

## **ФІЗИЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ РЕЧОВИН НА ПРИКЛАДІ ІЧ-СПЕКТРОСКОПІЇ**

**Расць Вікторія Володимирівна,**  
здобувач вищої освіти IV курсу, [victoria.vladimirovna24@gmail.com](mailto:victoria.vladimirovna24@gmail.com)  
Житомирський державний університет імені Івана Франка, Україна

**Кичкирук Ольга Юріївна,**  
кандидат хімічних наук, доцент, [panova\\_o\\_yu@ukr.net](mailto:panova_o_yu@ukr.net)  
Житомирський державний університет імені Івана Франка, Україна

Фізичні методи дослідження важливі для розуміння властивостей різних речовин і систем. Одним з найбільш поширених і корисних аналітичних методів є інфрачервона спектроскопія (IR spectroscopy), яка дозволяє вивчати взаємодію молекул, атомів і інфрачервоного випромінювання [1].

Інфрачервоне випромінювання було відкрито астрономом Вільямом Гершелем у 1800 році. Використовуючи призму, він спостерігав підвищення температури в області, розташованій за червоною межею спектра видимого світла. У період з 1882 по 1900 рік Вільям Ебні та Едвард Фестінг записали інфрачервоні спектри 52 сполук від 0,1 до 1,2 мкм і порівняли отримані смуги поглинання з функціональними групами молекули. У 1903 році американський фізик Вільям Кобленц використав призму хлориду натрію, щоб отримати дуже повний і точний ІЧ-спектр для багатьох сполук. Відсутність необхідного обладнання зробило перші експерименти з реєстрації ІЧ-спектру трудомісткими [3].

Інфрачервона спектроскопія отримала подальший розвиток після Другої світової війни: сигнал спектрометра був посилений, що скоротило час експерименту в 2-4 рази. Була розроблена технологія виготовлення термоелектричних приймачів з коротким часом відгуку, що дозволило зрушувати вимірювання в часі. Останнє призвело до створення 2-променевих пристроїв, шкали яких були відкалібровані за шкалою пропускання в залежності від довжини хвилі або хвильового числа. Подальші роботи по створенню більш точного і сучасного спектрометра були пов'язані з отриманням високоякісних кристалів галогенідів лужних металів, необхідних для створення оптичних елементів приладу. Наприклад, синтетично отриманий бромід калію може реєструвати ІЧ-спектри до 400 см<sup>-1</sup> з попередньою межею 650 см<sup>-1</sup>, на відміну від раніше використовуваного хлориду натрію (кам'яної солі).

Інфрачервоний (ІЧ) діапазон електромагнітного спектру розташований між видимим світлом і мікрохвильовими радіохвилями. Цей діапазон включає хвилі довжиною від 750 нм до 1 мм. Інфрачервона спектроскопія використовує цей діапазон для вивчення взаємодії між змінними частотами молекул і коливаннями (коливаннями і обертальними рухами) і інфрачервоним випромінюванням. Основним інструментом ІЧ-спектроскопії є ІЧ-спектрофотометр, який може вимірювати поглинання ІЧ-світла різними речовинами [2].

Варто зазначити, що коли інфрачервоне світло проходить через зразок, де молекула поглинає певну інфрачервону хвилю, спектрофотометр реєструє це поглинання. Ці дані можуть бути представлені у вигляді ІЧ-спектрів, в яких частота (або хвильове число) відображається на одній осі, а значення поглинання - на іншій. Пляжна спектроскопія має широкий спектр застосувань у науці та промисловості. Є кілька галузей промисловості, де цей метод незамінний.

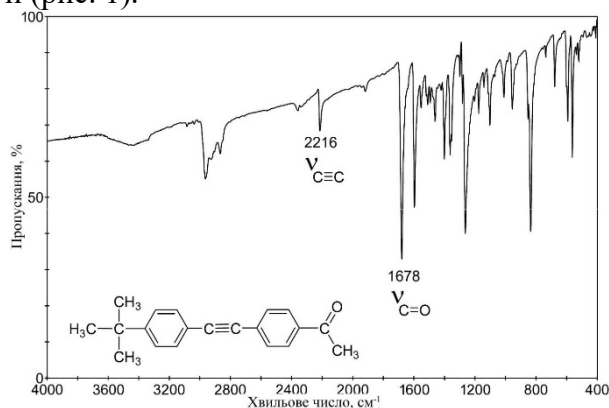
ІЧ-спектроскопія використовується для ідентифікації сполук, що містять органічні та неорганічні сполуки. Це допомагає хімікам визначати склад речовин і контролювати якість продукції. У фармацевтиці ІЧ-спектроскопія використовується для аналізу фармацевтичних речовин та контролю якості фармацевтичних препаратів. Цей метод використовується при аналізі харчових продуктів, включаючи визначення складу, якості та виявлення забруднюючих речовин. Інфрачервона спектроскопія допомагає вивчати структуру та властивості таких матеріалів, як пластмаси, полімери та кристали. У біологічних науках ІЧ-

спектроскопія використовується для вивчення біомолекул, таких як білки та нуклеїнові кислоти. До переваг інфрачервоної спектроскопії можна віднести такі: інфрачервоне світло не взаємодіє з водою, що дозволяє проводити аналіз у вологому середовищі, можливий аналіз без руйнування зразків, можна вимірювати досить малі концентрації речовин; цей метод знаходить застосування в багатьох галузях, від хімії та фармації до харчової промисловості та матеріалознавства; широко використовується для фундаментальних і прикладних досліджень, а також для управління виробничими процесами. Його можна використовувати для дослідження газоподібних, рідких і твердих речовин [1].

