

# Инфракрасная спектроскопия

**Инфракрасная спектроскопия** (*колебательная спектроскопия, средняя инфракрасная спектроскопия, ИК-спектроскопия, ИКС*) — раздел спектроскопии, изучающий взаимодействие инфракрасного излучения с веществами.

При пропускании инфракрасного излучения через вещество происходит возбуждение колебательных движений молекул или их отдельных фрагментов.

При этом наблюдается ослабление интенсивности света, прошедшего через образец. Однако поглощение происходит не во всём спектре падающего излучения, а лишь при тех длинах волн, энергия которых соответствует энергиям возбуждения колебаний в изучаемых молекулах. Следовательно, длины волн (или частоты), при которых наблюдается максимальное поглощение ИК-излучения, могут свидетельствовать о наличии в молекулах образца тех или иных функциональных групп и других фрагментов, что широко используется в различных областях химии для установления структуры соединений.

# Диапазон ИК-излучения



Полная энергия молекулы складывается из электронной, колебательной и вращательной:  $E_{пол} = E_e + E_{вр} + E_{кол}$ .

Средний ИК-диапазон (2-10 мкм) часто называется диапазоном «отпечатков пальцев молекул» из-за наличия в нем большого количества колебательно – вращательных переходов различных молекул, встречающихся в атмосфере, тканях

человеческого тела и т.д. По этой причине спектральный анализ излучения в среднем ИК - диапазоне является широко востребованными в различных научных,

Вращательным спектрам соответствует энергия перехода порядка  $10^{-2}$ - $10^{-3}$  ккал/моль, что соответствует далекой инфракрасной и микроволновых областях. Колебательные спектры связаны с изменением колебательной энергии и для большинства молекул проявляются в средней и ближней инфракрасной областях (1 - 40 мк).

Соответственно, энергия переходов сост. 1-10 ккал/моль. Колебательные уровни между которыми происходят переходы, принадлежат основному электронному состоянию.

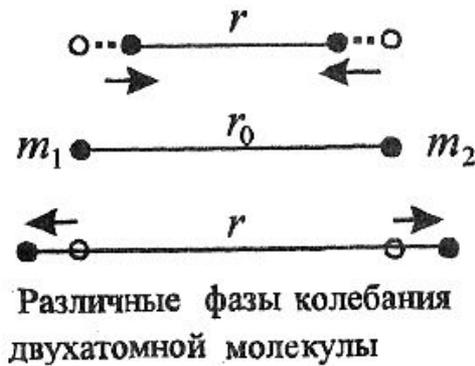
Электронные спектры возникают в результате переходов между электронными состояниями и наблюдаются в ультрафиолетовой, видимой и ближней инфракрасной областях (120-1000 нм).

Энергия переходов составляет более 100 ккал/моль. При поглощении такой энергии одновременно происходит изменение в колебательных и вращательных состояниях. Поэтому электронные спектры состоят из широких полос, на которых иногда видна колебательная структура. Последняя принадлежит колебательным переходам в возбужденном электронном состоянии.

Инфракрасная область спектра подразделяется на несколько диапазонов согласно применяемым оптическим материалам:

- 1. Область 0,8 – 2 мк** – ближняя инфракрасная область. **Оптика** – стекло или кварц. **Источники излучения** – лампа накаливания и тепловые источники. Приемники излучения – на основе датчиков фотосопротивления, термоэлементы и болометры (приемник теплового излучения).
- 2. Область 2 - 40 мк** – фундаментальная инфракрасная область. Используется солевая оптика: LiF (до 6 мк); CaF<sub>2</sub> (до 9 мк); NaCl (до 15 мк); KBr (до 27 мк); CsY (до 40 мк). **Источником излучения** служат силовые стрержни, **приемником излучения** – термоэлементы, болометры, оптико - акустические приемники.
- 3. Область до 200 мк** – далекая инфракрасная область. Исследуется при помощи дифракционных решеток. Свое развитие метод приобрел лишь в последние годы. Дифракционные решетки могут быть использованы по всему диапазону оптических спектров. Для разных областей применяются решетки с различным количеством штрихов на 1 см: 2000 - 12000 шт/см. Видимая область – 1000 шт/см. Для далекой инфракрасной области от 80 до 300 шт/см.

# ИК – спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния



Колебаниям двухатомной молекулы соответствует дискретный набор состояний и соответствующих им энергетических уровней. Для решения задачи о происхождении колебательного спектра двухатомной молекулы необходимо знать зависимость ее потенциальной энергии от межъядерного расстояния.

В приближении гармонического осциллятора, когда сила  $F$ , возвращающая ядра в положение равновесия  $r_0$ , пропорциональна смещению их из положения равновесия  $(r - r_0)$  и направлена в сторону, противоположную смещению, т. е.

$$F = -K(r - r_0)$$

Потенциальная энергия двухатомной молекулы  $U$  описывается параболой:

где  $K$  — силовая постоянная, или константа упругости связи. Этой функции отвечает набор эквидистантных (равноотстоящих) колебательных уровней:

$$E_v = h\nu_0 \left( v + \frac{1}{2} \right)$$

где  $E_v$  — энергия колебательного уровня;  $\nu_0$  — частота колебания гармонического осциллятора;  $v = 0, 1, 2, \dots$  — *колебательное квантовое число*.

Для гармонического осциллятора разрешены лишь переходы между соседними колебательными уровнями:  $\Delta v = \pm 1$ . Поэтому его спектр состоит всего из одной полосы с частотой  $\nu_0$ , которая зависит от силовой постоянной связи  $K$  и приведенной массы  $\mu$ :

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{\mu}},$$

где  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ ;  $m_1$  и  $m_2$  — массы ядер.

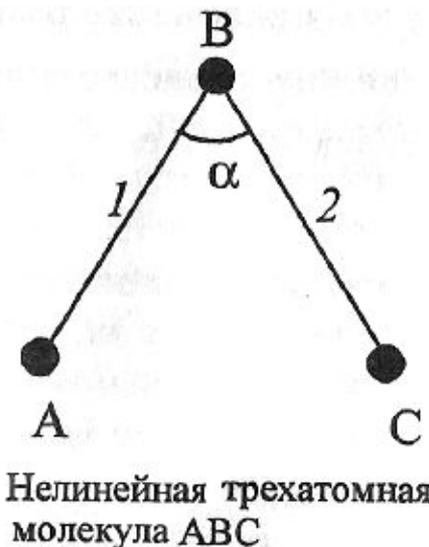
Силовая постоянная является важнейшей характеристикой химической связи. В табл. приведены значения силовых постоянных и энергии диссоциации некоторых двухатомных молекул. Из таблицы видно, что с увеличением энергии химической связи ее силовая постоянная возрастает.

### **Силовые постоянные и энергии диссоциации некоторых двухатомных молекул**

Молекула	$K \cdot 10^{-2}$ , Н/м	$D$ , кДж/моль
HF	8,8	568,6
HCl	4,8	427,9
HBr	3,8	362,9
HI	2,9	294,7
CO	18,7	1070,9
NO	15,5	637,6

В многоатомной молекуле все ядра совершают сложные колебательные движения. Потенциальную энергию такой молекулы приближенно можно представить в виде суммы потенциальных энергий связей и валентных углов и в гармоническом приближении описать набором силовых постоянных, характеризующих жесткость связей, валентных углов и учитывающих их взаимодействие.

Например, нелинейную трехатомную молекулу ABC (рис.) можно описать набором из шести силовых постоянных: связей 1 и 2, валентного угла  $\alpha$  (или деформационной силовой постоянной), взаимодействия связей 1 и 2, взаимодействия связей 1 и 2 с



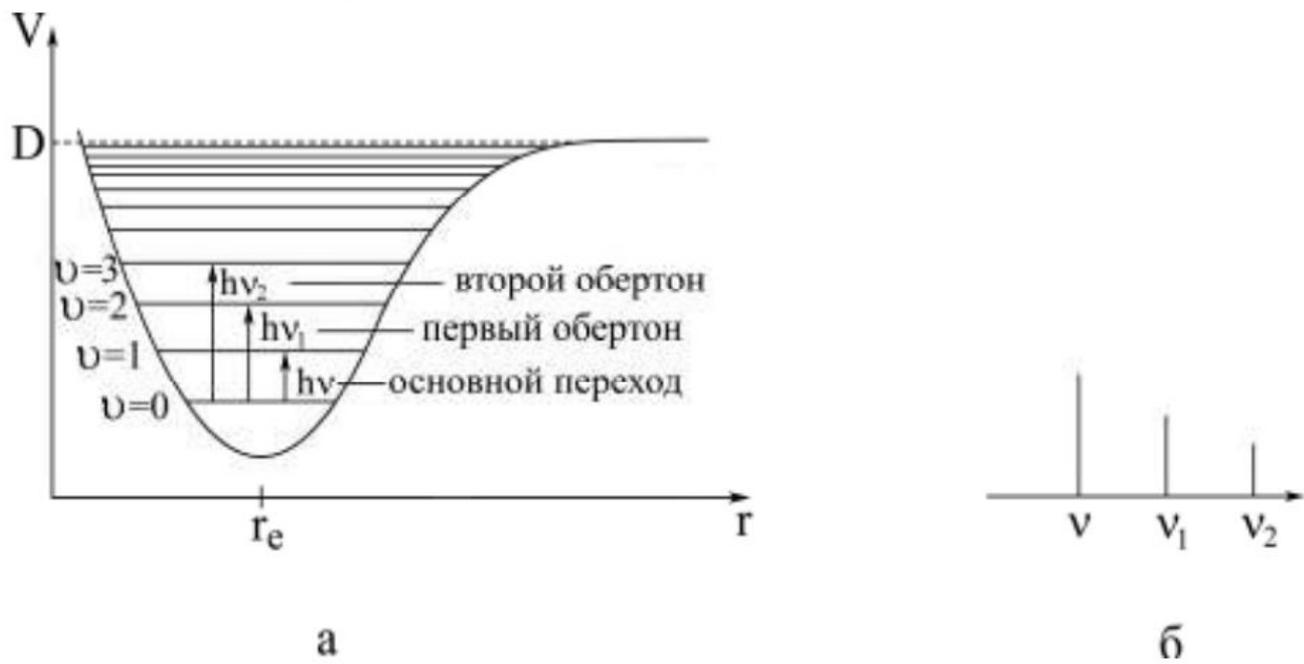
Эта позволяет сложное колебательное движение многоатомной молекулы представить в виде суперпозиции так называемых нормальных колебаний, при которых все ядра молекулы колеблются с одинаковой частотой и фазой, а ее центр масс остается неизменным.

Число нормальных колебаний соответствует числу колебательных степеней свободы в молекуле. У  $N$ - атомной нелинейной молекулы имеется  $(3N-6)$  колебательных степеней свободы, а у линейной —  $(3N-5)$ . Энергия каждого нормального колебания квантована и выражается формулой, отвечающей энергии гармонического осциллятора, а полная колебательная энергия многоатомной молекулы (равна сумме энергий ее нормальных колебаний):

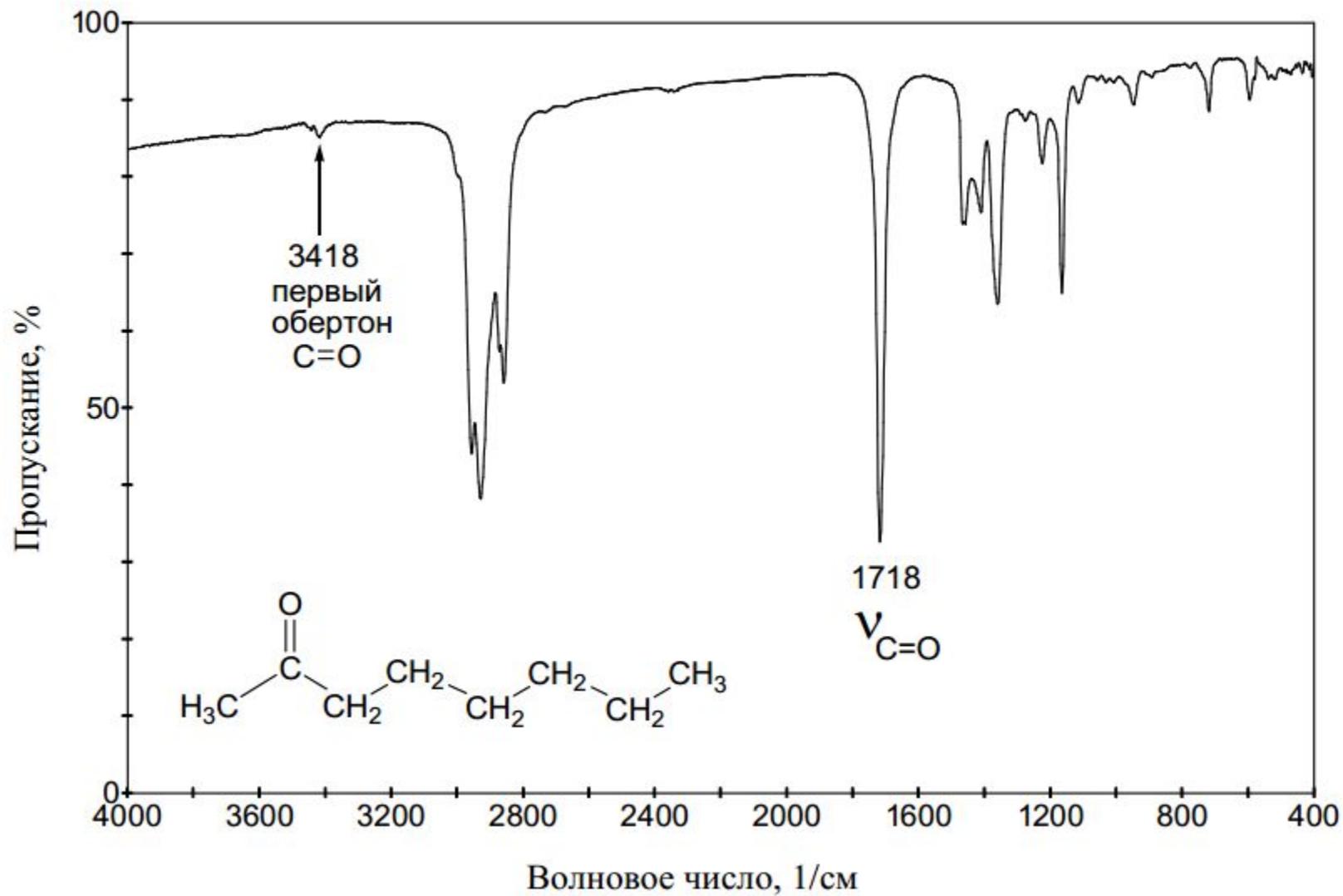
$$E = \sum_{i=1}^{\rho} E_i = h \sum_{i=1}^{\rho} \nu_{0i} \left( \nu_i + \frac{1}{2} \right),$$

где  $E_i$  и  $\nu_{0i}$  — энергия и частота  $i$ -го нормального колебания;  $\rho$  — число нормальных колебаний. Согласно правилу отбора в колебательном спектре многоатомной молекулы должны проявляться лишь частоты нормальных колебаний  $\nu_{0i}$ , отвечающие переходам  $\Delta \nu_i = \pm 1$ .

