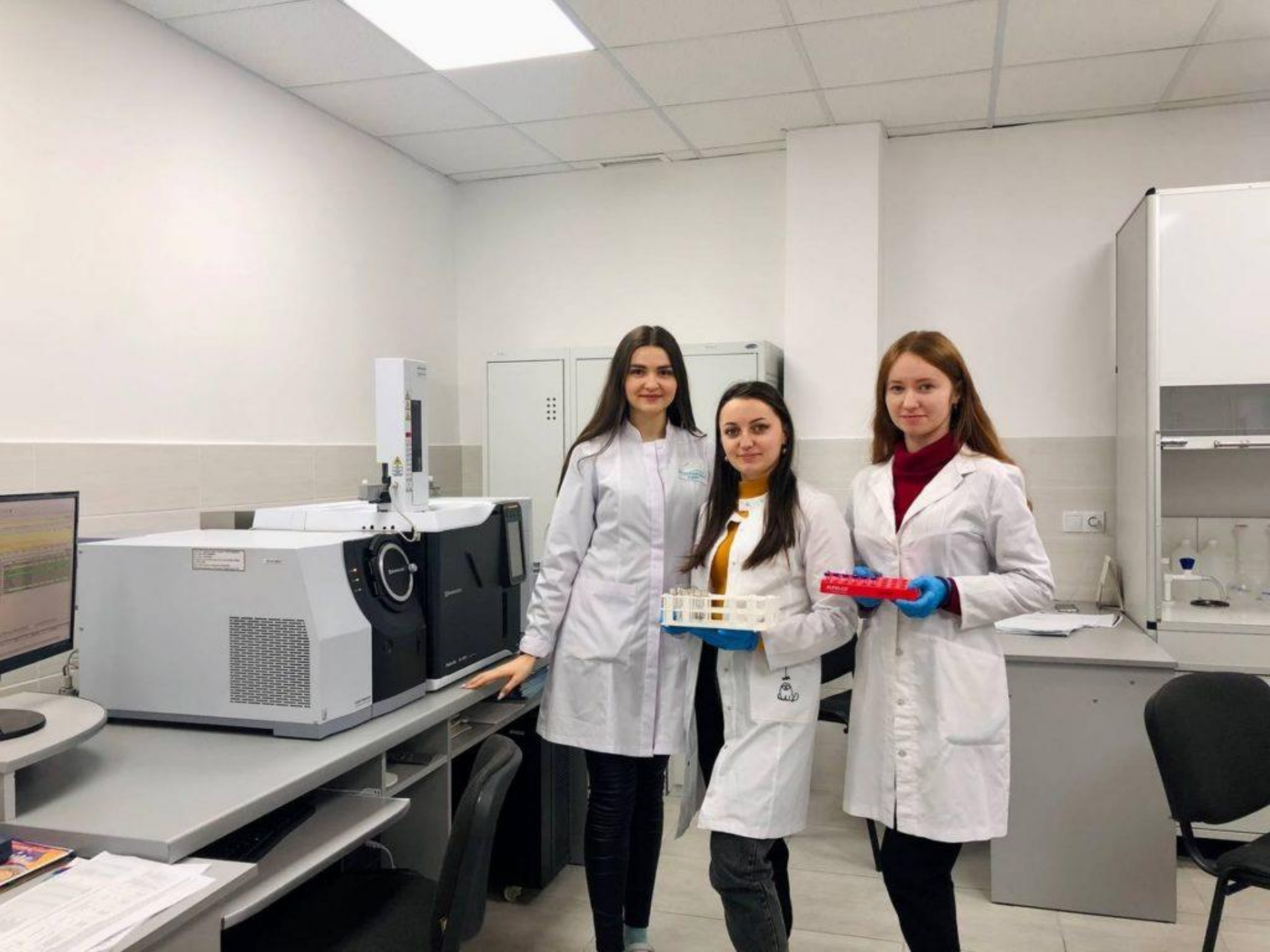
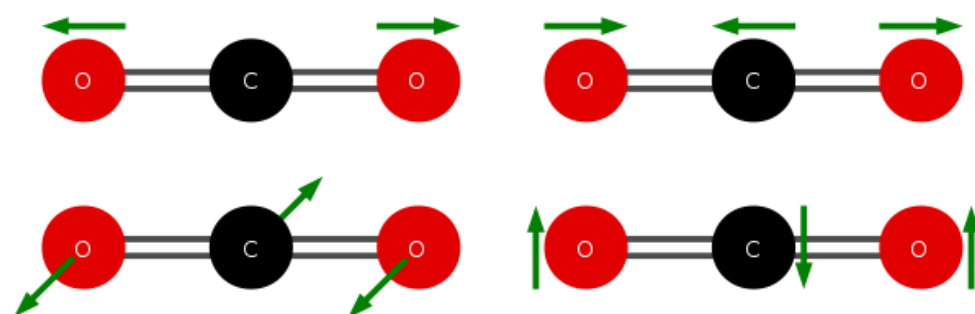
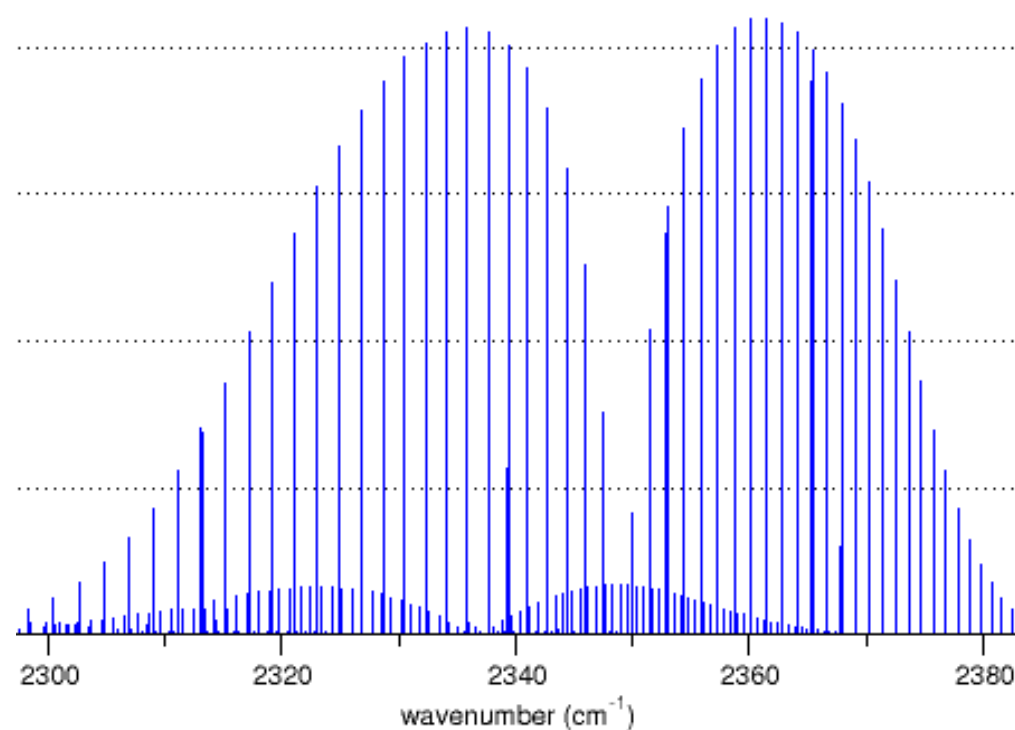
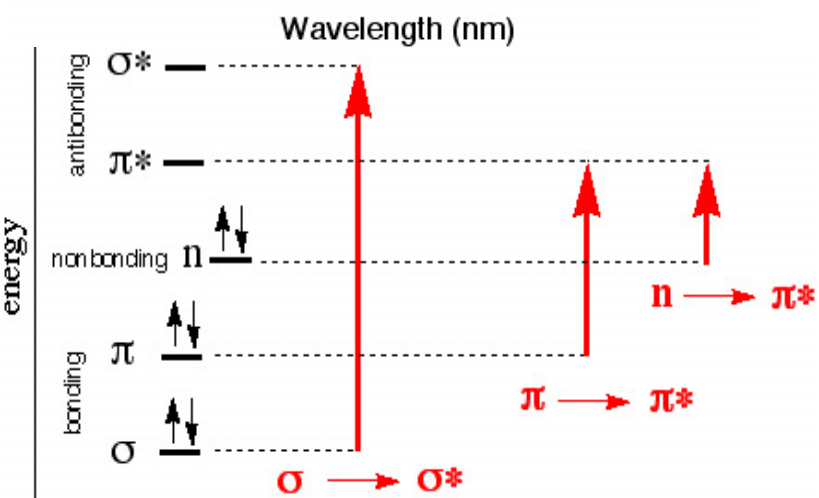
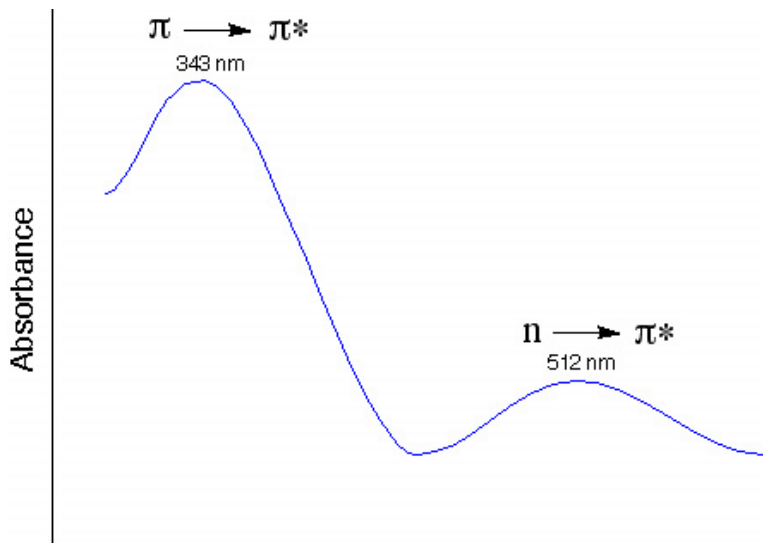


