

# Obsah

|                                                                     |    |
|---------------------------------------------------------------------|----|
| Předmluva . . . . .                                                 | 9  |
| <i>Kapitola I.</i> Úvod . . . . .                                   | 11 |
| <i>Kapitola II.</i> Transmisní metody . . . . .                     | 13 |
| 1. LAMBERTŮV-BEERŮV zákon . . . . .                                 | 13 |
| 2. Bilance záření . . . . .                                         | 15 |
| 3. Měřicí metody . . . . .                                          | 17 |
| 3.1 Kompenzační metody . . . . .                                    | 17 |
| 3.1.1 Stejná tloušťka měrné a srovnávací kyvety . . . . .           | 18 |
| 3.1.2 Nestejná tloušťka měrné a srovnávací kyvety . . . . .         | 21 |
| 3.1.3 Diferenční metoda . . . . .                                   | 22 |
| 3.1.4 Zmenšování intenzity srovnávacího paprsku . . . . .           | 26 |
| 3.2 Metoda základní linie . . . . .                                 | 28 |
| 3.3 Metoda se srovnávacím bodem . . . . .                           | 32 |
| 3.4 Metoda rozdílu extinkcí . . . . .                               | 33 |
| 3.5 Derivační metoda . . . . .                                      | 34 |
| 4. Extinkční koeficienty . . . . .                                  | 36 |
| 4.1 Údaje extinkčních koeficientů . . . . .                         | 36 |
| 4.2 Standardy k určování extinkčních koeficientů . . . . .          | 38 |
| 4.2.1 Čisté látky . . . . .                                         | 38 |
| 4.2.2 Směsi látek . . . . .                                         | 38 |
| 5. Celková koncentrace a tloušťka vzorku . . . . .                  | 40 |
| 5.1 Celková koncentrace . . . . .                                   | 40 |
| 5.2 Tloušťka vzorku . . . . .                                       | 40 |
| 5.2.1 Tloušťka kyvet . . . . .                                      | 40 |
| 5.2.2 Tloušťka tablet, filmů, suspenzí atd. . . . .                 | 42 |
| Vnitřní standard . . . . .                                          | 42 |
| 6. Způsoby vyhodnocování . . . . .                                  | 45 |
| 6.1 Kalibrační křivky . . . . .                                     | 46 |
| 6.2 Výpočet koncentrací ze soustavy rovnic . . . . .                | 47 |
| 6.2.1 Dvě složky . . . . .                                          | 49 |
| 6.2.2 Tři nebo čtyři složky . . . . .                               | 49 |
| 6.2.3 Dvě složky, neznámá tloušťka vzorku, rozptýl záření . . . . . | 51 |
| 6.3 Statistické metody . . . . .                                    | 53 |
| 7. Překrývání absorpčních pásů . . . . .                            | 54 |
| 7.1 Obecné řešení pro dvě složky . . . . .                          | 54 |
| 7.2 Zvláštní případy . . . . .                                      | 56 |
| 7.3 Symetrické absorpční pásy . . . . .                             | 57 |

