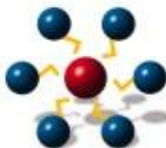
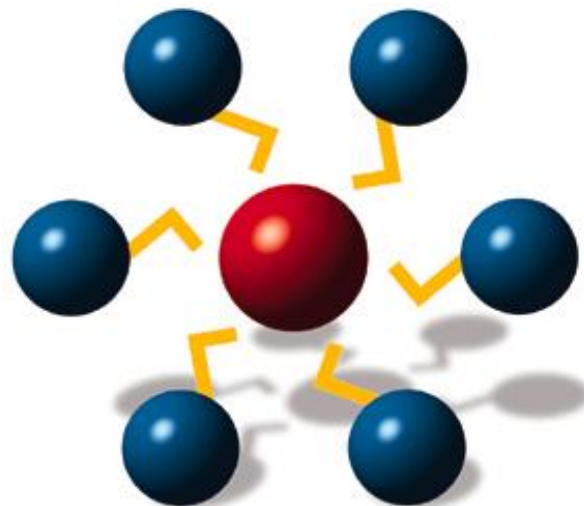
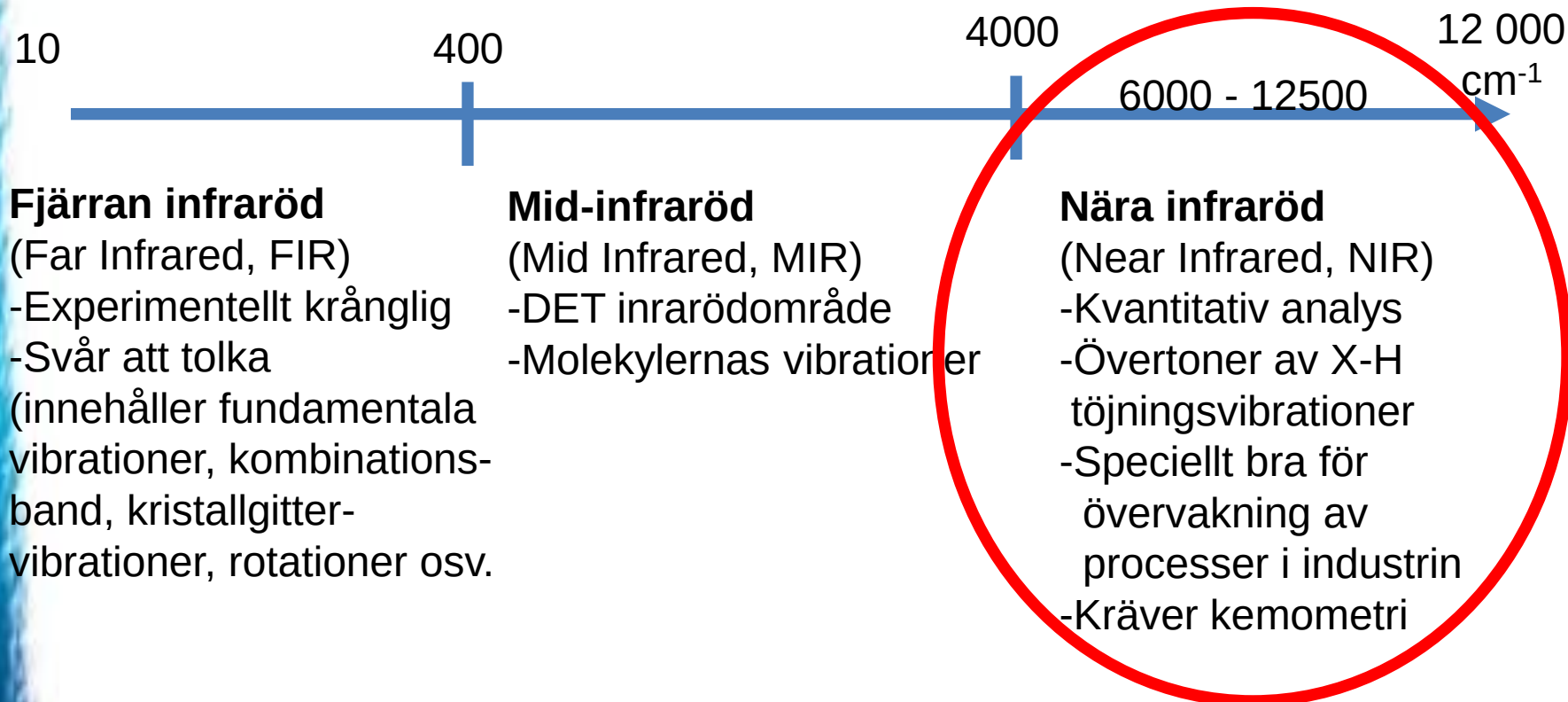


