

หน่วยที่ 2

วิธีอินฟราเรด สเปกโทรสโกปี

บทเรียน 2.1 หลักการพื้นฐานวิธีอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

จุดประสงค์การสอน

1. บอกการสั่นของพันธะโมเลกุล
2. อธิบายอินฟราเรดสเปกตรัม
3. บอกองค์ประกอบของเครื่อง FT-IR
4. ปฏิบัติการวิเคราะห์อินฟราเรดสเปกตรัมของสารอินทรีย์

2.1.1 การสั่นของพันธะโมเลกุล

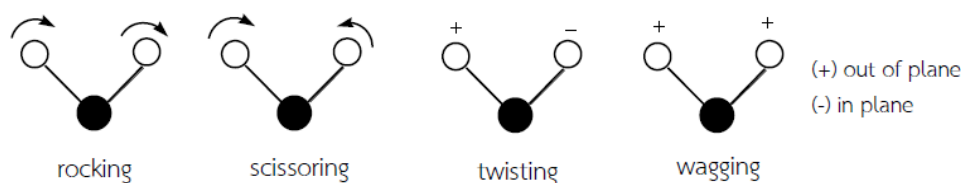
พันธะภายในโมเลกุลของสารอินทรีย์เป็นพันธะโคเวเลนต์ เกิดจากแต่ละอะตอมใช้อิเล็กตรอนร่วมกัน โดยปกติพันธะจะเกิดการสั่นอยู่ตลอดเวลา เรียกว่า การสั่นแบบพื้นฐาน (fundamental vibration) จำแนกออกเป็น 2 แบบ (ภาพที่ 2.1) ดังนี้

1. การสั่นแบบยืด (stretching) คือ พันธะระหว่างอะตอมยืดออกหรือหดตามแกน เกิดได้ทั้งแบบยืด สมมาตร (symmetrical stretching) และแบบยืดไม่สมมาตร (asymmetrical stretching) ดังภาพที่ 2.1

2. การสั่นแบบงอ (bending) คือ พันธะระหว่างอะตอมเปลี่ยนตำแหน่งไปจากแกนพันธะเดิม ส่งผลให้มุมพันธะเปลี่ยนแปลง ลักษณะการสั่นแบบงอจำแนกออกเป็น 4 แบบ ได้แก่ การโยก (rocking) กรรไกร (scissoring) การบิด (twisting) และการกระดิก (wagging) ดังภาพที่ 2.2



ภาพที่ 2.1 ลักษณะการสั่นแบบยืด

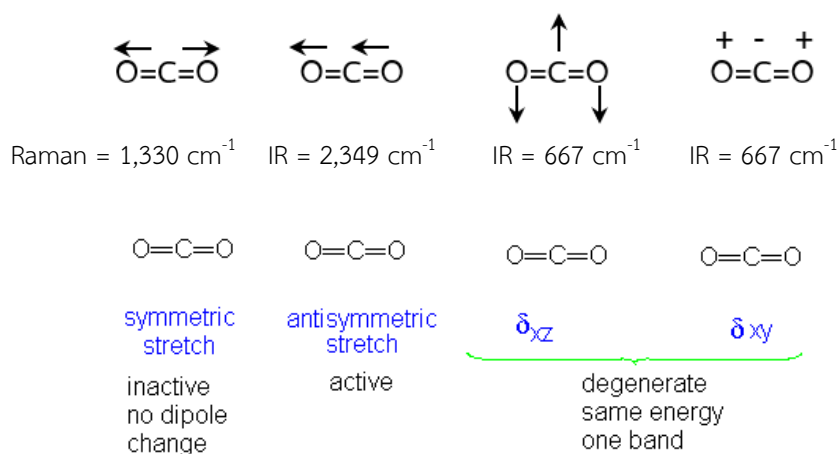


ภาพที่ 2.2 ลักษณะการสั่นแบบแบงอ

การสั่นแบบการโยกและการบิดเป็นแบบไม่สมมาตร ส่วนแบบกรรไกรและการกระดิกเป็นแบบสมมาตร โดยที่ทั้งการสั่นแบบยืดและแบบงอจะสามารถดูดกลืนรังสีอินฟราเรดได้ เรียกว่า ความว่องไวต่อรังสีอินฟราเรด (IR active) จะเกิดเฉพาะพันธะหรือโมเลกุลที่มีการเปลี่ยนแปลงไดโพลโมเมนต์ (dipole moment) หรือมีสภาพขั้วไฟฟ้าลบเท่านั้น เช่น พันธะคู่ (C=C) ในเอทิลีน ($\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$) ซึ่งโมเลกุลสมมาตรนั้น การสั่นของพันธะ C=C จะไม่มีความว่องไวต่อรังสีอินฟราเรด (IR inactive) แต่ถ้าเป็นโมเลกุล 2-methyl- 2-butene ($\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{CH}(\text{CH}_3)$) ซึ่งเป็นโมเลกุลไม่สมมาตร การสั่นของ C=C จะมีความว่องไวต่อรังสีอินฟราเรด

