



**Қ. И. Сәтбаев атындағы Қазақ Ұлттық техникалық зерттеу
университеті**

**Пән: «ФУНКЦИОНАЛДЫ МАТЕРИАЛДАР МЕН
НАНОҚҰРЫЛЫМДАРДЫ АЛУ ӘДІСТЕРІ»**

Дәріс-11

**Спектроскопиялық әдістер: ИҚ (IR), УФ-Vis, Раман,
фотоэлектрондық спектроскопия**

7M07103 - Материалтану және жаңа материалдар технологиясы

5 (1/0/2/2) кредит

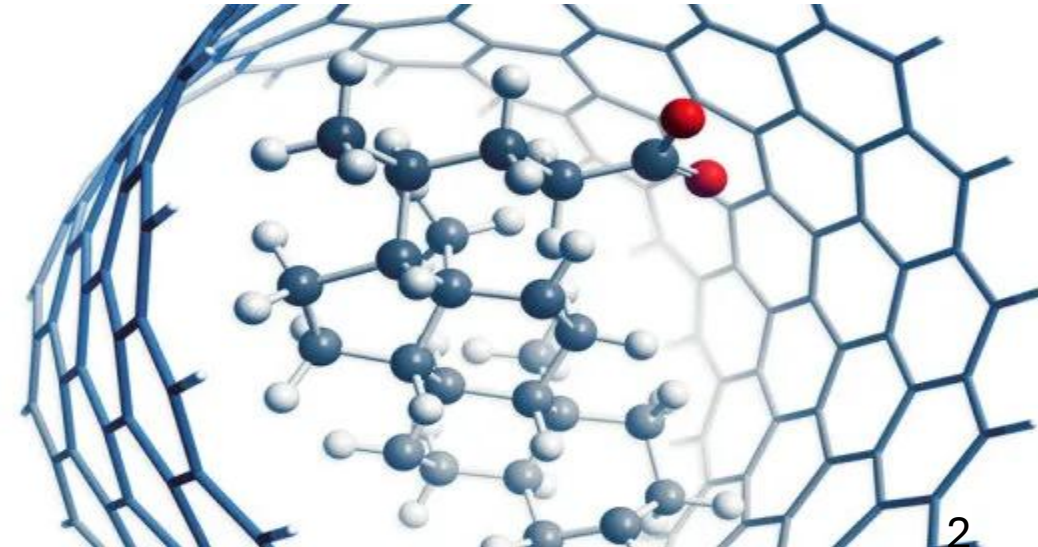
Семестр: 1, күзгі, 2025-2026 оқу жылы

Дәріскер – Керимкулова Алмагуль Рыскуловна

Спектроскопиялық әдістер: ИҚ (IR), УФ-Vis, Раман, фотоэлектрондық спектроскопия

Спектроскопия дегеніміз — заттың жарық (немесе электромагниттік сәуле) арқылы өзара әрекеттесуін зерттейтін талдау әдістерінің жиынтығы. Осы презентацияда мына әдістер қарастырылады: Infrared spectroscopy (ИҚ) Ultraviolet–visible spectroscopy (УФ-Vis) Raman spectroscopy (Раман) Photoelectron spectroscopy (фотоэлектрондық спектроскопия)

Әр әдістің: шығу тарихы, жұмыс принципі, жабдықтары, қандай талдау беретіндігі қарастырылады. Бұл әдістер материалыңыздың құрылымын, құрамын, беткі қабатын, химиялық байланыстарын анықтауда маңызды.



