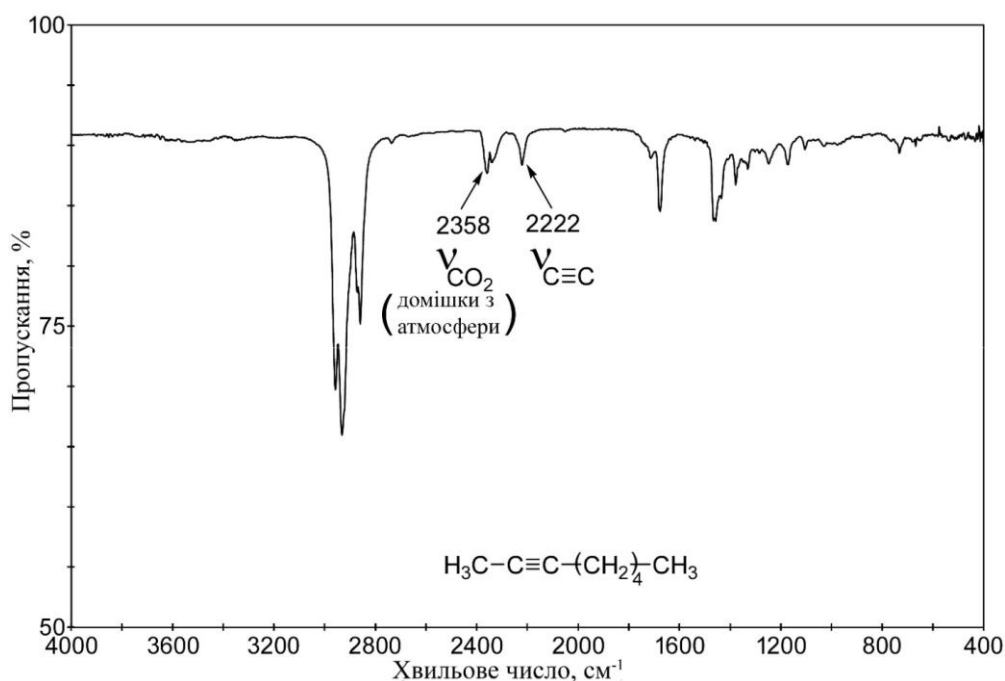


Рис.10. ІЧ-спектри потрійного зв'язку в дизаміщених алкінах

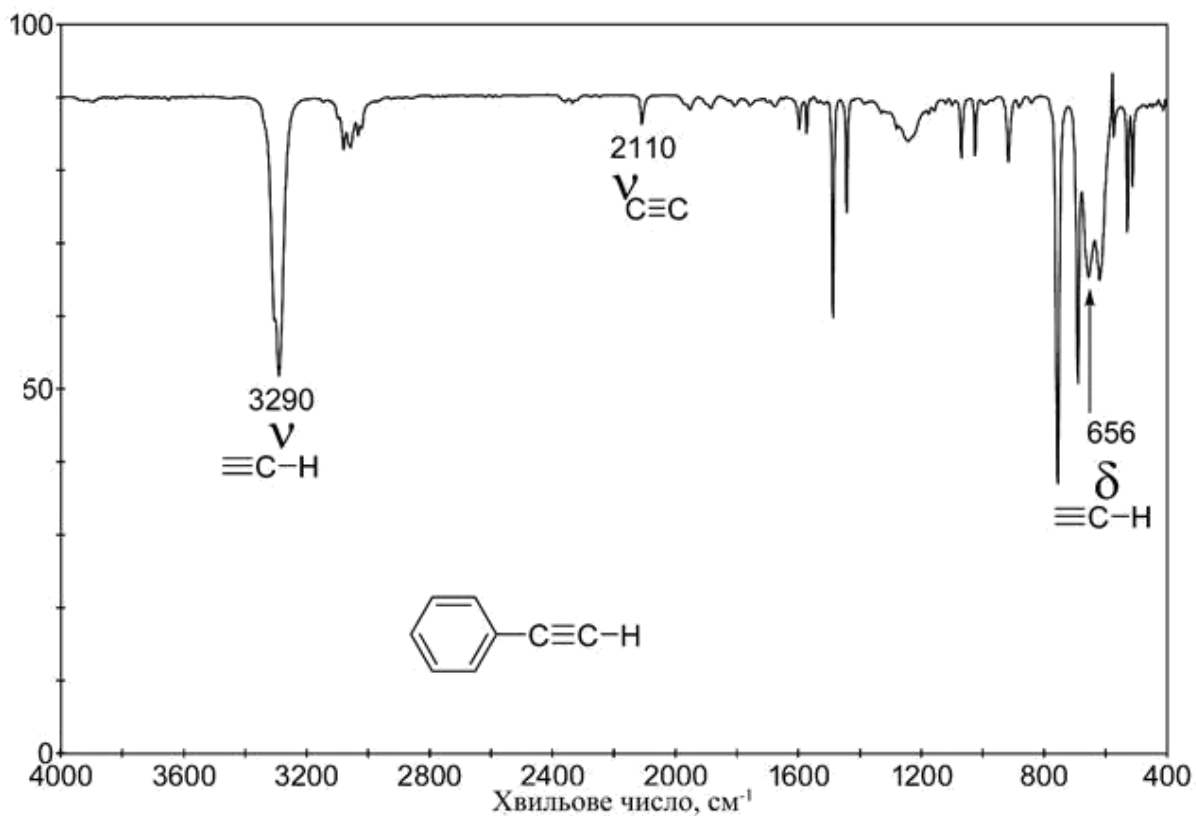


Рис.11. ІЧ-спектри потрійного зв'язку при кінцевому розташуванні

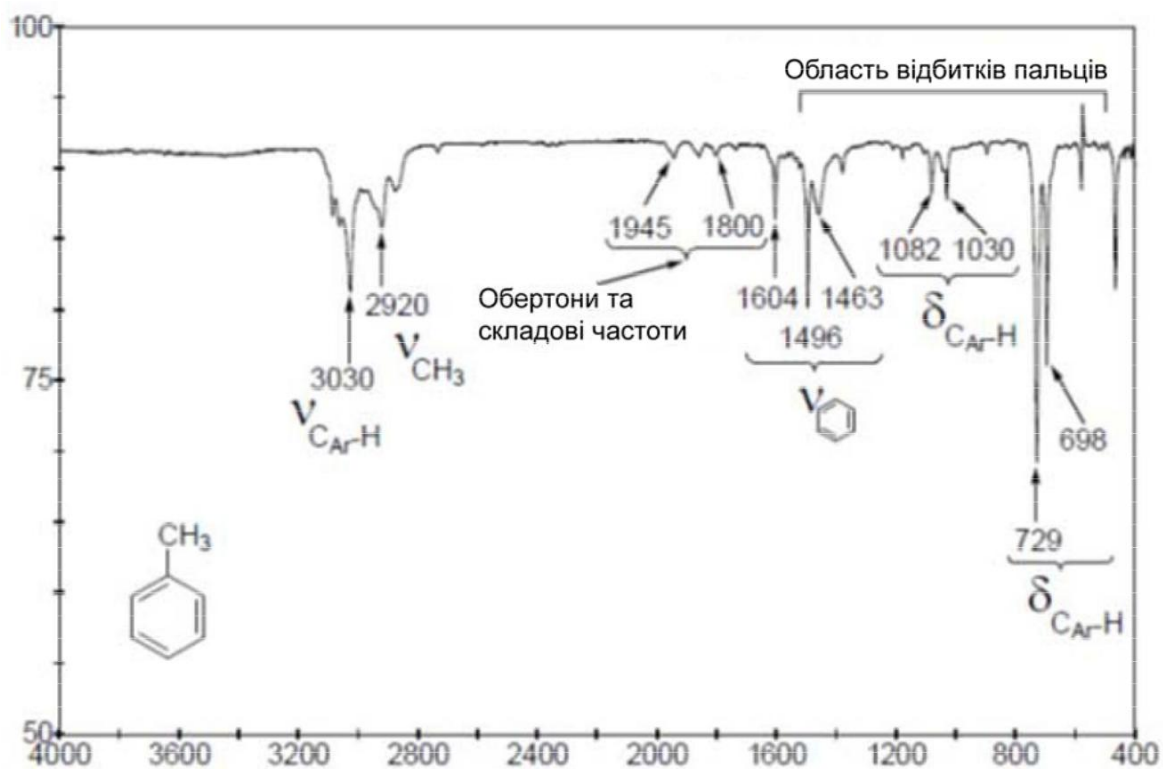


Рис.12 . ІЧ-спектри ароматичних сполук

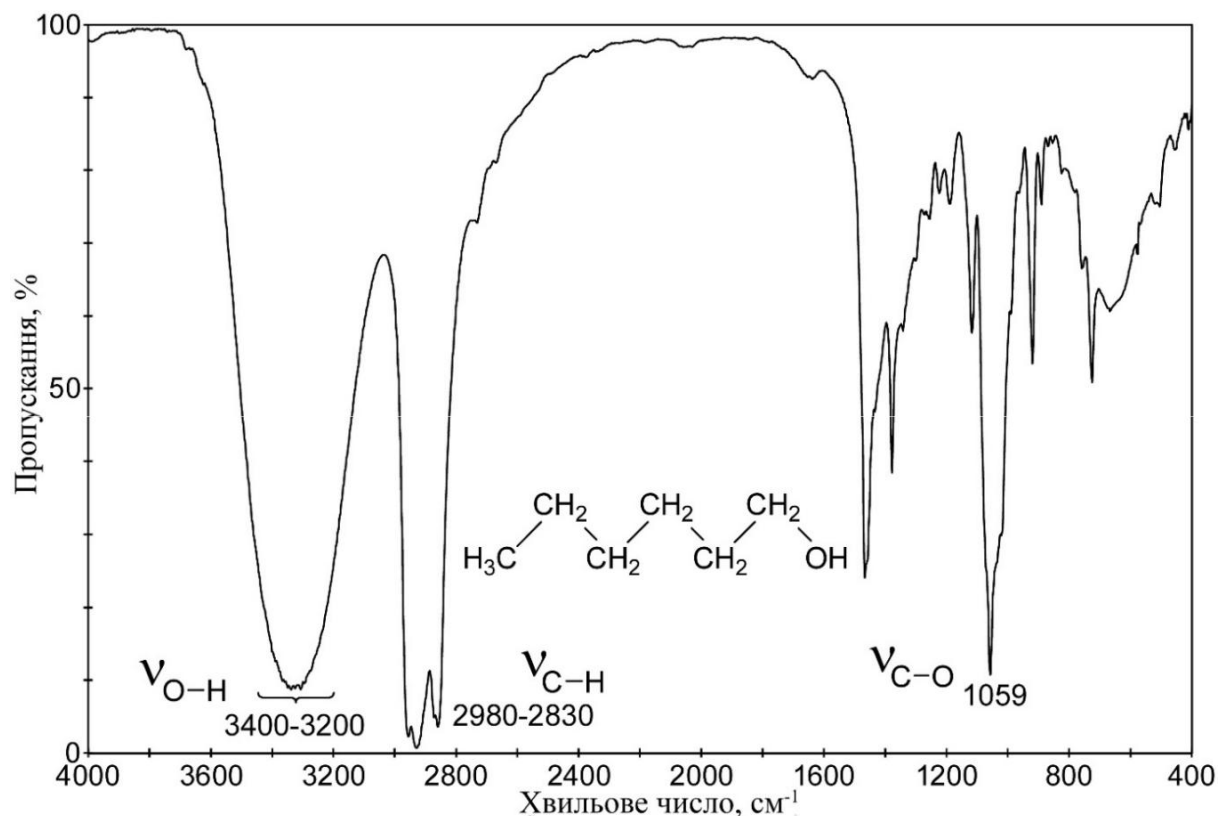


Рис.13 . ІЧ-спектр аліфатичного спирту

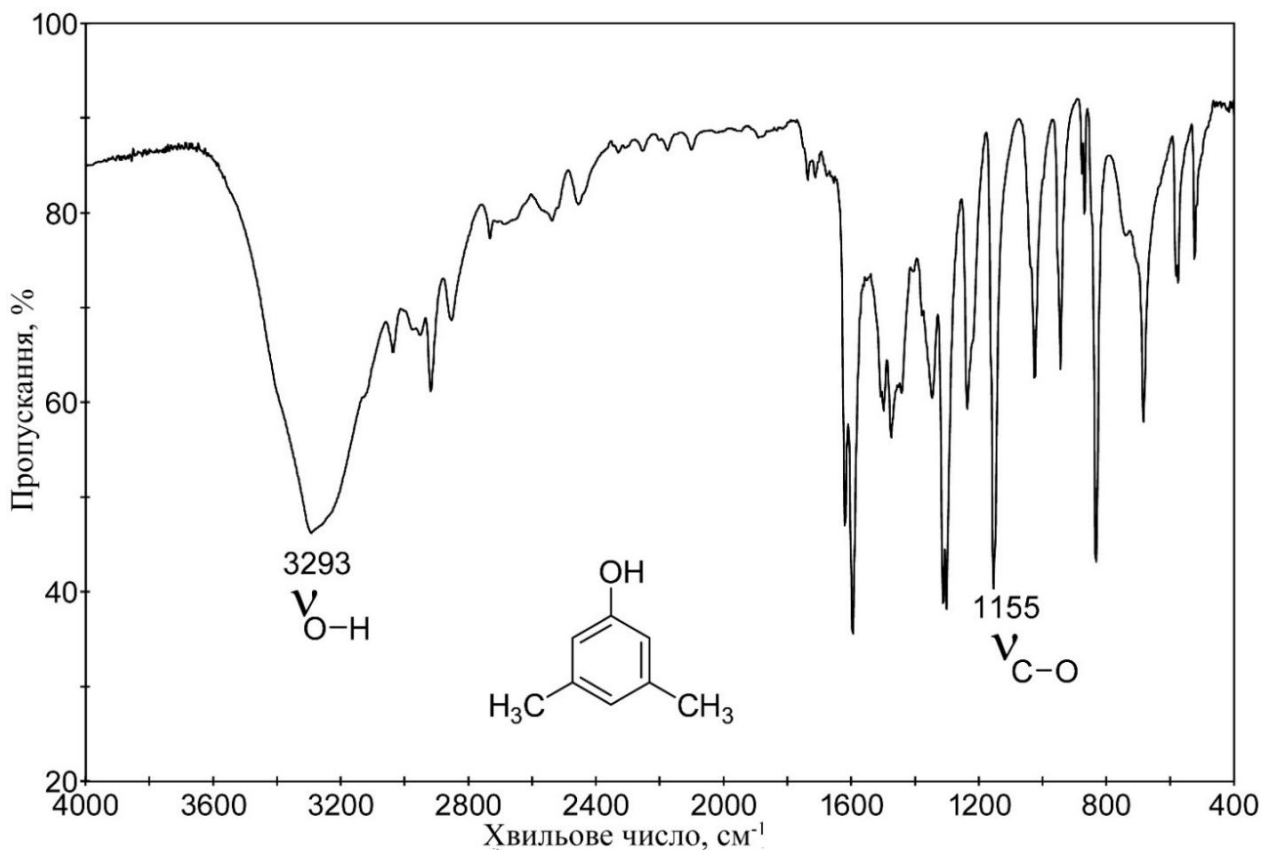


Рис.14. ІЧ-спектри фенолу

Характерними смугами спиртів і фенолів є смуги валентних і деформаційних коливань зв'язків О–Н і валентні коливання зв'язків С–О. Смуга валентних коливань гідроксигруп спиртів і фенолів проявляється в одній і тій же