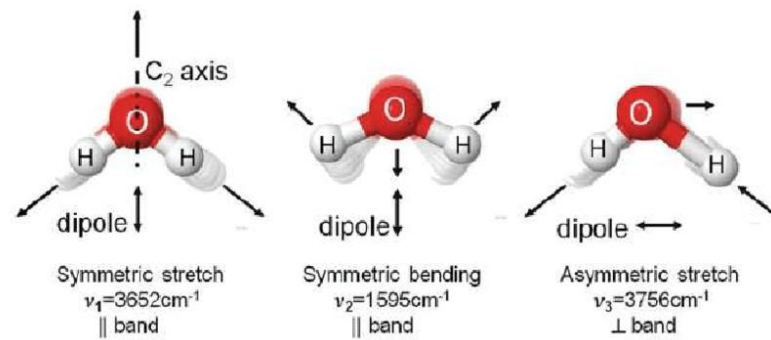
โครงสร้างสารอินทรีย์เป็น 3 มิติ กำหนดให้แต่ละอะตอมอยู่บนแกน x, y และ z เมื่ออะตอมหมุนรอบแกนทำให้มีระดับขั้นความเสรี (degree of freedom) เท่ากับ 3 ถ้าโมเลกุลมี n อะตอม ระดับขั้นความเสรี เท่ากับ 3n เมื่อพิจารณากระดับขั้นความเสรีสามารถคำนวณจำนวนการสั่นแบบพื้นฐานของโมเลกุลเส้นตรง เท่ากับ $3n-5$ ส่วนกรณีโมเลกุลไม่เป็นเส้นตรง เท่ากับ $3n-6$ โดยที่ n คือจำนวนอะตอมภายในโมเลกุล

ตัวอย่าง แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2) โครงสร้างแบบเส้นตรง จำนวนการสั่นแบบพื้นฐาน $3n-5$ โดยที่จำนวนอะตอมภายในโมเลกุล เท่ากับ 3 ดังนั้น จำนวนการสั่นแบบพื้นฐานเท่ากับ 4 (ภาพที่ 2.3) ได้แก่ ยืดสมมาตร ($1,330\text{ cm}^{-1}$) และยืดไม่สมมาตร ($2,349\text{ cm}^{-1}$) งอแบบกรรไกร ลักษณะอยู่ในระนาบและตั้งฉากกับระนาบ โดยการงอทั้งสองลักษณะมีความถี่เท่ากัน (667 cm^{-1}) เฉพาะการสั่นแบบยืดไม่สมมาตรเท่านั้นที่ว่องไวต่อรังสีอินฟราเรด



ภาพที่ 2.3 จำนวนการสั่นแบบพื้นฐานของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์

สำหรับตัวอย่างโมเลกุลไม่เป็นเส้นตรง เช่น น้ำ (H_2O) รูปร่างเป็นมุมอ จำนวนการสั่นแบบพื้นฐานเท่ากับ $3n-6$ โดยที่จำนวนอะตอมภายในโมเลกุล เท่ากับ 3 ดังนั้น จำนวนการสั่นแบบพื้นฐานเท่ากับ 3 (ภาพที่ 2.4) ได้แก่ ยืดสมมาตร ($3,652\text{ cm}^{-1}$) และยืดไม่สมมาตร ($3,756\text{ cm}^{-1}$) และงอแบบกรรไกร ($1,595\text{ cm}^{-1}$) ซึ่งการสั่นทั้งหมดวงไว้ต่อรังสีอินฟราเรดเนื่องจากโมเลกุลมีการเปลี่ยนแปลงไดโพลโมเมนต์