IR-спектроскопия (ИК)

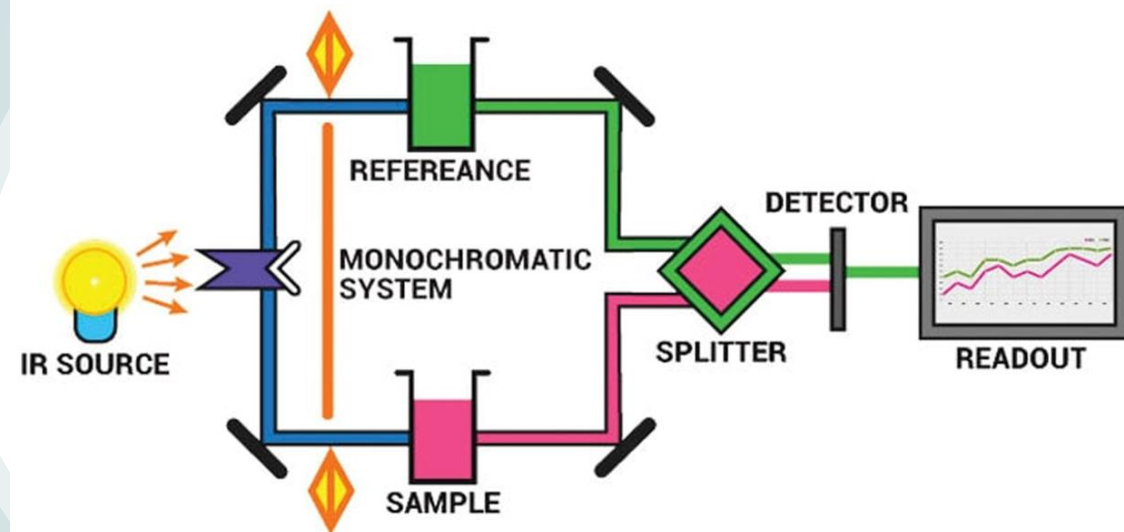
Шығу тарихы

Инфрақызыл сәуле алғаш рет William Herschel тарапынан 1800 жылы күн сәулесін призмамен жіктеп, қызыл сыртындағы “жылулық” сәулені өлшеу арқылы табылған. 11900-жж басында William Weber Coblentz органикалық қосылыстардың IR спектрлерін жинаған. 11940-жж орта кезінде АҚШ пен Жапонияда коммерциялық инфрақызыл спектрометрлер пайда болды.