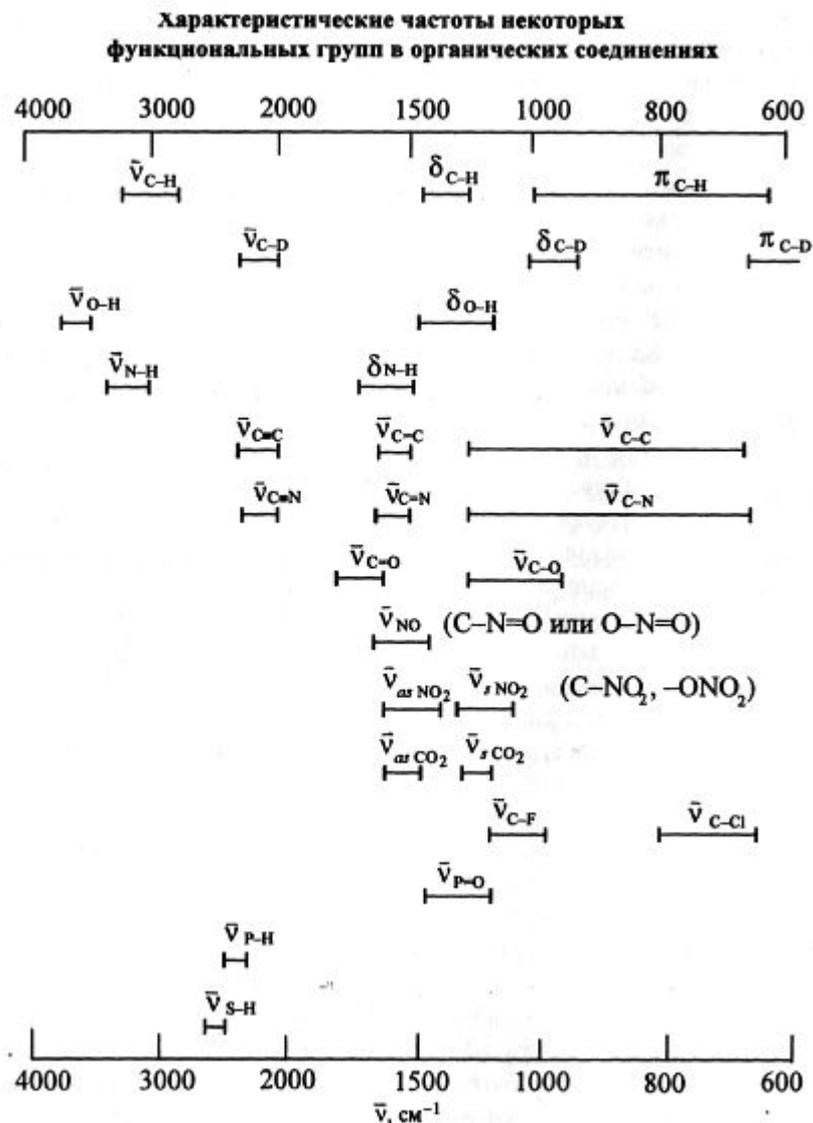
Рассматривая колебания молекул, мы ограничились гармоническим приближением. Реальные колебания в большей или меньшей степени ангармоничны, т. е. не отвечают уравнению. Вследствие ангармоничности в колебательном спектре двухатомной молекулы помимо полосы с частотой  $\nu_0$ , называемой основной, или фундаментальной, появляются полосы обертонов:  $\sim 2\nu_0$  (первый обертон),  $\sim 3\nu_0$  (второй обертон) и т. д., а в спектре многоатомной молекулы в месте с полосами нормальных колебаний  $\nu_{01}$  и их обертонов ( $\sim 2\nu_{01}$ ,  $\sim 3\nu_{01}$  и т. д.) присутствуют полосы составных частот ( $\nu_{01} \pm \nu_{01}$ ).



Кривая потенциальной энергии и уровни колебательной энергии ангармонического осциллятора (а). Схематический колебательный спектр ангармонического осциллятора (б).



Если частота, соответствующая колебанию определенной связи, мало меняется при переходе от одной молекулы, содержащей эту связь, к другой, то такую частоту называют характеристической. Наличие в колебательном спектре характеристических частот (полос) однозначно указывает на присутствие в молекуле вещества соответствующих им связей. Концепция характеристических частот широко используется для проведения структурно-группового анализа веществ по их колебательным спектрам. Для подобного рода анализа неорганических и органических веществ существуют специальные корреляционные таблицы.

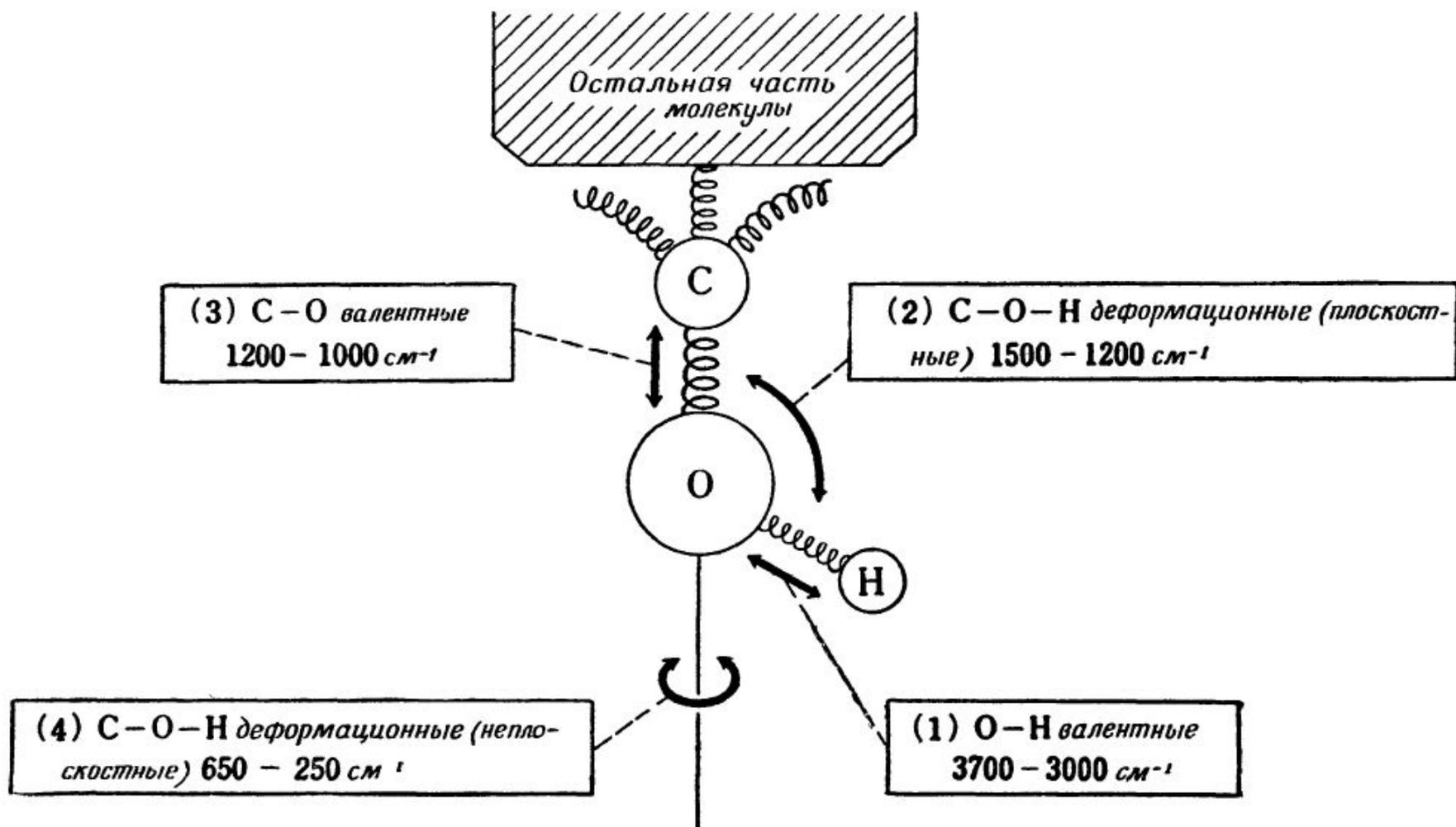


# Виды и энергия колебаний молекул

Поглощением в инфракрасной области обладают молекулы, дипольные моменты которых изменяются при возбуждении колебательных движений ядер.

Колебательные движения молекул определяются их внутренними, или колебательными, степенями свободы. Число колебательных степеней свободы и соответствующих им нормальных колебаний равно  $(3n-5)$  для линейных молекул и  $(3n-6)$  для нелинейных молекул, где  $n$  — число атомов в молекуле. Например, молекула воды  $\text{H}_2\text{O}$  нелинейна и имеет 3 колебательные степени свободы, а линейная молекула водорода  $\text{H}_2$  — лишь одну.

Колебания молекул могут заключаться в изменении длин связей (**валентные колебания,  $\nu$** ) либо углов между связями (**деформационные колебания,  $\delta$** ). Валентные колебания могут быть **симметричными** и **антисимметричными**, а деформационные колебания подразделяются на **ножничные, маятниковые, веерные** и **крутильные**. Для более сложных молекул, в которых одна из деформационно колеблющихся частей гораздо массивнее другой, деформационные колебания чаще описывают как **плоскостные** и **внеплоскостные**. Колебания, которые заключаются в одновременном изменении нескольких длин связей или валентных углов, называются **скелетными**.

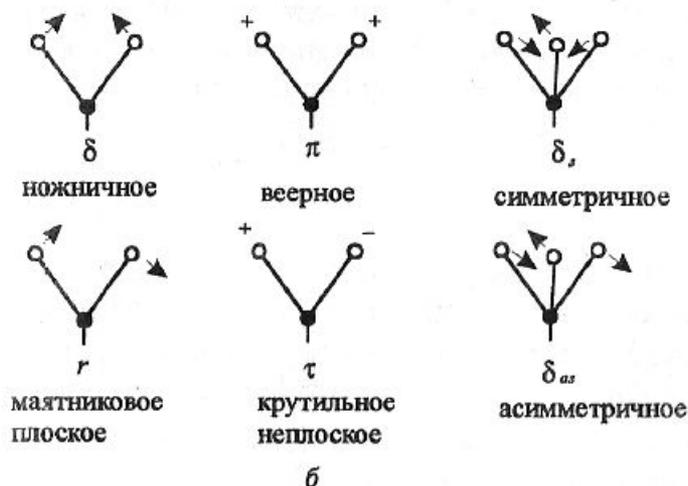
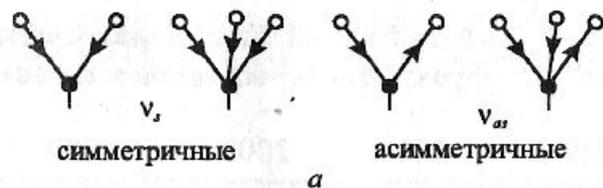
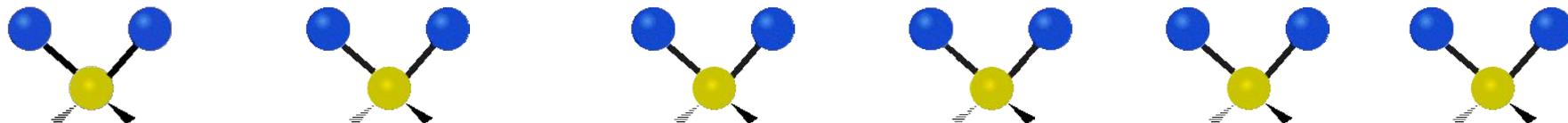


Колебания и области поглощения гидроксильной группы в спиртах

Нормальные колебания принято подразделять на валентные ( $\nu$ ), характеризующиеся движением атомов по осям связей, и деформационные ( $\delta$ ,  $\pi$ ,  $\tau$ ) при которых изменяются валентные углы, в то время как длины связей практически не меняются. Частоты валентных колебаний значительно выше (более, чем на порядок) частот деформационных колебаний. Это объясняется тем, что силовые постоянные связей в несколько раз больше деформационных силовых постоянных. У известных в настоящее время молекул частоты нормальных колебаний располагаются в инфракрасной области спектра от 4000 до  $100 \text{ см}^{-1}$ .

При нормальном колебании все ядра молекулы колеблются с одинаковой частотой и фазой, однако амплитуды их колебаний могут существенно различаться. Возможен случай, когда при данном нормальном колебании амплитуда колебаний ядер одной из связей значительно превосходит амплитуды колебаний всех остальных ядер молекулы. Тогда частоту данного нормального колебания условно приписывают (относят) колебанию именно этой связи.