області спектра. Положення і форма цієї смуги залежать від ступеня асоціації, зумовленої наявністю водневого зв'язку. Вільна (неасоційована) гідроксогрупа спостерігається в газовій фазі і в розведених розчинах в неполярних розчинниках у вигляді інтенсивної вузької смуги в області від 3650 до 3580 см^{-1} (рис.13).

Під час вимірювання концентрованих розчинів, розплавів, суспензій в вазеліновій олії або таблеток з КВг валентні коливання ОН-групи проявляються у вигляді широкої смуги змінної інтенсивності при більш низьких частотах (від 3200 до 3550 см^{-1}). Це зумовлено утворенням міжмолекулярного зв'язку між ОН-групами.

Положення сильних смуг валентних коливань зв'язку С–О спиртів і фенолів, які спостерігаються в області від 1050 до 1200 см^{-1} , по-різному. Це дозволяє відрізнити первинні, вторинні і третинні спирти один від одного і від фенолів. Смуги площинних деформаційних коливань О–Н, що знаходяться в діапазоні від 1420 до 1260 см^{-1} , Часто маскуються смугами інших груп і для ідентифікації спиртів і фенолів мають дещо менше значення (рис. 14).

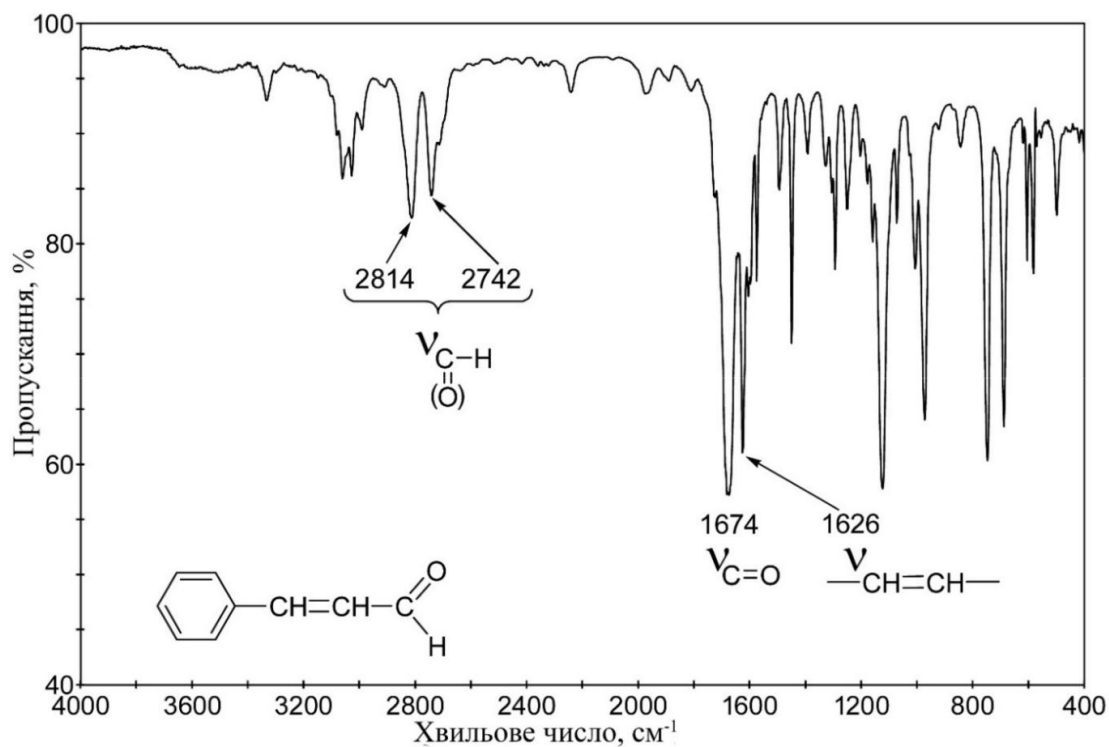
Для етерів характерними є смуги, обумовлені валентними коливаннями зв'язків системи С–О–С. Діалкінові і циклічні етери мають в ІЧ-діапазоні інтенсивну і широку смугу асиметричних валентних коливань (від 1150 до 1085 см^{-1}). Смуга симетричних валентних коливань слабка і не має істотного значення для встановлення структури.