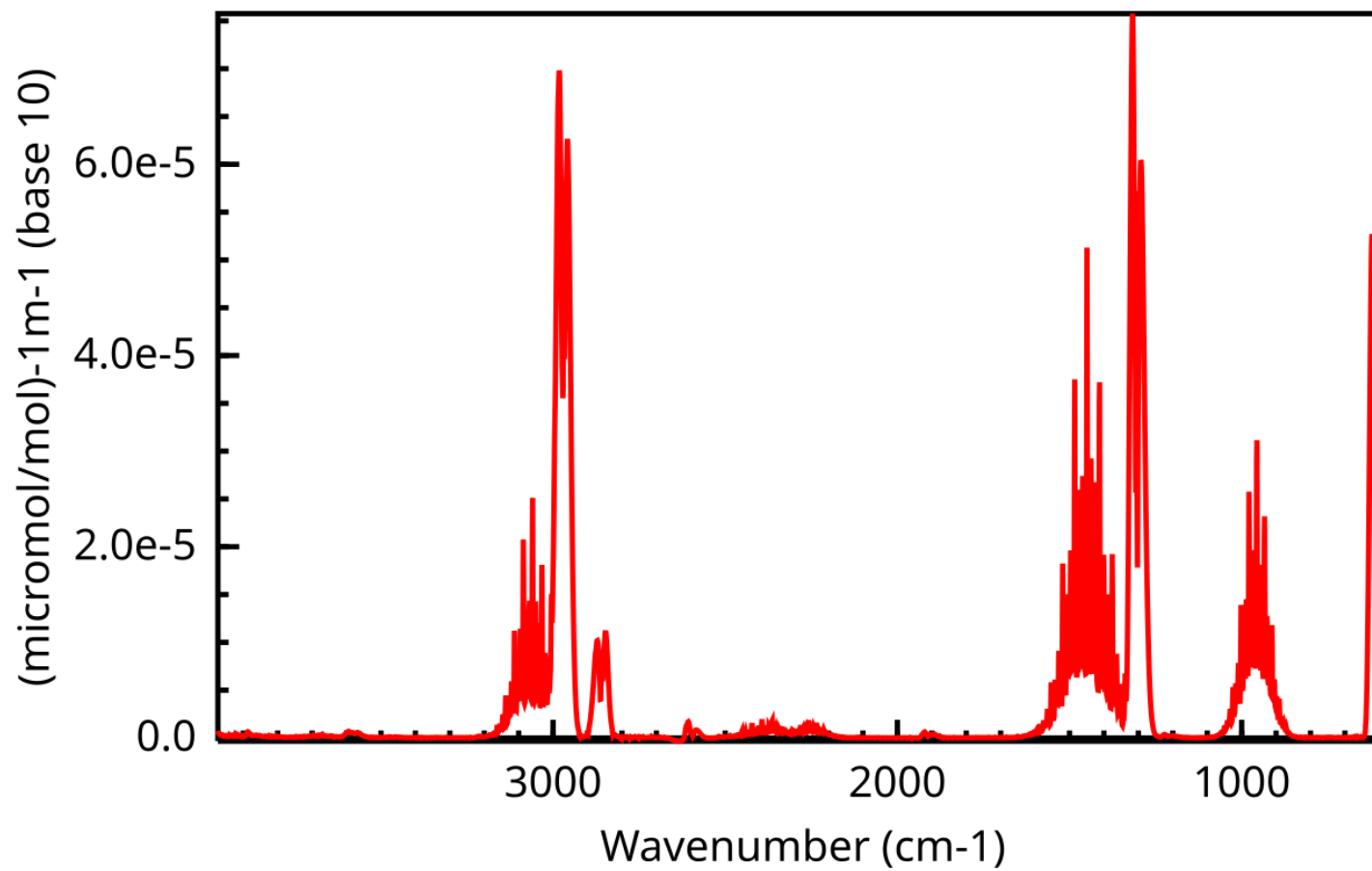
Инфрақызыл спектроскопия -ның өзара әрекеттесуін өлшеу болып табылады инфрақызыл бірге сәулелену зат арқылы сіңіру, эмиссия, немесе шағылысу. Ол зерттеу және анықтау үшін қолданылады химиялық заттар немесе функционалды топтар қатты, сұйық немесе газ күйінде. Оның көмегімен жаңа материалдарды сипаттауға немесе белгілі және белгісіз үлгілерді анықтауға және тексеруге болады. Инфрақызыл спектроскопияның әдісі немесе әдістемесі деп аталатын құралмен жүзеге асырылады инфрақызыл спектрометр (немесе спектрофотометр) шығарады инфрақызыл спектр.

Жұмыс істеу принципі

- Молекулалар инфрақызыл (IR) сәулені сіңіргенде, оның атом-атом байланыстары вибрациялық және/немесе айналмалы қозғалыстар арқылы энергия қабылдайды.
- IR диапазоны шамамен 2500–16 000 нм немесе жиілік жағынан $\sim 1.9 \times 10^{13}$ – 1.2×10^{14} Гц.
- Егер молекулада диполь моменті бар байланыс болса, онда ол IR сәулесін сіңіруге қабілетті.
- Жалпы: жарық көзінен шыққан IR сәуле үлгіден өтіп, детекторға жетеді; сіңірілген толқын ұзындықтары спектрде «басылған» шеттер ретінде көрінеді. Бұл арқылы байланыстардың түрі мен функционал топтар анықталады.

