

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ  
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

ФИЗТЕХ-ШКОЛА ЭЛЕКТРОНИКИ, ФОТОНИКИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ

ПРАКТИКУМ КАФЕДРЫ ФОТОНИКИ

## Основы инфракрасной спектроскопии

выполнили студенты 654а группы ФЭФМ

Агафонов Владислав  
Карпова Татьяна

# Содержание

<b>1</b>	<b>Цель работы</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Теоретические положения</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Экспериментальная установка</b>	<b>3</b>
<b>4</b>	<b>Результаты измерений</b>	<b>3</b>
4.1	Порядок измерений и обработки результатов . . . . .	3
4.2	Спектр пропускания воды . . . . .	3
4.3	Спектр пропускания этанола . . . . .	4
4.4	Спектр пропускания растворов хлорида натрия и глюкозы . . . . .	4
4.5	Спектр пропускания яичного белка . . . . .	6
<b>5</b>	<b>Вывод</b>	<b>7</b>

# 1 Цель работы

Ознакомление с основами инфракрасной спектроскопии; измерение спектров следующих веществ:

- вода
- этанол
- глюкоза
- хлорид натрия
- яичный белок

в диапазоне  $0.85 - 1.7 \mu\text{м}$

## 2 Теоретические положения

**Спектроскопия** – раздел физики, изучающий взаимодействие между веществом и излучением. Методы спектроскопии используются для исследования энергетической структуры атомов, молекул и макроскопических тел, образованных из них. Спектроскопия является важнейшим методом исследования в физике, химии, астрономии и медицине. Спектры атомов и молекул чаще всего состоят из серий *спектральных линий*, каждая из которых характеризует резонанс между двумя квантовыми состояниями. Объяснение этих серий и спектральных характеристик, связанных с ними, было одним из толчков к созданию квантово-механической теории. Так, например, спектральные линии водорода были впервые объяснены с помощью модели водородоподобного атома Бора.

Методы спектроскопии классифицируются различными способами:

- по типу излучения (электромагнитные и акустические волны, волны де Бройля)
- по природе взаимодействия (спектроскопия поглощения и рассеяния (упругого и неупругого), импедансная спектроскопия)
- по типу исследуемого вещества (атомная, электронная, ядерная спектроскопия)

В данной работе исследуется метод инфракрасной спектроскопии поглощения.

Объединение атомов в молекулы приводит к появлению новых энергетических состояний и, соответственно, уникальных для каждого типа молекул переходов между этими состояниями. Каждое вещество имеет уникальный спектр, отражающий эти переходы; по свойствам спектра можно делать выводы о составе и строении вещества. Различают 3 основных типа энергетических уровней, переходы между которыми наблюдаются в молекулярных спектрах: вращательные, колебательные и электронные.

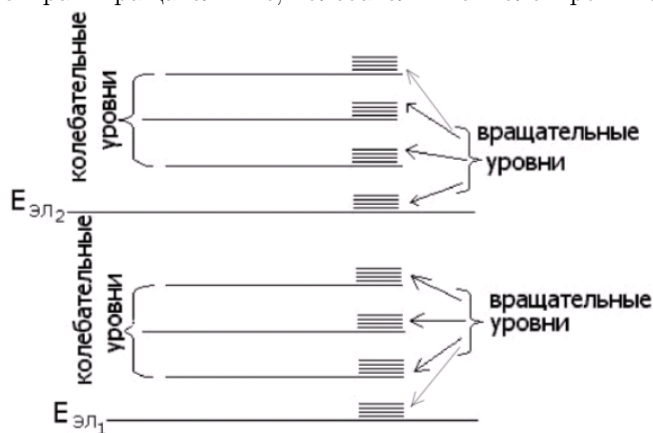


Рис. 1: Схема энергетических уровней двухатомной молекулы

1. **Вращательные уровни** ( $10^{-5} - 10^{-3}$  эВ) отвечают коллективному движению атомов в молекуле; исследуются методами микроволновой спектроскопии
2. **Колебательные переходы** ( $10^{-2} - 10^{-1}$  эВ) отвечают относительному движению атомов в молекуле; исследуются методами инфракрасной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния
3. **Электронные переходы** (1–10 эВ) – переходы между электронными орбиталями в атоме; исследуются методами спектроскопии видимого и ультрафиолетового излучения

