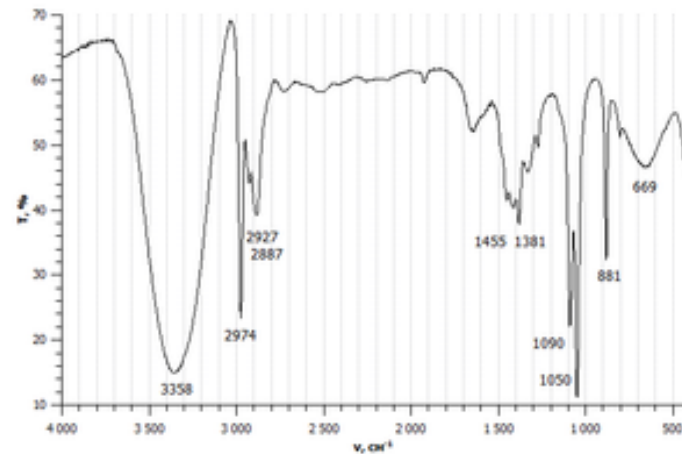


ЗЕРТТЕУДІҢ СПЕКТРЛІК ӘДІСТЕРІ

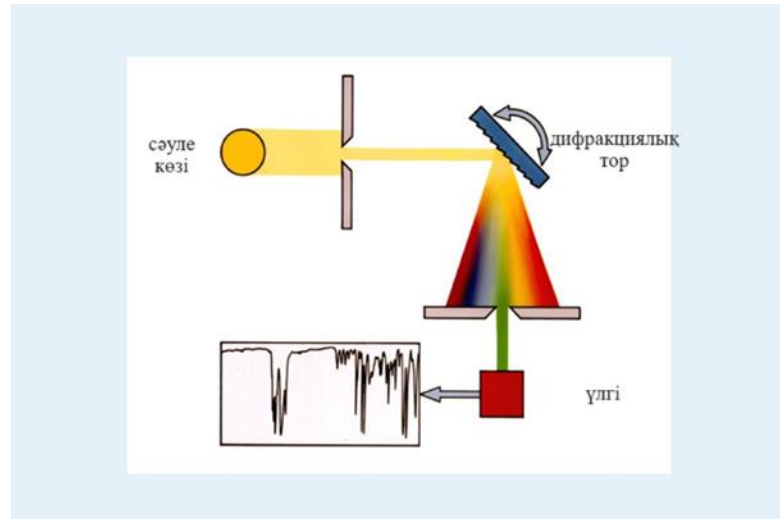
Дәріс-6. Наноматериалдарды зерттеуде ИҚ-спектроскопиясының қолданылуы.



Дәріскер: х.ғ.к., қауымдастырылған профессор
Керимкулова А.Р.

ИҚ спектроскопиясының жұмыс принципі келесідей:

- Инфрақызыл спектроскопия - инфрақызыл сәуле көрінетін диапазоннан тыс электромагниттік спектр аймағын алады. Оның көрінетін жарықпен салыстырғанда ұзын толқындары (әдетте 2,5–25 микрометр) бар. Әрбір молекулада оның химиялық сәйкестігін анықтайтын саусақ ізі сияқты ерекше тербелмелі спектр бар. Үлгінің ИҚ спектрін талдау арқылы ғалымдар бар молекулалардың түрлерін анықтай алады (1-сурет).



1-сурет. ИҚ спектроскопиясының жұмыс принципі

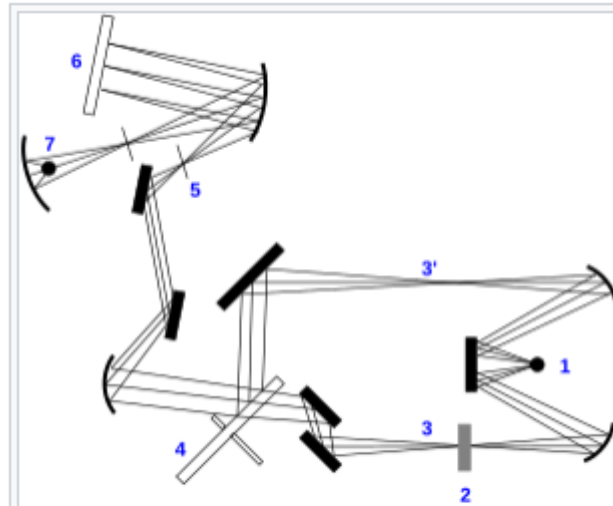
ИҚ спектроскопиясы күшті құрал болғанымен, ол дифракция шегі деп аталатын айтарлықтай кедергіге тап болады. ИҚ сәулеленуі үшін дифракция шегі ажыратымдылықты шамамен 5 микрометрге дейін шектейді.