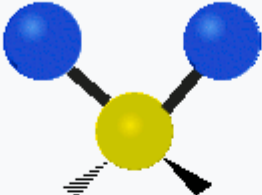
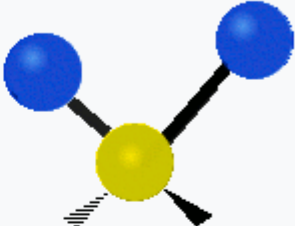
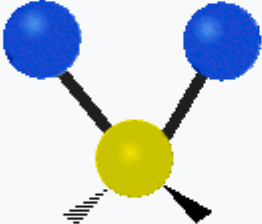
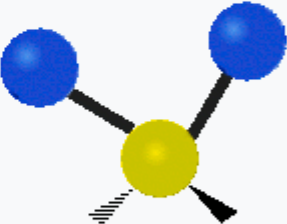
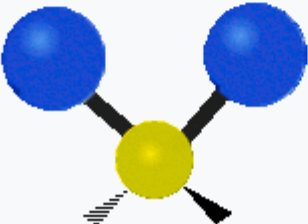
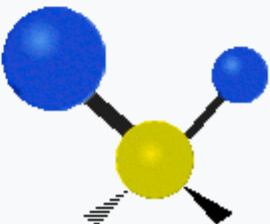


Bromomethane
INFRARED SPECTRUM



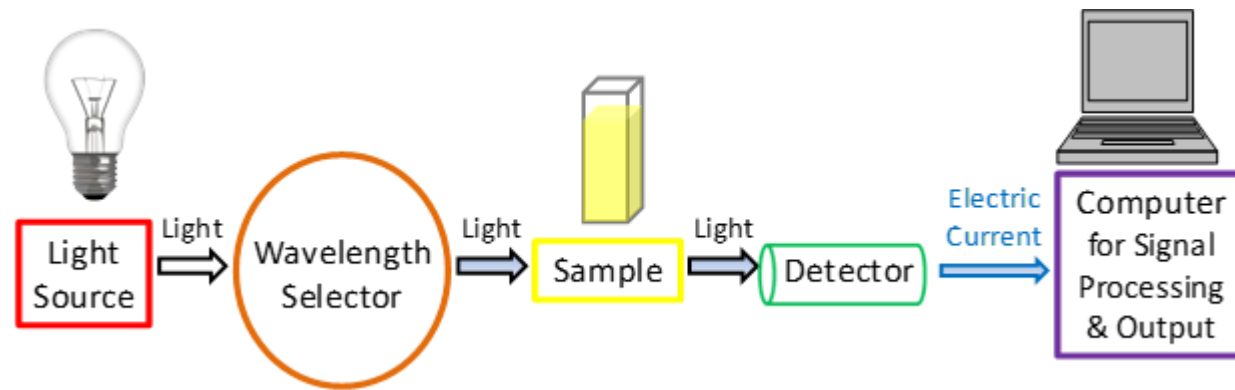
NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>)

Молекуладағы атомдар санына байланысты тербеліс режимдерінің саны анықталады. Егер молекула сызықтық болса, онда тербеліс режимдері $3N-5$ формуласы бойынша, ал сызықтық емес болса $3N-6$ формуласы бойынша есептеледі. Мысалы, көмірқышқыл газы (CO_2) — сызықтық молекула және оның 4 тербеліс режимі бар, ал су (H_2O) — сызықтық емес молекула, оның 3 тербеліс режимі бар. ИҚ белсенді болу үшін тербеліс кезінде молекуланың дипольдік моменті өзгеруі қажет. Симметриялы молекулалар, мысалы N_2 , ИҚ спектрінде көрінбейді, бірақ Раман спектрінде байқалады. Ал асимметриялы молекулалар, мысалы CO , ИҚ спектрінде сіңіру жолақтарына ие. Күрделі молекулаларда көптеген байланыстар болғандықтан, олардың ИҚ спектрлерінде көптеген шыңдар байқалады. Мысалы, H_2X_2 типті молекулаларда тоғыз түрлі тербеліс режимі болуы мүмкін — созылу, иілу, бұлау және бұралу сияқты.