Возможны комбинированные переходы, например, электронный переход с возбуждением колебательных степеней свободы. На рис. 1 представлена схема энергетических уровней двухатомной молекулы (масштаб искажён)

### 3 Экспериментальная установка

Блок-схема экспериментальной установки для изучения метода инфракрасной спектроскопии поглощения представлена на рис. 2 (в дальнейшем установку будем называть спектрометром). Свет от лампы накаливания (1) коллимируется с помощью линзы (2) и проходит через кювету с исследуемым веществом (3). Затем с помощью линзы (4) свет фокусируется на вход одномодового волокна (5), подведённого к спектроанализатору Anritsu. Под кюветой находится нагревательный элемент Пельтье, предназначенный для нагревания исследуемого вещества. Для лучшего теплоотвода система из кюветы, линз и элемента Пельтье закреплена на радиаторе. Для лучшего теплоотвода система из кюветы, линз и элемента Пельтье закреплена на радиаторе.

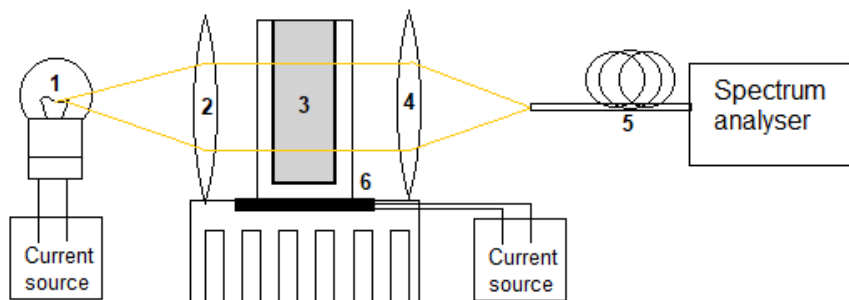


Рис. 2: Блок-схема спектрометрической установки

### 4 Результаты измерений

#### 4.1 Порядок измерений и обработки результатов

В первую очередь, с помощью спектрометра был получен спектр пустой кюветы. Далее были получены спектры исследуемых веществ в кювете. Итоговые спектры были получены путём вычитания из спектра «вещество+кювета» спектра кюветы. Спектр снимался в диапазоне длин волн от 600 нм до 1750 нм; далее представлены только участки спектров от 800 нм до 1350 нм (они не были зашумлены и содержат основную информацию об исследуемых веществах).

#### 4.2 Спектр пропускания воды

На рис. 4 представлен спектр пропускания воды, полученный с помощью спектрометра. В спектре прослеживаются пики поглощения на длинах волн 970 нм и 1200 нм. Они связаны с колебательными степенями свободы молекулы  $\text{H}_2\text{O}$ .

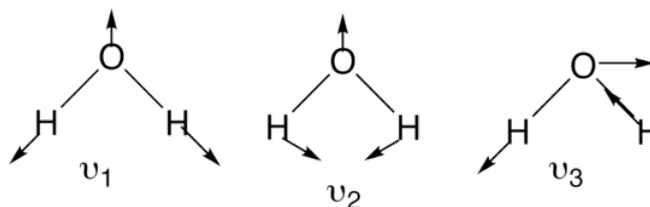


Рис. 3: Колебательные степени свободы в молекуле воды

В молекуле воды существуют три основных типа колебаний атомов: симметричное растяжение ( $\nu_1 = 3050$  нм), изгиб ( $\nu_2 = 6080$  нм) и асимметричное растяжение ( $\nu_3 = 2870$  нм). Колебания атомов в молекуле в каждом из случаев схематично изображены на рис. 3. Различные суперпозиции этих колебаний дают новые линии в спектре. Так, например, в спектре воды, измеренном в работе (рис. 3), наблюдаются пики поглощения, соответствующие сочетанию асимметричного и симметричного растяжений ( $a\nu_1 + b\nu_3 = 970$  нм,  $a + b = 3$ ), а также суперпозиции всех трёх видов колебаний ( $a\nu_1 + \nu_2 + b\nu_3 = 1200$  нм,  $a + b = 2$ ) (здесь везде  $a, b = 0, 1, 2, \dots$ )<sup>[1]</sup>.