В ІЧ-спектрі альдегідів і кетонів є сильна смуга валентних коливань групи С=О. У аліфатичних альдегідів максимум смуги поглинання знаходиться в області 1725 см^{-1} , у кетонів 1715 см^{-1} . Якщо карбонільна група пов'язана зі зв'язком С=С або ароматичною системою, максимум смуги поглинання зміщується в низькочастотну область: у ароматичних альдегідів – від 1715 до 1695 см^{-1} , у алкіларилкетонів – 1690 см^{-1} у діарілкетонів – 1665 см^{-1} . Дві смуги слабкої інтенсивності в області від 2720 до 2690 см^{-1} і від 2830 до 2810 см^{-1} відповідають валентним коливанням зв'язку С–Н альдегідів (рис. 15).

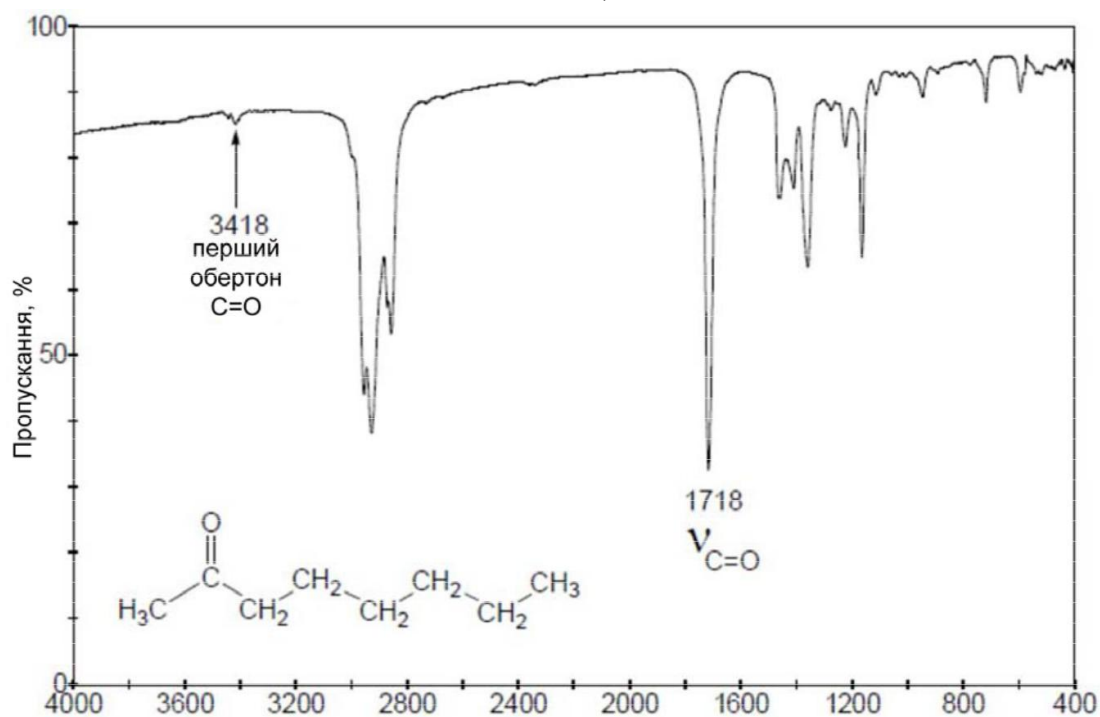
Для карбонових кислот і їх функціональних похідних проявляється інтенсивні смуги поглинання в області від 1900 до 1600 см^{-1} , що обумовлені валентними коливаннями зв'язку С=О. На наявність смуг і їх інтенсивність впливає атомна вага атомів, пов'язаних з карбоксильною групою. Великий вплив на частоту коливань зв'язку С=О надають внутрішньо- і міжмолекулярні водневі зв'язки, координація молекул, електростатичні взаємодії (рис. 16).

Як у твердому, так і в рідкому стані кислоти існують у вигляді димерів. Поглинання в цій області належить коливаннями, що пов'язані з утвореними водневими зв'язками між карбонільними групами. У парах або розведених

розчинах в неполярних розчинниках можна спостерігати поглинання не пов'язаної карбонільної групи при більш високих частотах. У парах ацетатної кислоти частота спостерігається в області 1790 см^{-1} . Для кислот і окремих типів функціональних похідних смуги поглинання в вузькому інтервалі частот і, отже, за положенням даних смуг можна зробити висновок про тип похідного.



а)



б)

Рис.15. ІЧ-спектри альдегіду (а) та кетону (б)

Кислоти можна ідентифікувати за поглинанням в інших областях спектра. Для них характерна широка смуга поглинання в інтервалі від 3300 до 2500 см^{-1} , викликана валентними коливаннями ОН групи, що бере участь в утворенні водневого зв'язку. У мономерах смуга поглинання не зв'язаної гідро-кисильної групи значно вужче і становить від 3650 до 3500 см^{-1} .