Симметрия \ Бағыт	Симметриялық	Симметрияға қарсы
Радиалды	 Симметриялық созылу (v_s)	 Антисимметриялық созылу ($v_{\text{сияқты}}$)
Ендік	 Қайшы (δ)	 Тербеліс (ρ)
Бойлық	 Тербеліс (ω)	 Бұралу (τ)

Симметриялы созылу-қысу режимінің 3D анимациясы С–Н байланыстары туралы бромметан

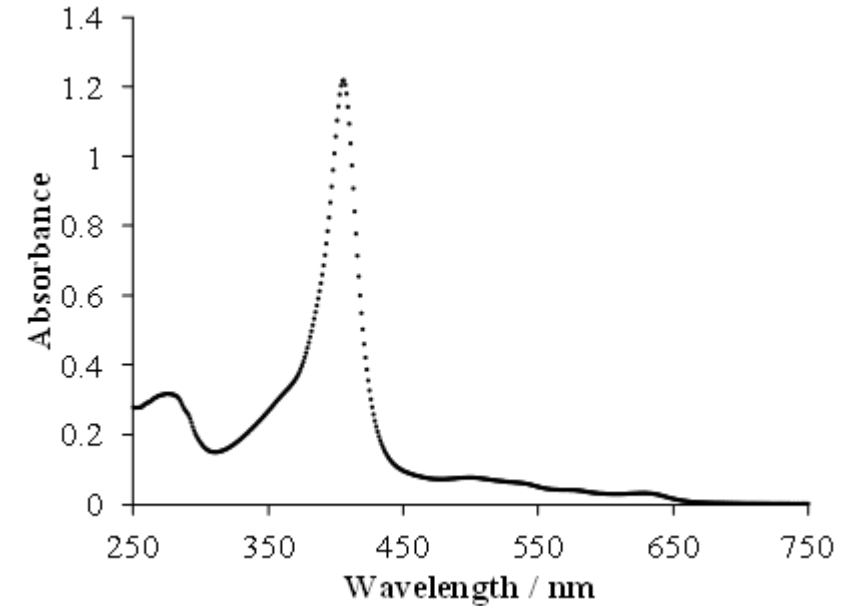
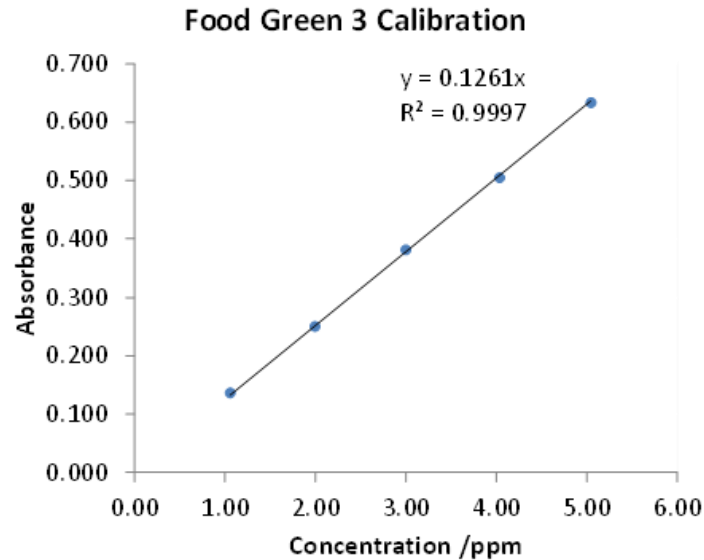
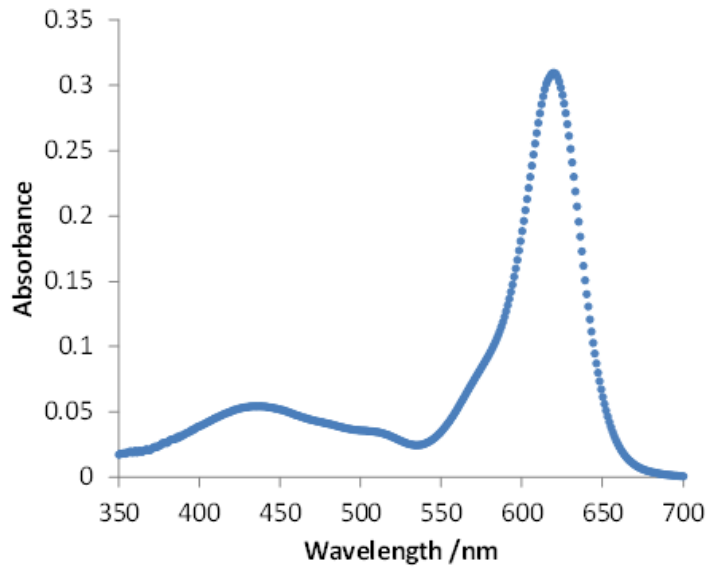
Ультракүлгін-көрінетін спектроскопия (УФ-Vis) - бактериялық өсіруден, дәрілік заттарды анықтаудан, тазалықты тексеруден және нуклеин қышқылын сандық анықтаудан бастап, сусындар өндірісі мен химиялық зерттеулердегі сапаны бақылауға дейін көптеген ғылыми салаларда кеңінен қолданылатын әдіс. Бұл мақалада УК-ККС спектроскопиясының жұмыс принципі, алынған деректерді талдау әдістері, бұл әдістің артықшылықтары мен шектеулері және оның кейбір қолданылуы сипатталған.