Валентные колебания		Деформационные колебания			
симметрич ное	антисимметрич ное	плоскостные		внеплоскостные	
		ножничное	маятниковое	веерное	крутильное



Формы валентных (а) и деформационных (б) колебаний:

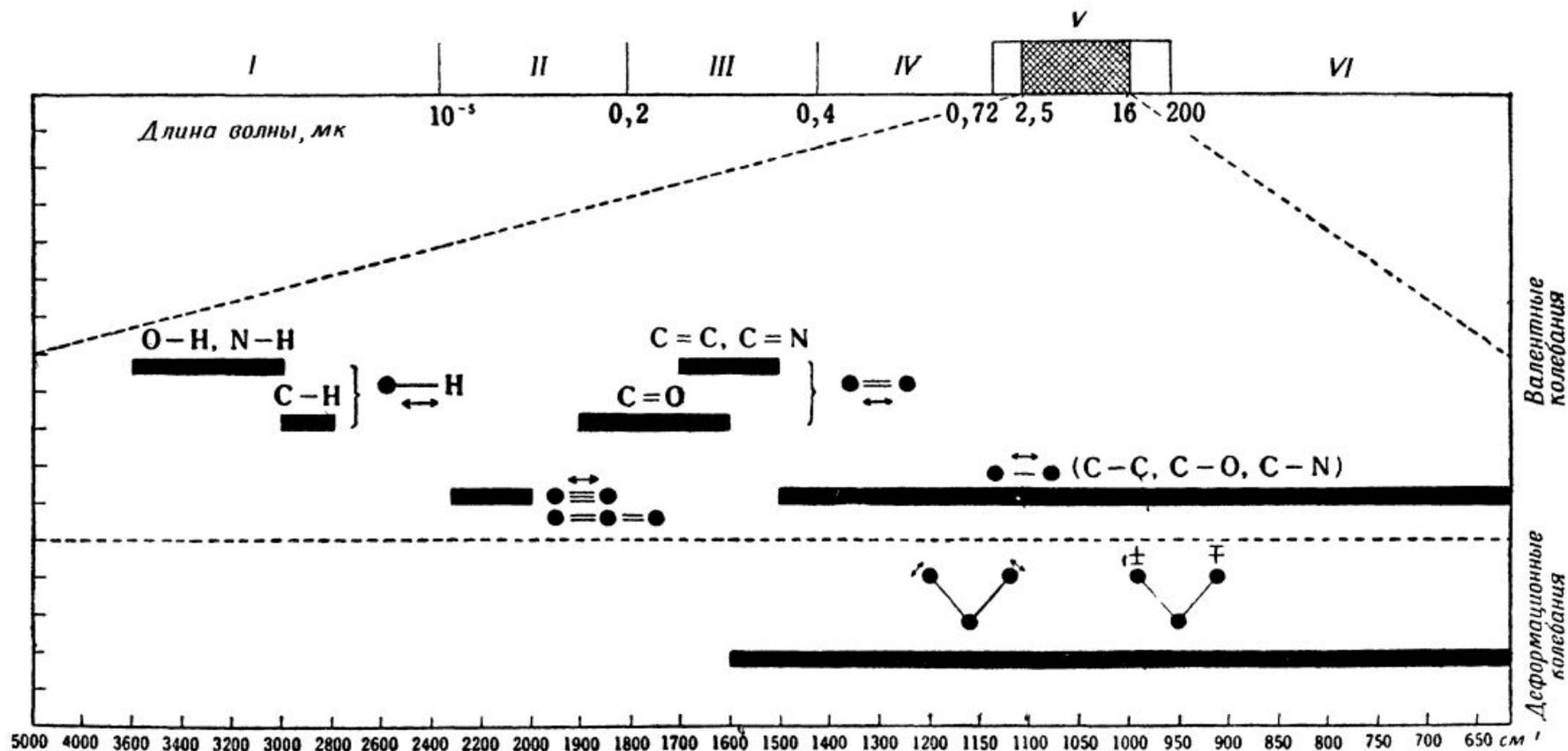
стрелками обозначены направления смещения ядер. Знаки «+» и «-» обозначают колебания в направлении, перпендикулярном плоскости рисунка («+» — к читателю, «-» — от читателя)

# Основные области инфракрасного спектра. Рекомендации по интерпретации инфракрасных спектров

**В ИК-спектрах органических соединений можно выделить три основные области:**

- 1. 4000-2500  $\text{см}^{-1}$ . Область валентных колебаний простых связей X–H: O–H, N–H, C–H, S–H.**
- 2. 2500-1500  $\text{см}^{-1}$ . Область валентных колебаний кратных связей X=Y, X $\equiv$ Y: C=C, C=O, C=N, C $\equiv$ C, C $\equiv$ N.**
- 3. 1500-500  $\text{см}^{-1}$ . Область валентных колебаний простых связей X–Y: C–C, C–N, C–O и деформационных колебаний простых связей X–H: C–H, O–H, N–H. Эта область также называется "областью отпечатков пальцев", т.к. положение и интенсивность полос поглощения в этом диапазоне сугубо индивидуальны для каждого конкретного органического соединения.**

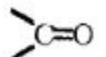
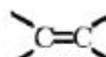
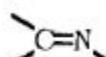
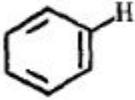
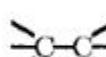
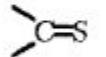
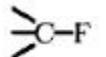
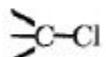
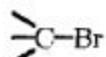
Только по полному совпадению частот и интенсивностей линий в этой области ИК-спектра можно говорить об идентичности сравниваемых объектов. При интерпретации ИК-спектров наиболее информативными являются области 2500-1500  $\text{см}^{-1}$  и 4000-2500  $\text{см}^{-1}$ . Анализ первой из них позволяет определить в структуре соединения неопредельные фрагменты: C=C, C $\equiv$ C, C=O, C=N, C $\equiv$ N, ароматические и гетероароматические ядра. Полосы поглощения в области 4000-2500  $\text{см}^{-1}$  позволяют однозначно идентифицировать такие функциональные группы как O–H, N–H, S–H, а также различные типы связей углерод–водород  $\text{Csp}_3\text{–H}$ ,  $\text{Csp}_2\text{–H}$ ,  $\text{Csp–H}$ , (O=)C–H (альдегид). Поэтому, рекомендуется начинать рассмотрение ИК-спектров именно с этих двух областей. При обнаружении в них характеристичных полос валентных колебаний определенных типов связей рекомендуется дополнительно найти полосы соответствующих деформационных колебаний в области 1500-500  $\text{см}^{-1}$  например в



Валентные и деформационные колебания в инфракрасной области спектра.

Области спектра: гамма-лучей (I), рентгеновских лучей (II); ультрафиолетовая (III); видимая (IV); инфракрасная (V), микроволновая (VI).

Характеристические частоты валентных колебаний некоторых молекулярных групп

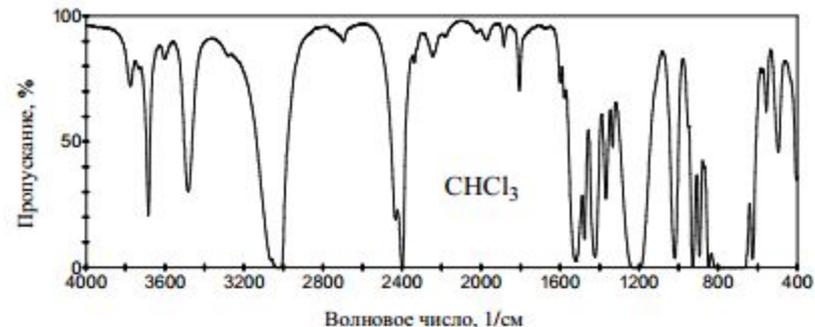
Группа	Приближенное значение частоты, см <sup>-1</sup>	Группа	Приближенное значение частоты, см <sup>-1</sup>
-OH	3600		1750-1600
-NH <sub>2</sub>	3400		1650
≡CH	3300		1600
	3060	  	1200-1000
=CH <sub>2</sub>	3030		
-CH <sub>3</sub>	2970 (асим.валент.)		
	2870 (сим.валент.)		1100
	1460 (асим.деформ.)		1050
	1375 (сим.деформ.)		725
-CH <sub>2</sub> -	2930 (асим.валент.)		650
	2860 (сим.валент.)		550
	1470 (деформ.)		
-SH	2580		
-C≡N	2250		
-C≡C-	2220		

## Практические рекомендации по регистрации инфракрасных спектров

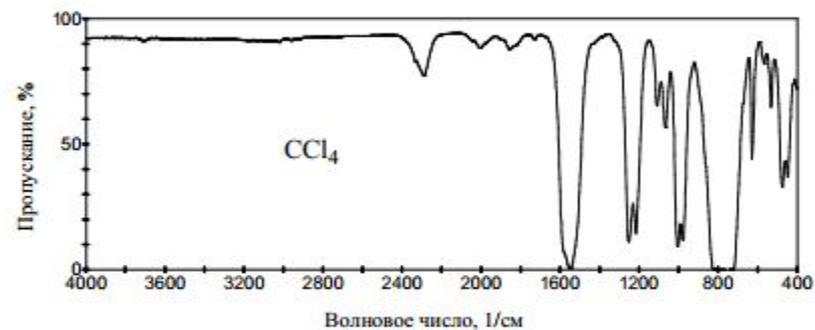
Современные спектрометры позволяют регистрировать ИК-спектры газообразных, жидких и твердых образцов. Для получения ИК-спектра органического или природного соединения необходимо всего от 1 до 10 мг вещества. Регистрация ИК-спектров осуществляется в кюветах изготовленных из бромида калия KBr или хлорида натрия NaCl – материалов, не поглощающих ИК-излучение в исследуемом диапазоне. ИК-спектры принято записывать в виде зависимости пропускания ИК-излучения (%) от волнового числа  $\nu = 1/\lambda$  ( $\text{см}^{-1}$ ).

В большинстве случаев ИК-спектры органических и природных соединений регистрируют либо в виде растворов веществ в хлороформе  $\text{CHCl}_3$ , четыреххлористом углероде  $\text{CCl}_4$ , сероуглероде  $\text{CS}_2$ , либо в виде твердых прозрачных таблеток, полученных прессованием под давлением мелко размолотой смеси вещества с бромидом калия. Иногда используют метод съемки ИК-спектра вещества в виде мелко растертой суспензии в вазелиновом или минеральном масле. В случае регистрации ИК-спектров соединений в растворах или суспензиях необходимо вычитать полосы поглощения растворителей или суспендирующей среды. При интерпретации ИК-спектров веществ, полученных в растворах в  $\text{CHCl}_3$  и  $\text{CCl}_4$ , нужно учитывать, что в зонах собственного поглощения этих растворителей отнесение линий спектра может быть неоднозначным.

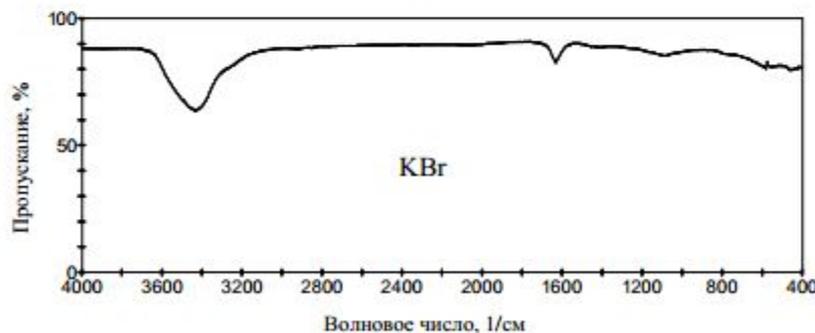
На рис. (а,б) приведены ИК-спектры  $\text{CHCl}_3$  и  $\text{CCl}_4$ . Для  $\text{CHCl}_3$  характерно интенсивное собственное поглощение в диапазонах: 3100-3000, 1250-1200, 800-650  $\text{см}^{-1}$ .  $\text{CCl}_4$  имеет поглощение в интервалах: 1560-1540, 800- 700  $\text{см}^{-1}$ . В указанных областях поглощение растворителей может маскировать полосы анализируемых веществ. На рис. (в) также приведен ИК-спектр таблетки  $\text{KBr}$ . Поглощение ИК-излучения бромидом калия начинается ниже 450  $\text{см}^{-1}$  и не маскирует поглощение органических соединений. При регистрации ИК-спектров органических и природных соединений часто наблюдаются линии поглощения примесей в образцах. Обычно это сигнал воды около 3450  $\text{см}^{-1}$ , колебания диоксида углерода (как примеси из атмосферы) при 2360-2325  $\text{см}^{-1}$ . Иногда образцы загрязнены силиконовыми смазками, имеющими полосы при 1625  $\text{см}^{-1}$  и 1100-1000  $\text{см}^{-1}$ , или фталатами, проявляющимися в виде пика 1725  $\text{см}^{-1}$ . Следует помнить, что кюветы для ИК- спектроскопии, изготовленные из  $\text{KBr}$  и  $\text{NaCl}$ , чувствительны к воздействию следов воды и со временем мутнеют и выходят из строя. Поэтому, необходимо тщательно сушить образцы и растворители перед



а



б



в

ИК-спектры  $\text{CHCl}_3$  (а),  $\text{CCl}_4$  (б), зарегистрированные в кювете толщиной 1мм, и ИК-спектр таблетки  $\text{KBr}$  (в). Все спектры сняты относительно воздуха.