Nära infrarödspektrometri (NIR)

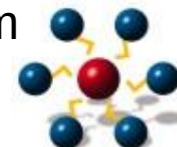
Matti Hotokka
Fysikalisk kemi



NIR området



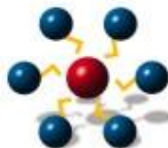
Våglängdskala används ofta: 850 – 1700 nm



Spektroskopier ...

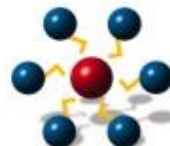
Där nära infrarött ljus används

- ⇒ Nära infrarödspektrometri (NIR)
 - Absorptionspektrometri
 - Övertoner, främst av X-H töjningar
 - För kvantitativ analys
- ⇒ Ramanspektrometri (ifall den väckande strålningen är infrarött)
 - Baserar sig på spridning
 - Fundamentala vibrationsövergångar



Vilka band observeras

- ⇒ C-H töjningsvibrationer
 - Fundamentala frekvensen nära 3000 cm^{-1}
 - Första övertonen nära 6000 cm^{-1}
- ⇒ N-H, fundamental vid 3400 cm^{-1}
- ⇒ O-H, fundamental vid 3600 cm^{-1}
- ⇒ Nästa viktiga fundamental vid 1600 cm^{-1} så första övertonen ligger i Mid-IR
- ⇒ Olika kombinationssvängningar



Bandpositioner

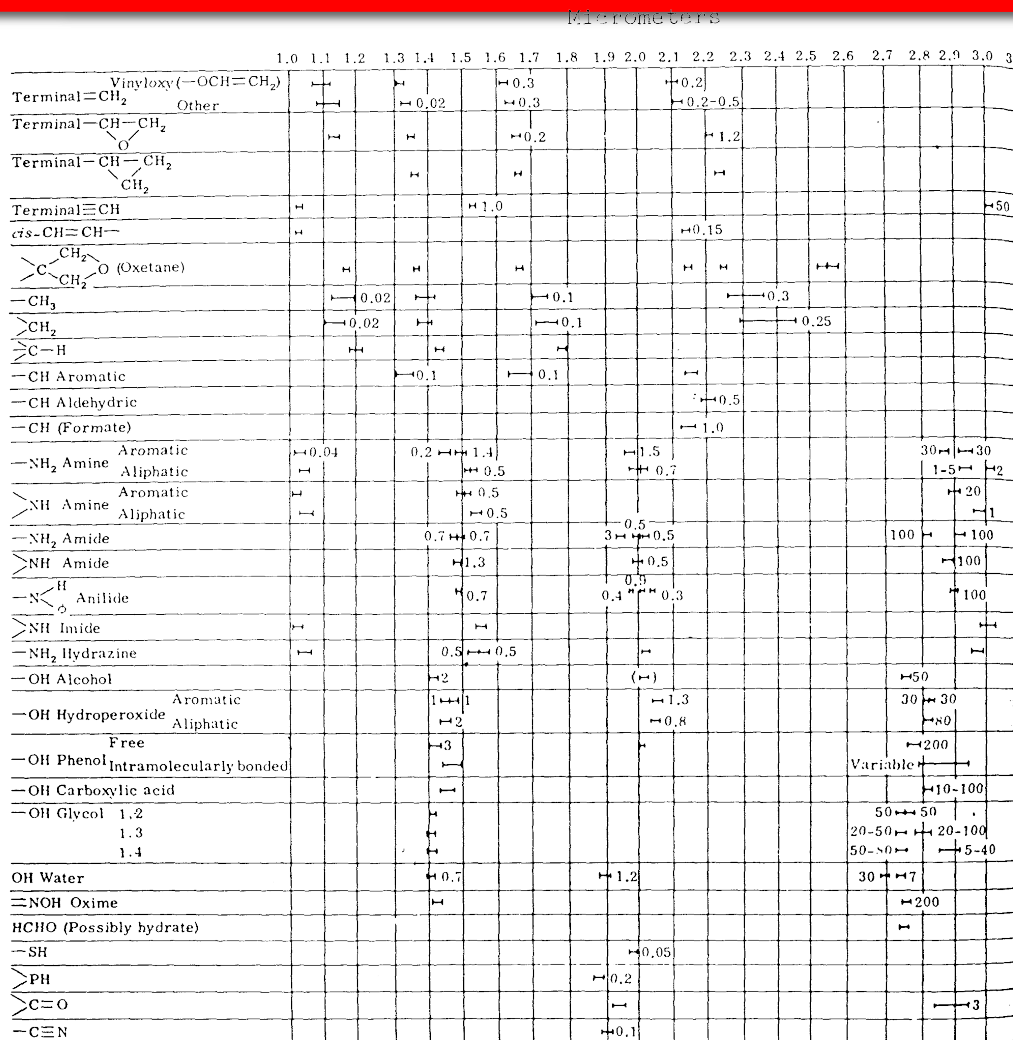
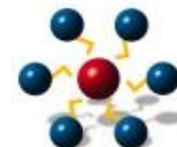