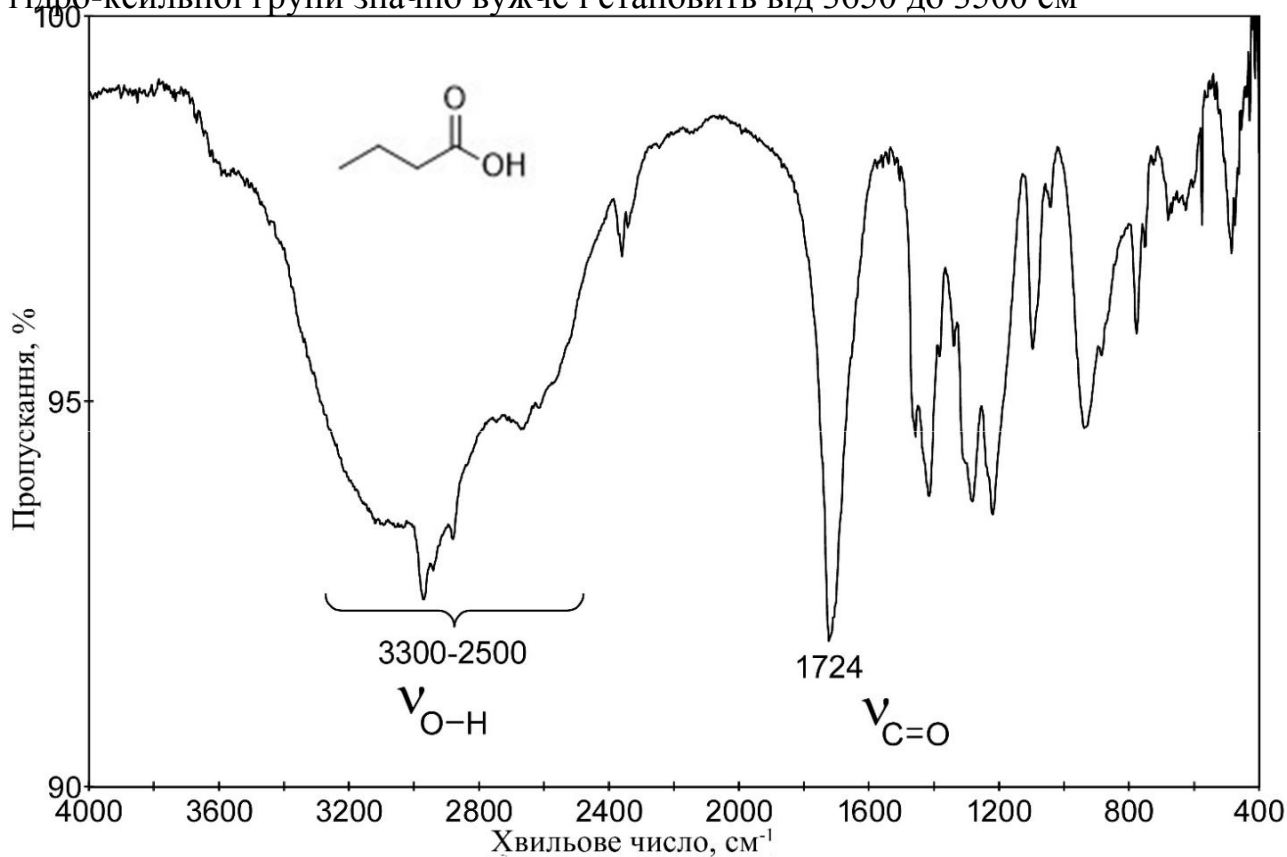


Рис.16. ІЧ-спектр карбонових кислот

В ІЧ-спектрах естерів є характерна інтенсивна широка смуга в області від 1300 до 1050 см^{-1} , що обумовлена коливаннями угруповання С–О–С (рис. 17 а, б).

Солі карбонових кислот та ангідриди характеризуються двома інтенсивними смугами поглинання в області валентних коливань групи С=О. Вони обумовлені асиметричними і симетричними коливаннями двох рівноцінних зв'язків. У карбоксилат-йоні