



Application Note AN #88

## Использование спектрометра ALPHA для обучения ИК-Фурье спектроскопии

ИК-Фурье спектрометр ALPHA размером с лабораторный журнал прекрасно подходит для учебных лабораторий и классов. Он сочетает высокую чувствительность, обеспечиваемую высококачественной оптикой, стабильность измерений, высокую точность по волновому числу и доступную цену. Благодаря небольшому размеру ALPHA может быть размещен практически везде. Он хорошо подходит как для учебных, так и для исследовательских задач как надежный и прочный прибор. Проще, чем когда-либо делают ИК-Фурье анализ умное программное и аппаратное обеспечение. В качестве отличного дополнения для учебных целей Bruker предлагает «Набор для обучения». В набор входит специализированный пользовательский интерфейс, подробное руководство, описывающее несколько стандартных экспериментов для обучения, жидкостную кювету для количественных измерений на основе закона Ламберта-Бера, магнитный держатель пленок и расширенная библиотека спектров полимеров для идентификации и определения толщины полимерных пленок, а также газовая кювета с дополнительной апертурой. С помощью ПО и руководства курс по обучению основам ИК спектроскопии может быть легко подготовлен, и



студенты смогут измерить образцы и обработать результаты без дополнительных пояснений.

### Оборудование

Компактный и прочный спектрометр ALPHA прекрасно подходит для учебных целей. Он укомплектован неизнашиваемыми компонентами, такими как запатентованный интерферометр RockSolid и долговечный твердотельный диодный лазер. Источник

ИК-излучения и осушитель легко заменяются пользователем. Нет необходимости обращаться за сервисным обслуживанием, так как все расходные материалы легко извлекаются через заднюю панель спектрометра.

Компоненты с длительным сроком службы, простота эксплуатации и технического обслуживания, низкое потребление энергии значительно снижают текущие расходы. Благодаря уникальной конструкции, спектрометр ALPHA нечувствителен к таким внешним воздействиям, как удары и вибрации. Поэтому прибор можно свободно перемещать, чему также способствует легкость (7 кг) и небольшие размеры спектрометра. Bruker предлагает богатый выбор приставок для измерений: пропускания, нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО), диффузного и зеркального отражения. Они легко сменяются без использования каких-либо инструментов, что позволяет быстро настраивать прибор на необходимый способ измерения.



Рисунок 1. Различные приставки с механизмом QuickSnap

### Примеры использования

Пример 1. Хорошим примером для иллюстрации классического эксперимента физической химии и основных принципов колебательно-вращательной спектроскопии служит спектр гетероядерной двухатомной молекулы хлороводорода (HCl) в газовой фазе. Для регистрации тонкой структуры спектра необходим спектрометр с высоким спектральным

разрешением. ALPHA с опцией высокого разрешения позволяет получить высококачественный спектр HCl в газовой фазе. На рисунке 4 представлен колебательно-вращательный спектр HCl, зарегистрированный в газовой ячейке (изображена на рисунке). Тонкая



Рисунок 2. Набор для обучения на фоне спектрометра ALPHA: жидкостная кювета, магнитный держатель пленок и газовая кювета с апертурой. На экране ноутбука изображен мастер с измеренным газовым спектром.

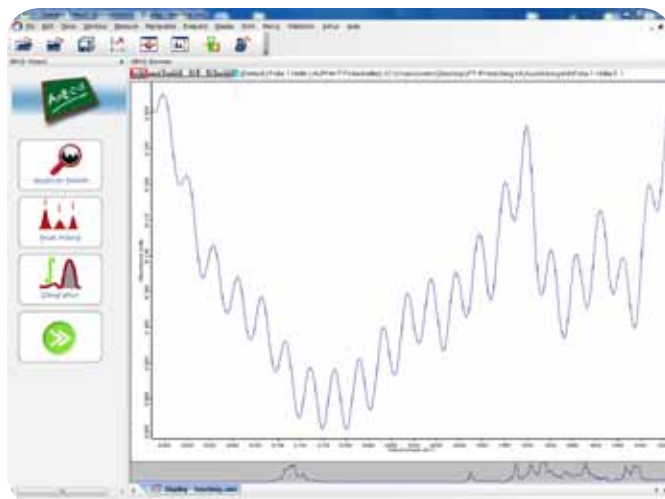


Рисунок 3. Вид программного обеспечения и спектр полимерной пленки с интерференционными полосами.