ภาพที่ 2.4 จำนวนการสั่นแบบพื้นฐานของน้ำ

โดยทั่วไปแถบที่เกิดในอินฟราเรดสเปกตรัมเกิดจากการสั่นแบบพื้นฐาน (การยืดและการงอ) ยังมีแถบที่มีความเข้มต่ำกว่าความถี่แบบพื้นฐาน เรียกว่า แถบความถี่เกิน (overtone) ซึ่งเกิดเมื่อความถี่พื้นฐานมีความเข้มสูง อาจมีแถบเกิดที่ความถี่ที่เป็นผลบวกหรือผลต่างของความถี่แบบพื้นฐาน แถบเหล่านี้เรียกว่า แถบผลบวก (combination bands) ถ้าแถบความถี่เกินหรือแถบผลบวกเกิดใกล้กับแถบพื้นฐาน ผลก็คือ ทำให้ความเข้มของแถบพื้นฐานลดลง แต่ไปเพิ่มความเข้มของแถบความถี่เกินและแถบผลบวก ปรากฏการณ์นี้คือเกิด แถบเฟอร์มิเรโซแนนซ์ (fermi resonance) และพีกทั้งคู่บางครั้งเรียกว่า fermi doublet

ส่วนใหญ่พีกในอินฟราเรดสเปกตรัมที่เกิดขึ้นจะไม่เท่ากับจำนวนการสั่นแบบพื้นฐานที่คำนวณได้ ซึ่งอาจพบได้ทั้งจำนวนพิกน้อยกว่าหรือมากกว่าตามทฤษฎี ดังนี้

1) กรณีพีกมีจำนวนน้อยกว่าทฤษฎี สาเหตุเนื่องจาก

1. ความเข้ม คือ พีกที่มีความเข้มต่ำมาก ๆ จึงไม่สามารถมองเห็นได้
2. ความถี่ คือ พีกของการสั่นแบบพื้นฐานไม่ได้อยู่ในช่วง $667-4,000\text{ cm}^{-1}$ หรือการสั่นที่มีความถี่เท่ากัน ทำให้พีกรวมกัน เรียกว่า แถบเดียวกัน (degenerate band) ส่วนใหญ่พบในโมเลกุลสมมาตร เช่น งอแบบกรรไกรของแก๊ส CO_2 ที่ความถี่ 667 cm^{-1} (ภาพที่ 2.3) เป็นต้น หรือความถี่ใกล้เคียงกัน พีกจึงเกิดการซ้อนเหลื่อมกันมองเห็นเป็นพีกเดียวกัน

3. ไดโพลโมเมนต์ คือ การสั่นของพันธะไม่มีการเปลี่ยนแปลงไดโพลโมเมนต์หรือที่มีความไม่ว่องไวต่อรังสีอินฟราเรด จึงไม่สามารถดูดกลืนรังสีอินฟราเรดได้

2) กรณีฟีกมีจำนวนมากกว่าทฤษฎี เนื่องจากเกิด

1. แถบความถี่เกิน (overtone band) คือ ฟีกที่มีความถี่เป็น $2\bar{\nu}$, $3\bar{\nu}$, $4\bar{\nu}$,... ของการสั่นแบบพื้นฐาน แต่จะมีความเข้มต่ำ เช่น ความถี่ของหมู่คาร์บอนิล $\bar{\nu}$ $1,700\text{ cm}^{-1}$ อาจเกิด overtone band ที่ $2\bar{\nu}$ เท่ากับ $3,400\text{ cm}^{-1}$ เป็นต้น

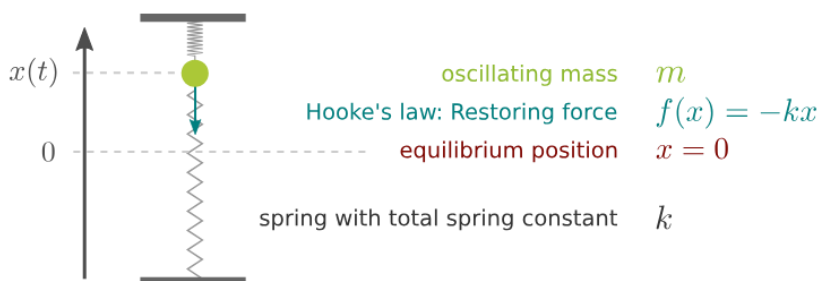
2. แถบผลรวม (combination band) คือ ฟีกเกิดจากผลบวกของความถี่ตั้งแต่ 2 ฟีกขึ้นไป ($\bar{\nu}_{\text{com}} = \bar{\nu}_1 + \bar{\nu}_2$)

3. แถบผลต่าง (difference band) คือ ฟีกเกิดจากผลต่างของความถี่ตั้งแต่ 2 ฟีกขึ้นไป ($\bar{\nu}_{\text{diff}} = \bar{\nu}_1 - \bar{\nu}_2$)