FIGURE 69. Correlation chart for near infrared region. Numbers in the chart represent average molar absorptivities. (REFERENCE: Rao, C. N. R., *Chemical Applications of Infrared Spectroscopy*, Academic Press, New York, 1963. With permission.)

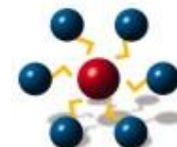


Bandpositionerna

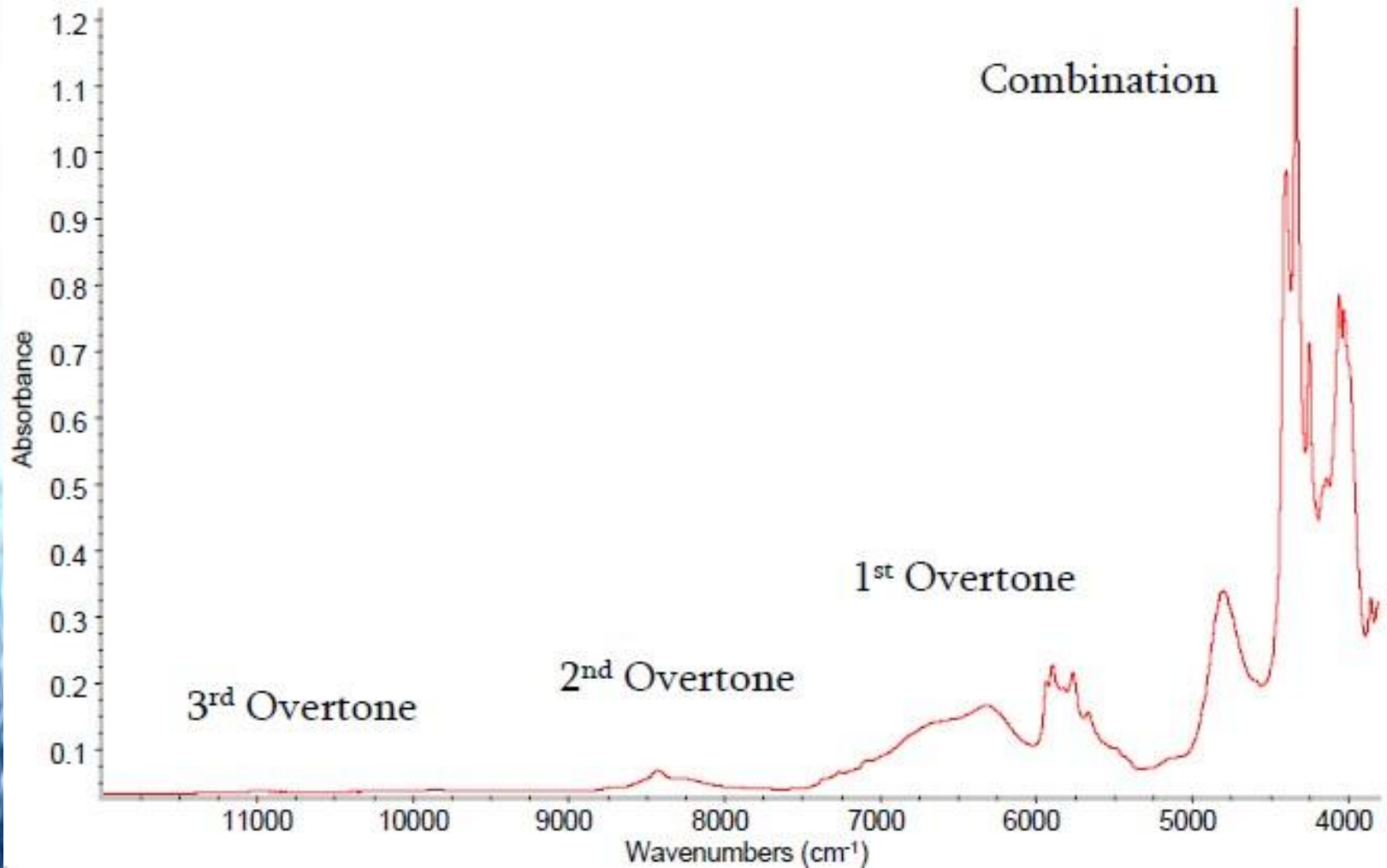
⇒ Anharmoniciteten spelar en viktig roll