- Жарықтың үлгімен әрекеттесуі: ИҚ спектрометрі молекулалардан тұратын үлгіге сәуле жібереді. Үлгідегі молекулалар осы сәулеленудің бір бөлігін олардың діріл және айналу режимдеріне сәйкес сіңіреді.
- Жұтылуды өлшеу: спектрометрдегі Детектор үлгі арқылы өткен сәулеленудің қарқындылығын өлшейді. Өлшенген сіңіру мәні сәулеленудің жиілігіне (немесе толқын санына) және үлгі молекулаларындағы сәйкес тербеліс пен айналу ауысуларына байланысты.
- Спектрді алу: үлгі арқылы өткеннен кейін сәулеленудің сіңірілген қарқындылығы спектр түрінде көрсетіледі, онда толқын саны немесе жиілігі көлденең ось бойымен, ал жұтылу шамасы тік ось бойымен тұндырылады. Спектр үлгідегі молекулалардың бірегей "ізін" білдіреді.

ИҚ спектроскопиясының ашылу тарихы



- 1800 жылы Уильям Гершель жарықтың әртүрлі түстерін қыздыру әсері бойынша эксперимент жасап көрінетін спектрдің қызыл шетінен көрінбейтін сәулеленуді тапты, оны инфрақызыл сәулелер деп атады.



Оптическая схема двухлучевого дисперсионного ИК-спектрометра: 1 — источник, 2 — образец, 3 — луч, проходящий через образец, 3' — луч сравнения, 4 — зеркало с секторами, 5 — щели, 6 — решётка, 7 — детектор

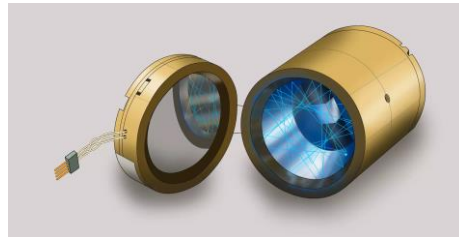
1940 жылдан бастап жарық көзінен, монохроматордан және детектордан тұратын дисперсиялық спектрометрлер қолданыла бастады.



Оптическая схема Фурье-ИК-спектрометра

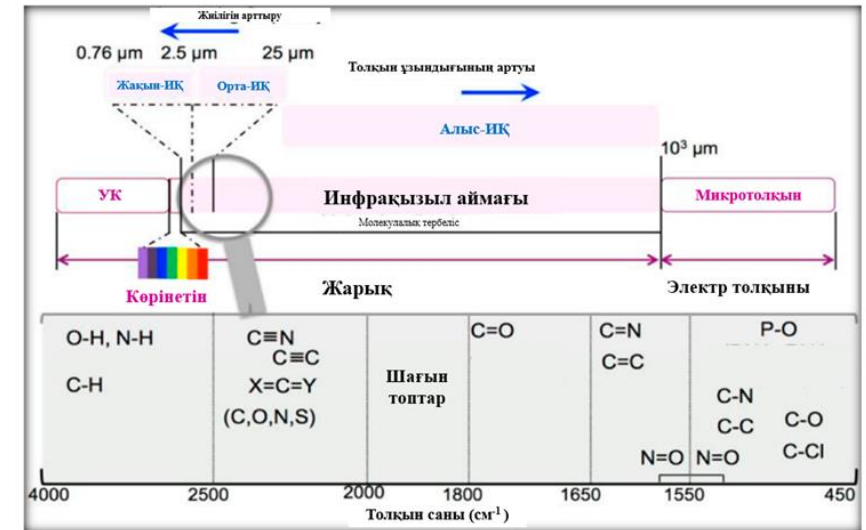
1960 жылдың ортасында Фурье түрлендіру (FT) техникасының пайда болуымен бұл салада прогрес қарқынды түрде дами бастады. Алғашқы коммерциялық FTIR спектрометрлері **1970** жылдардың ортасында кең тарады

XIX ғасырдың аяғы мен XX ғасырдың басында ғалымдар инфрақызыл сәулеленуді өлшеу және анықтау үшін **болومتر** жасады.