4. แถบเฟอร์มิเรโซแนนซ์ (Fermi resonance band) คือ ฟีกเกิดจากการคู่ควบ (coupling) ของความถี่ระหว่างการสั่นแบบพื้นฐานและแถบความถี่เกินหรือแถบผลรวม

พันธะในสารอินทรีย์มีทั้งพันธะเดี่ยว พันธะคู่ และพันธะสาม ซึ่งขนาดอะตอมและชนิดพันธะจะมีผลต่อความถี่ทั้งการสั่นแบบยืดและงอ สามารถอธิบายลักษณะการสั่นจากแบบจำลองตัวแกว่งกวัดฮาร์มอนิกอย่างง่าย (simple harmonic oscillator) ดังภาพที่ 2.5 พิจารณาความถี่ของการสั่นแบบยืดจากอนุพัทธ์กฎของฮุก (Hooke's law) ดังสมการ (2.1)

จากพื้นฐานกฎของฮุก กล่าวว่า “เมื่อออกแรงภายนอกยืดหรือกดสปริงไปจากจุดสมดุลภายใต้ ขอบเขตของการยืดหยุ่น สปริงจะมีแรงดึงกลับ (restoring Force) เพื่อดึงสปริงเข้าสู่จุดสมดุลเหมือนเดิมซึ่งแรงนี้จะแปรผันเป็นปฏิภาคตรงกับการกระจัดของสปริงจากตำแหน่งสมดุลนั้น”



ภาพที่ 2.5 แบบจำลองตัวแกว่งกวัดฮาร์มอนิกอย่างง่าย

$$\bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \text{.....(2.1)}$$

เมื่อ $\bar{\nu}$ คือ ความถี่ของการสั่น (cm^{-1})

c คือ ความเร็วแสง เท่ากับ $3 \times 10^{10}\text{ cm/s}$

k คือ ค่าคงที่ของพันธะเดี่ยว พันธะคู่ และพันธะสาม เท่ากับ 5×10^5 , 10×10^5 และ 15×10^5 ไดน์ต่อเซนติเมตร (dyne/cm) ตามลำดับ

μ คือ มวลลดทอน (reduced mass) ของอะตอม (กรัม) เท่ากับ $m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ โดยที่ m_1 และ m_2 คือ มวลอะตอมระหว่างพันธะ

ตัวอย่าง 2.1 คำนวณความถี่ของการสั่นแบบยืดของพันธะ C-H

วิธีคิด จากสมการ

$$\bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

คำนวณ μ จาก

$$m_C = \text{มวลอะตอมของคาร์บอน/เลขอาโวกาโดร} = 12/(6.02 \times 10^{23}) = 1.99 \times 10^{-23} \text{ g}$$

$$m_H = \text{มวลอะตอมของไฮโดรเจน/เลขอาโวกาโดร} = 1/(6.02 \times 10^{23}) = 1.66 \times 10^{-24} \text{ g}$$

$$\mu = \frac{m_C m_H}{m_C + m_H} = \frac{(1.99 \times 10^{-23})(1.66 \times 10^{-24})}{(1.99 \times 10^{-23}) + (1.66 \times 10^{-24})} = 1.53 \times 10^{-24}$$

แทนค่าลงสมการ

$$\begin{aligned} \bar{\nu} &= \frac{1}{(2)(3.14)(3.0 \times 10^{10})} \sqrt{\frac{5.0 \times 10^5}{1.53 \times 10^{-24}}} \\ &= 5.31 \times 10^{-12} \sqrt{3.26 \times 10^{29}} \\ &= 3,029 \text{ cm}^{-1} \end{aligned}$$

ดังนั้น $\bar{\nu}$ (คำนวณ) = 3,029 cm^{-1} ส่วน $\bar{\nu}$ (วัดได้จริง) = 3,000 cm^{-1}

ปัจจัยต่อความถี่ของการสั่นของพันธะ

เฉพาะพันธะภายในโมเลกุลที่มีการเปลี่ยนแปลงไดโพลโมเมนต์ (dipole moment) เท่านั้นที่ว่องไวต่อรังสีอินฟราเรด โดยแต่ละพันธะจะมีความถี่ของการสั่นไม่เท่ากัน ผลต่อความถี่ในการดูดกลืนรังสีอินฟราเรดจะพิจารณา ตามสมการของอนุพัทธ์กฎของฮุก ดังสมการ (2.1) มีปัจจัยดังนี้