➤ Speciellt vätebundna system är anharmoniska

Fundamental	Vågtalet (cm^{-1})		H ₂ O(l)	Tolkning
	H ₂ O(g)	H ₂ O(l)	Vågtalet	
ν_1	3657	3404	5020	$a\nu_1 + \nu_2 + b\nu_3, a+b=1$
ν_2	1595	1643	6800	$a\nu_1 + b\nu_3, a+b=2$
ν_3	3756	3404	8330	$a\nu_1 + \nu_2 + b\nu_3, a+b=2$
			10310	$a\nu_1 + b\nu_3, a+b=3$
			11960	$a\nu_1 + \nu_2 + b\nu_3, a+b=3$



Band intensities

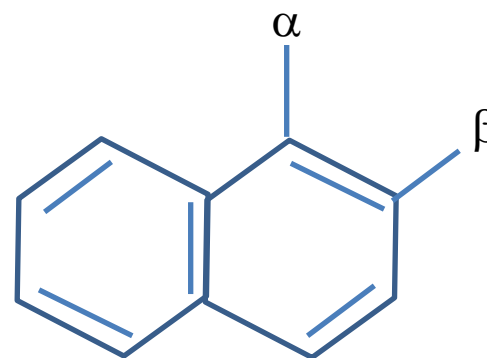


Bandintensiteterna

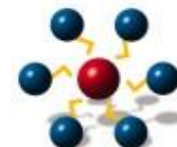
- ⇒ Intensiteten minskar typiskt med faktor 10 för varje högre överton
- ⇒ Den första övertonen är ofta 100 ggr svagare än fundamentala övergången

CH oscillatorstyrkor i naftalen

Vågta	Oscillatorstyrka	Tolkning
5957	2.8×10^{-7}	$ 2\rangle_\alpha$
5989	3.9×10^{-7}	$ 2\rangle_\beta$
8759	3.3×10^{-8}	$ 3\rangle_\alpha$
8806	5.0×10^{-8}	$ 3\rangle_\beta$
11445	4.5×10^{-9}	$ 4\rangle_\alpha$
11506	6.6×10^{-9}	$ 4\rangle_\beta$
14014	6.6×10^{-10}	$ 5\rangle_\alpha$
14088	9.4×10^{-10}	$ 5\rangle_\beta$
16467	1.1×10^{-10}	$ 6\rangle_\alpha$
16553	1.5×10^{-10}	$ 6\rangle_\beta$