➤ Fourier-Transform InfraRed



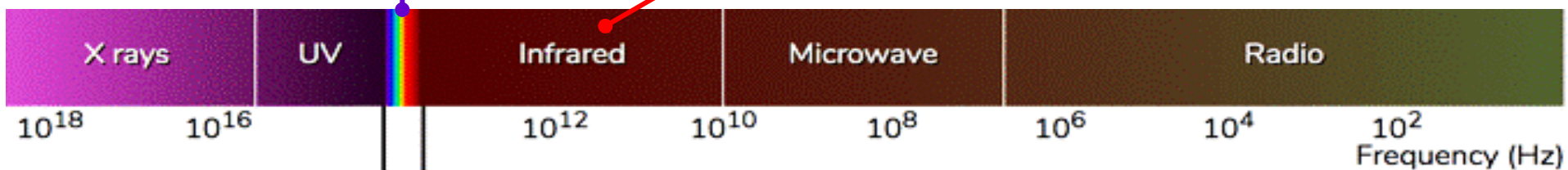


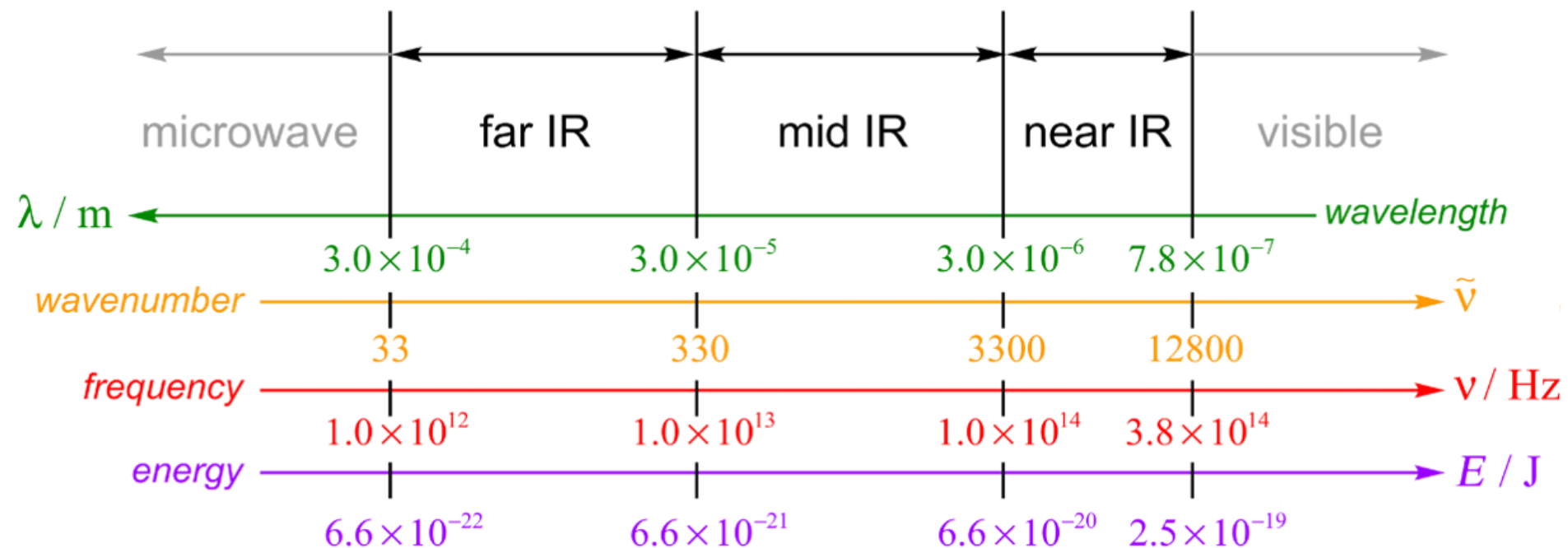




електронні спектри

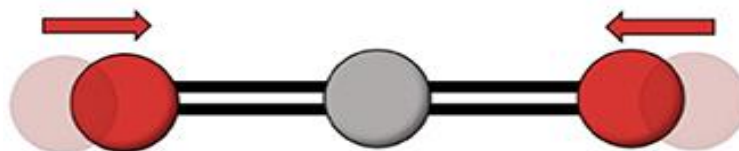
коливальні спектри



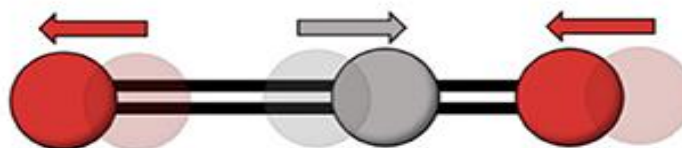


діапазон	довжина хвилі	хвильове число	інфо
▪ vis	400-700 nm (1050 nm)		
➤ Near-IR	800-2500 nm	14000–4000 cm⁻¹	овертони+комбінаційні
➤ Mid-IR	2.5–25 μm	4000–400 cm⁻¹	структура
➤ Far-IR	25–1000 μm	400–10 cm ⁻¹	

radial = валентні

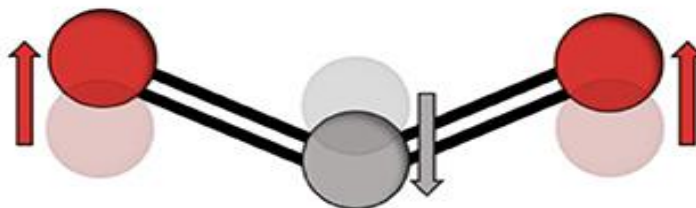


Symmetric stretching

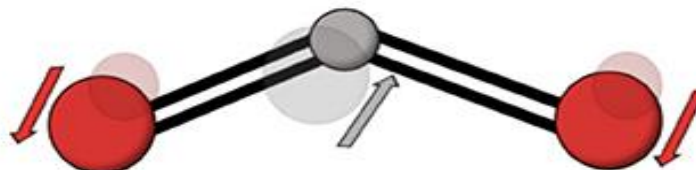


Asymmetric stretching

latitudinal = широтні
ножничні - маятникові



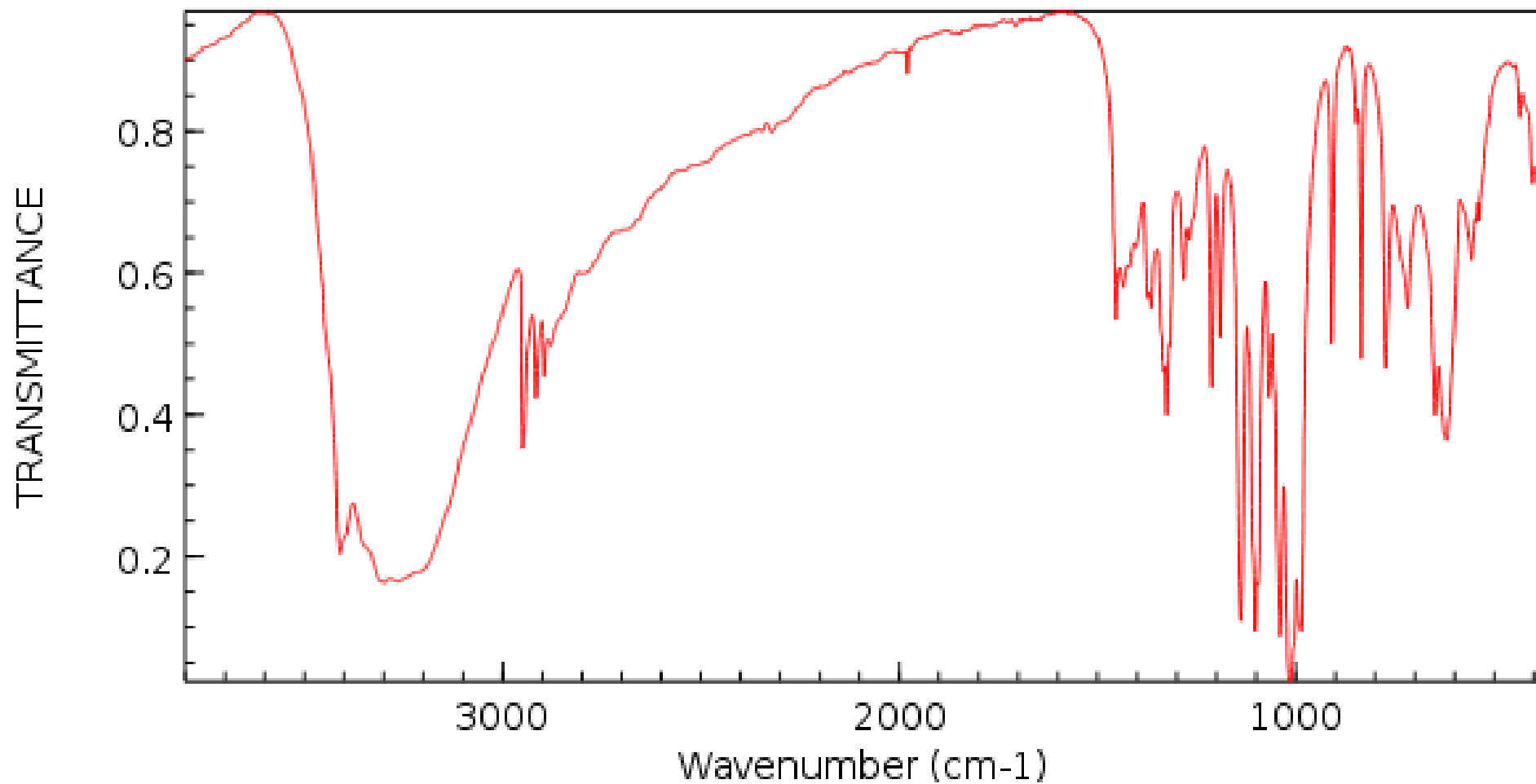
In plane bending



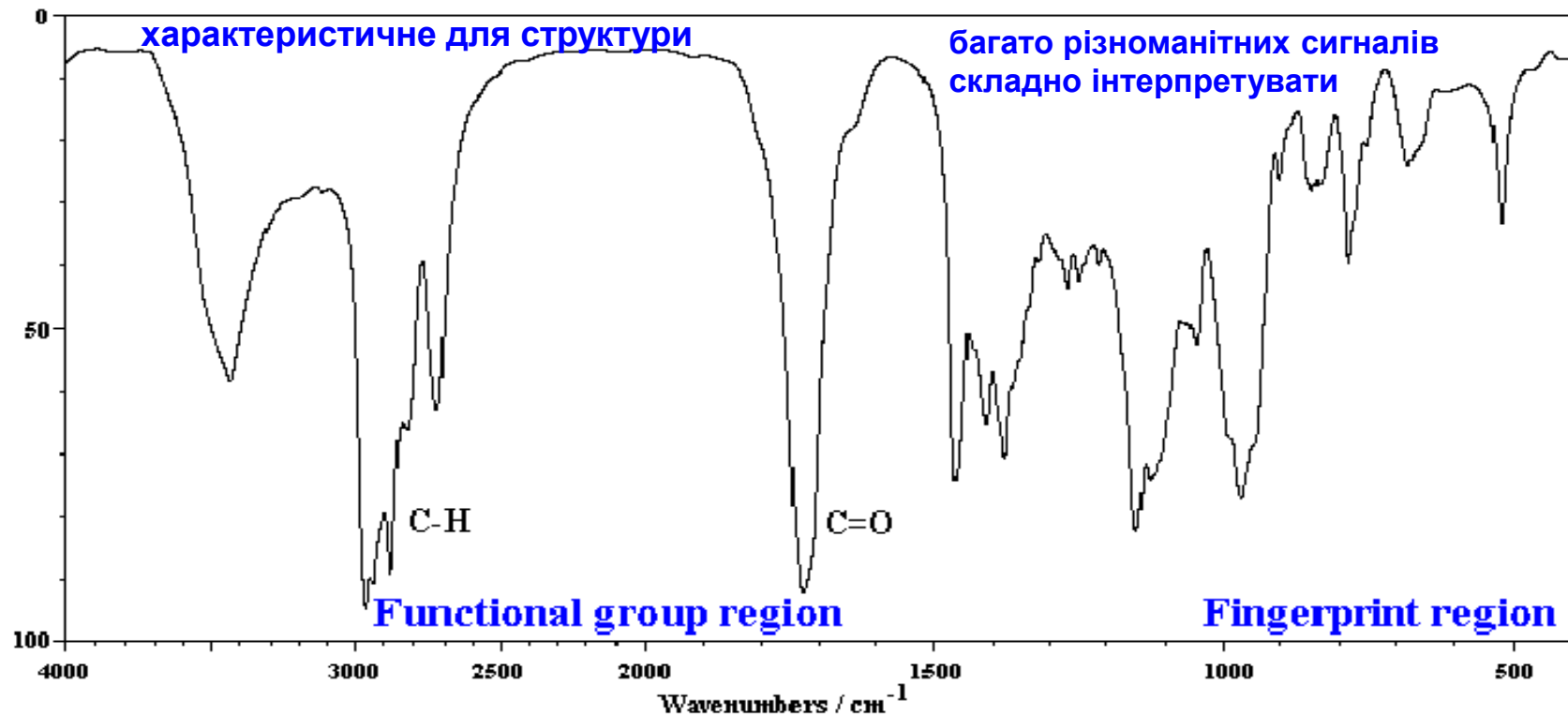
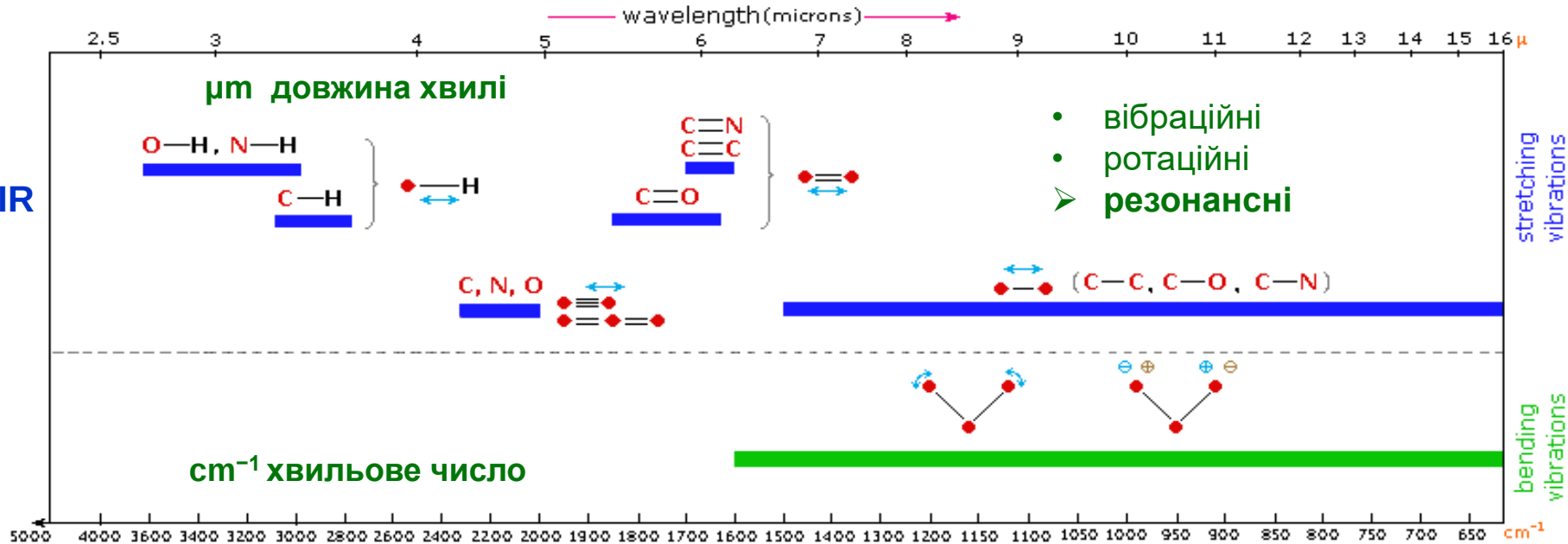
Out of plane bending