ІЧ-спектроскопія найчастіше використовується в органічній хімії та в хімії полімерних сполук для встановлення структури молекули або наявності функціональних груп, а також для ідентифікації речовин. Завдяки простоті цього методу і можливості його автоматизації інфрачервона спектроскопія широко використовується в наукових лабораторіях і є надійним засобом моніторингу хімічного виробництва. Інфрачервона (ІЧ) спектроскопія є потужним інструментом для аналізу ідентифікації речовин на основі їх взаємодії з інфрачервоним випромінюванням. Цей фізичний метод дослідження використовує характеристики молекулярних вібрацій, які відображаються у ІЧ спектрах речовин. Основна ідея полягає в тому, що кожна речовина має унікальний ІЧ спектр, що дозволяє не тільки ідентифікувати сполуки, але й вивчати їх структуру та конформацію.

Основні області ІЧ-спектроскопії [3]: 4000-2500 $\text{cm}^{-1}$ . Поле коливань валентних електронів простих зв'язків: О-Н, N-H, С-Н, S-H; 2500-1500 $\text{cm}^{-1}$ . Валентне коливальне поле множинних зв'язків: С = С, С = О, С = N, ССС, CNN 1500-500 $\text{cm}^{-1}$ . Площа валентних коливань простих зв'язків: С-С, С-N, С-О і деформаційні коливання простих зв'язків: С-Н, О-Н, N-H інтенсивність ліній поглинання в цьому грудні індивідуальна для кожної органічної сполуки.

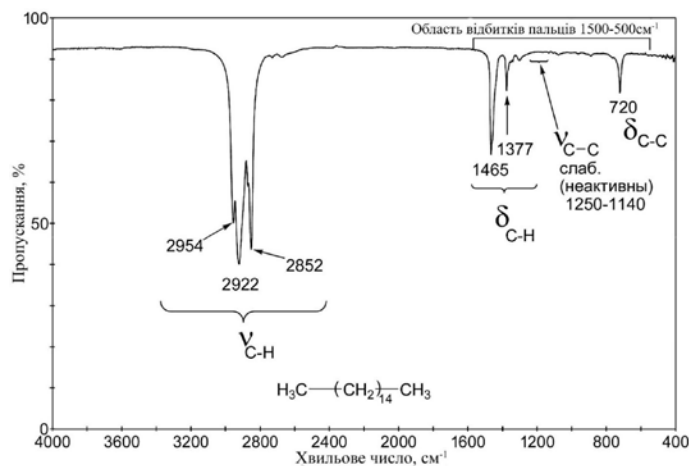
Отже, ІЧ-спектр молекули - це серія піків або смуг поглинання, які описують відповідні переходи коливальної енергії (рис. 1).



**Рис. 1.** Приклад ІЧ-спектру

Аналіз ІЧ-спектра досліджуваної речовини зводиться до пошуку характерних смуг поглинання з урахуванням значення максимальної частоти поглинання, форми і щільності смуг і їх зіставлення з відповідними структурними елементами. Інтенсивність смуги позначається у відсотках ( % ) як поглинання (J) або пропускання (R) світла. Смуги поглинання порівнюються один з одним і згруповані в сильні, середні і слабкі (рис. 2) [2].

ІЧ-спектрометр дозволяє реєструвати спектри газів, рідин і твердих речовин. Для отримання ІЧ-спектру потрібно 1-10 мг досліджуваної речовини. Реєстрація ІЧ-спектру здійснюється у ваннах з броміду калію KBr або хлориду натрію NaCl, матеріалу, який не поглинає ІЧ-випромінювання.



**Рис. 2.** Інфрачервоний спектр органічної сполуки

Отже, фізичні методи дослідження, зокрема інфрачервона (ІЧ) спектроскопія, грають важливу роль у різних галузях науки і технологій. Основні особливості цього методу полягають у використанні інфрачервоного випромінювання для аналізу хімічних сполук та властивостей матеріалів. Один з головних плюсів фізичних методів, включаючи ІЧ спектроскопію, полягає в тому, що вони зазвичай не потребують фізичного контакту з об'єктом дослідження. Це дозволяє вивчати матеріали та процеси без їхнього пошкодження чи зміни.

1. Azevedo H. L., Monken H. R., Melo V. P. Study of Heavy Metal Pollution in the Tributary Rivers of the Jacarepaga Lagoon, Rio de Janeiro State, Brazil. Through Sediment Analysis. Springer-Verlag. Berlin. Heidelberg. 1988. P. 21–29.

2. Balasubramanian G., Senthil A. M. On the empirical study of elemental analysis and metal testing using XRF spectrum analysis algorithm. Int J and Appl Sci Eng. 2016. V. 3 (1). P. 61-67.

3. Яцков М. В., Буденкова Н. М., Мисіна О. І. Фізична та колоїдна хімія. Навч. посібник. Рівне: НУВГП, 2016. 164 с.