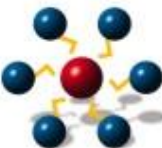


H. G. Kjaergaard och B. R. Henry, J. Phys. Chem. 99 (1995) 899.



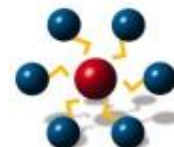
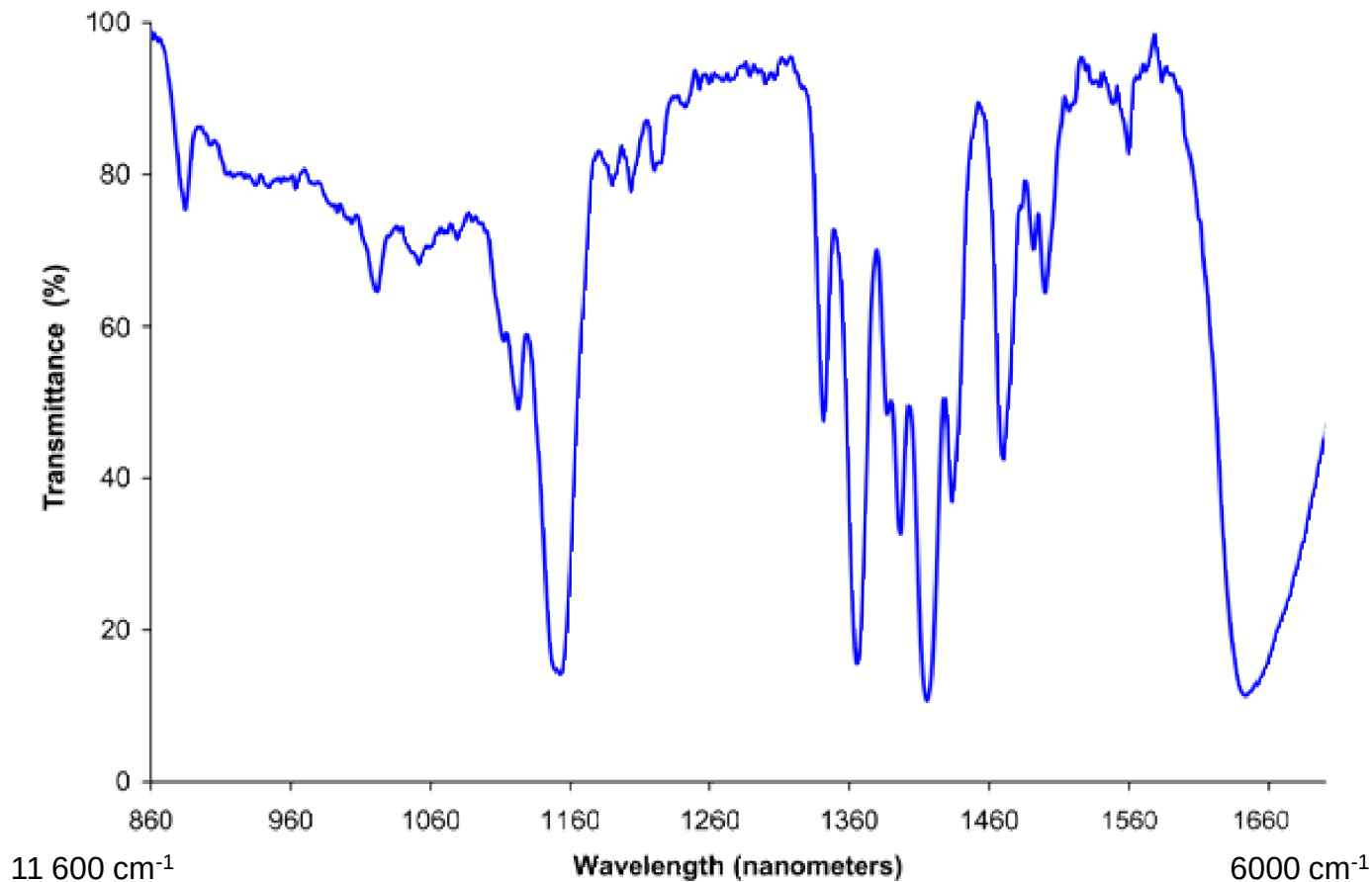
Var används?