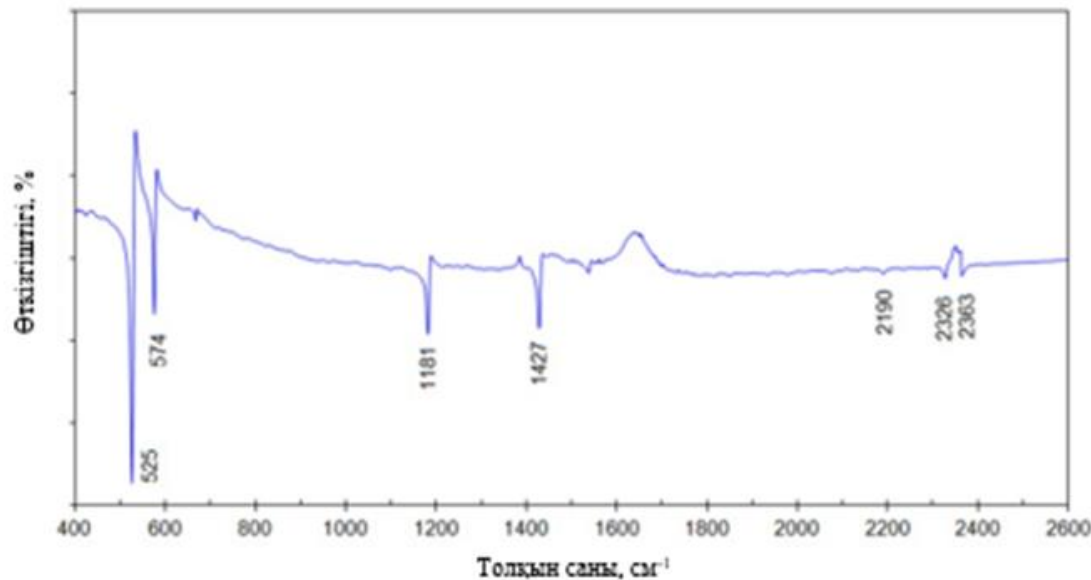
ИҚ спектроскопиясының жұмыс істеу принципі

- ИҚ-спектроскопия-заттардың молекулалық құрылымын зерттеу үшін кеңінен қолданылатын әдіс. ИҚ-спектроскопия 3 облысқа бөлінеді (2 сурет): алыс-ИҚ (FIR), орта-ИҚ (MIR) және жақын-ИҚ (NIR).
- - Жақын-ИҚ (NIR): Жоғары энергияға ие, шамамен 14000 - 4000 см^{-1} . Бұл облыс көрінетін спектрлермен байланысты және гармоникалық тербелістерді қоздыруға қабілетті.
- - Орта-ИҚ(MIR): Бұл облыс орташа энергияға ие, шамамен 4000-400 см^{-1} .
- - Алыс-ИҚ(FIR):Төмен энергияға ие, шамамен 400-10 см^{-1} . Электромагниттік спектрдің радиолокациялық және микротолқынды аймақтарына жақын. Спектроскопияда айналмалы қозғалыс үшін қолдануға болады.



Наноматериалдарды ИҚ спектроскопиясын қолдана отырып талдау Фуллерендерді ИҚ спектроскопия арқылы зерттеу

Шамамен 528, 577, 1183 және 1429 см⁻¹ инфрақызыл сіңіру жолақтары таза С60 фуллереніне жатады, ал күшті шыңдар, шамамен, 509 см⁻¹ және 740 см⁻¹ тығыздығы жоғары С60 фуллереніне тән. Зерттелген үлгінің инфрақызыл спектрінде (3-сурет) С–С тербелмелі режимдеріне жататын 525, 574, 1181 және 1427 см⁻¹-де айқын фуллерен шыңдары байқалады, оның жоғары симметриясын ескере отырып, бос кесілген икосаэдрлік молекула осы төрт күшті шыңды көрсетеді деп есептеледі.