# Принцип работы спектральных приборов

Разложение излучения сложного состава осуществляется двумя методами. Первый метод - **пространственное разделение спектра**, или селективная фильтрация, второй — **селективная модуляция**. Несмотря на принципиальное различие обоих методов, можно представить работу спектрального прибора следующим образом. Пусть имеется исследуемое спектральное распределение (рис. а), описываемое функцией  $f(\lambda)$ . Спектральный прибор, разлагающий и регистрирующий это распределение, можно характеризовать некоторой функцией  $g(\lambda - \lambda_i)$ , которая описывает способность спектрального прибора выделять узкие участки спектра с шириной  $\delta\lambda$  (рис. б) и называется аппаратной функцией или функцией пропускания спектрального прибора. Из понятия аппаратной функции ясно, что чем меньше ее ширина, тем точнее будет измерена спектральная линия или полоса и

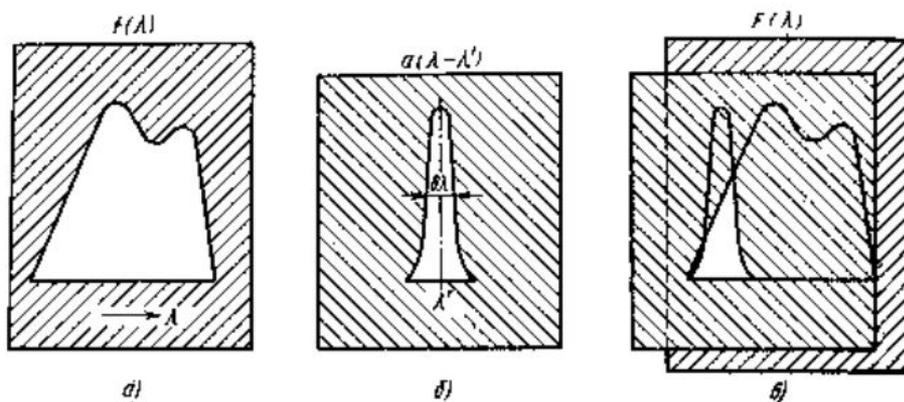


Иллюстрация принципа работы спектрального прибора

Наблюдаемое распределение энергии излучения источника  $F(\lambda)$  будет описываться некоторой функцией:

$$F(\lambda) = \int_0^{\infty} f_u(\lambda_i) f_a(\lambda - \lambda_i) d\lambda_i.$$

Процесс измерения спектров сводится к следующему. Исследуемое излучение со спектральным распределением  $F(\lambda)$  направляется на спектральный селективный фильтр или спектральный селективный модулятор. В первом случае селективный фильтр выделяет интервал  $\delta\lambda$  в окрестности каждой  $\lambda_i$  и перестраивается во времени по закону  $\lambda_i(t)$ . Это называется сканированием спектра. На приемник приходят спектральные компоненты ( $\delta\lambda$ ). Электрический сигнал регистрирующего устройства дает функцию  $F(t)$  или  $F(\lambda)$ , т.е. наблюдаемый спектр (рис. в).

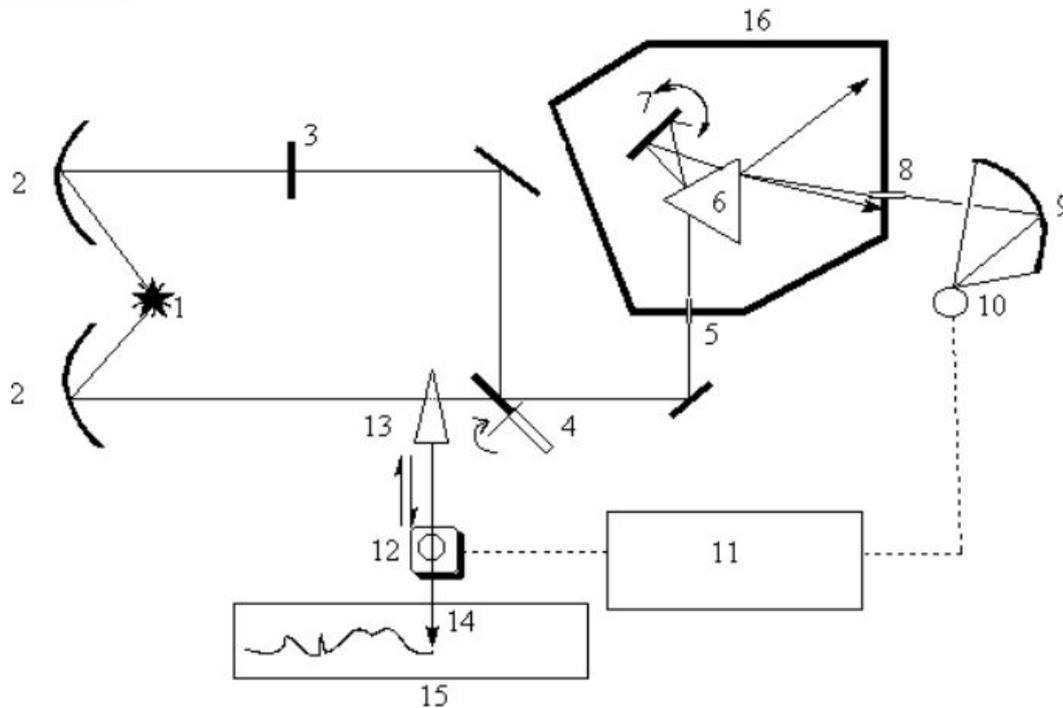
Во втором случае, т.е. в случае со спектральной селективной модуляцией на фотоприемник одновременно приходит излучение на многих длинах волн  $\lambda_i$ . Это излучение модулируется разными частотами  $f_i$  (для каждой  $\lambda_i$  своя  $f_{\text{модул.}}$ ). На фотоприемнике потоки  $\Phi_i$  складываются и образуют сложный электрический сигнал. Спектр электрического сигнала несет информацию о спектре исследуемого излучения.

# Устройство и принцип работы ИК спектрометров

## спектрометров

Для лучшего понимания основ спектроскопии, несмотря на фактический отказ от использования двух лучевых ИК спектрометров в современной практике, ознакомление с устройством этих приборов необходимо.

Оптическая схема двух лучевого ИК спектрометра приведена на рисунке.



*Рис. 4.* Схема двухлучевого ИК спектрометра.

1. Источник излучения.
2. Фокусирующие зеркала.
3. Образец.
4. Вращающееся секторное зеркало.
5. Входная щель монохроматора.
6. Призма из монокристалла (NaCl, LiF, KBr).
7. Зеркало Литтрова.
8. Выходная щель монохроматора.
9. Фокусирующее зеркало.
10. Приемник излучения.
11. Усилитель сигнала.
12. Электродвигатель.
13. Измерительная диафрагма.
14. Перо самописца.
15. Диаграммная лента.
16. Термостатированный корпус монохроматора.

Прибор работает следующим образом. ИК-излучение от нагретого до температуры около 1200 °С стержня (Он имеет название Глобар, изготовлен из карбида кремния и нагревается за счет проходящего тока низкого напряжения) с помощью фокусирующих зеркал направляется на образец (3) и на эталон. После этого оба луча направляются на вращающееся секторное зеркало с разных сторон, так что после этого зеркала в направлении входной щели монохроматора попеременно направляется луч света от образца или эталона. Частота вращения обычно составляет около 10 герц. Входная щель вырезает узкую полосу света из падающего излучения и направляет свет на призму разлагающую излучение в спектр, изготовленную из монокристаллов галогенидов щелочных и щелочноземельных металлов. Разложенный в спектр луч отражается от зеркала, называющегося зеркалом Литтрова, и снова проходит через призму на выходную щель. Развертка спектра осуществляется за счет поворота зеркала Литтрова. Такая схема позволяет получить хорошую развертку спектра при небольших размерах прибора. Свет, прошедший через выходную щель, фокусируется на приемнике излучения, который во многих приборах представлял собой батарею миниатюрных термопар, и тем самым преобразуется в переменный электрический ток, сила которого тем больше, чем больше различие в энергии излучения попадающего на приемник после прохождения эталона и образца. Далее, слабый переменный электрический ток в усилителе преобразуется в ток большой мощности, и этот ток управляет движением электродвигателя. Усилитель селективно настроен на частоту вращения секторного зеркала и этим значительно улучшается отношение сигнал – шум. Электродвигатель перемещает градуированную измерительную диафрагму в луче сравнения до тех пор, пока интенсивность излучения от образца и от эталона не окажется одинаковой. В этом случае переменный электрический ток становится равным нулю. Измерительная диафрагма представляет собой диск с клиновидными прорезями. Положение измерительной диафрагмы связано с положением пера самописца. Степень ослабления света прямо пропорциональна углу поворота измерительной диафрагмы. Такая схема позволила устранить проблему нелинейности связи между интенсивностью ИК излучения и температуры на термопарах приемника излучения. При изготовлении спектрометра необходимо точное нахождение двух положений измерительной диафрагмы: положения соответствующего 100% прохождению света через образец и

Устройство приборов определяет и такую характеристику спектра, как разрешение.

Разрешением называется расстояние между двумя соседними пиками (полосами) при котором на приборе они записываются в виде двух максимумов. (См. рис.). Существует, критерий Релея, согласно которому два пика в спектре являются разрешенными если, полуширина каждого пика меньше, чем расстояние между максимумами.

Полуширина пика определяется расстоянием между правым и левым крылом пика при интенсивности равной половине интенсивности в максимуме (спектры должны быть представлены в шкале оптической плотности). Полуширина непосредственно связана с величиной спектральной щели спектрометра

(выходная щель). Чем шире щель, тем ниже разрешающая способность спектрометра. Но с

таким образом, щель и разрешающая способность прибора всегда сопровождается увеличением шума и средним падает отношение сигнал/шум. Поэтому, изменение ширины щели сопровождается изменением пиковой интенсивности наблюдаемых полос поглощения определяется геометрической серединой) начинает приближаться к линии излучения, часть энергии излучения начинает проходить через щель и фиксироваться приемником излучения значительно раньше, чем для узкой щели. В результате использование широкой щели сопровождается уширением измеряемой полосы поглощения и снижением ее пиковой интенсивности. Однако вся энергия излучения проходит и через узкую и широкую щель и поэтому интегральная интенсивность полосы является величиной постоянной. Большинство используемых приборов работают в диапазоне среднего ИК излучения 4000-400 см<sup>-1</sup>. Точность определения коэффициентов поглощения около 1%, отношение сигнал шум составляет 200-300:1. Время регистрации полного спектра сильно зависит от разрешающей способности прибора и обычно 30-90 минут. Однако, настройка спектрометра на фиксированную длину волны позволяет регистрировать кинетику химических процессов проходящих за 10-20 секунд.

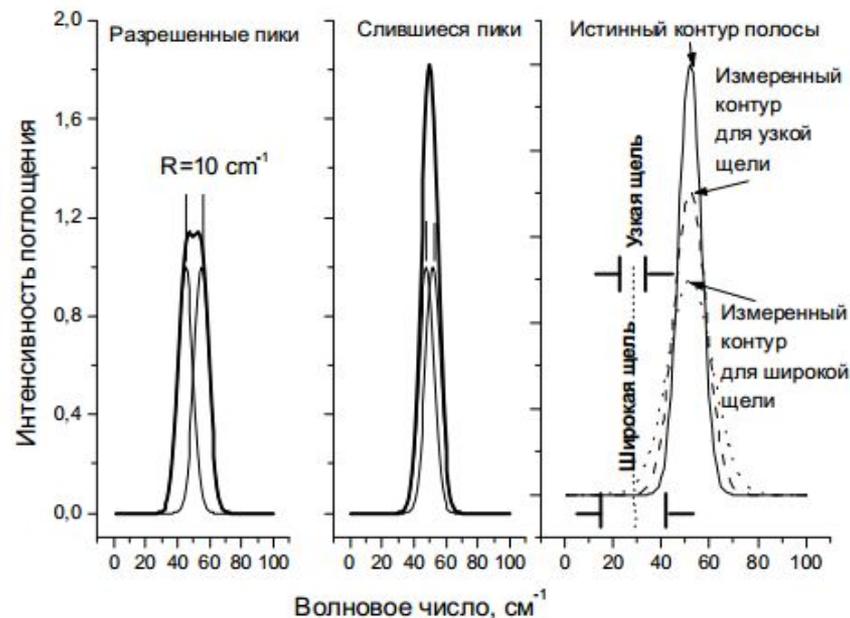


Иллюстрация понятия разрешения в оптических спектрах, снятых на двухлучевых спектрометрах.

# Фурье-ИК

## спектроскопия

Наиболее широко применяемая в настоящее время техника спектрального анализа в инфракрасной (ИК) области – Фурье-ИК спектроскопия – имеет некоторые специфические особенности, не всегда известные специалистам, привыкшим к использованию стандартных дифракционных приборов. Одна из основных причин этого заключается в том, что здесь формирование спектрального контура происходит не в результате прямой установки ширины щелей, скорости сканирования и других привычных физических параметров, а требует применения математических преобразований, таких, как Фурье-преобразование, фазовая коррекция и аподизация, которые могут затруднять понимание Фурье-ИК методики.

Устройство устаревших двухлучевых приборов позволяет легко перейти к пониманию работы современных ИК Фурье спектрометров. Для любого типа приборов необходимо наличие трех компонент – источника излучения, приемника излучения и анализатора спектра (монокроматора в двухлучевых спектрометрах и интерферометра для Фурье спектрометров). Основа работы двухлучевых спектрометров состоит в том, что с помощью призмы или дифракционной решетки свет от источника разлагается (диспергируется) в спектр и сравниваются два спектра от источника излучения один после прохождения света через эталон, а второй после прохождения света через образец. В Фурье спектрометрах спектр получают другим образом, с использованием интерферометра Майкельсона схема, которого представлена на рисунке.

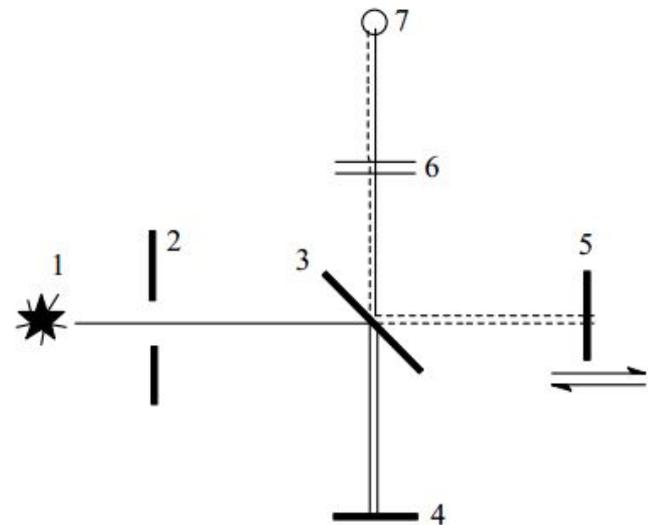


Схема Фурье ИК спектрометра.