структура хорошо разрешается: вращательные линии расщепляются в соответствии с природным соотношением изотопов  $^{135}\text{Cl}$  и  $^{137}\text{Cl}$  (на рисунке 5 представлен спектр в более крупном масштабе). Все необходимое для проведения этого эксперимента есть в наборе: газовая кювета из нержавеющей стали с окнами  $\text{CaF}_2$ , стойкими к воздействию воды и HCl. Эту кювету легко наполнять хлороводородом, образующимся над дымящей соляной кислотой.

В состав набора для обучения также входят принадлежности для следующих измерений: количественное определение циклогексанона в

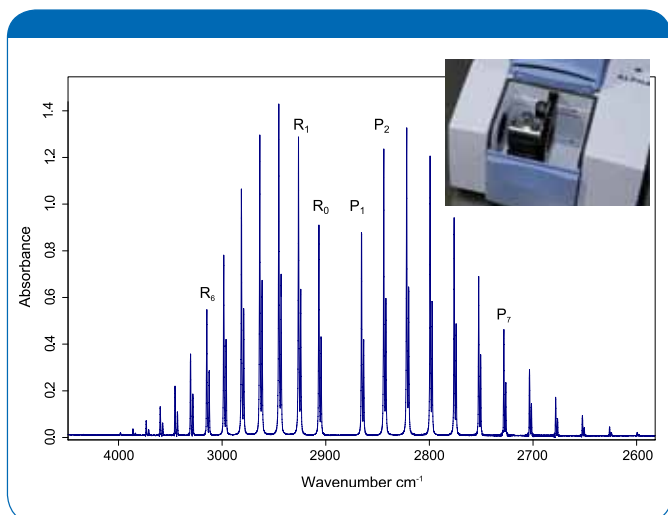


Рисунок 4. Колебательно-вращательный спектр HCl в газовой фазе, зарегистрированный спектрометром ALPHA в режиме пропускания.

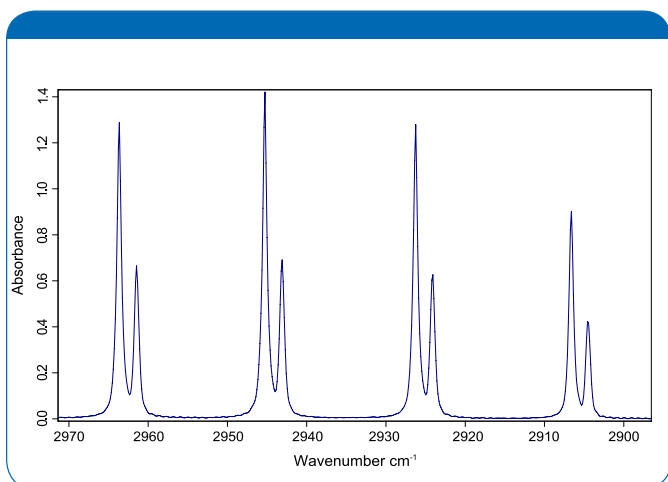


Рисунок 5. Увеличенное изображение спектра; вращательные линии расщепляются в соответствии с природным соотношением изотопов C135 и C137.

циклогексане, основанном на законе Ламберта-Бера, идентификация полимерной пленки с помощью поиска спектра по библиотеке, определение ее толщины по анализу интерференционных полос в спектре. Специализированное ПО в сочетании с руководством помогает студентам в проведении эксперимента, предоставляет необходимую теоретическую информацию и уменьшает время подготовки эксперимента как преподавателям, так и студентам.