3-сурет. Ум-Сохрангкев өзенінен табылған С60 фуллереннің инфрақызыл спектрінің 400-2600 см⁻¹ диапазонындағы көрінісі

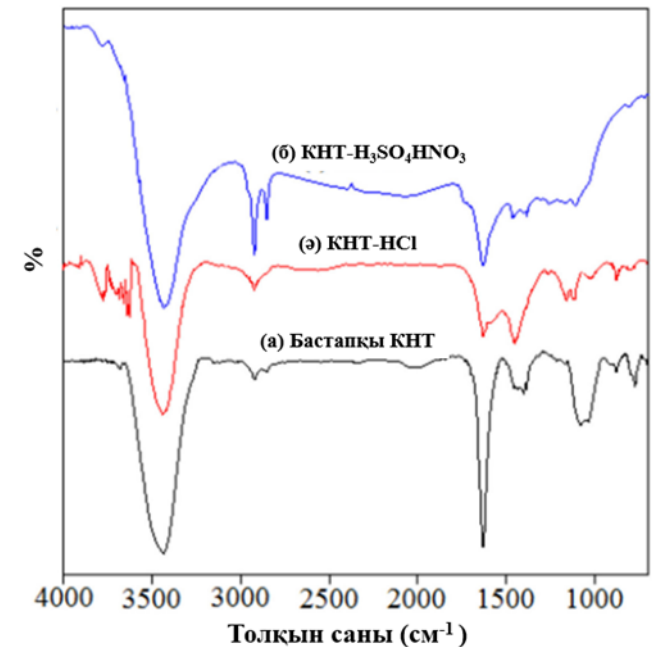
ИҚ-спектроскопиясы арқылы зерттелген КНТ үлгілері

- Миан Мухаммад-Ахсон Аслам және т.б. зерттеушілер КНТ-ні қышқылдармен және т.б. қосылыстармен модификациялап әртүрлі әдістермен құрылымын зерттеді. 4-ші суретте КНТ-дің ИҚ-спектрлері келтірілген.

Бастапқы КНТ спектрін талдау кезінде нанотүтікшелердің бетінде **ароматты сақиналарға тән** келетін **1600 см-1 болатын** жұтылу жолағын көруімізге болады.

2910-нан 2940 см-1 аралығындағы жолақ нанотүтікшелер бетінде **метилен тобы** бар екендігін көрсетеді.

Карбонил топтарының болуын 1735 см-1 шыңы арқылы көре аламыз. Ал, 1450 см-1 шыңы СН₂-нің ассиметриялық иілуін көрсетеді, бұл КНТ құрылымында ақаулардың болу мүмкіндігін сипаттайды.



4-сурет. КНТ-дің ИҚ-спектрлері: (а) бастапқы КНТ, (ә) НСІ-мен өңделген КНТ, (б) Н₂SO₄ және НNO₃ қоспасымен өңделген КНТ [157].

Көміртекті талшықтарды ИҚ спектроскопиясы арқылы талдау

Хосподарова В. және басқа да ғалымдар жұмыстарында ағаш целлюлозасы мен қайта өңделген қалдықтардан алынған целлюлозды талшықтарды ФТ-ИҚ көмегімен салыстырмалы зерттеу жүргізді және 5-ші суретте келтірілген.

3660 - 2900 см⁻¹ толқындар диапазонындағы шыңдар полисахаридтердегі ОН және СН байланыстарының созылу тербелістеріне тән екені көрсетілген.

3331 см⁻¹ кең шыңы полисахаридтердегі гидроксил тобының созылу діріліне, соның ішінде целлюлозадағы сутектік байланыстардың молекула аралық және молекула ішілік тербелістеріне тән.

2894 см⁻¹ жолағы полисахаридтердің барлық көмірсутекті компоненттерінің СН созылу тербелісіне жатады.

Целлюлозаға жататын типтік жолақтар 1630-900 см⁻¹ аймағында байқалды, мұндағы 1633 см⁻¹ шыңдары целлюлоза жұтқан су молекулаларының тербелісіне сәйкес келеді.