FTIR спектр містить **багато** піків

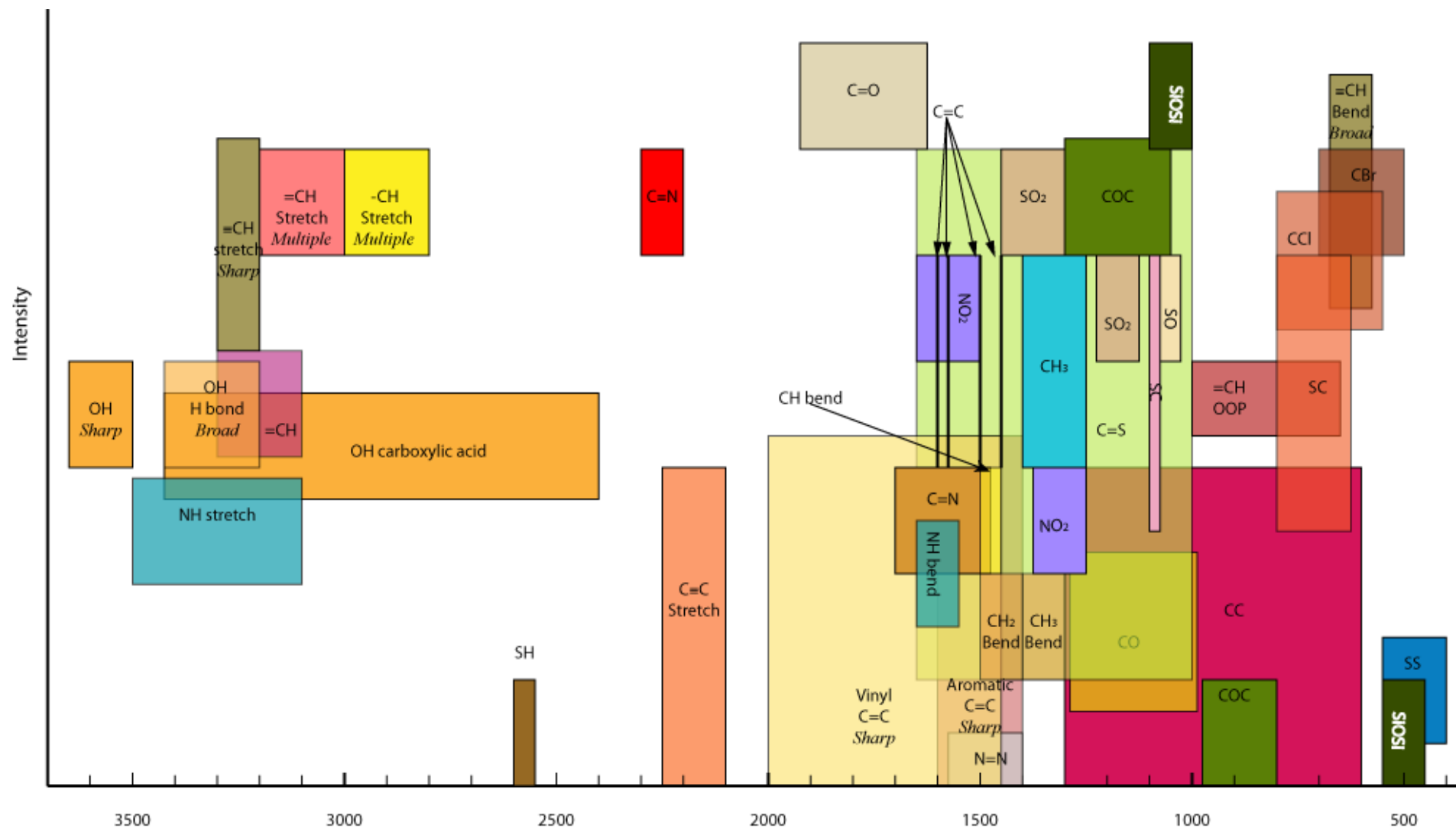
D-GLUCOSE
INFRARED SPECTRUM



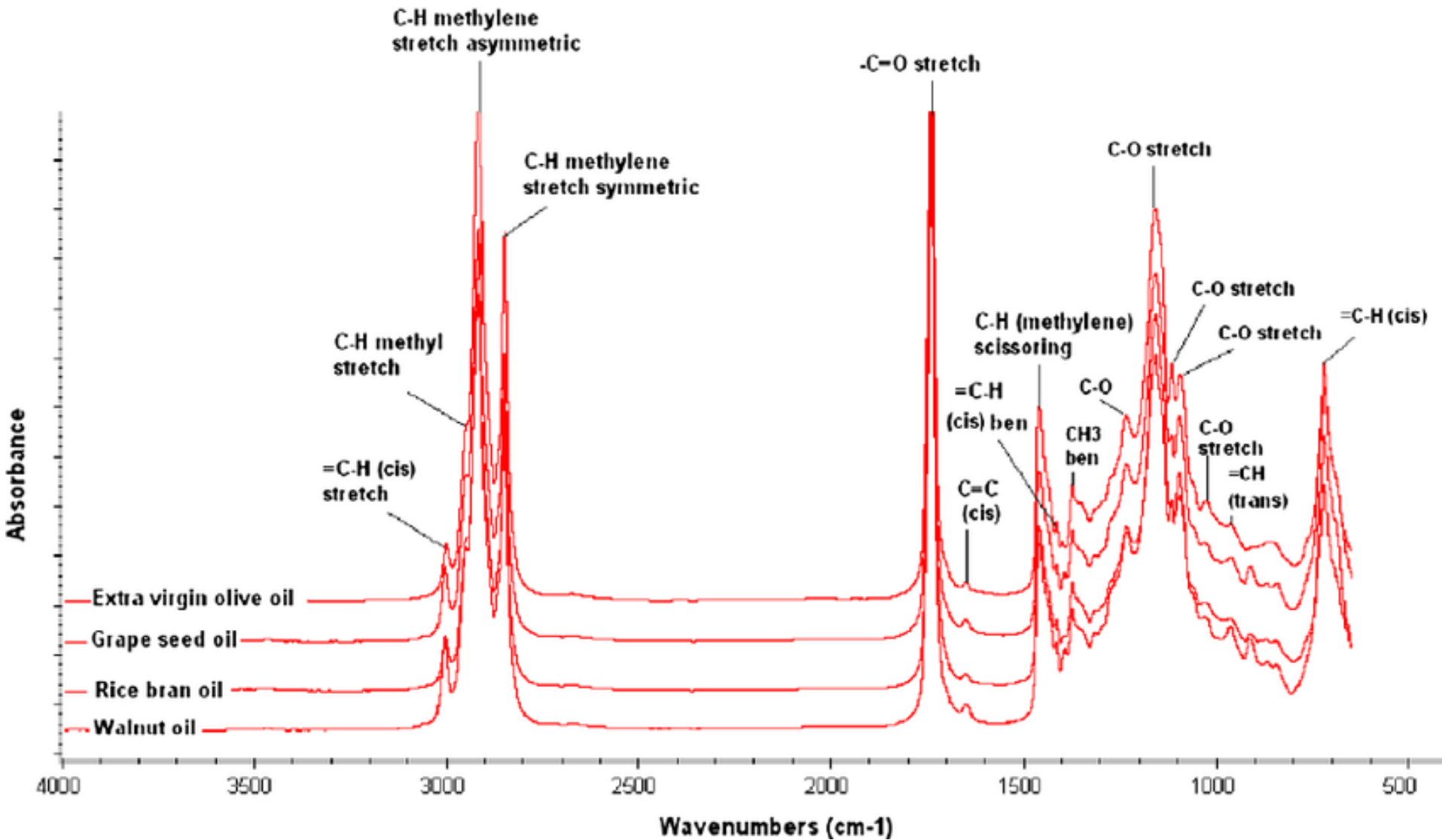
MIR



MIR

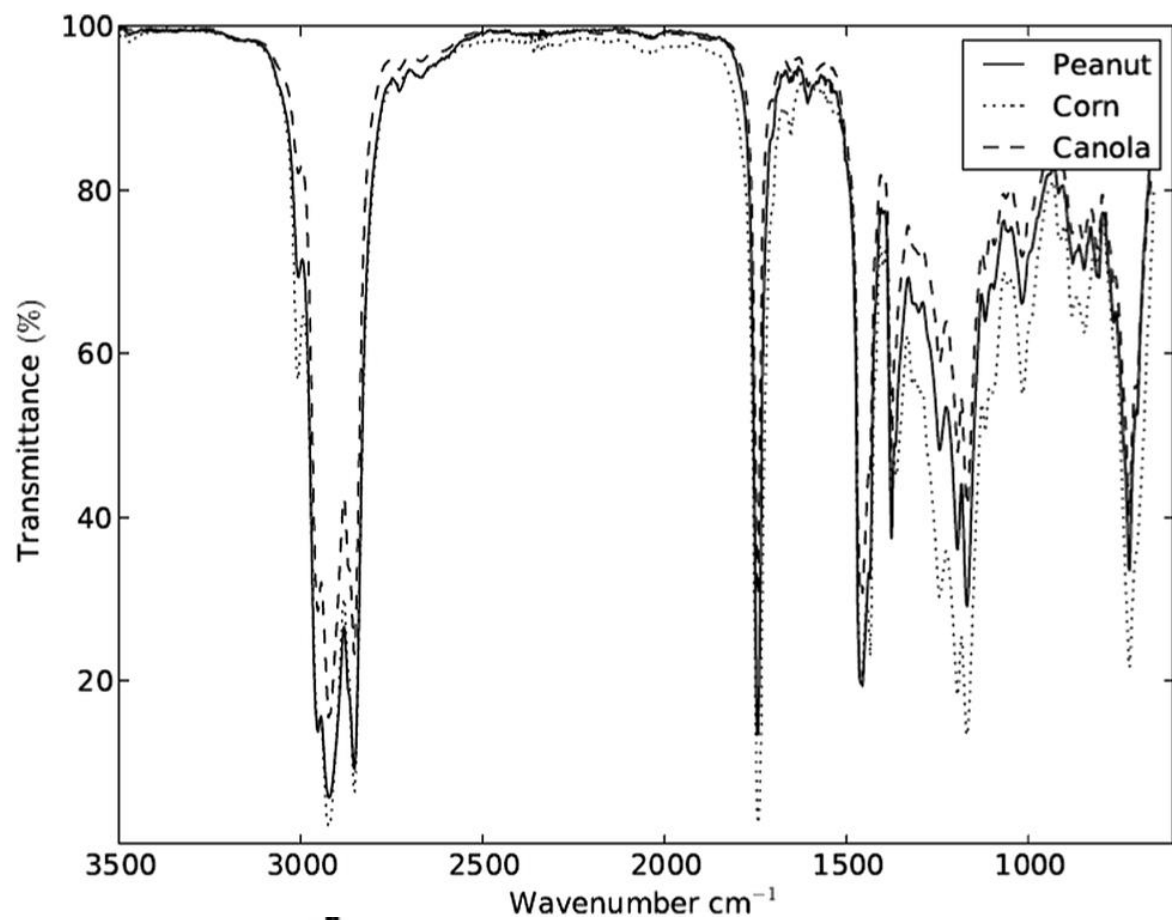


MIR рослинні олії



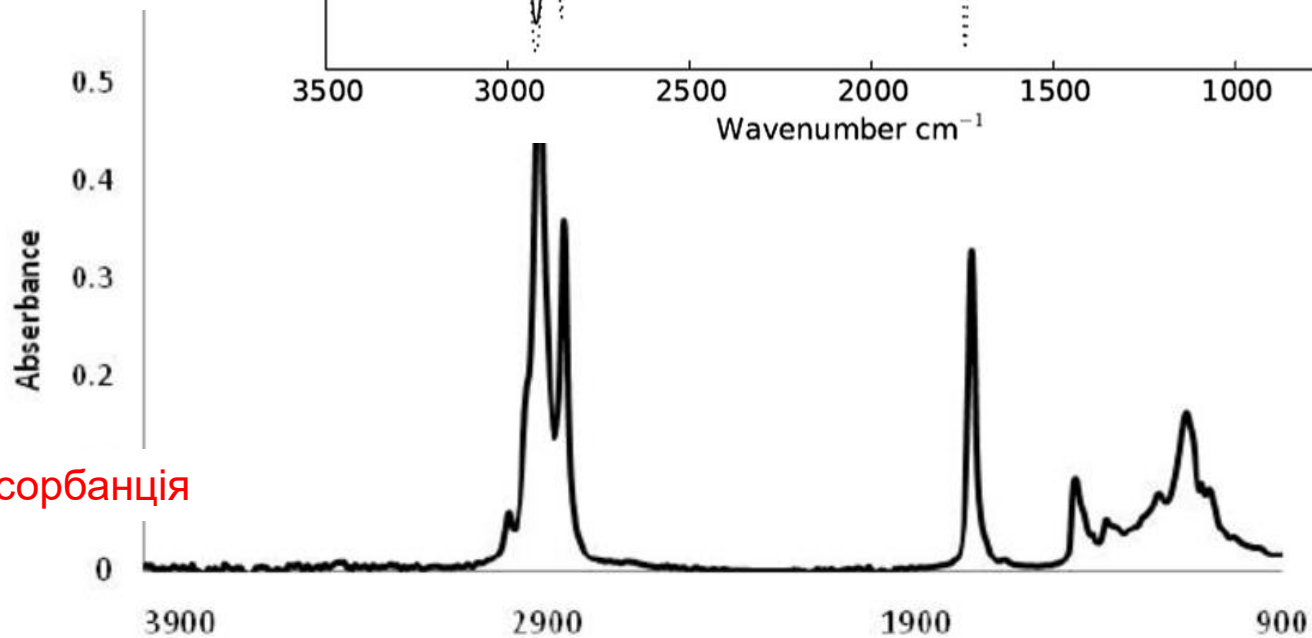
MIR

трансмисія



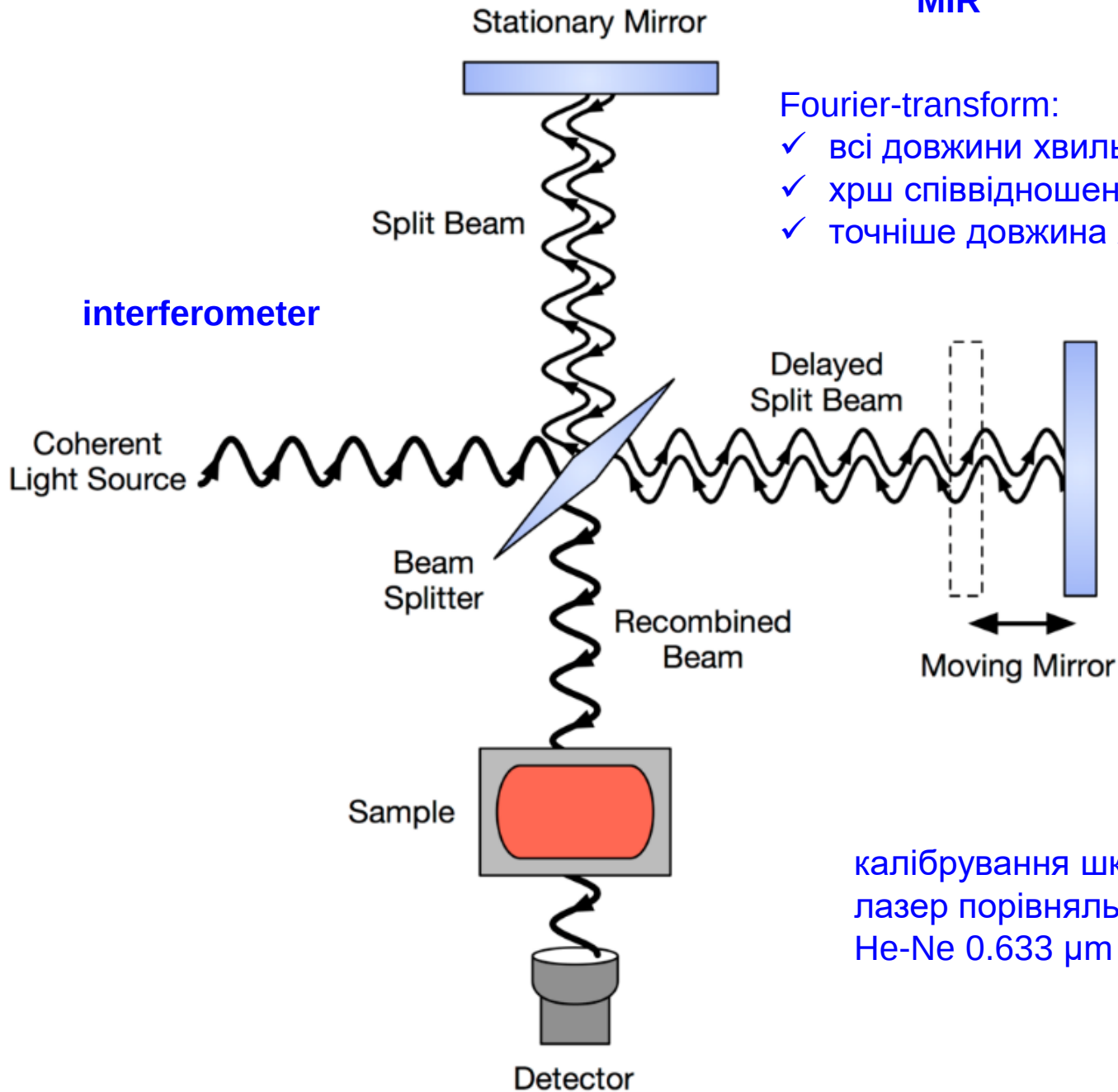
арахісова
кукурудзяна
ріпакова

абсорбанція



оливкова