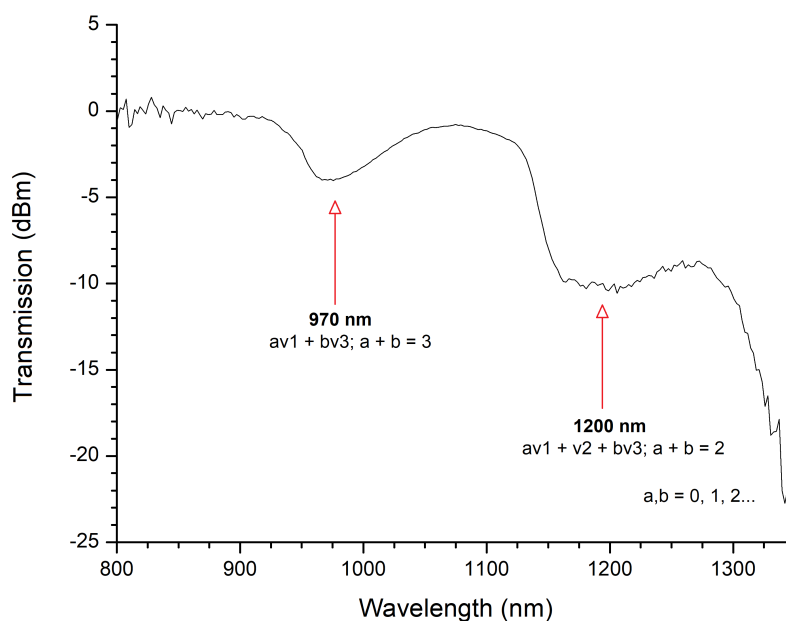


Рис. 4: Спектр пропускания воды в диапазоне длин волн 800-1350 нм

### 4.3 Спектр пропускания этанола

На рис. 5 представлен спектр пропускания этилового спирта, полученный с помощью спектрометра. В спектре чётко прослеживается пик поглощения на длине волны 1186 нм, также присутствуют небольшие пики поглощения на длинах волн 1150 и 1208 нм. Эти линии соответствуют вторым обертонам колебаний связи С–Н (связь С–Н в  $\text{CH}_3$  для длин волн 1150 и 1186 нм и в  $\text{CH}_2$  для длины волны 1208 нм)<sup>[2]</sup>.