дві С–О зв'язку проявляються в діапазоні від 1650 до 1550 см^{-1} (асиметричні) і від 1450 до 1400 см^{-1} (симетричні).

У ангідриду смуга асиметричних коливань також більш інтенсивна і знаходиться в діапазоні від 1870 до 1800 см^{-1} . З меншою інтенсивністю смуга симетричних коливань в діапазоні 1775 до 1740 см^{-1} . Смуги відстоять одна від одної на 60 см^{-1} .

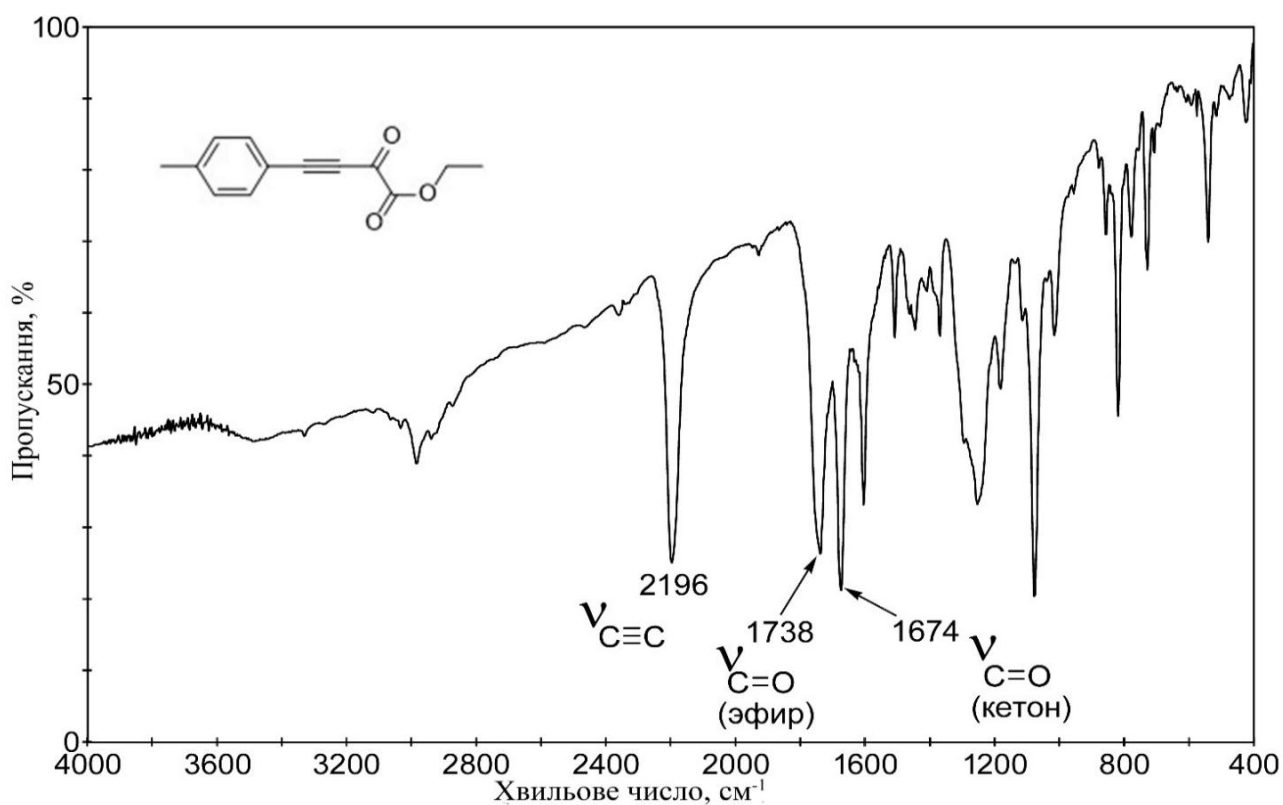
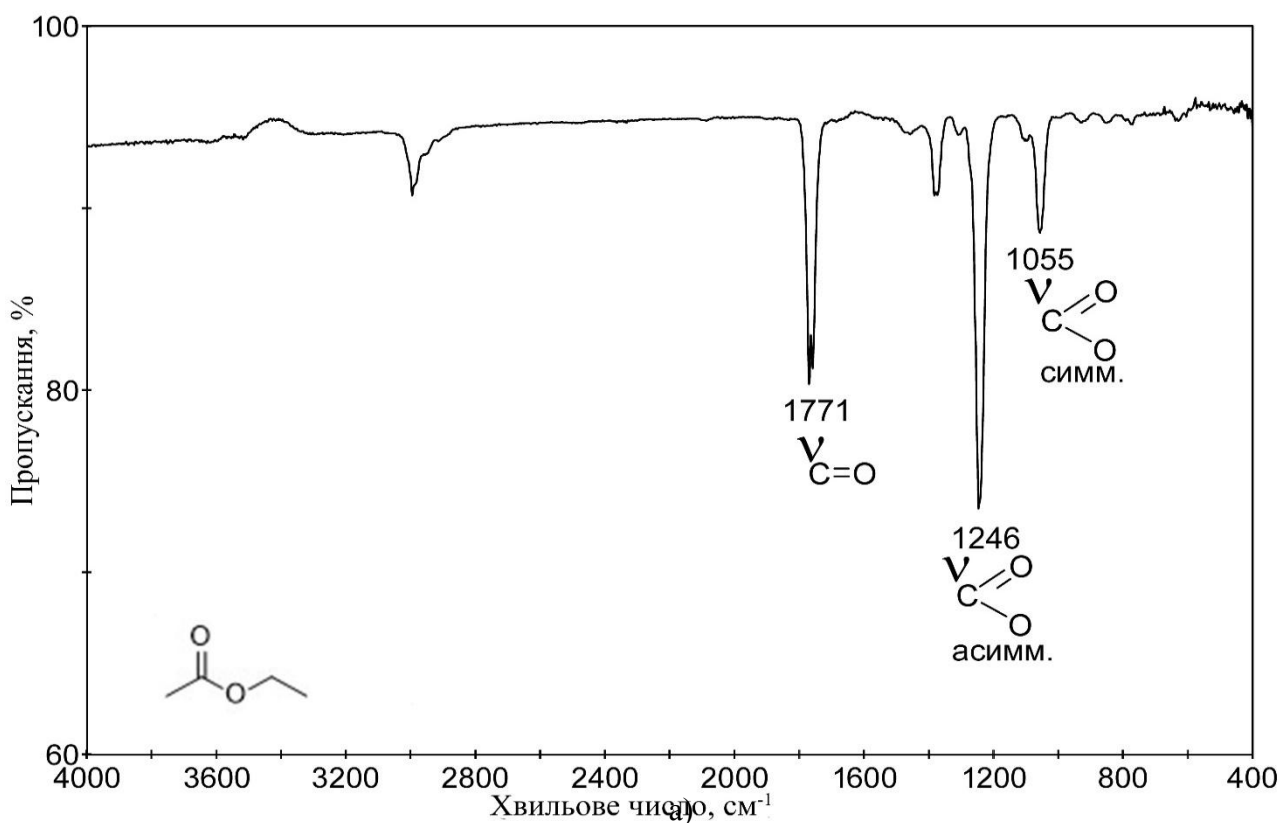