- ⇒ Kvantitativ analys speciellt i processer
- ⇒ Kvalitativ analys endast i specialfall
- ⇒ Spektret består av breda band, som ofta täcker varandra



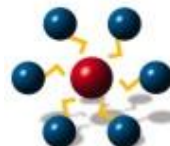
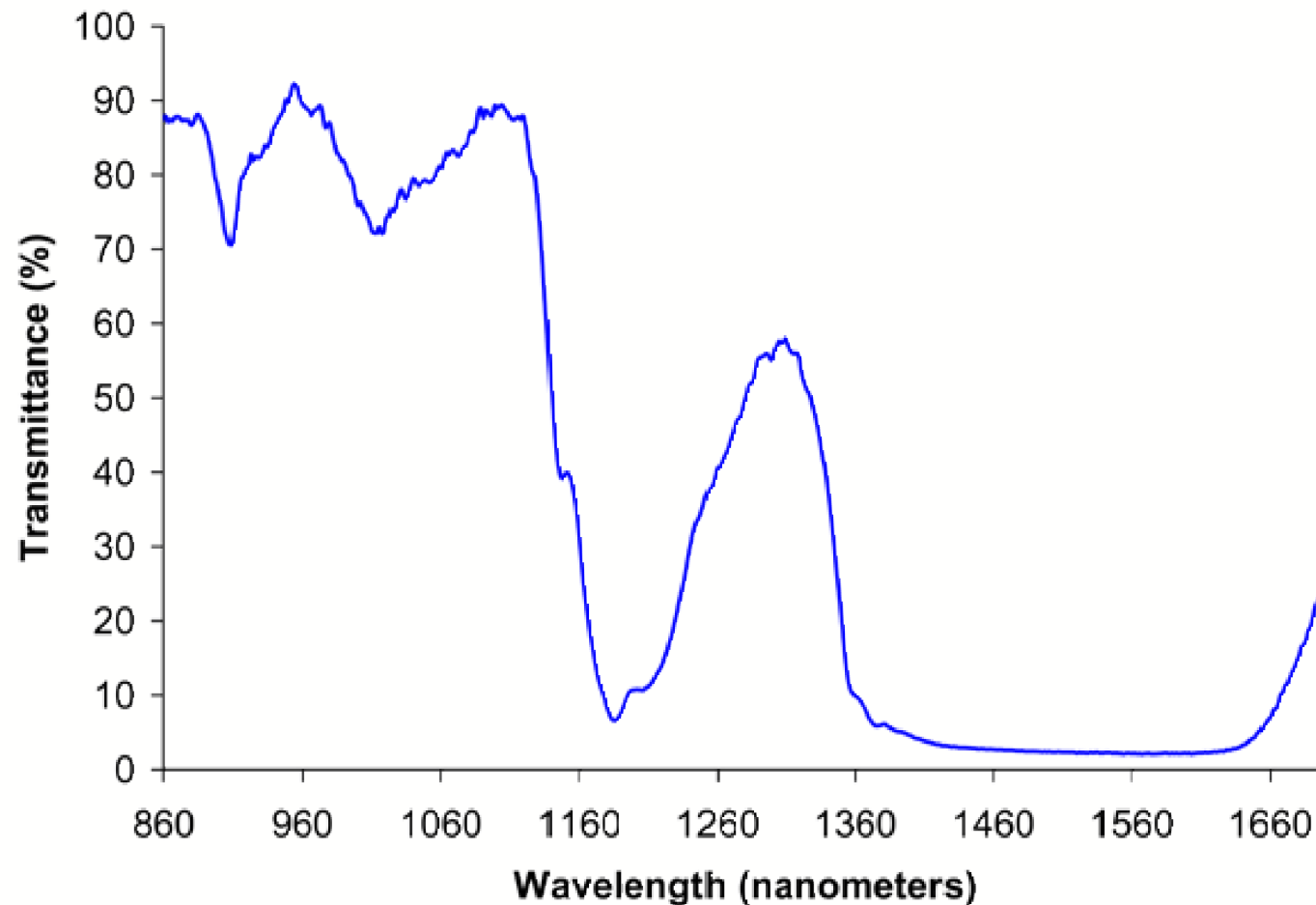
Spektra är komplicerade