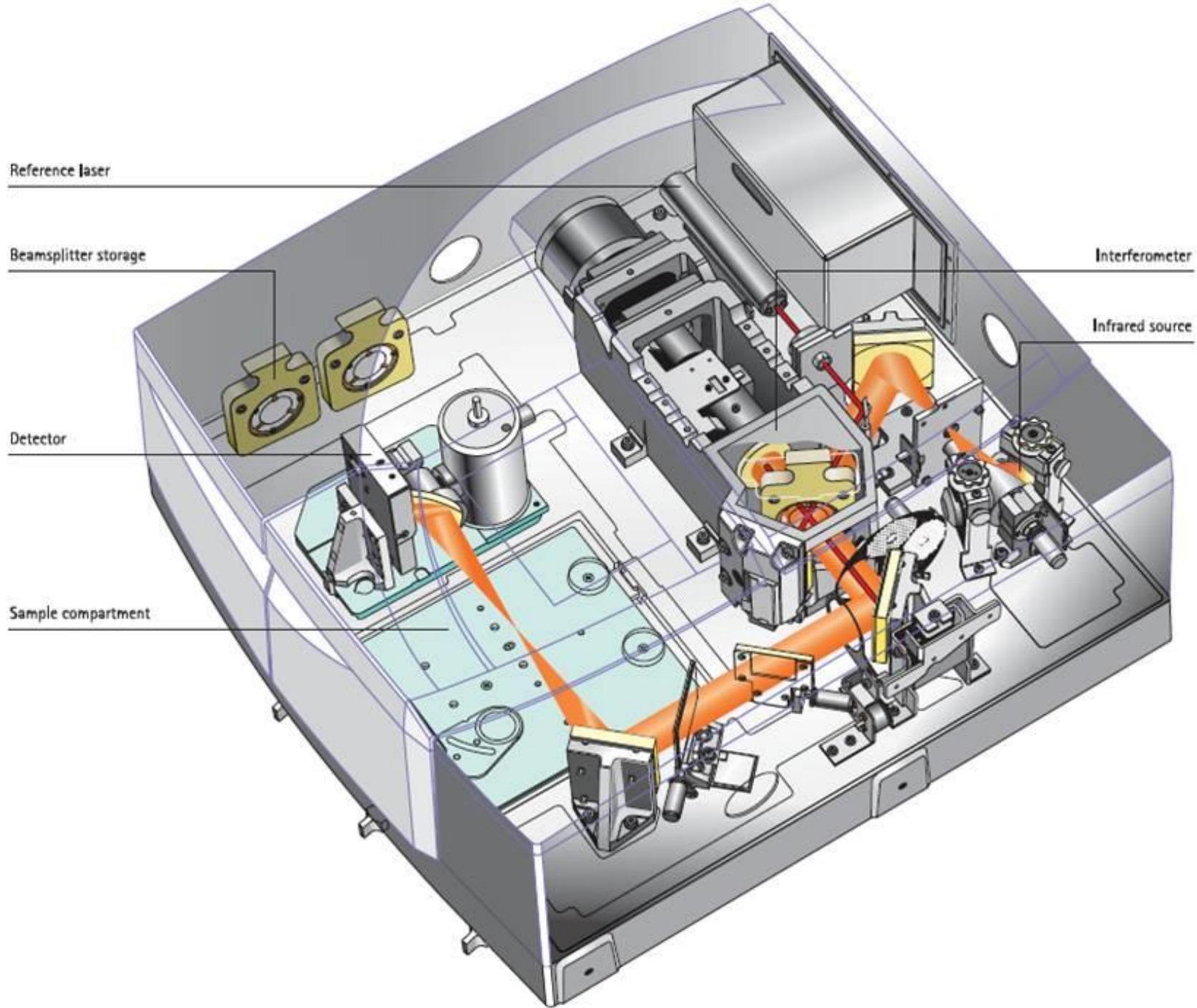
MIR



Fourier-transform:

- ✓ всі довжини хвиль одночасно
- ✓ хрш співвідношення сигнал/шум ($\sim\sqrt{\text{scans}}$)
- ✓ точніше довжина хвилі

калібрування шкали:
лазер порівняльний
He-Ne $0.633\ \mu\text{m}$ ($15800\ \text{cm}^{-1}$)



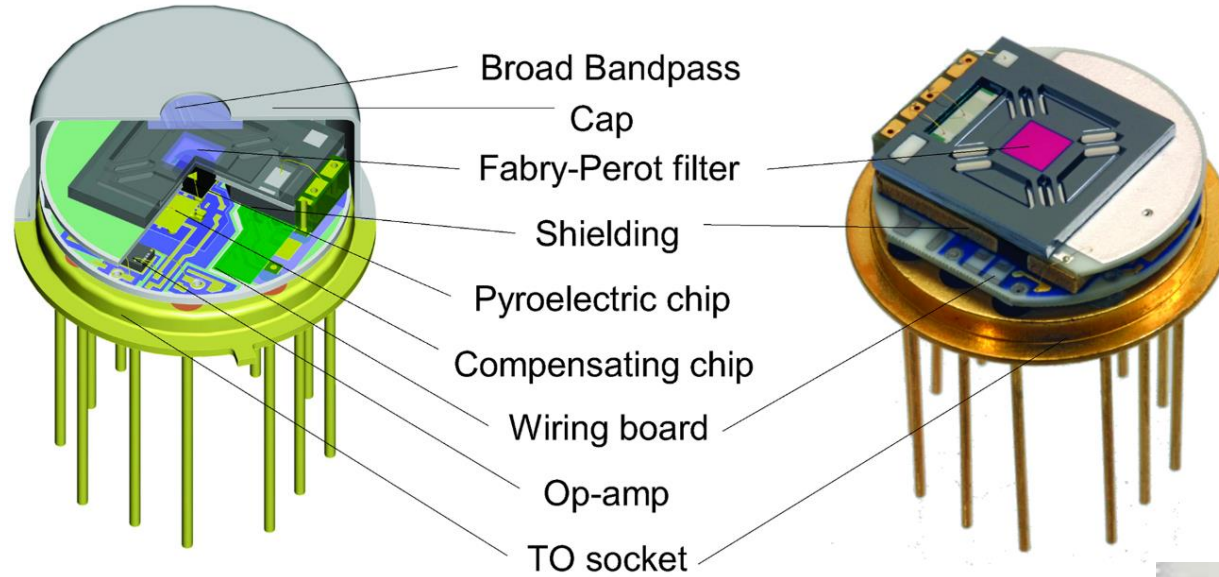
Mid-InfraRed

детектор піроелектричний

LiTaO₃ (~5 sec)