|                                                                                      |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 7.4 Zvláštní případ . . . . .                                                        | 58  |
| 7.5 Izosbestický bod . . . . .                                                       | 60  |
| 8. Odchylky od LAMBERTOVA-BEEROVA zákona . . . . .                                   | 61  |
| 8.1 Příčiny odchylek . . . . .                                                       | 61  |
| 8.2 Způsoby korekcí . . . . .                                                        | 70  |
| 9. Přesnost a citlivost analýz . . . . .                                             | 72  |
| 9.1 Přesnost analýz . . . . .                                                        | 72  |
| 9.2 Citlivost analýz . . . . .                                                       | 76  |
| 10. Tvar absorpčního pásu a pravé hodnoty jeho charakteristických veličin . . . . .  | 77  |
| 10.1 Tvar absorpčního pásu . . . . .                                                 | 78  |
| 10.1.1 Teoretický tvar . . . . .                                                     | 78  |
| 10.1.2 Přístrojová funkce . . . . .                                                  | 80  |
| 10.1.3 Změřený tvar . . . . .                                                        | 81  |
| 10.2 Pravá hodnota extinkčního koeficientu . . . . .                                 | 82  |
| 10.3 Pravá hodnota šíře absorpčního pásu . . . . .                                   | 87  |
| 10.4 Pravá hodnota integrované absorpce . . . . .                                    | 89  |
| 10.5 Jednotky charakteristických veličin absorpčních pásů . . . . .                  | 96  |
| 10.6 Použití charakteristických veličin absorpčních pásů v analýze . . . . .         | 97  |
| 11. Skupinová analýza . . . . .                                                      | 98  |
| 11.1 Volba modelové látky . . . . .                                                  | 98  |
| 11.2 Postup analýz . . . . .                                                         | 100 |
| 11.3 Použití tabelovaných hodnot integrální absorpce . . . . .                       | 101 |
| 12. Analýza nečistot . . . . .                                                       | 102 |
| 13. Sledování časové změny spektra . . . . .                                         | 103 |
| 14. Dichroický poměr, stupeň krystalinity . . . . .                                  | 105 |
| 14.1 Dichroický poměr a koeficient . . . . .                                         | 105 |
| 14.2 Stupeň krystalinity . . . . .                                                   | 108 |
| <i>Kapitola III.</i> Reflexní metody . . . . .                                       | 109 |
| 1. Absorpce odraženého záření . . . . .                                              | 109 |
| 2. Metoda ATR . . . . .                                                              | 110 |
| <i>Kapitola IV.</i> Příklady rozborů . . . . .                                       | 114 |
| <i>Kapitola V.</i> Infračervená spektroskopie ve spojení s jinými metodami . . . . . | 151 |
| <i>Kapitola VI.</i> Příprava vzorků a pořizování záznamů spekter . . . . .           | 162 |
| 1. Optické materiály . . . . .                                                       | 162 |
| 2. Příprava vzorků . . . . .                                                         | 168 |
| 2.1 Plyny . . . . .                                                                  | 169 |
| 2.2 Kapaliny . . . . .                                                               | 172 |
| 2.3 Roztoky . . . . .                                                                | 176 |
| 2.4 Tuhé látky . . . . .                                                             | 180 |
| 2.4.1 Tablety z bromidu draselného . . . . .                                         | 181 |
| 2.4.2 Tablety z jiných materiálů . . . . .                                           | 186 |
| 2.4.3 Filmy a deponované vrstvy . . . . .                                            | 187 |
| 2.4.4 Suspenze . . . . .                                                             | 190 |
| 2.4.5 Gely . . . . .                                                                 | 192 |
| 2.4.6 Vlákna . . . . .                                                               | 192 |



|                                                                                            |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 3. Zvláštní zařízení . . . . .                                                             | 192 |
| 3.1 Chlazené kyvety . . . . .                                                              | 192 |
| 3.2 Vyhřívané kyvety . . . . .                                                             | 194 |
| 3.3 Kyvety ke studiu absorpce plynů a heterogenních reakcí . . . . .                       | 195 |
| 3.4 Příprava vzorků z plynové chromatografie . . . . .                                     | 196 |
| 3.5 Zařízení pro reflexní spektra a metodu ATR . . . . .                                   | 197 |
| 3.6 Zařízení pro práci v inertním prostředí . . . . .                                      | 199 |
| 4. Seřízení přístroje, volba absorpčních pásů a koncentrací, proměřování záznamů . . . . . | 200 |

|                                            |     |
|--------------------------------------------|-----|
| <i>Kapitola VII. Dokumentace . . . . .</i> | 206 |
|--------------------------------------------|-----|

|                                                                           |     |
|---------------------------------------------------------------------------|-----|
| 1. Způsoby dokumentace . . . . .                                          | 206 |
| 2. Seznam kvantitativně analyzovaných látek (skupin) . . . . .            | 216 |
| 3. Vzorcový rejstřík kvantitativně analyzovaných látek (skupin) . . . . . | 238 |

|                                                                     |     |
|---------------------------------------------------------------------|-----|
| <i>Kapitola VIII. Tabulky pro nejdůležitější přepočty . . . . .</i> | 260 |
|---------------------------------------------------------------------|-----|

|                                                                                                                                            |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| I. Převod vlnových délek v mikronech na vlnočty v $\text{cm}^{-1}$ . . . . .                                                               | 260 |
| II. Úprava vzorku o transmissi $T_1$ na vzorek o transmissi $T_2$ . . . . .                                                                | 263 |
| III. Extinkce $E$ pro různé hodnoty transmise $T$ a korekce $k$ na rozptýlené záření podle výrazu $E = \log [(100 - k)/(T - k)]$ . . . . . | 264 |
| IV. Převod číselných hodnot extinkčních koeficientů stanovených pro různé údaje koncentrace . . . . .                                      | 268 |
| V. Převod číselných hodnot integrální absorpce . . . . .                                                                                   | 269 |

|                                                    |     |
|----------------------------------------------------|-----|
| <i>Kapitola IX. Spektra rozpouštědel . . . . .</i> | 270 |
|----------------------------------------------------|-----|

|                             |     |
|-----------------------------|-----|
| <i>Literatura . . . . .</i> | 276 |
|-----------------------------|-----|

|                           |     |
|---------------------------|-----|
| <i>Rejstřík . . . . .</i> | 291 |
|---------------------------|-----|