Рис.17. а, б. ІЧ-спектри естерів

В спектрах амінів в розбавлених розчинах спостерігаються дві вузькі лінії на 3500 і 3400 cm^{-1} . Вторинні аміни мають одну смугу поглинання, що відповідає зв'язку N–H. Для аліфатичних амінів в інертних розчинниках вона спостерігається в області від 3350 до 3310 cm^{-1} , в спектрах змішаних амінів смуга поглинання розташована в області 3450 cm^{-1} . Якщо аміногрупа бере участь в утворенні міжмолекулярного водневого зв'язку, то смуги поглинання

N–H зміщуються в низькочастотну область. Однак ці зміщення не настільки значні, як для гідроксогруп. Асоційовані первинні аміни дають смуги поглинання від 3420 до 3300 см^{-1} і від 3330 до 3250 см^{-1} , вторинні – на від 3300 до 3150 см^{-1} . При неповній асоціації можна спостерігати одночасно смуги вільної і асоційованої аміногруп (рис. 18).

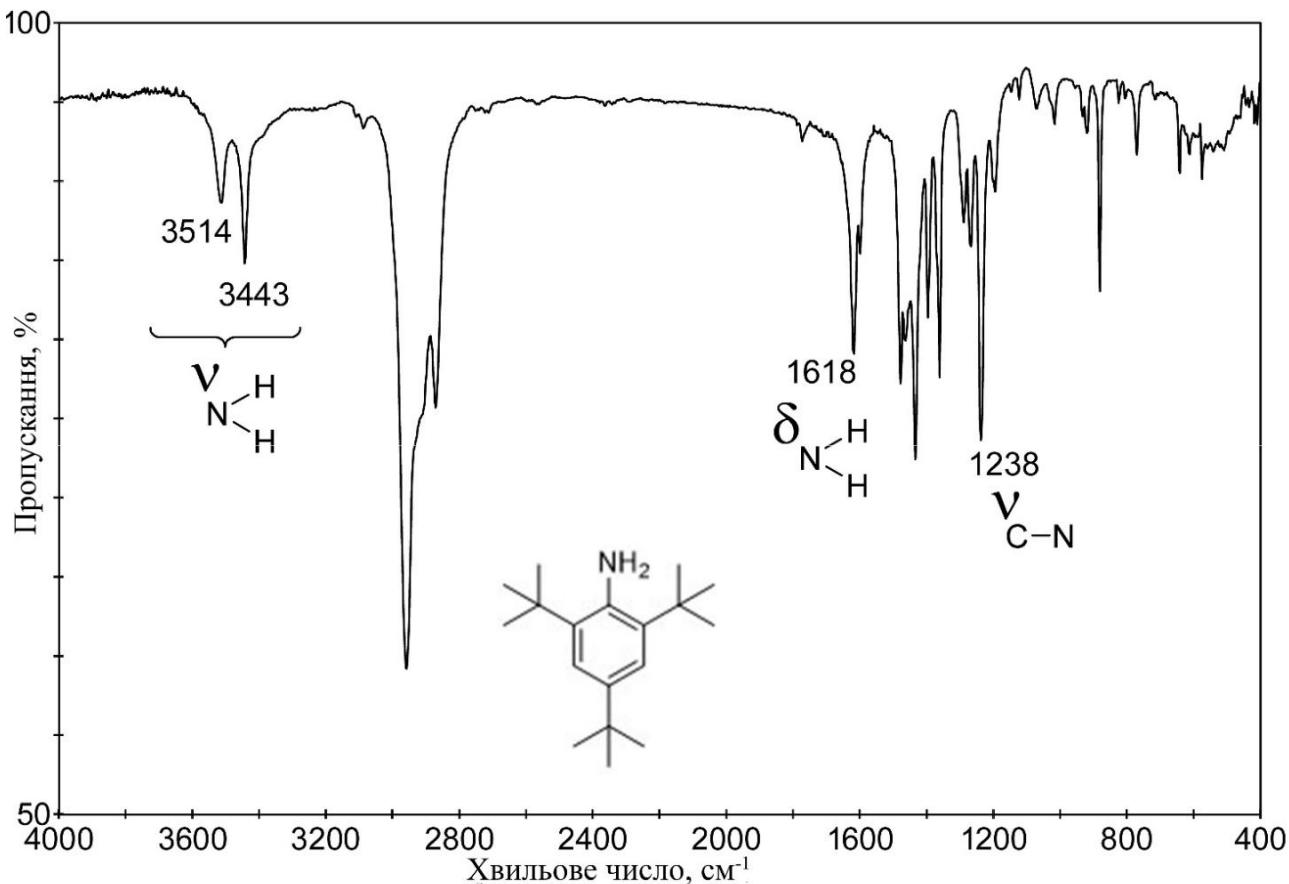


Рис.18. ІЧ-спектр ароматичних амінів

Деформаційні коливання аміногруп знаходяться в області від 1650 до 1500 і від 950 до 650 см^{-1} . Первинні аміни мають смуги поглинання плоских деформаційних коливань середньої інтенсивності від 1650 до 1580 см^{-1} , втори-чні– від 1600 до 1500 см^{-1} слабкої інтенсивності. При утворенні водневих зв'язків частота коливань підвищується.

Аміни мають смуги поглинання коливання зв'язку C–N. У аліфатичних амінах ці смуги знаходяться від 1250 до 1020 см^{-1} середньої інтенсивності, в ароматичних амінах – інтенсивне поглинання в інтервалі 1340 – 1260 см^{-1} .

Нітросполуки характеризуються двома інтенсивними смугами поглинання асиметричних і симетричних валентних коливань NO_2^- груп. Для аліфатичних нітросполук ці смуги поглинання знаходяться від 1565 до 1545 і від 1385 до 1360 см^{-1} . При сполученні частоти коливань NO_2^- груп знижуються, для ароматичних нітросполук вони спостерігаються в інтервалі від 1550 до 1510 і від 1360 до 1300 см^{-1} . Ароматичні нітросполуки характеризуються інтенсивною смугою валентних коливань C–N в інтервалі від 870 до 840 см^{-1} (рис.20).