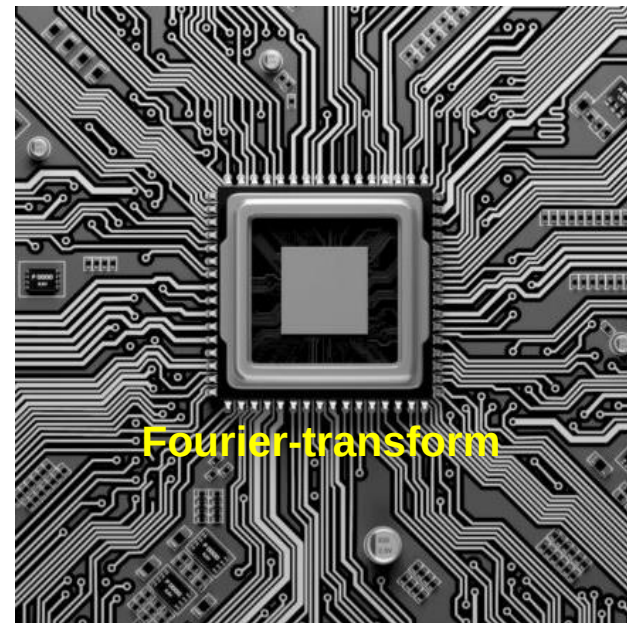
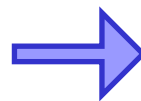
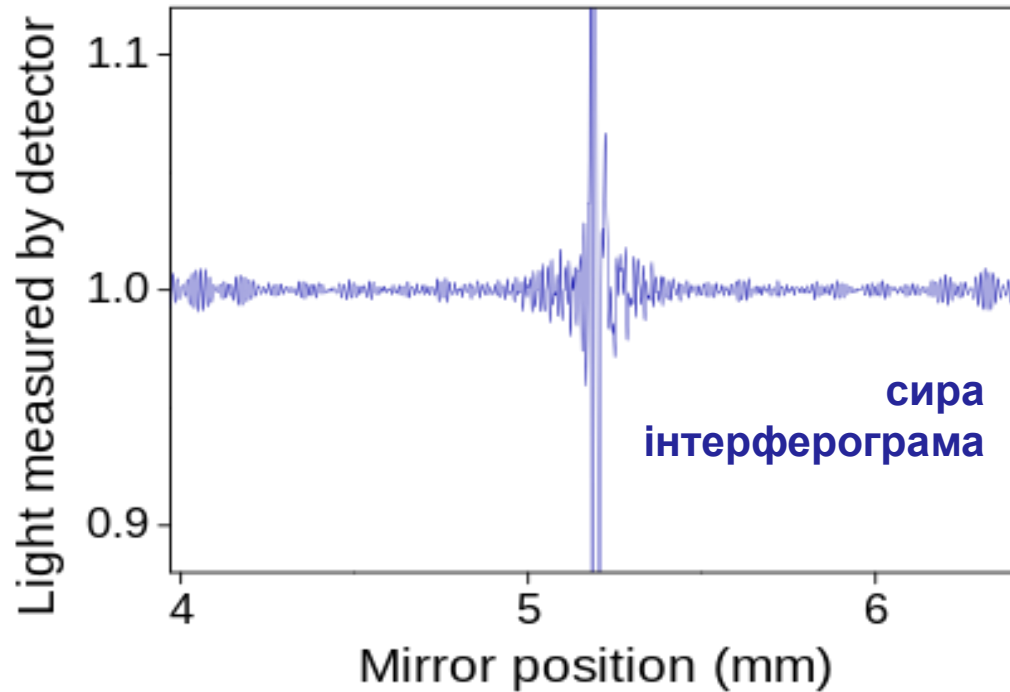
HgCdTe охолоджуваний (~10 msec)