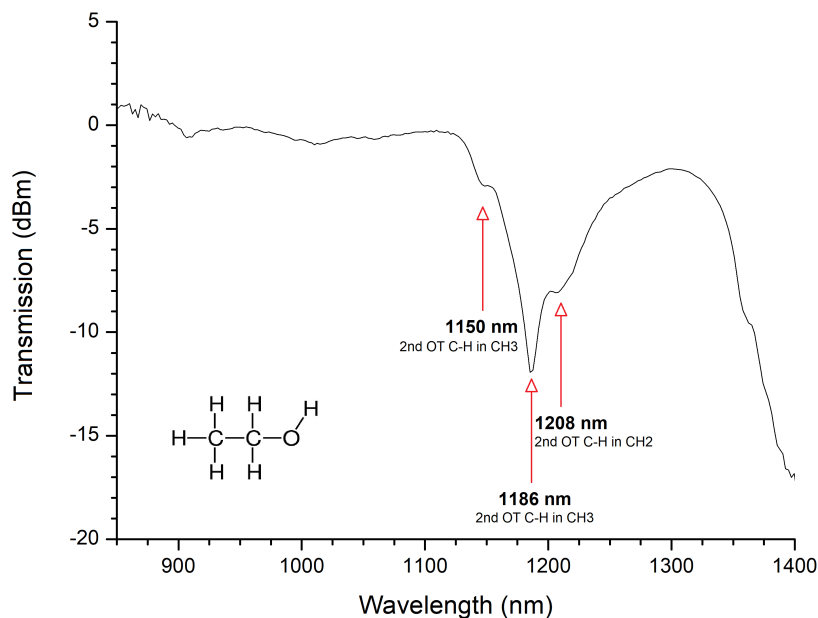


Рис. 5: Спектр пропускания этанола в диапазоне длин волн 800-1350 нм

### 4.4 Спектр пропускания растворов хлорида натрия и глюкозы

Для исследования спектров пропускания хлорида натрия и глюкозы были изготовлены водные растворы соответствующие растворы (20% раствор  $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$  и 15% раствор  $\text{NaCl}$ ). Спектры пропускания растворов

представлены на рис. 6. Для сравнения на этом же рисунке приведён спектр пропускания воды, измеренный в п. 4.2.

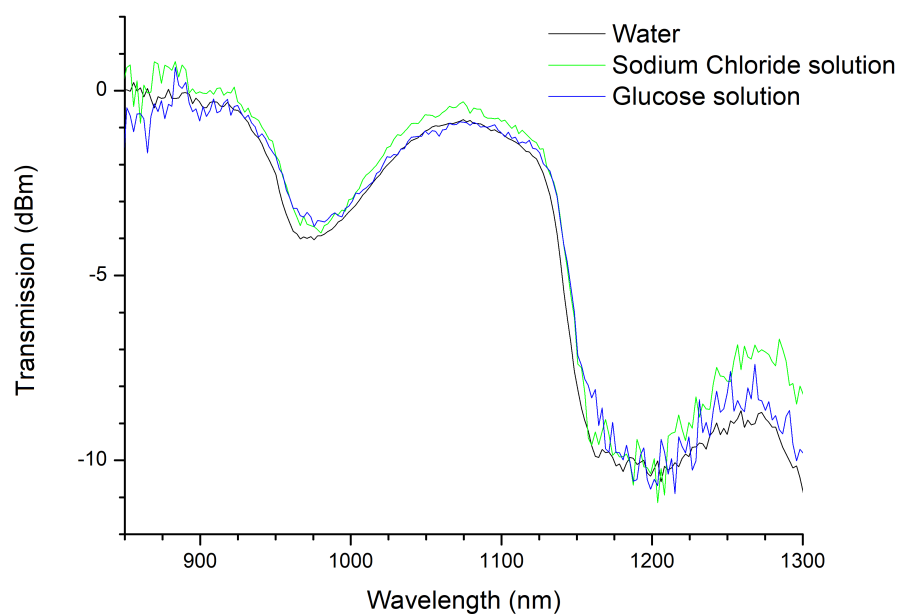


Рис. 6: Спектры пропускания водных растворов глюкозы и хлорида натрия в диапазоне длин волн 800-1350 нм

Видно, что спектры пропускания водных растворов исследуемых веществ практически не отличаются от спектра пропускания воды. Для более детального анализа можно вычесть из спектров растворов спектр воды (полученные спектры представлены на рис. 7).