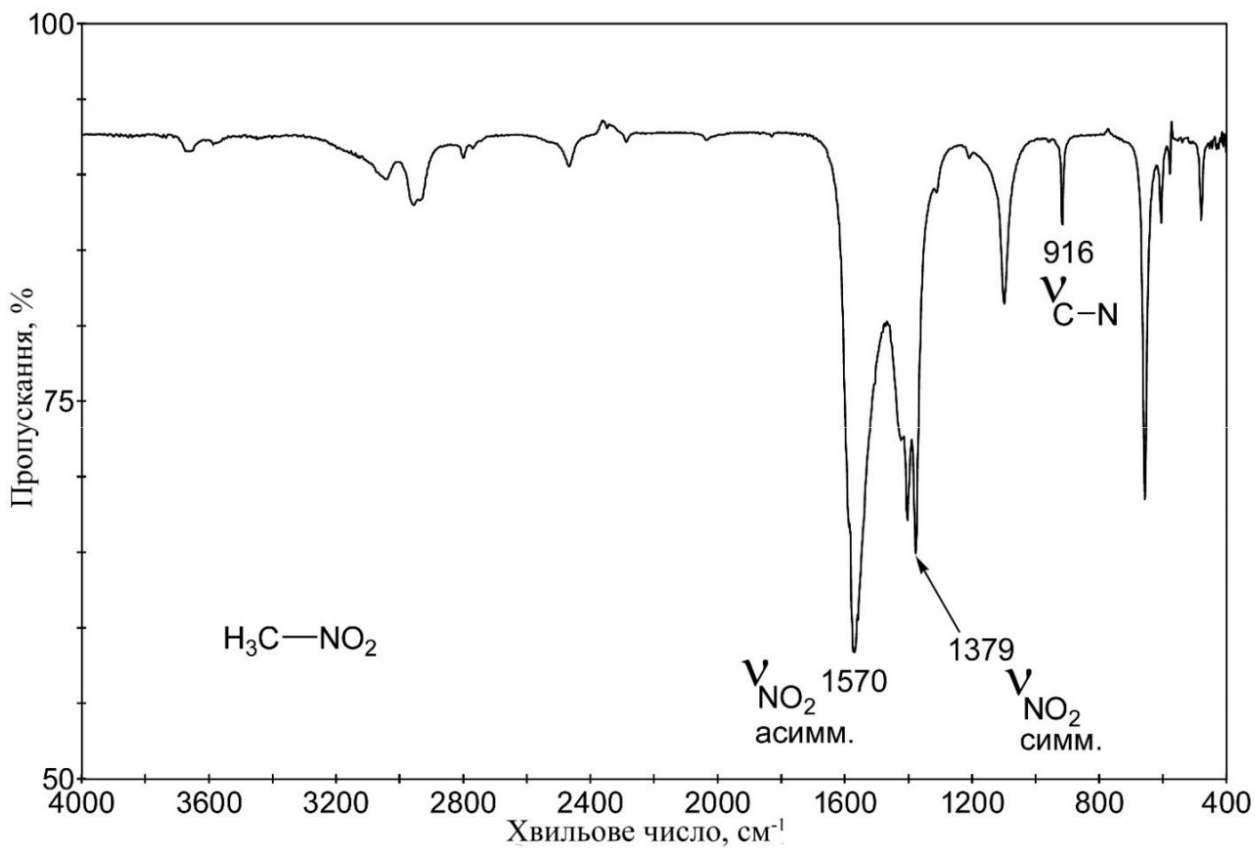


Рис.19. ІЧ-спектри Нітрогену

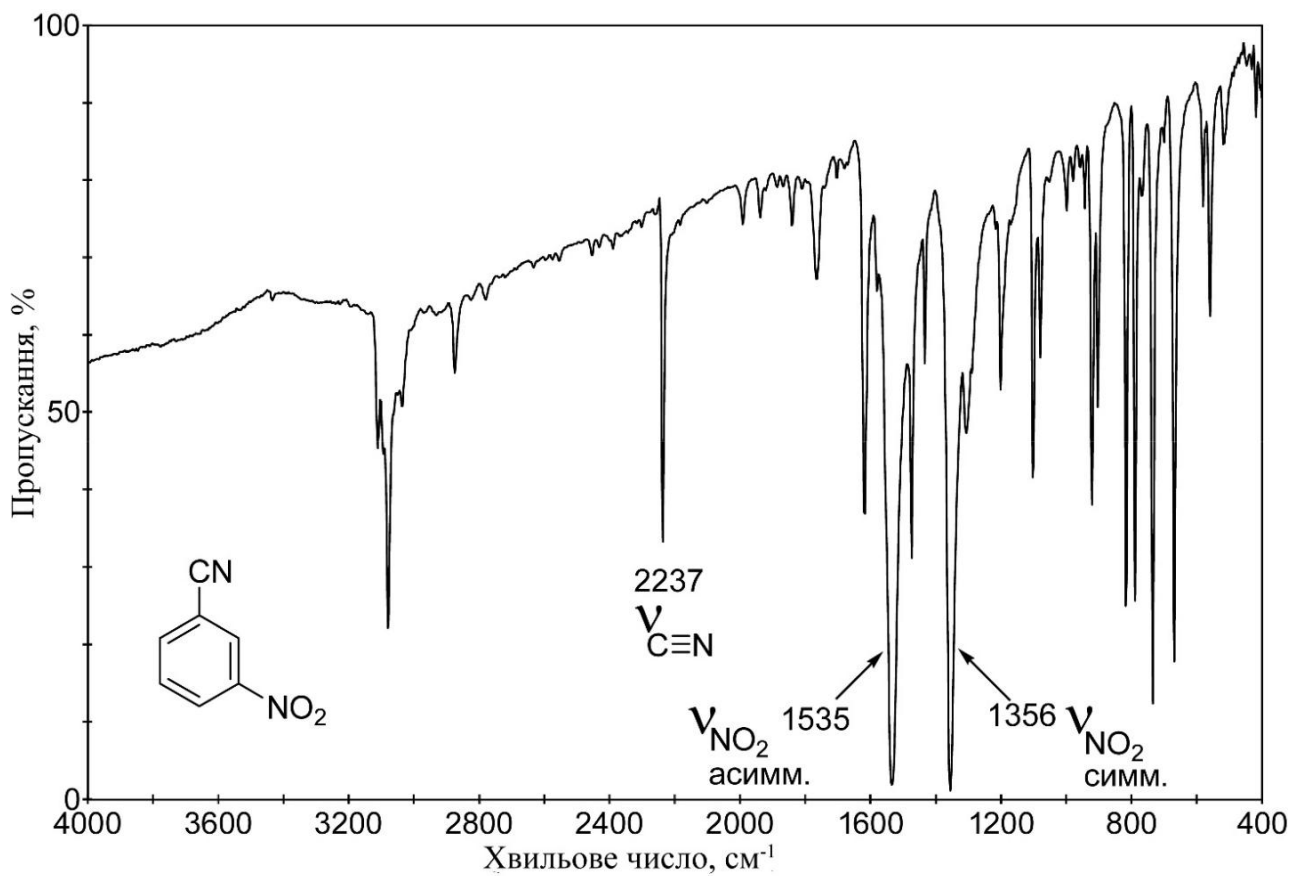


Рис.20. ІЧ-спектр ароматичного нітропохідного

6. Сфера застосування

ІЧ-спектроскопія знайшла застосування у різних галузях науки та техніки.

Сфери використання ІЧ-спектроскопії:

- якісний аналіз. Визначення функціональних груп сполук: C=O, OH, NH₂, тощо;
- кількісний аналіз сумішей речовин;
- дослідження міжмолекулярних взаємодій: водневих зв'язків, донорно-акцепторної взаємодії;
- вивчення кінетики хімічних реакцій;
- характеристика інтермедіатів хімічних реакцій.

ІЧ-спектроскопія залишається неперевершеним методом ідентифікації і дослідження будови органічних і деяких неорганічних сполук. В аналітичній хімії ІЧ-спектроскопія є зручним методом визначення якості речовин, наприклад смол, продуктів органічного синтезу компонентів в сумішах. В органічній хімії ІЧ-спектроскопія є використовується найчастіше завдяки її універсальності, можливості прямого та незалежного визначення низки важливих функціональних груп і структурних фрагментів у невеликих кількостях досліджуваної речовини, у будь якому її агрегатному стані та без будь яких суттєвих обмежень фізико-хімічних властивостей. методом ідентифікації органічних сполук.

За ІЧ-спектрами можна встановлювати склад різних сумішей органічних речовин. Так, метод широко застосовують при дослідженні органічних компонентів ґрунтів, з яких більшу частину становлять гумусові кислоти – азотовмісні оксикарбонові кислоти.

Використання ІЧС дозволяє легко ідентифікувати індивідуальні полімери, їх суміші і співполімери. Для цього порівнюють знятий ІЧ-спектр зразка аналізованого полімерного матеріалу з еталонними спектрами передбачуваних полімерів або співполімерів. Якщо в атласі еталонних спектрів не буде знайдено ідентичний спектр, то роблять віднесення смуг поглинання аналізованого зразка за допомогою таблиці характеристичних частот. Співставлення цієї інформації з фізико-хімічними властивостями дозволяє однозначно ідентифікувати невідомий полімер.

ІЧ-аналізатори широко використовуються для аналізу газів. Дві ідентичні газові кювети – вимірювальну і кювету порівняння – опромінюють пульсуючими потоками ІЧ-випромінювання однакової інтенсивності. Пульсацію потоків здійснюють за допомогою механічного переривача, що обертається. Кювету порівняння заповнюють газом, який не поглинає в ІЧ-

області (зазвичай азот). Пневматичний детектор складається із двох камер, розділених мембраною. Мембрана одночасно є одним з електродів конденсатора. Камери заповнюють чистим газом-аналітом, наприклад, СО. Пульсуюче випромінювання поглинається газом, який знаходиться в камерах. Це призводить до підвищення температури і, відповідно, періодичних коливань мембрани. Якщо інтенсивності світлових потоків, що падають на обидві камери, різняться, мембрана зміщується відносно нейтрального положення. Це призводить до зміни ємності конденсатора, яка пропорційна величині поглинання.

Якісний і кількісний аналізи не вичерпують всіх можливих використань методу ІЧС. Цей метод широко використовується для дослідження структури неорганічних комплексів, міжмолекулярних водневих зв'язків, симетрії молекул, ступеню полярності, кислотності та основності органічних сполук, і також для вивчення взаємодії між розчинником і розчиненою речовиною.

У фізиці ІЧ-спектроскопія є методом дослідження енергетичних рівнів у напівпровідниках, а також для визначення міжатомних відстаней у молекулах.

У біології спектроскопія є методом вивчення транспортування біологічно-активних речовин до жирової клітини.

Цей метод є додатковою інформацією під час розшифрування структури кристалів.