джерело: **SiC** (~1200 K)
діапазон 1-24 μm

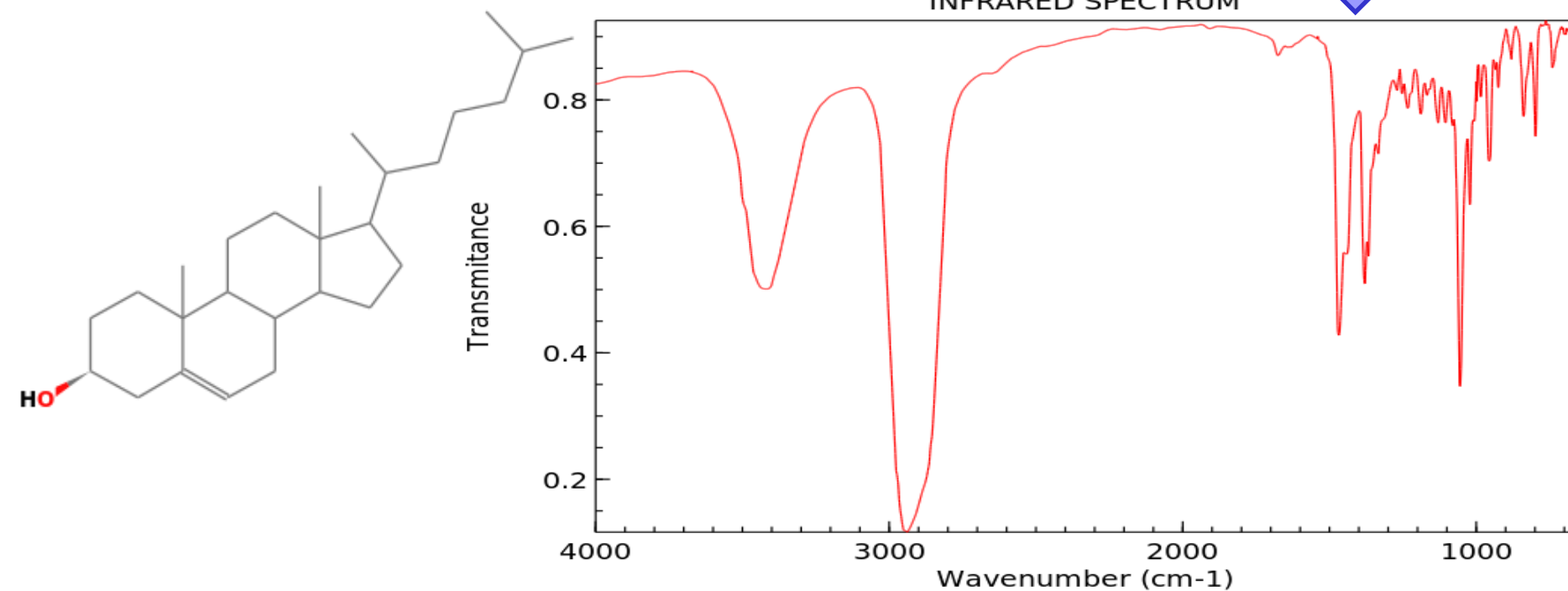


подільник променя
KBr + покриття **Ge**
ZnSe

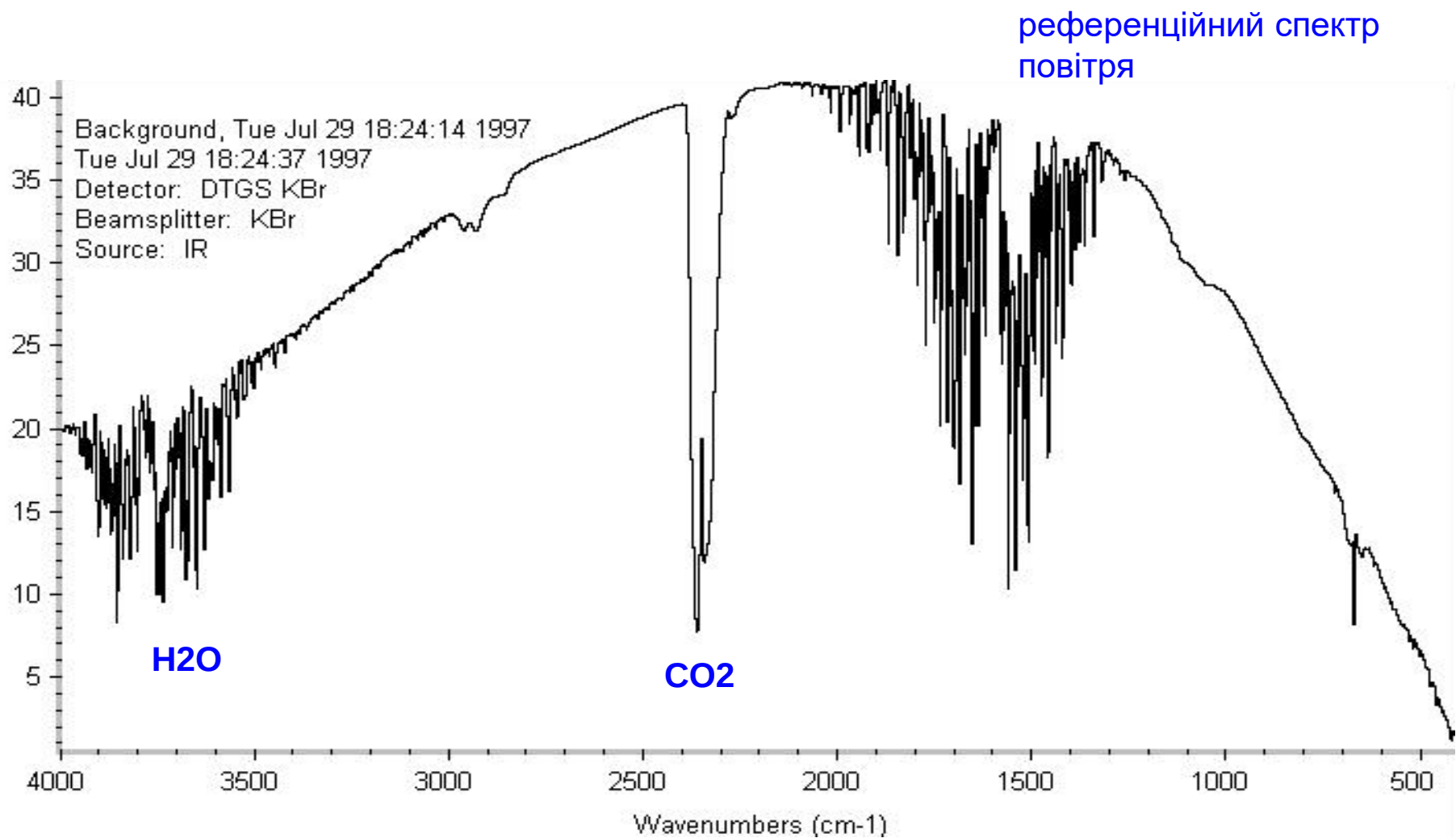




CHOLEST-5-EN-3Beta-OL
INFRARED SPECTRUM

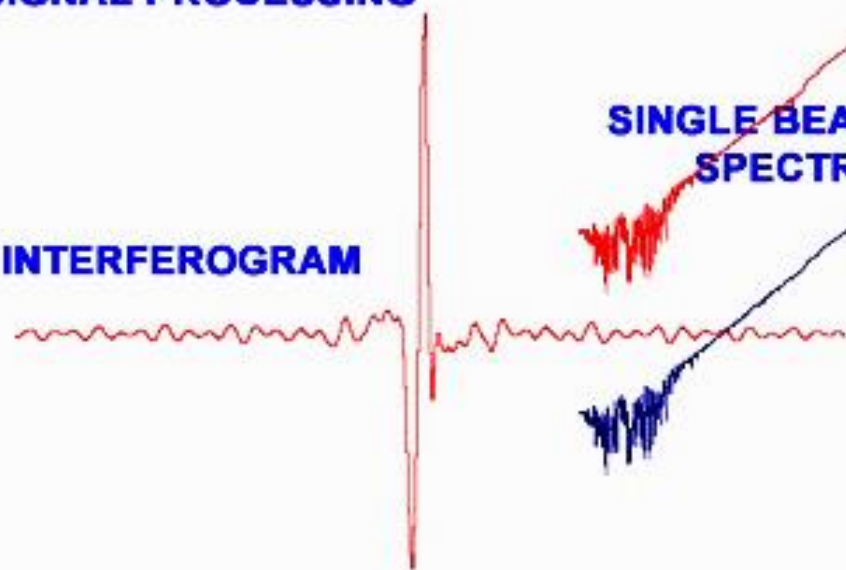


Single Beam

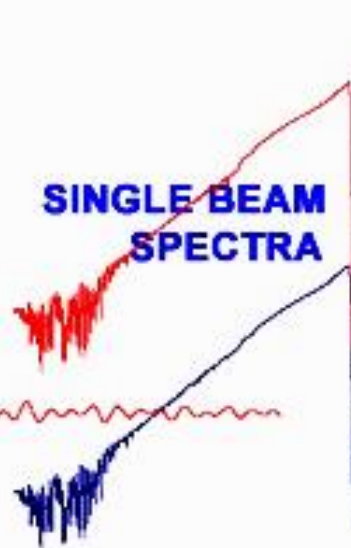


FTIR SPECTRAL SIGNAL PROCESSING

INTERFEROGRAM

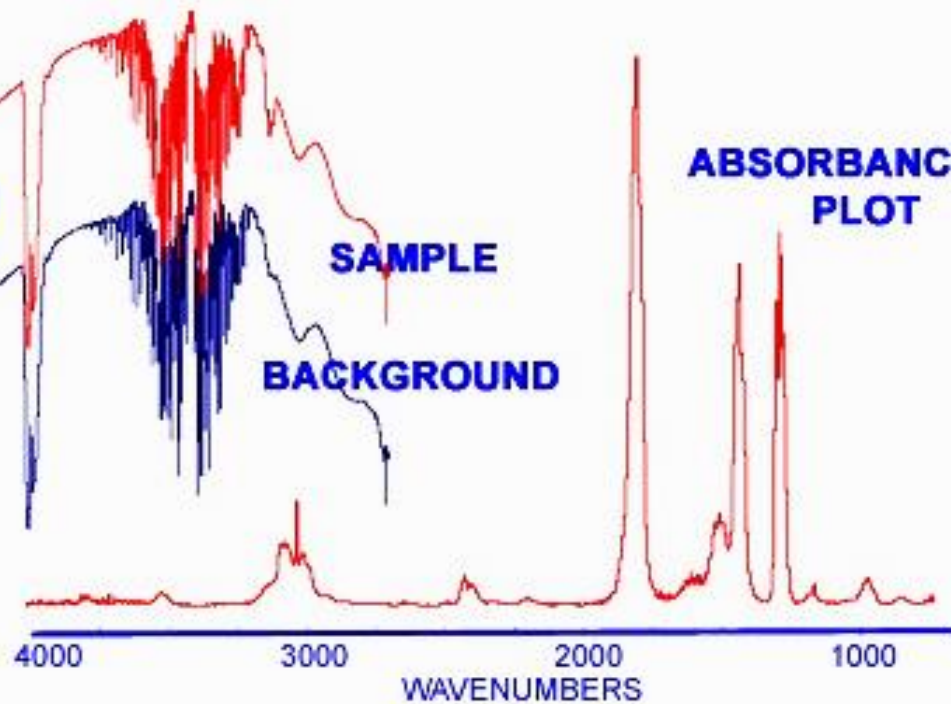


SINGLE BEAM
SPECTRA

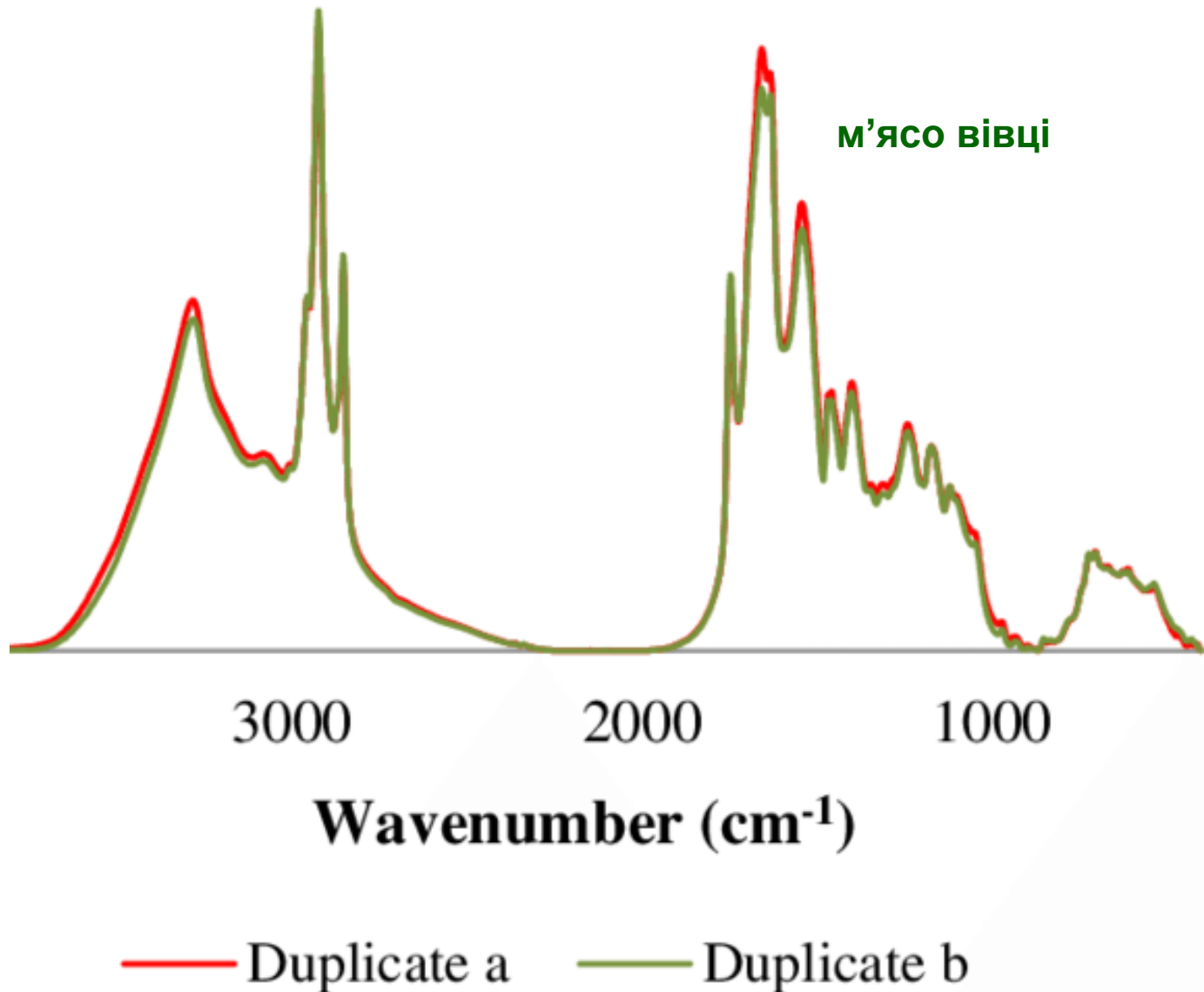


SAMPLE
BACKGROUND

ABSORBANCE
PLOT

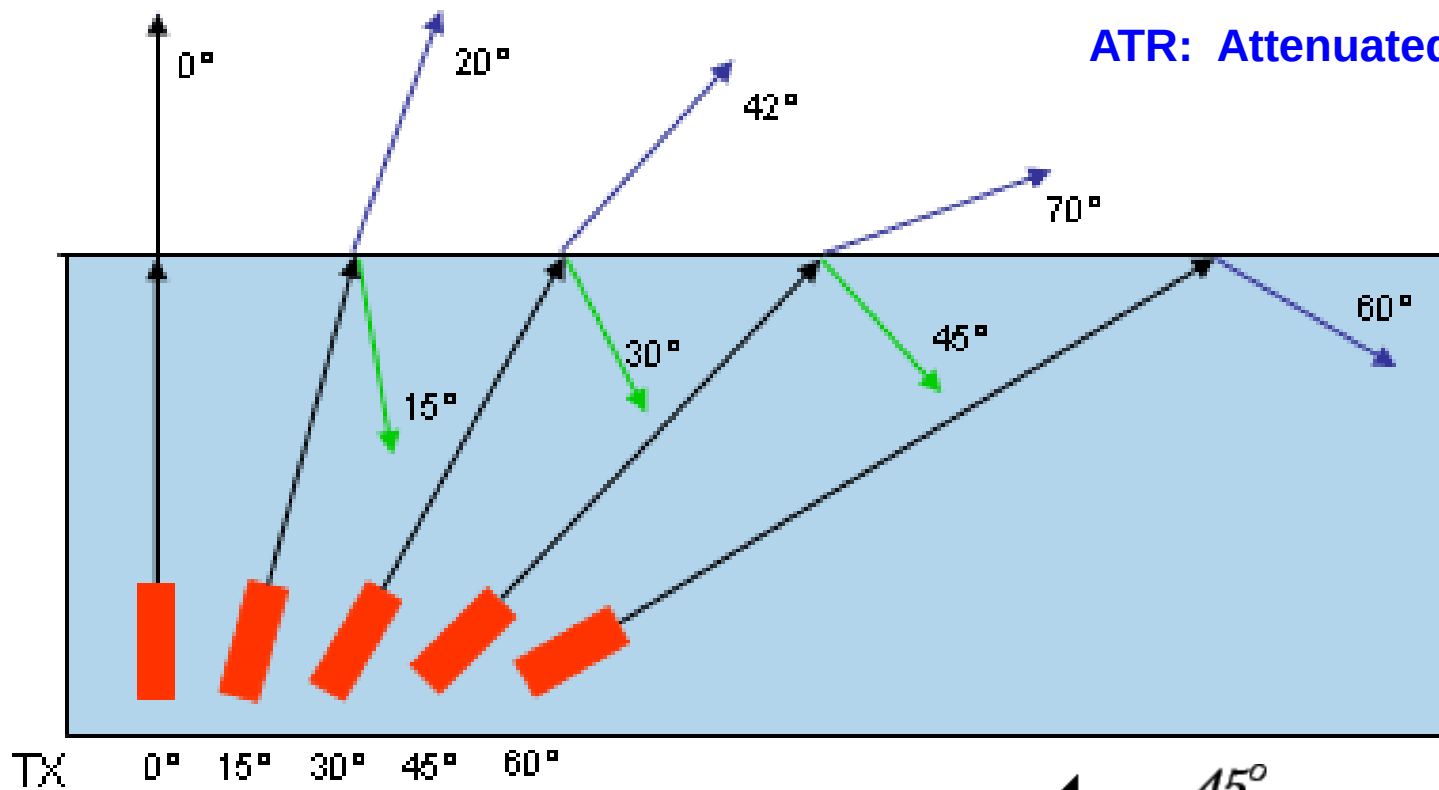


- ✓ кільканадцять різних точок
- ✓ кількість сканів (64, 128, 256 ..) зменшує шум