1. Источник излучения.
2. Апертурная диафрагма.
3. Светоделитель.
4. Неподвижное зеркало.
5. Подвижное зеркало.
6. Образец.
7. Приемник излучения.

Устройство интерферометра Майкельсона существенно проще чем устройство монохроматора. Свет от источника излучения проходит через апертурную диафрагму, которая служит только для ослабления света, с тем чтобы обеспечить на детектор попадала энергия не приводящая к искажению сигнала. После этого световой пучок попадает на светоделитель, который представляет собой полупрозрачное зеркало, например, пленку кремния или германия на прозрачной для ИК излучения (например, KBr или CsI) подложке.

Далее отраженный свет попадает на неподвижное зеркало, а прошедший свет (пунктир) попадает на перемещающееся зеркало. От обоих зеркал свет отражается на светоделитель и далее, по направлению к приемнику излучения идут отраженный луч от подвижного зеркала и прошедший луч от неподвижного зеркала. Эти два луча интерферируют между собой и интерферограмма, полученная регистрацией зависимости интенсивности света попадающего на приемник излучения от положения зеркала 5, запоминается в памяти вычислительной машины. Следует отметить, что вследствие того, что свет отраженный подвижным и неподвижным зеркалами дважды «взаимодействует» со светоделителем: один раз отражается, а второй раз проходит сквозь него, при использовании одного светоделителя возможно измерения ИК спектра в широком диапазоне, не менее чем  $400-7800 \text{ см}^{-1}$ ).

Для построения обычного ИК спектра в координатах интенсивность поглощения и волновое число необходимо точное измерение перемещения зеркала 5. Во всех приборах это делается с помощью опорного лазерного луча, который падает на перемещающееся зеркало. Интерферограмма от опорного луча представляет собой синусоиду, где расстояния между максимумами точно равно длине волны лазерного излучения, обычно это около 700 нм, или 0.7 мкм. При измерении максимумов, минимумов и нулевых точек (всего 4 точки) положение зеркала измеряется через каждые 0.175 мкм. Это достаточно при измерении ИК спектра, поскольку даже в высокочастотной области длина волны ИК света составляет 2.5 мкм. Физическая основа получения ИК спектра из интерферограммы достаточно простая. Для монохроматического излучения интерферограмма представляет простую синусоиду. Для излучения состоящего из набора длин волн отдельные синусоиды суммируются в интерферограмму. Выделение отдельных синусоид из суммарного спектра полностью эквивалентно разложению именно это обстоятельство и послужило основанием для введения термина Фурье спектроскопия (FTIR). Если не разбирать математические основы Фурье преобразования, то на качественном уровне смысл этих преобразований сводится к следующему. Вправо и влево от максимальной точки интерферограммы (которая отвечает равенству расстояния подвижного и неподвижного зеркала от светоделителя) с шагом равным длине волны  $\lambda_i$  проводится суммирование (интегрирование) интенсивностей интерферограммы. Поскольку только для этой длины волны значения выделенной косинусоиды являются максимальными и положительными, а остальные длины волн вклад дают произвольный, то есть и положительный и отрицательный, в результирующую сумму дает вклад только косинусоида отвечающая величине  $\lambda_i$ , а вклады других длин волн зануляются. Такая процедура интегрирования проводится для всех длин волн с шагом равным 0,5 от заданного разрешения, которое определяется числом точек зарегистрированных в интерферограмме. Для построения спектра проводится нормировка всех найденных интегралов к 100%. Отсюда очевидно, что для повышения разрешения в Фурье спектроскопии необходимо накопление большего числа точек в интерферограмме, что можно достигнуть за счет увеличения длины хода подвижного зеркала. Теоретически, для измерения «идеального» спектра ход подвижного зеркала должен быть бесконечным. Очевидно, что это физически невозможно. Обрыв движения зеркала приводит к тому, что в рассчитанных спектрах появляются искажения, как правило, в виде появления рядом с узкими пиками отрицательных пиков или ложных пиков. Для подавления этого эффекта для расчетов спектров используются, так называемые, функции аподизации. Суть этих функций состоит в том, чтобы интенсивность интерферограммы к точкам, где начинается и заканчивается ее регистрация, была равна 0. С точки зрения устройства Фурье спектрометры более просты, чем двухлучевые спектрометры. Поскольку Фурье анализ представляет собой достаточно сложную математику, без появления доступных и быстродействующих вычислительных машин развитие Фурье спектроскопии было практически невозможно. Вычислительная машина проводит разложение интерферограммы в ряд Фурье, в котором коэффициенты разложения пропорциональны интенсивностям света попавшего на приемник излучения на разных длинах волн. Поскольку через интерферометр проходит свет большой интенсивности, то приемник излучения быстро и точно регистрирует интерферограмму и на современных приборах при разрешении около  $2-4 \text{ см}^{-1}$  один ИК спектра снимается (сканируется) приблизительно за 1-2 секунды (для лучших образцов приборов до 80 спектров за 1 сек). При этом отношение сигнал-шум для одного скана имеет величину порядка 2000-3000. В конечном итоге, при накоплении нескольких десятков спектров (сканов) за 1 минуты, может быть снят весь спектр с точностью определения коэффициента пропускания порядка 0.001-0.0001%. Фактически спектр в ЭВМ запоминается как таблица интенсивностей зарегистрированных через фиксированное значение (шаг) волнового числа. Поскольку привычный вид ИК спектра как зависимость степени ослабления света от волнового числа получается расчетным путем на ЭВМ, то спектры

## **Методики подготовки образцов и способы измерения спектров, растворов, газов, порошков и адсорбированных на них молекул**

В настоящее время в ИК спектроскопии используются различные методики измерения спектров растворов, газов, порошков и адсорбированных на них молекул и следовательно разные способы подготовки образцов для измерений. Эти методики можно разделить на три группы.

Первая группа – включает в себя наиболее старые методы – методы пропускания (Transmittance mode).

Вторая группа измерения спектров – методики НПВО или ATR (нарушенное полное внутренне отражение).

Третья группа – методики диффузного отражения (DRIFT).

Рассмотрим эти методики более подробно.

## Методики пропускания

Методика пропускания исторически является наиболее старой. При использовании этой методики образец в кювете помещают в рабочий луч спектрометра и измеряют отношение интенсивности света прошедшего через образец к интенсивности светового потока направленного на образец. При этом кювета представляет собой параллелепипед или цилиндр с плоскими передней и задней стенками для вхождения и выхода луча спектрометра перпендикулярного оси луча. Расстояние между входом луча в кювету и выходом называется оптический путь ( $l$ ) (Рис. 1). Спектр обычно представляется или в виде зависимости коэффициента пропускания, измеряемого в %, ( $T = I/I_0 \cdot 100\%$ ) или оптической плотности ( $A$ , от слова **A**bsorbance, ранее было принято обозначение  $D$ , от понятия optical **D**ensity) от волнового числа. В старой литературе в качестве абсциссы в спектрах использовали длину волны, измеренную в микронах. Переход от длины волны в шкалу волновых чисел выражается формулой  $\nu [\text{cm}^{-1}] = 10^7/\lambda[\text{нм}] = 10^4/\lambda[\text{мкм}]$ . Такой методикой можно измерять спектры газов (оптический путь для измерения спектров газов обычно изменяется от 5 до 20 см для обычных кювет и может быть увеличен до 30-50 м в многоходовых кюветах). Оптическая схема многоходовой кюветы представлена на рис. 2. Использование многоходовых кювет позволяет увеличить чувствительность газового анализа более чем в 100 раз, однако объем газовых кювет достигает 3-5 литров, что требует использования больших объемов исследуемых газов. Однако с

ПС  
НС

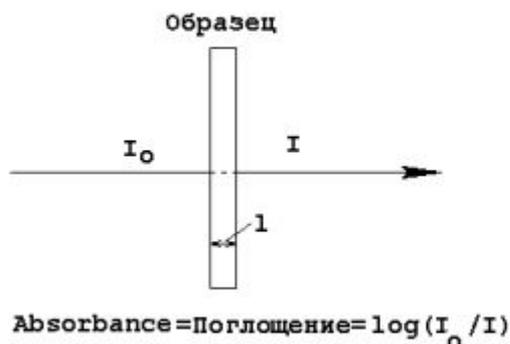


Рис. 1 Схема регистрации спектра методикой пропускания.

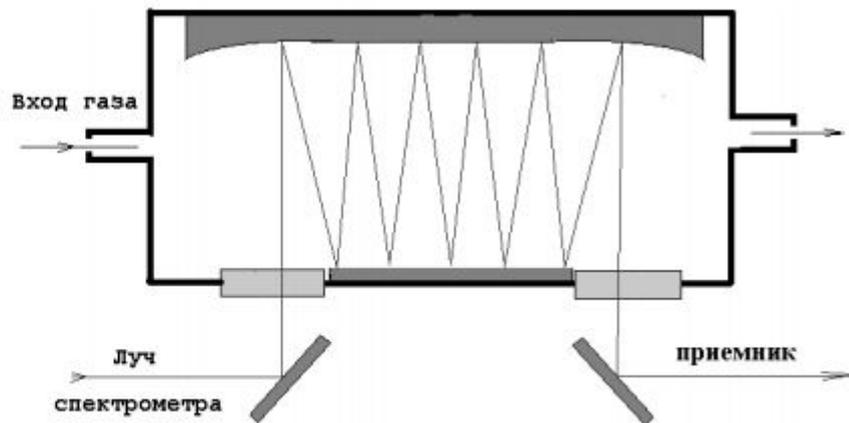
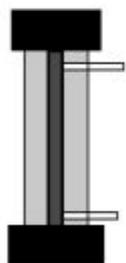
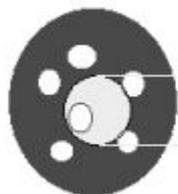


Рис. 2 Схема многоходовой газовой кюветы.

Для съемки растворов используются жидкостные кюветы с различными величинами оптического пути от 0.01 до 5 мм. При этом, для тонких кювет необходимо добиваться отсутствия газовых пузырей в растворе. Спектры твердых веществ обычно снимают в так называемых матрицах или вазелиновом масле. Под матрицей понимается кристаллическое вещество, которое не дает собственных полос поглощения в исследуемом спектральном диапазоне. Обычно вещество в количестве 2-4 мг тщательно размешивается и одновременно растирается в 400-800 мг матрицы. В качестве матрицы можно использовать NaCl, KBr или CsI. Эти вещества гигроскопичны, и поэтому перед смешиванием с исследуемым порошком их желательно осушить. Однако полностью избавиться от воды в этих матрицах невозможно. Это обстоятельство надо обязательно учитывать при изучении конкретных веществ. Так, например, наличие влаги в матрице для цеолитов приводит к частичному замещению протонов образца на ионы щелочных металлов. Нитратные группы на поверхности оксида алюминия превращаются

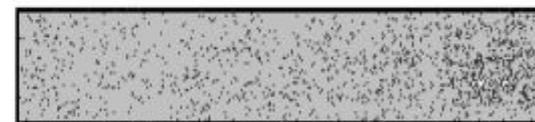
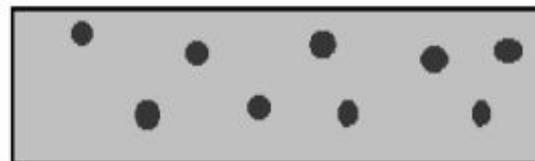


Правильно подготовленный образец



Диаметр луча

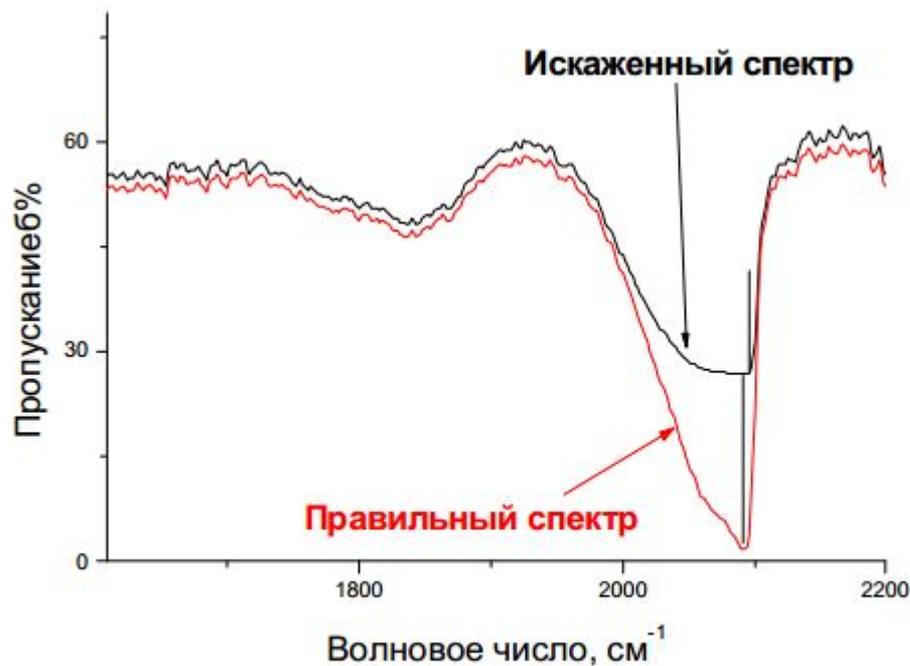
Жидкий образец с пузырями воздуха



Неправильно подготовленный образец для снятия спектра порошка (неравномерность распределения порошка)

Ошибки, допускаемые при приготовлении жидких и твердых образцов для регистрации ИК спектров.

При использовании вазелинового масла влияние влаги отсутствует, однако, спектральные области 1350-1500 и 2700-3100  $\text{см}^{-1}$  перекрыты полосами поглощения вазелинового масла. При съемке ИК спектров в области длинноволновой ИК (ниже 350  $\text{см}^{-1}$ ) в качестве матрицы используют порошки специального полиэтилена. Важно отметить, что качество приготовления образцов (прежде всего равномерность распределения исследуемого вещества в луче спектрометра) играет ключевую роль для получения качественного спектра, как при съемке спектров жидкостей, так и при съемки порошков. Неравномерности (рис.) обычно существенно искажают и форму спектральных линий и их интенсивность. Пример таких искажений приведен на рис.