Diklormetan

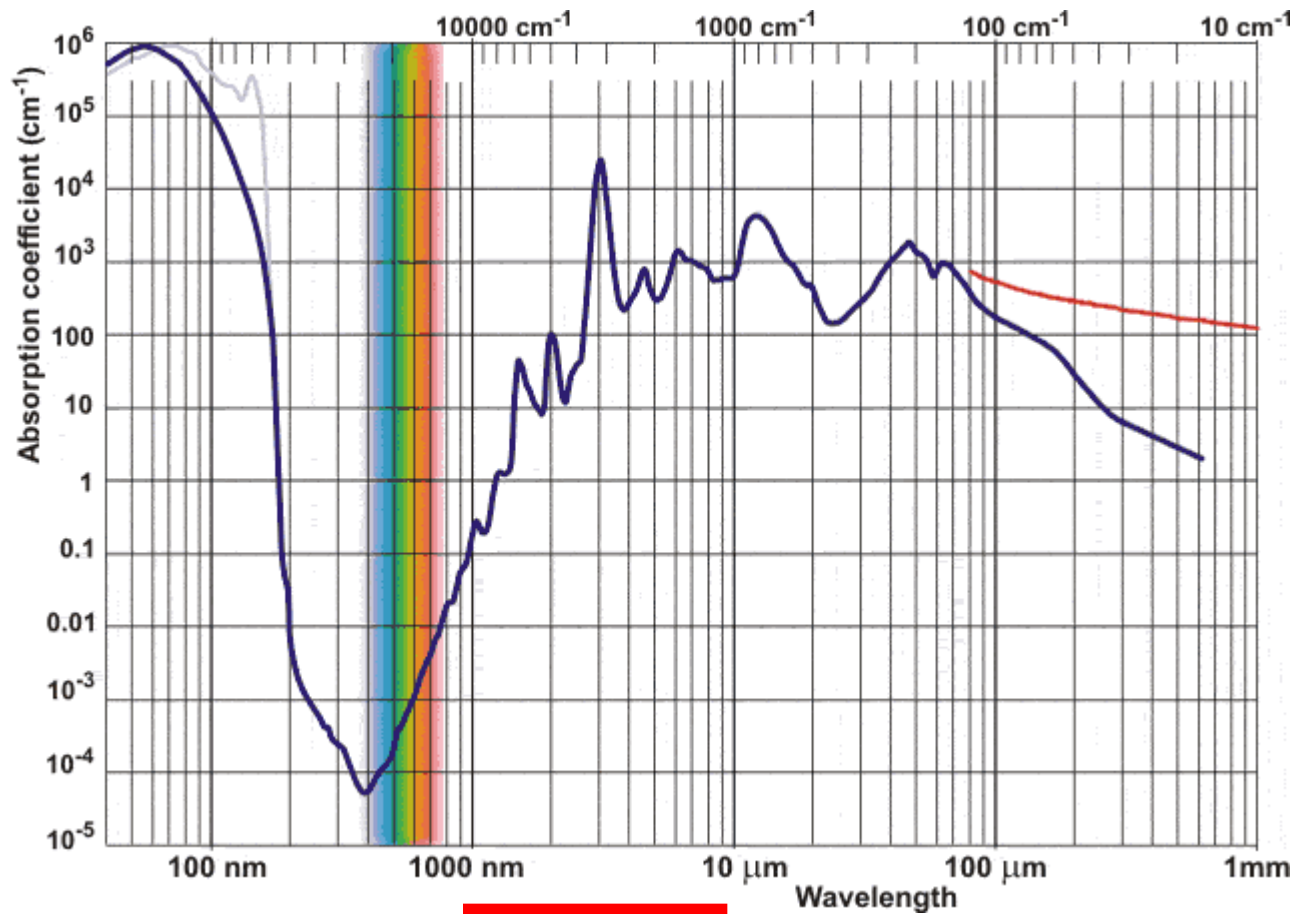


Banden är breda

Etanol

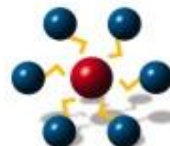


Vatten absorberar starkt



NIR

MIR



Applikationer

⇒ Processer i industrin

- Billig instrumentering
- Mätning på långt avstånd vanlig
- Ljus penetrerar i många material
- Kemometri minskar störsustansers inverkan
- Mångsidig
 - Spannmål, foder, matvaror, dryckor, läkemedel, petrokemiska produkter, medicinsk diagnostik osv.