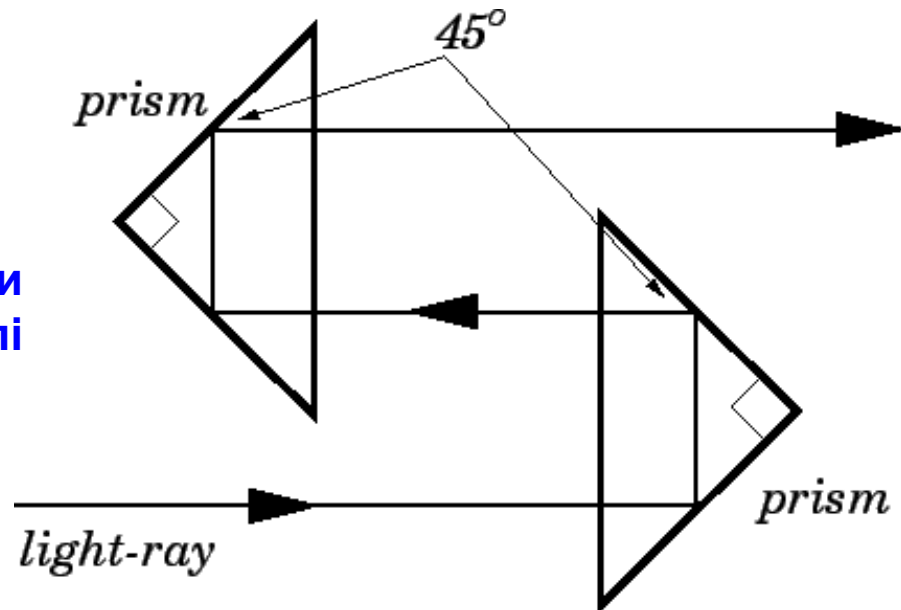


ATR: Attenuated Total Reflectance

повне відбиття
світла



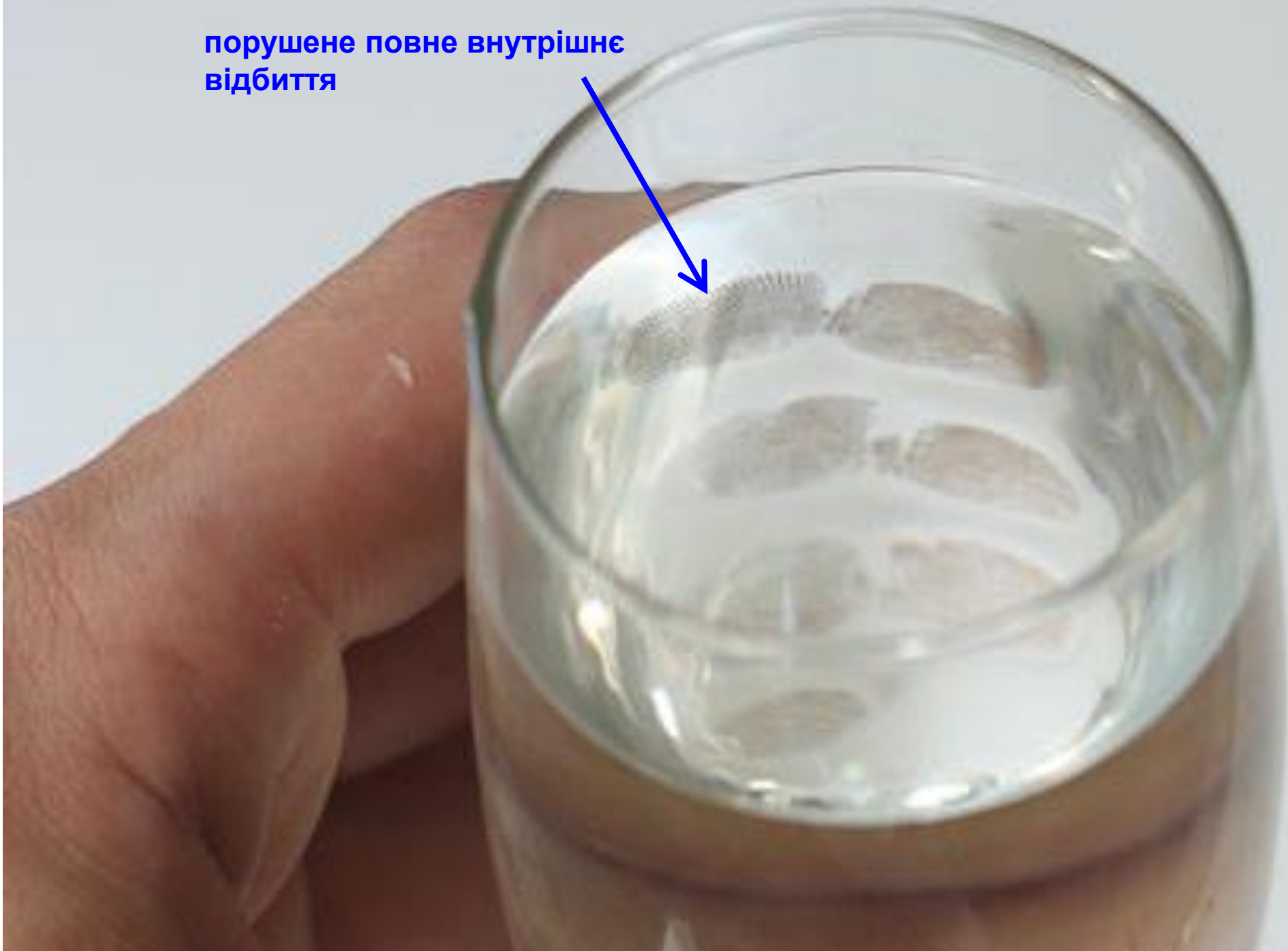
призми
в біноклі



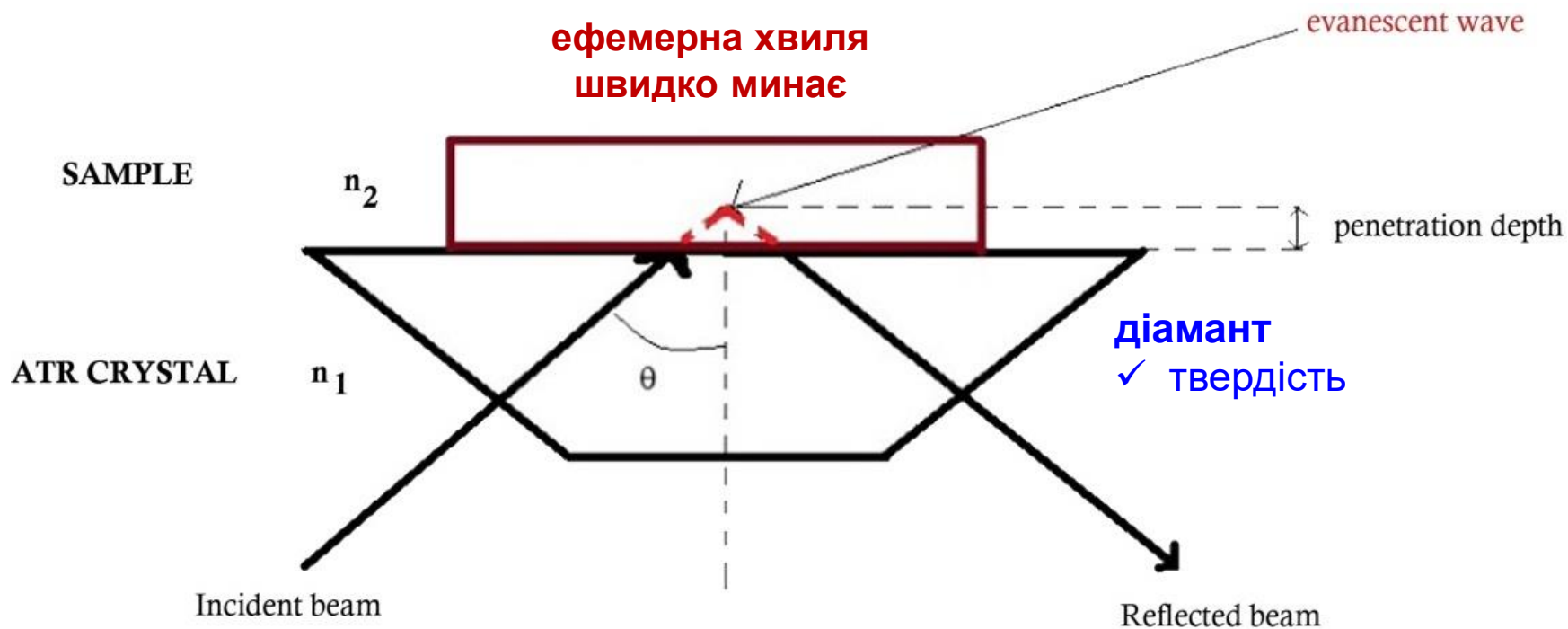


повне внутрішнє
відбиття

порушене повне внутрішнє
відбиття

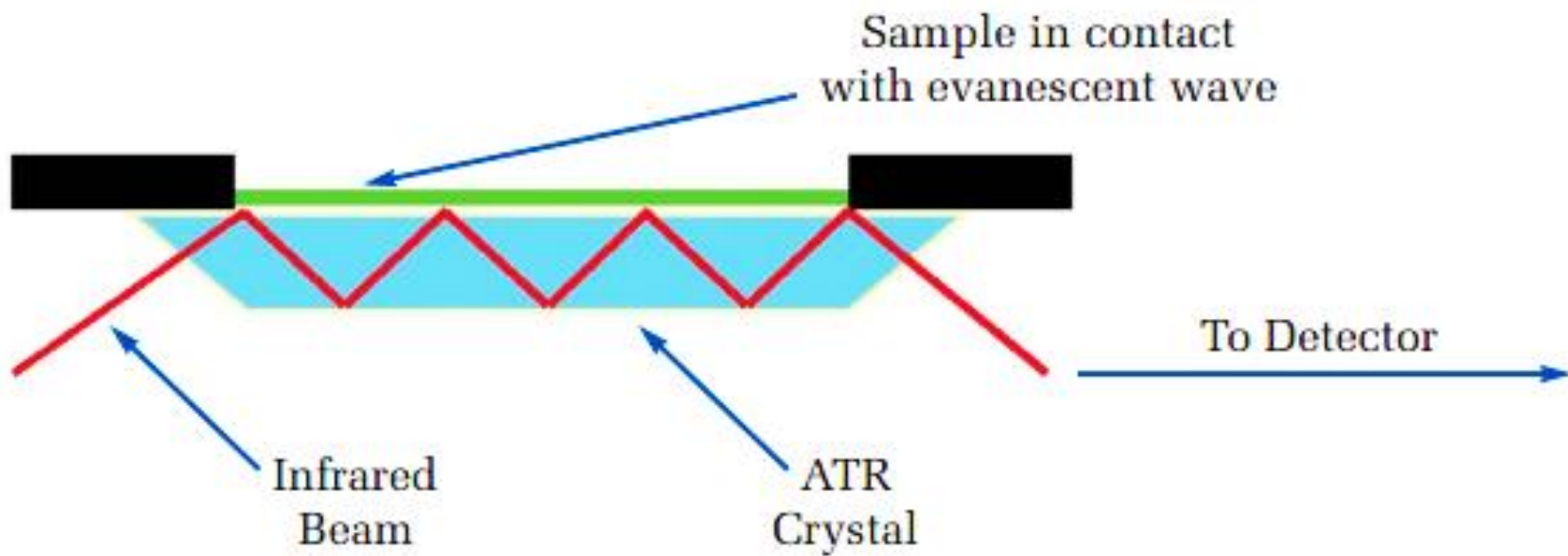


ATR: Attenuated Total Reflectance



входить 0.5-2 μm

- довжина хвилі
- кут падіння
- рефракція кристалу ATR
- рефракція середовища



кількість відбивань

- кут падіння
- довжина кристалу ATR



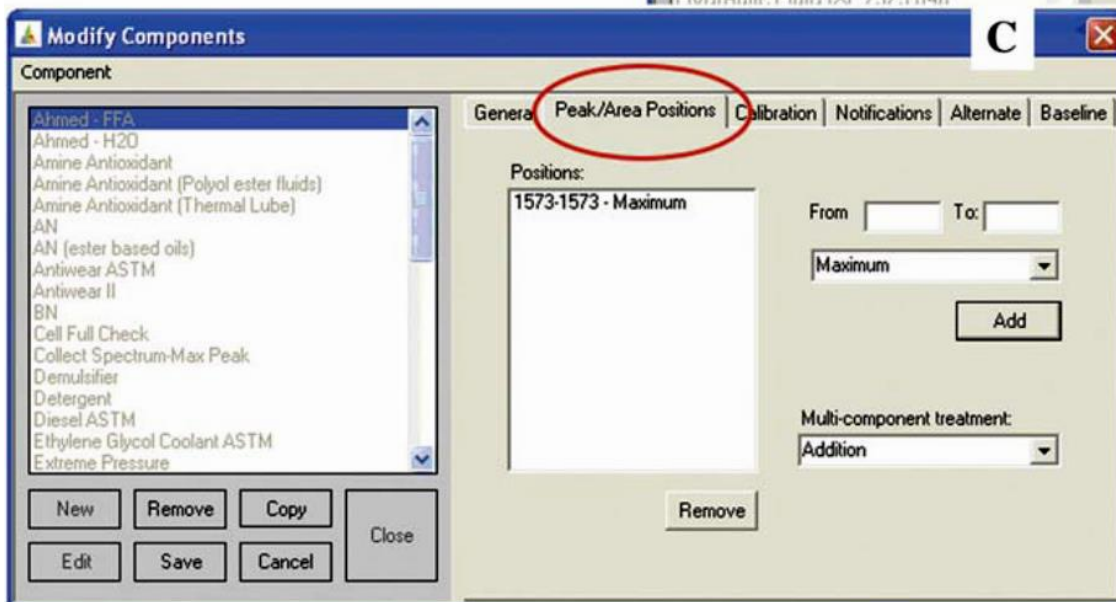
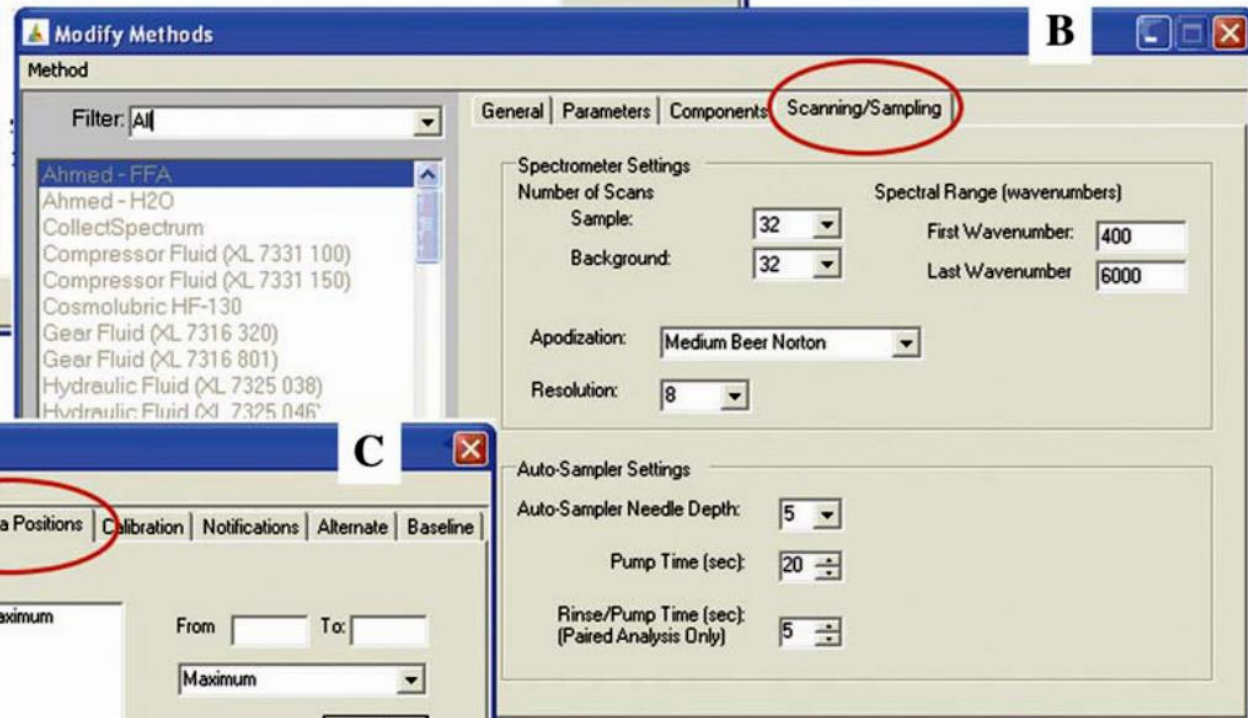
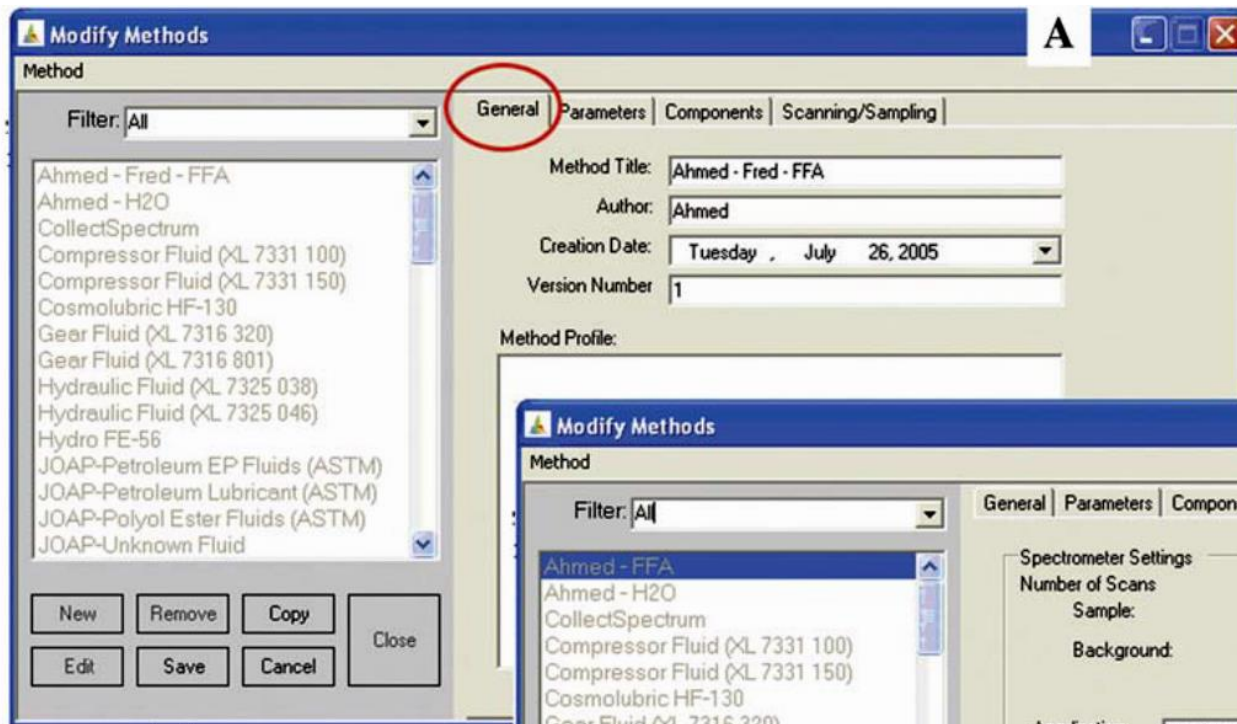
притискання:

- контакт
- повітря

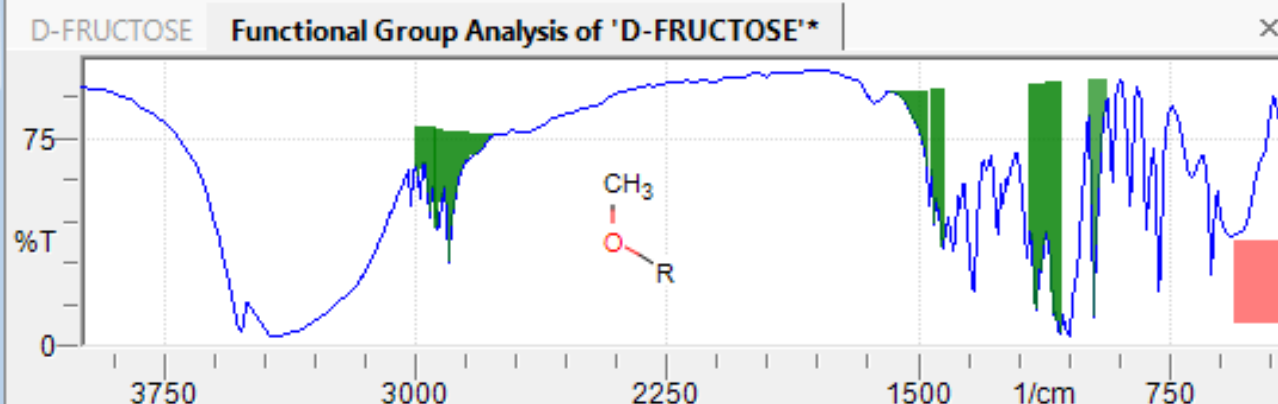
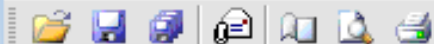




світловоди ATR
✓ in situ
- дорогі



розбудоване
програмне забезпечення



Passed Interpretation Rules

Vibration	Start WN	End WN	Threshold
C Skeletal, Methoxy	980	90	
C-O Stretch	1150	10	
CH3 def, sym	1450	14	

Failed Interpretation Rules

Vibration	Start WN	End WN	Threshold
CO def	560	400	Weak

Matching Functional Groups

Quality	Functional Group	Chemical Sub Class	Chemical Class
100	Alkoxy Substituent	Substituent Group	Side Chain or Substituent
100	Hydroxy Compound	Substituent Group	Side Chain or Substituent
98	Hydroxy, Possibly 1,2-Diol		Aliphatic Alcohol
97	Aliphatic Ether or Sulfoxide	Substituent Group	Side Chain or Substituent
97	Possibly Primary Hydroxy	Substituent Group	Side Chain or Substituent
93	Aliphatic Alkoxy, Methoxy		Aliphatic Ether