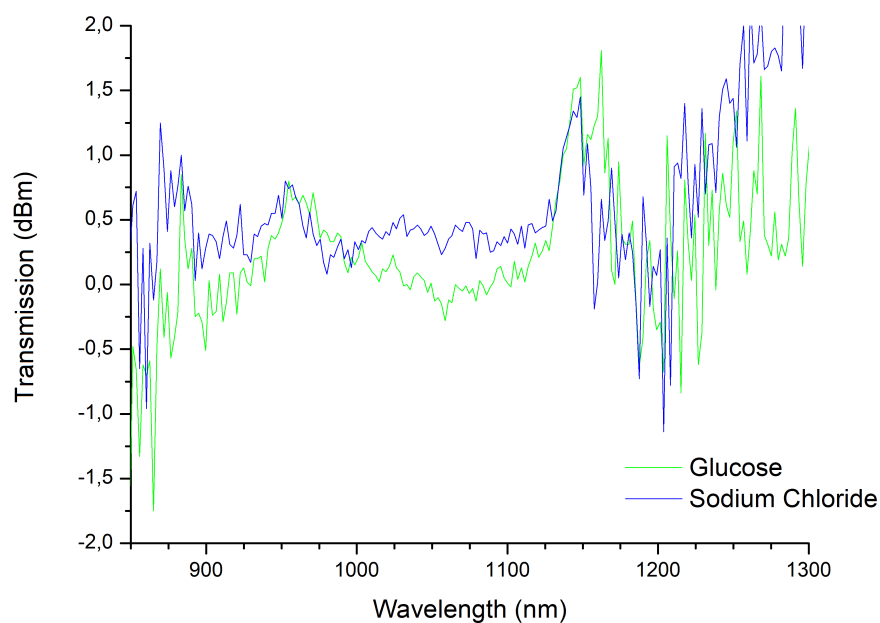


Рис. 7: Спектры пропускания водных растворов глюкозы и хлорида натрия с вычтенным спектром пропускания воды в диапазоне длин волн 800-1350 нм

В спектрах практически не наблюдаются резкие пики поглощения. В спектре глюкозы присутствует широкий, но неглубокий пик поглощения на длине волны 1050 нм. Возможно, он связан с колебанием связи С–Н в молекуле глюкозы. Также у глюкозы и у хлорида натрия наблюдается небольшой пик поглощения на 1200 нм; вероятно, он также связан с колебаниями в молекулах.

## 4.5 Спектр пропускания яичного белка

На рис. 8 приведена эволюция спектров пропускания яичного белка при его постепенном нагреве. Кювета с белком нагревалась с помощью элемента Пельтье, раз в 5 минут снимался спектр пропускания образца.

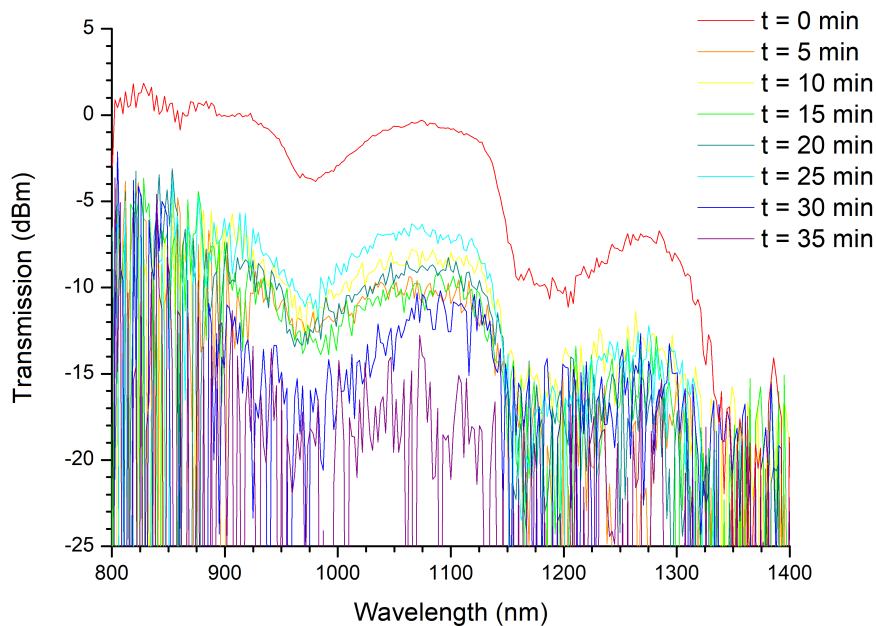


Рис. 8: Спектры пропускания яичного белка в зависимости от длительности нагрева в диапазоне длин волн 800-1350 нм

Можно видеть, что при нагревании яичного белка интенсивность света, проходящего через образец, уменьшается. При увеличении температуры белка он начинает коагулировать, свет рассеивается на коагулировавших молекулах белка, соответственно, пропускание образца уменьшается.