УК-Вис спектрофотометрінің негізгі компоненттерінің жеңілдетілген диаграммасы.

УФ-Vis спектроскопиясында жарық көзі маңызды рөл атқарады, себебі бұл әдіс жарықты қолдануға негізделген. Көбінесе кең толқын ұзындығын шығаратын ксенон шамы қолданылады, бірақ ол қымбат әрі тұрақсыз. Сондықтан екі шамнан тұратын жүйелер жиі пайдаланылады: көрінетін аймақ үшін вольфрам немесе галоген шамы, ал ультракүлгін аймақ үшін дейтерий шамы қолданылады. Өлшеу кезінде шамдардың ауысуы әдетте 300–350 нм диапазонында жүреді, себебі бұл аймақта екі шамның жарық интенсивтілігі теңеседі. Үлгіге сәйкес белгілі толқын ұзындығын таңдау үшін монохроматор немесе түрлі фильтрлер пайдаланылады. Монохроматор жарықты дифракциялық тор арқылы бөледі және қажетті толқын ұзындығын таңдайды. Абсорбциялық және интерференциялық фильтрлер қажетсіз толқын ұзындықтарын сіңіреді немесе жояды. Интерференциялық фильтрлер бірнеше диэлектрлік қабаттардан тұрады және деструктивті интерференция арқылы қажетсіз жарықты бөгейді. Монохроматор мен фильтрлердің үйлесуі өлшеудің дәлдігін арттырып, сигнал мен шумдың арақатынасын жақсартады.

«Cloudy» және «Octopus-like» бөлшектер



Үлгіден алынған Food Green 3-тің УК көрінетін спектрі сол жақ графикте көрсетілген. Оң жақ графикте көрсетілген калибрлеу қисығы ең кіші квадраттар әдісіне негізделген сызықтық регрессия теңдеуін қолдана отырып, Food Green 3 стандартты сұйылтылған ерітінділері негізінде құрастырылған.

УК-көрінетін спектрофотометрді пайдаланып алынған тәуелсіздіктің мысалы.

Пайдаланылған әдебиеттер

- 1.Skoog, D. A., Holler, F. J., & Crouch, S. R. Principles of Instrumental Analysis. 7th ed. – Cengage Learning, 2017.
- 2.Pavia, D. L., Lampman, G. M., Kriz, G. S., & Vyvyan, J. A. Introduction to Spectroscopy. 5th ed. – Cengage Learning, 2014.
- 3.Hollas, J. M. Modern Spectroscopy. 4th ed. – Wiley, 2004.
- 4.Harris, D. C. Quantitative Chemical Analysis. 10th ed. – W. H. Freeman and Company, 2020.
- 5.Atkins, P. & de Paula, J. Physical Chemistry. 11th ed. – Oxford University Press, 2018.
- 6.Dyer, J. R. Applications of Absorption Spectroscopy of Organic Compounds. – Prentice Hall, 1987.
- 7.Lever, A. B. P. Inorganic Electronic Spectroscopy. 2nd ed. – Elsevier, 1984.