93	Methoxy Substituent	Substituent Group	Side Chain or Substituent
85	Methyl Mercapto	Aliphatic Thioether	Aliphatic Thiocompound

Projects - IR Analyze Demo

- IR Analyze Demo
 - 1-METHYL-2-PYRROLIDINONE
 - ACETONITRILE
 - BUTYL ETHER
 - BUTYRAMIDE
 - D-FRUCTOSE
 - MALONAMIDE
 - M-NITROTOLUENE

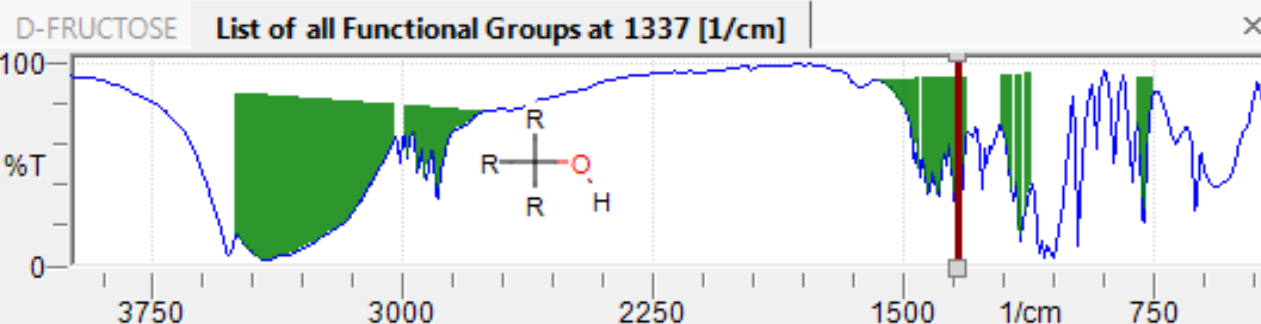
Projects Library Explorer

Mathematics

Adjust X-Axis Calculate Reset

➤ assignment

Lab... Pro... Mat... Au...



Passed Interpretation Rules

Vibration	Start WN	End WN
O-H Stretch	3450	3255
C-H Stretch, Alkyl	3000	2855
C-H Bend, CH ₂ /CH ₃	1480	1410
O-H Def	1400	1320

Failed Interpretation Rules

Vibration	Start WN	End WN	Threshold

Matching Functional Groups

Quality	Functional Group	Chemical Sub Class	Chemical Class
100	Hydroxy, Possibly 1,2-Diol		Aliphatic Alcohol
86	Methyl Mercapto	Aliphatic Thioether	Aliphatic Thioce
84	Tertiary Alcohol		Aliphatic Alcohol
62	CF ₃ group	Fluorine compounds	Organic Halogen
8.5	Aliphatic Amine, Primary, Branched		Aliphatic Amine
8.4	Primary Alcohol		Aliphatic Alcohol
8.3	CHF ₂	Fluorine compounds	Organic Halogen
6.7	Branched, Gem Dimethyl	Alkyl Group	Aliphatic Compou
6.6	Tetrapropyl Ammonium Salt		Aliphatic Amine

Projects - IR Analyze Demo

- 1-METHYL-2-PYRROLIDINONE
- ACETONITRILE
- BUTYL ETHER
- BUTYRAMIDE
- D-FRUCTOSE
- MALONAMIDE
- M-NITROTOLUENE

Projects Library Explorer

Mathematics

Adjust X-Axis

Calculate

Reset

- пошук в базах
- вибір імовірних

836.167175 [1/cm] , -26.261494 [%T]

Department:

Operator: ahm

LabCognition