Искажения ИК спектров при неправильном приготовлении образцов.

## Метод НПВО

В последнее время, с развитием ИК-Фурье спектроскопии, широкое развитие получил один из старых методов регистрации спектров – метод нарушенного полного внутреннего отражения. Суть метода иллюстрирует рис. Известно, что при некоторых небольших углах падения света на поверхность (неважно изнутри пластины или сверху) практически весь падающий свет от этой поверхности отражается. Это свойство нашло применение при изготовлении световодов. Однако, в этом процессе падающая на поверхность электромагнитная волна на расстояние приблизительно равное ее длине «выходит» за поверхность (для ИК диапазона это расстояние по порядку величины составляет около 10 микрон). Таким образом, вещество, находящееся на отражающей поверхности, начинает поглощать энергию падающего луча, что было названо нарушенным полным внутренним отражением. Распространение этого метода обусловлено тем, что для анализа не требуется какой-либо подготовки образцов. На поверхность кристалла наносится капля исследуемой жидкости или насыпается и прижимается порошок. Самый хороший материал для изготовления кристаллов это алмаз. Важным достоинством методики является возможность исследовать концентрированные растворы, а также твердые порошки без использования матрицы. Во всех случаях анализируется слой вещества составляющих величину порядка 5-10 мк, что является оптимальным для получения качественного спектра, и не требует подбирать толщину кюветы или использования матрицы.



Схема измерения спектра порошка методом НПВО.

# Метод диффузного отражения

Методики диффузного отражения нашли применение в УФ- спектроскопии. Вид спектроскопии еще в 50-х годах XX века (рис. 1). И только через 20-30 лет они, получившие название ИКС-ДО (DRIFT), начали использоваться при регистрации ИК спектров. Это было обусловлено низкой чувствительностью обычных двухлучевых спектрометров, поскольку их оптические схемы не позволяют весь отраженный свет (или значительную его долю) направить на детектор. Упрощение оптической схемы при переходе к ИК-Фурье спектрометрам в настоящее время позволило метод диффузного отражения (ИКСДО) сделать рутинным методом. Схема работы приставки диффузного отражения показана на рис. 2. Методика диффузного отражения позволяет измерять спектры порошков и пленок нанесенных на отражающие плоскости. Однако эта методика не является количественной вследствие неопределенности глубины проникновения излучения в образец, теоретически эта методика должна использоваться для бесконечного слоя исследуемого образца, что на практике сводится к толщине до 2 мм, хотя для сильно поглощающих веществ глубина анализа существенно снижается. Кроме этого, надо иметь ввиду, что для крупнокристаллических образцов, в области сильного поглощения (в области собственных колебаний кристалла) в измеренный спектр существенный вклад дает зеркальное отражение от поверхности кристаллов. Это приводит к существенному искажению спектров. Особенностью метода диффузного отражения является повышенная чувствительность к слабым полосам поглощения. Это, на качественном уровне, можно объяснить тем, что в случае слабого поглощения (мало-интенсивные линии) свет отражается от большего объема образца, чем для интенсивных полос поглощения.

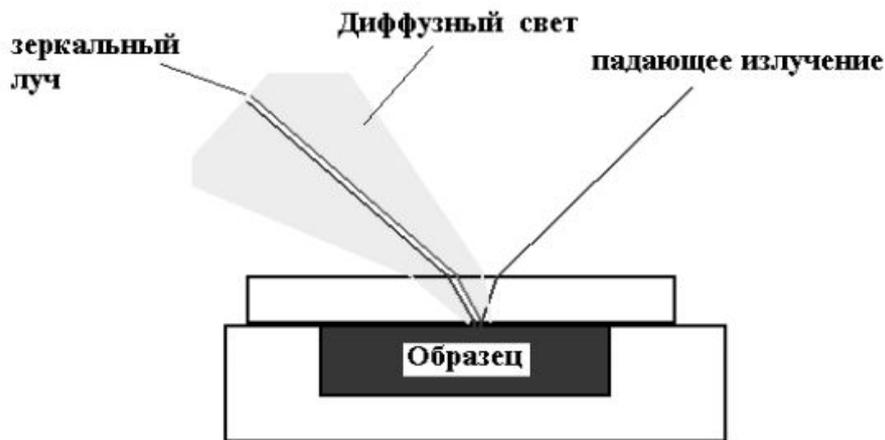


Рис. 1. Схема хода лучей для методики диффузного отражения.

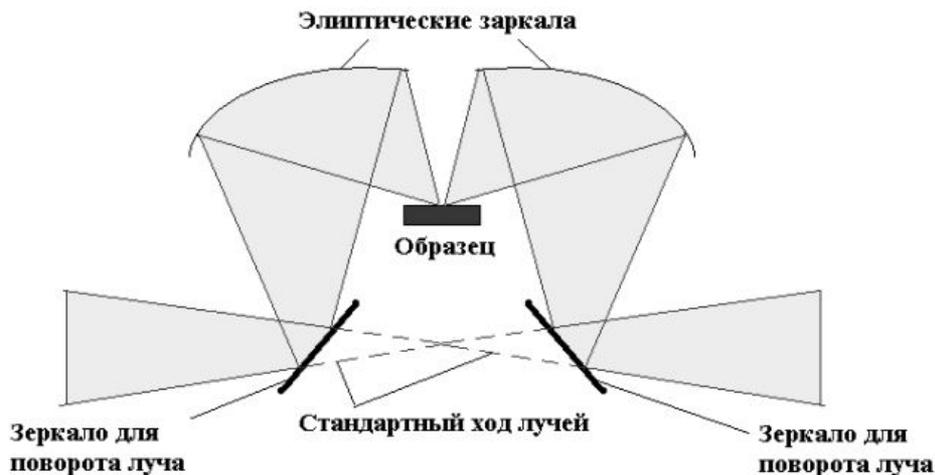


Рис. 2. Оптическая схема приставки диффузного отражения.

# Измерение спектров адсорбированных молекул

## молекул

Методики регистрации спектров адсорбированных молекул существенно отличаются от методик принятых в классической ИК спектроскопии, и описанных в известной литературе. Это обусловлено: – прежде всего тем, что исследуемые твердые образцы катализаторов перед адсорбцией необходимо очистить путем прокаливания при высоких температурах и предотвратить контакт образцов с воздухом; – во-вторых, тем, что количество атомов адсорбированных молекул в десятки и сотни раз меньше, чем число атомов в адсорбентах и следовательно спектры могут быть сняты только в области слабого поглощения адсорбентов. Для обеспечения первой особенности ИК спектроскопии адсорбированных молекул используются специальные высоковакуумные и герметичные проточные кюветы, позволяющие нагревать образцы при температурах 500-1000°С и регистрировать спектры пропускания образцов (рис. 1).

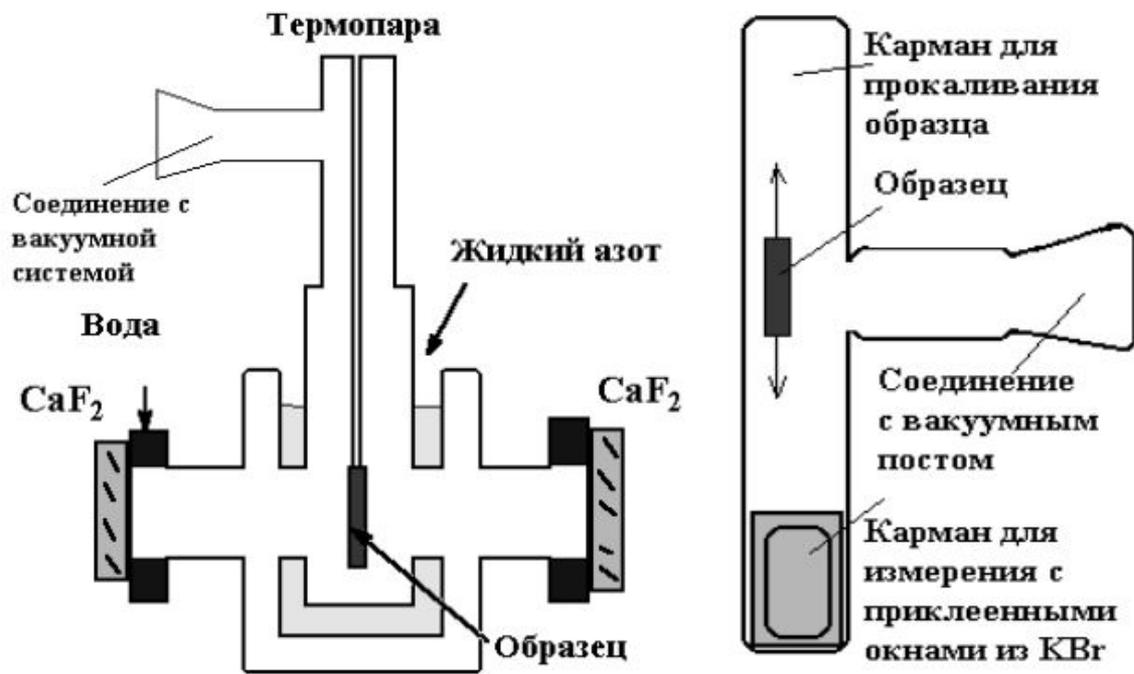
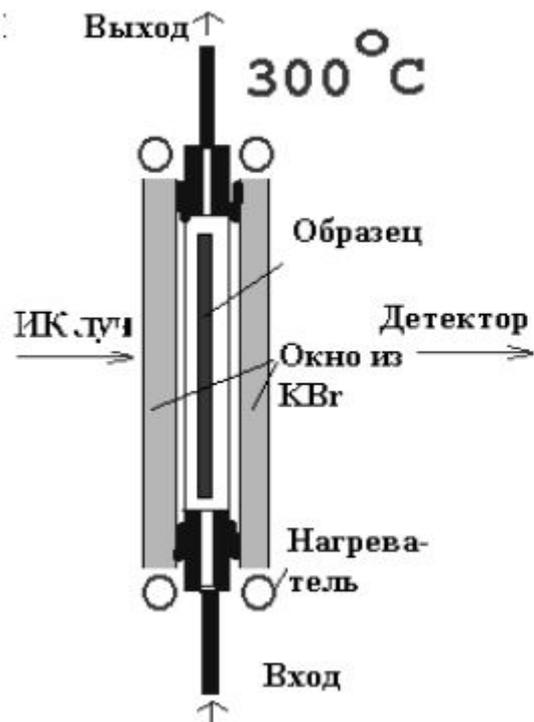


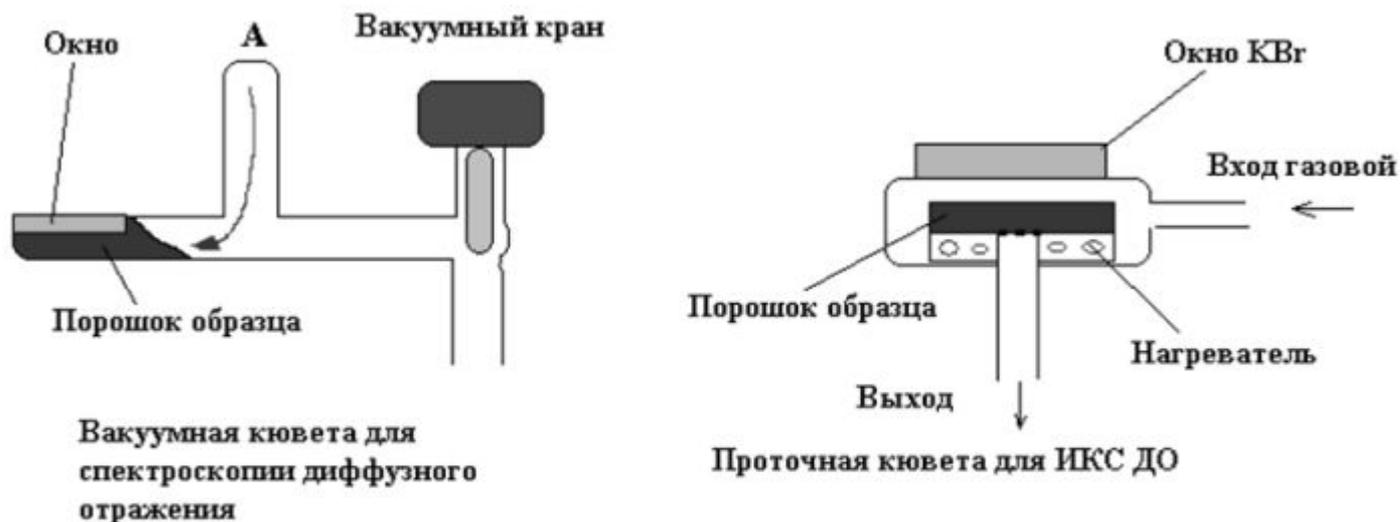
Рис. 1 Схемы кювет используемых для измерения спектров адсорбированных молекул, слева – для температур 77-773 К, справа – для температур 273-573 К с возможностью предварительного прокаливания при 1273 К.

Справа показаны простейшие кюветы которые использовали еще в середине XX века. За счет перемещения образца из одной части кювету в другую образцы могли быть прокалены при температурах до  $1000^{\circ}\text{C}$ , но измерения спектров возможны при температурах не выше  $300^{\circ}\text{C}$ , так как для соединения оптических окон из прозрачных для ИК лучей кристаллов необходимо использовать клеи (герметики), рабочая температура которых не превышает  $300^{\circ}\text{C}$ . Кювета показанная слева, позволяет измерения спектров проводить в диапазоне температуры от жидкого азота до  $500^{\circ}\text{C}$  В последнем случае вместо жидкого азота в нижнюю часть кюветы вставляются нагреватели. В литературе описаны и другие типы кювет, имеющие лишь конструкционные отличия. Для измерений спектров пропускания адсорбированных молекул в проточных условиях используются более простые конструкции кювет (рис. 2)



*Рис. 2* Схема проточной ИК кюветы для измерения спектров адсорбированных молекул.