Сравним спектры пропускания яичного желтка и воды (рис. 9) и заметим, что основные пики поглощения (970 и 1200 нм) у этих веществ совпадают. Можно сделать вывод, что основную часть белка составляет вода (согласно [Википедии](#), вода составляет около 90% белка).

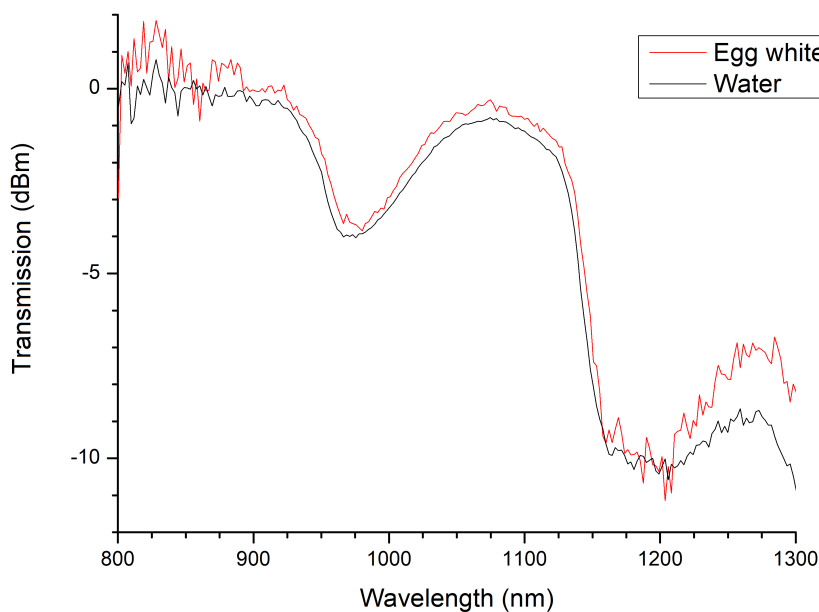


Рис. 9: Спектры пропускания яичного белка и воды в диапазоне длин волн 800-1350 нм

## 5 Вывод

В ходе работы были изучены основные принципы спектроскопии, и с помощью собранного ИК-спектрометра измерены спектры пропускания различных веществ в диапазоне 800-1350 нм.

1. В спектре пропускания воды обнаружены спектральные линии, соответствующие суперпозициям различных колебаний атомов в молекуле  $\text{H}_2\text{O}$  (970 нм и 1200 нм)
2. В спектре пропускания этанола обнаружены спектральные линии, соответствующие колебаниям атомов в связях C–H (1150, 1186 и 1208 нм)
3. В спектрах водных растворов глюкозы и хлорида натрия не были выявлены характерные спектральные линий этих веществ; чётко прослеживаются только пики поглощения воды
4. В спектре яичного белка не было обнаружено характерных спектральных линий; основные пики поглощения совпали с уже полученными пиками поглощения воды
5. При нагревании яичного белка наблюдалось ослабление пропускания, связанное с рассеиванием света на коагулировавшем белке

Для более точного спектроскопического анализа необходимо использовать более широкий спектр длин волн ИК-диапазона, так как переходам между основными колебательными уровнями энергий в молекулах соответствуют длины волн порядка 2-10  $\mu\text{m}$ .

## Список литературы

- [1] Martin Chaplin, Water Absorption Spectrum ([http://www1.lsbu.ac.uk/water/water\\_vibrational\\_spectrum.html](http://www1.lsbu.ac.uk/water/water_vibrational_spectrum.html))
- [2] M. Schwanninger, J.C. Rodrigues and K. Fackler. A review of band assignments in near infrared spectra of wood and wood components – J. Near Infrared Spectrosc. 19, 287–308 (2011) (<https://journals.sagepub.com/doi/pdf/10.1255/jnirs.955>)