Пример 2. Анализ образцов, чувствительных к воздуху и влажности, является важной тематикой, как в исследовательских проектах, так и при обучении химиков и лаборантов. Спектрометр ALPHA может быть легко помещен в стандартный перчаточный бокс. При использовании алмазного модуля НПВО это наилучший способ анализа чувствительных образцов (рисунок 6). ALPHA выдерживает вакуумирование в



Рисунок 6. Спектрометр ALPHA внутри перчаточного бокса

шлюзе перчаточного бокса. Пользователь может удалить осушитель из спектрометра, что обеспечит быстрое вытеснение воздуха инертным газом внутри прибора. ALPHA может поддерживать связь с компьютером путем беспроводного соединения. Для проведения анализа образцы прижимаются с помощью простого механизма, что несложно сделать даже в толстых перчатках. Очевидно, что в случае использования ИК-Фурье спектрометра в перчаточном боксе, работа с образцами безопаснее, проще и быстрее.

Пример 3. В лабораторных практикумах зачастую стоит задача анализировать соединения, синтезированные студентами. Используя спектрометр ALPHA с модулем НПВО, задача анализа образца, оценки данных и создания отчета решается менее чем за минуту. После регистрации спектра, он сравнивается со спектрами, содержащимися в библиотеках. В

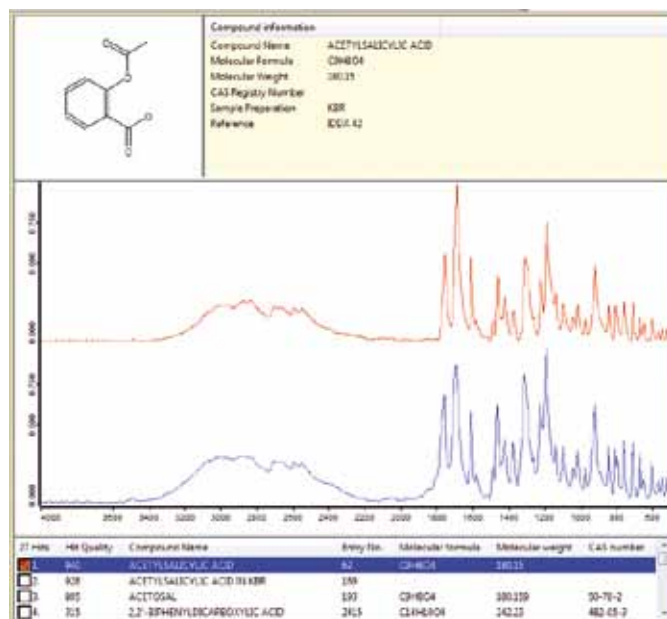


Рисунок 7. Окно результатов поиска со списком совпадений

результате составляется список совпадений, в начале которого располагается наиболее вероятное вещество. Чем выше «Степень совпадения» (максимальное значение 1000), тем лучше корреляция между спектром образца и спектром, найденным в библиотеке. На рисунке 7 представлен результат сравнения спектра синтезированной ацетилсалициловой кислоты со спектром из библиотеки. Степень совпадения равна 940, т.е. вещество идентифицировано. В окне результатов поиска отображается дополнительная информация: структурная и брутто-формулы. Компания Bruker предлагает разнообразные библиотеки, содержащие спектры тысяч органических и неорганических веществ. Для анализа специфических соединений, таких как фармакологические субстанции и полимеры, доступны соответствующие библиотеки.

## Заключение

Спектрометр ALPHA компании Bruker – универсальный прибор. Он предоставляет широкие возможности его использования в различных областях науки и образования, благодаря богатому набору различных приставок и модулей. Например, алмазный модуль НПВО Bruker позволяет проводить измерение быстро и легко, даже в толстых перчатках в перчаточном боксе. С механизмом QuickSnap, все модули легко подключаются к спектрометру, составляя с ним единую систему, готовую к решению новых задач.

Дополнительный набор для обучения прекрасно подходит для преподавания основ ИК-Фурье спектроскопии студентам. Набор содержит всё необходимое для измерения жидкостей, пленок и газов. Прилагаемое руководство освещает практические и теоретические основы изучаемого предмета. В сочетании со специальным пользовательским интерфейсом руководство помогает студентам проводить эксперименты, не имея специальных навыков работы со спектроскопическим программным обеспечением.