При использовании методики диффузного отражения проблема приготовления таблеток отсутствует, при этом используются другие типы ИК кювет, показанные на рис. Для данного метода в кювету засыпается порошок исследуемого адсорбента, который прокаливается в заданных условиях. После напуска исследуемого адсорбата снимаются спектры. Если порошок засыпать в кювету, показанную слева в сухом боксе или под вакуумом, то спектры ИКСДО можно снимать без предварительной тренировки. Этот метод используется при исследовании катализаторов полимеризации не допускающих контакта образца с атмосферой.



Кюветы для измерения спектров методом диффузного отражения.

А – место прокаливания образца.

## Фурье-спектрометр Varian 660 – IR

На сегодняшний день Фурье-спектрометры выпускаются многими фирмами-производителями. Одним из лидеров в производстве высококачественных Фурье-спектрометров является компания Varian (с 2010 года Agilent Technologies). На рис.

изображен ИК Фурье-спектрометр Varian 660-IR со следующими основными характеристиками:

1. Стандартный спектральный диапазон:  $7900\text{-}375\text{ см}^{-1}$  ( $\sim 1.27\text{ – }27\text{ мкм}$ )
2. Максимальный спектральный диапазон:  $50000\text{-}20\text{ см}^{-1}$  ( $\sim 0.2\text{ – }500\text{ мкм}$ )
3. Спектральное разрешение:  $0.07\text{ см}^{-1}$
4. Соотношение сигнал/шум (peak-to-peak): 10 000:1 (при 5-секундном измерении)
5. Высокосветосильный 60-ти градусный интерферометр Майкельсона
6. Выходы внешнего пучка для присоединения выносных приставок - ТГА/ИК, Рамановской приставки, модуля, систем матричных экспериментов



Фурье-спектрометр «Varian 660-IR»

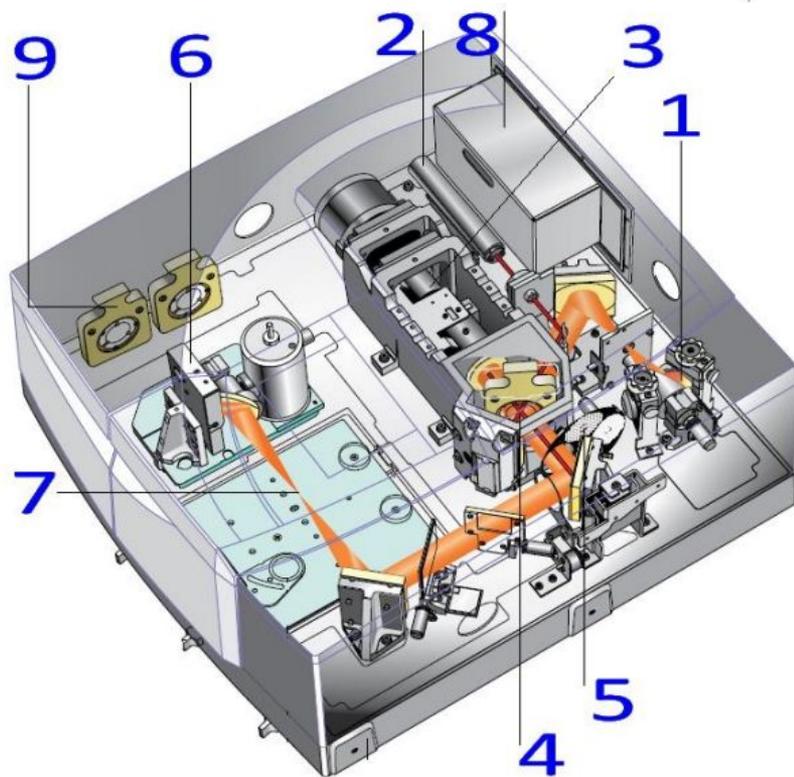
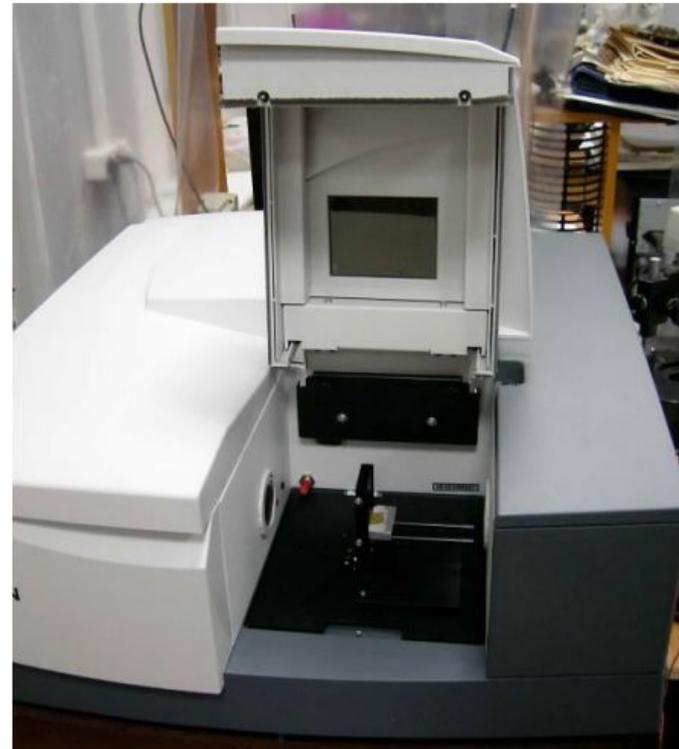
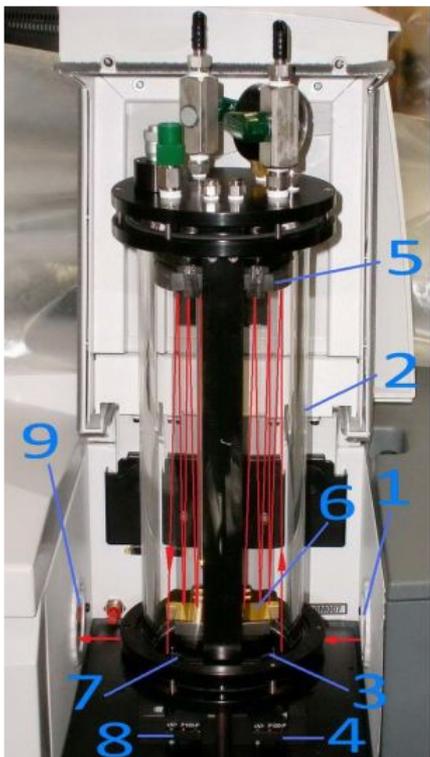


Схема ИК Фурье-спектрометра «Varian 660 - IR»



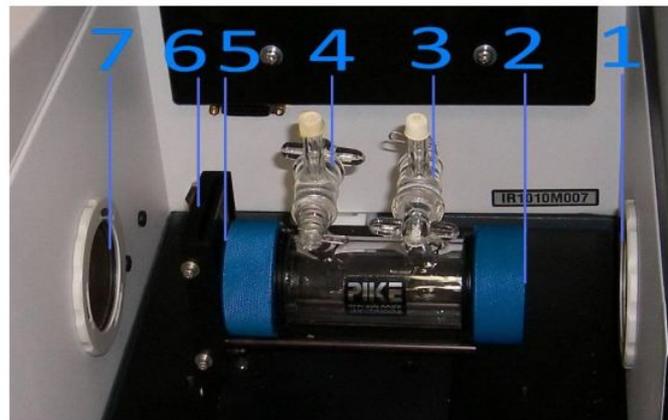
Отсек для установки исследуемых образцов

Схема (рис.) Фурье-спектрометра Varian 660-IR включает в себя: 1 – источник ИК излучения, 2 – гелий-неоновый лазер, 3 - система прецизионного перемещения подвижного зеркала, 4 – 60° интерферометр Майкельсона, 5 – attenuator с программным управлением, 6 – приемник ИК излучения, 7 – место установки исследуемого объекта, 8 – АЦП (24 bit 600 kHz Delta-Sigma), 9 – место хранения сменных светоделительных пластинок. Также присутствуют отверстия для спектрального анализа внешнего излучения.



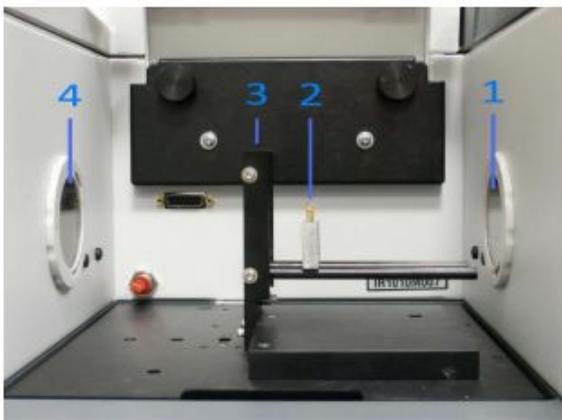
Многоходовая газовая кювета (PIKE TECHNOLOGIES).

9 – окна спектрометра, 2 – кювета, 3,7 – входное и выходное окна кюветы, 4,8 – зеркала для завода излучения, 5,6 – зеркала с золотым напылением.

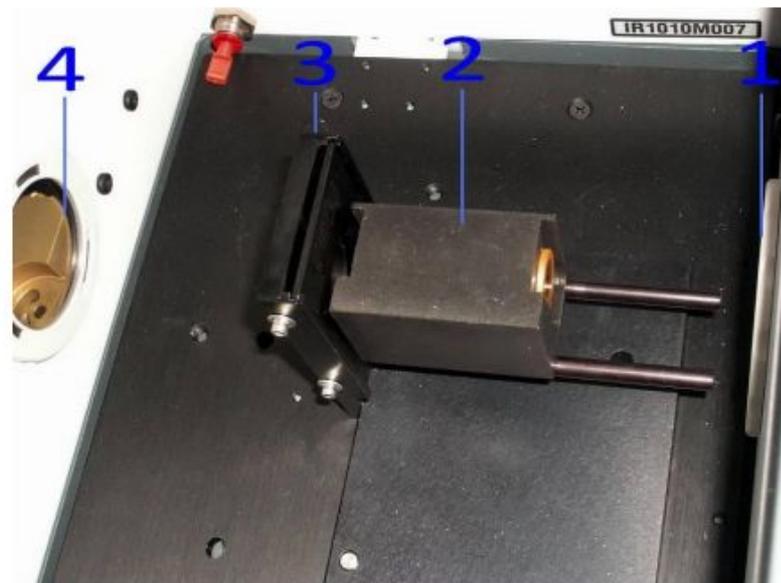


Одноходовая газовая кювета (PIKE TECHNOLOGIES) длиной 10 см.

1, 7 – окна спектрометра, 2, 5 – входное и выходное окна кюветы, 3,4 – газовые вентили, 6 – держатель кюветы.

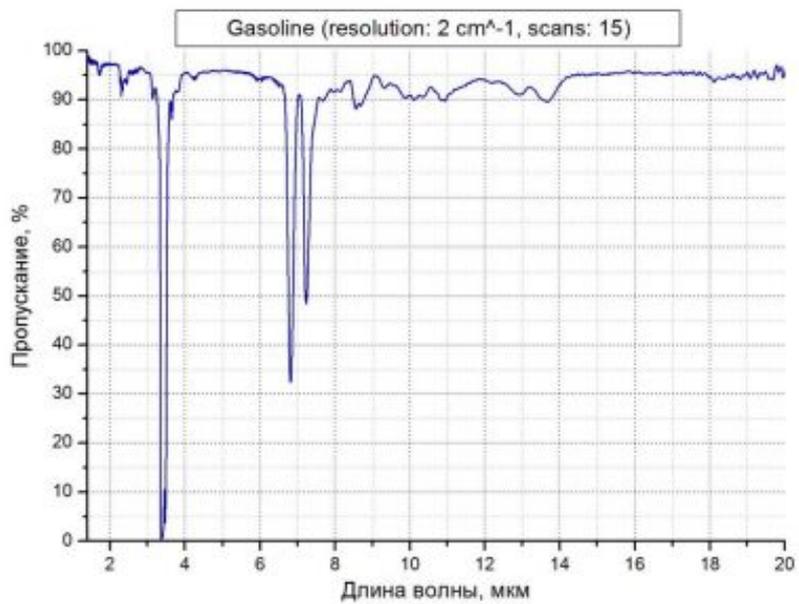


Размещение образца  $\text{Cr}^{2+}:\text{ZnSe}$  в отсеке. 1,4 – окна спектрометра, 2 – образец, 3 – держатель образца.

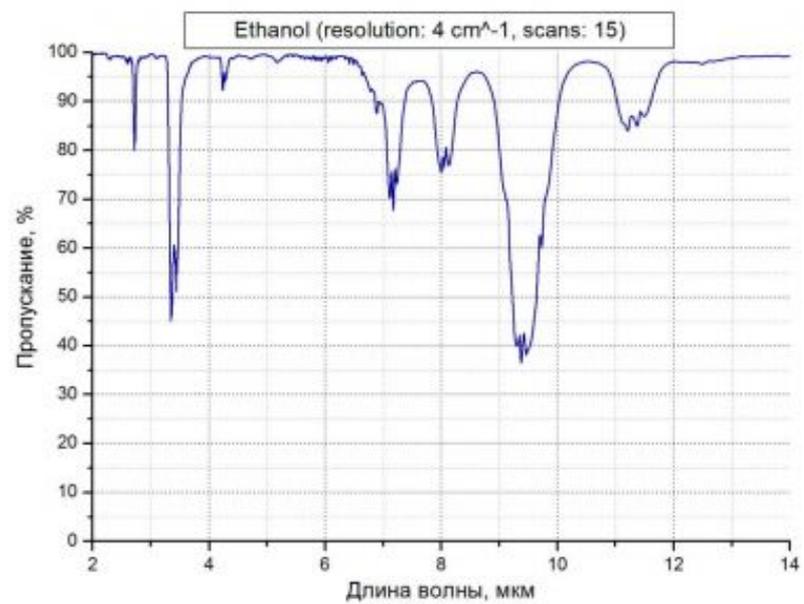


Расположение жидкостной кюветы в отсеке спектрометра Varian 660-IR.

1,4 – окна спектрометра, 2 – кювета, 3 – держатель.



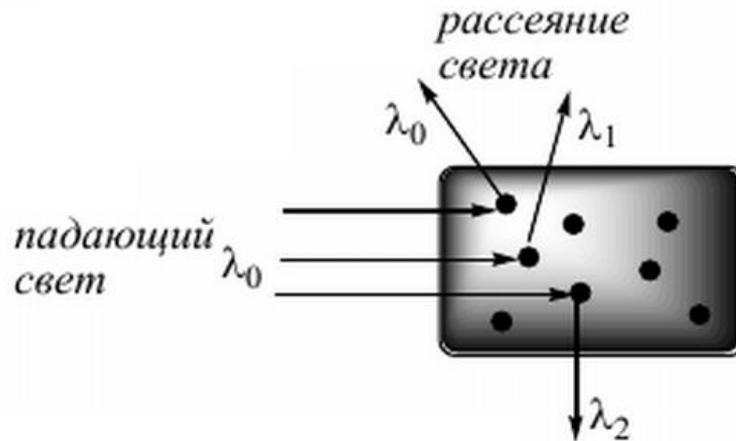
Спектр пропускания паров бензина.



Спектр пропускания паров этанола (разрешение 4 см<sup>-1</sup>)

СПЕКТРОСКОПИЯ  
КОМБИНАЦИОННОГО  
РАССЕЯНИЯ  
(РАМАНОВСКАЯ  
СПЕКТРОСКОПИЯ)

Рассеяние света – совокупность физических явлений (отражение, преломление, дифракция и др.), которые влияют на направление распространения света в веществе и могут изменять длину волны света.



Типы рассеяния света:

1. Эластичное (упругое) релеевское – без изменения длины волны света;
2. Неэластичное (неупругое) рамановское – с изменением длины волны света.

Дж. В.С. Релей (1842-1919) – английский физик.

Ч. В. Раман (1888-1970) – индийский физик.

## Упругое рассеяние. Уравнение Релея

$$\frac{I_s}{I_0} = \frac{16\pi^4 a^2 \sin^2 \varphi}{r^2 \lambda^4}$$

$I_s$  – интенсивность прошедшего света;

$I_0$  – интенсивность падающего света;

$a$  – поляризуемость молекулы;

$\varphi$  – угол рассеяния света по отношению к электрическому диполю молекулы;

$r$  – расстояние (путь) пройденный рассеянным светом;

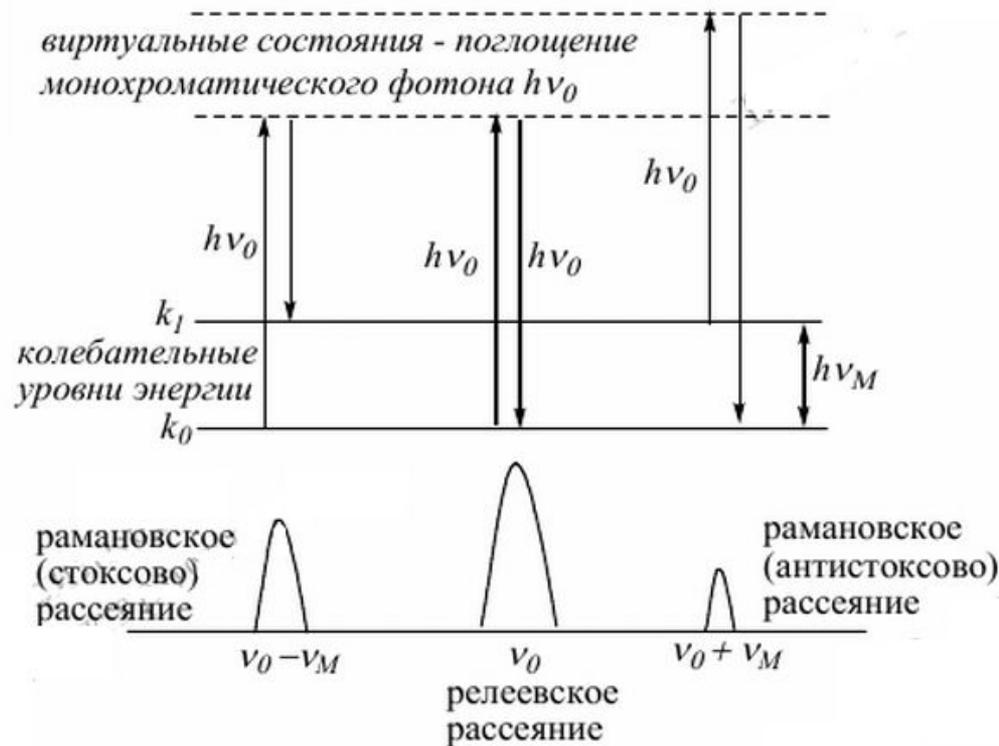
$\lambda$  – длина волны света.

Следствия из уравнения Релея:

- рассеяние прямо пропорционально квадрату поляризуемости молекул;
- рассеяние уменьшается с квадратом расстояния;
- рассеяние падает пропорционально четвертой степени длины волны.

# Рамановское рассеяние

Рамановское рассеяние изменяет длину волны падающего света вследствие взаимодействия света с колебательными квантами рассеивающей молекулы.



Методы молекулярной спектроскопии. Комбинационное рассеяние

**Стоксова рамановская линия** – переход молекулы с нижнего на верхний колебательный уровень в результате поглощения и рассеяния кванта света.

**Антистоксова рамановская линия** – переход молекулы с верхнего на нижний колебательный уровень. Интенсивность антистоксовых линий мала, т.к. вероятности перехода с верхних на нижние колебательные уровни малы, вследствие больших заселенностей нижних уровней. В практике спектроскопии комбинационного рассеяния

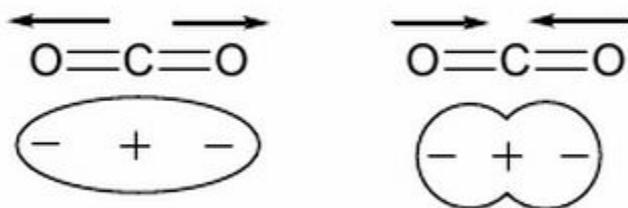
## Сравнение рамановского рассеяния и инфракрасной спектроскопии

*В спектроскопии комбинационного рассеяния являются активными колебания связей, при которых происходит изменение поляризуемости ( $\alpha$ ) связи.*

*В ИК спектроскопии – изменение дипольного момента ( $\mu$ ) связи.*

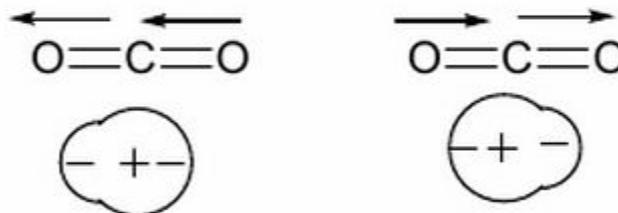
### Колебания молекулы $\text{CO}_2$

симметричное валентное колебание



есть изменение поляризуемости  $\alpha$  –  
КР активно  
нет изменения дипольного момента  $\mu$  –  
ИК не активно

асимметричное валентное колебание

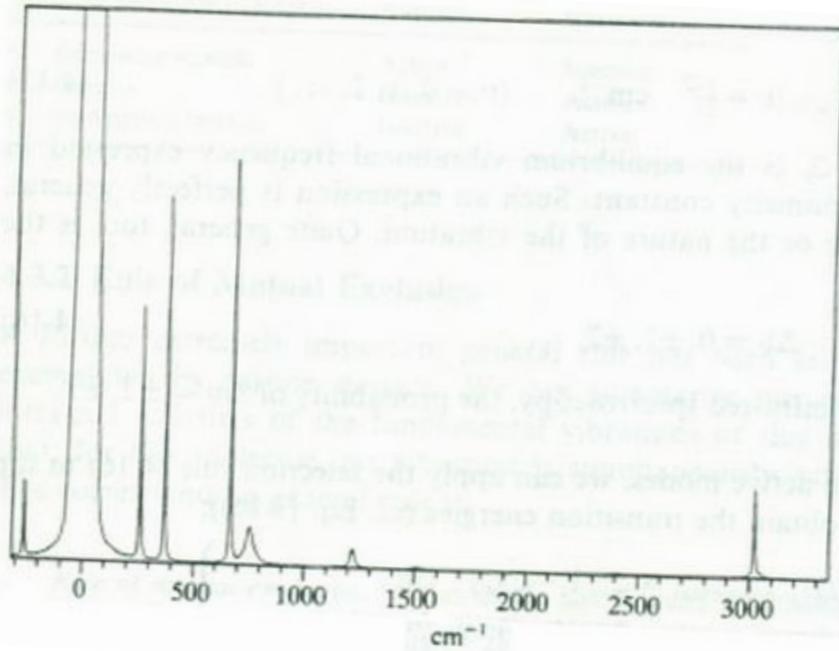


нет изменения поляризуемости  $\alpha$  –  
КР не активно  
есть изменение дипольного момента  $\mu$  –  
ИК активно

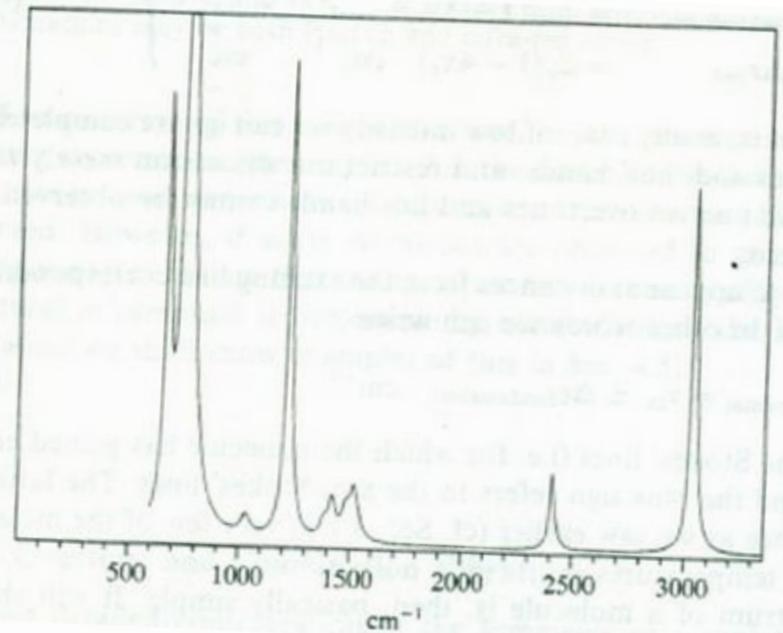
*ИК- спектроскопия и КР – взаимодополняющие друг-друга методы!*

*Колебания связей проявляются в обоих спектрах, но с разной интенсивностью*

# Примеры ИК-спектров и КР- спектров.

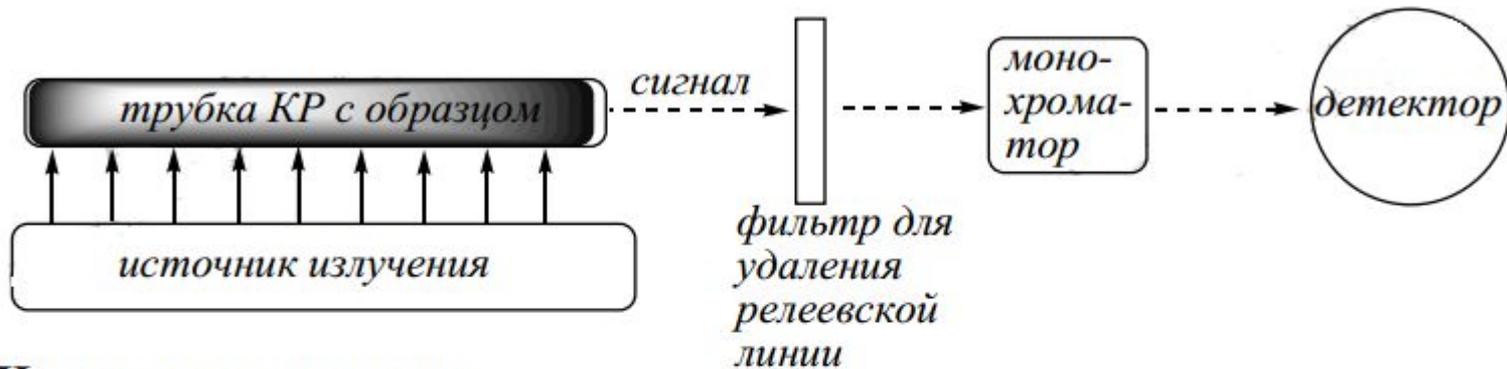


КР- спектр  $\text{CHCl}_3$



ИК- спектр  $\text{CHCl}_3$

## Блок-схема спектрометра КР



### Источники излучения.

1. Ртутная лампа + монохроматор – выделение линии 435.8 нм.
2. Лазеры: аргонный – 488, 514.5 нм; криптоновый – 530.9, 647.1 нм; гелий-неоновый – 633 нм; иттрий-алюминиевый гранат, легированный неодимом – 1064 нм.

Детектирование сигнала осуществляется под углом  $90^\circ$  к падающему свету.

Можно регистрировать спектры газов, жидкостей и твердых тел.

Количество образца 0.1-10 мг.

В качестве растворителя можно использовать воду.

Материал для кювет – кварц или обычное стекло.

## Области применения спектроскопии рамановского рассеяния

1. В химии – идентификация химических веществ.
1. В биологии и медицине – изучение строения белков, полипептидов, липидов, олигосахаридов. Клинические исследования биотканей организмов.
1. Анализ пищевых продуктов и медицинских препаратов, не вскрывая прозрачную полимерную упаковку (такие упаковки имеют слабый спектр КР).
4. В технике анализ композиционных и керамических материалов, искусственных алмазов и пр.