1. ความแข็งแรงของพันธะ ความถี่ของการสั่นของพันธะจะแปรผันตรงกับค่าคงที่ (k) หรือความแข็งแรงของพันธะ เรียงลำดับจากน้อยไปมาก ดังนี้ พันธะเดี่ยว พันธะคู่และพันธะสาม มีค่าคงที่ของพันธะเดี่ยว พันธะคู่ และพันธะสาม เท่ากับ 5×10^5 , 10^6 และ $15 \times 10^5 \text{ dyne/cm}$ ตามลำดับ ดังนั้นความถี่ของการสั่นแบบยืดของพันธะระหว่างอะตอมคาร์บอน ดังนี้

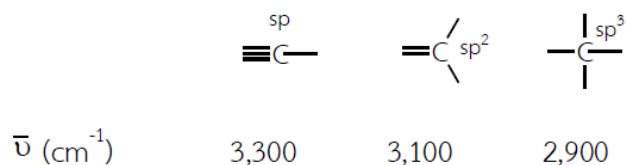
	$\text{C}-\text{C}$	$\text{C}=\text{C}$	$\text{C}\equiv\text{C}$
$\bar{\nu} (\text{cm}^{-1})$	1,200	1,650	2,150

2. อะตอมระหว่างพันธะ ถ้ามวลอะตอมระหว่างพันธะมาก ทำให้มวลลดทอน (μ) มาก ด้วยเช่นกัน ดังนั้นความถี่ของการสั่นของพันธะจะแปรผกผันกับมวลลดทอน ดังนี้

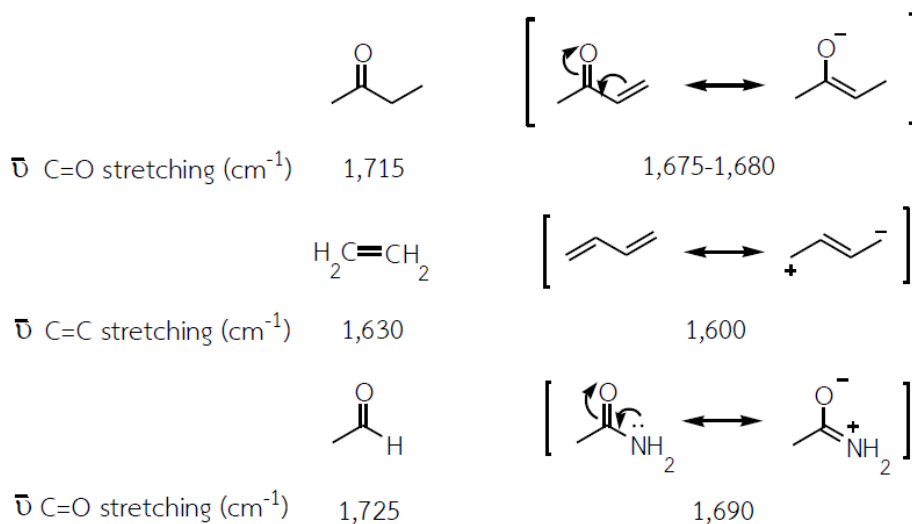
	$\text{C}-\text{H}$	$\text{C}-\text{C}$	$\text{C}-\text{O}$	$\text{C}-\text{Cl}$
$\bar{\nu} (\text{cm}^{-1})$	~3,000	1,200	1,100	800
	$\text{C}\equiv\text{C}$	$\text{C}\equiv\text{N}$	$\text{C}=\text{O}$	
$\bar{\nu} (\text{cm}^{-1})$	2,150	2,250	1,640-1,870	

3. ชนิดของการสั่น การทำให้พันธะยืดมากขึ้นต้องดูดกลืนพลังงานย่านอินฟราเรดมากกว่า การให้พันธะงอ ความถี่ของการสั่นแบบยืดจึงมากกว่าแบบงอ เช่น พันธะ C-H มีความถี่แบบยืดเท่ากับ $\sim 3,000 \text{ cm}^{-1}$ ส่วนความถี่แบบงอ เท่ากับ $1,340 \text{ cm}^{-1}$ เป็นต้น

4. ไฮบริไดเซชัน (hybridization) ชนิดไฮบริไดเซชันของอะตอมคาร์บอน ได้แก่ sp , sp^2 และ sp^3 มีผลต่อความแข็งแรงของพันธะหรือค่าคงที่ (k) ดังนี้



5. เรโซแนนซ์หรือระบบ conjugate โครงสร้างไดอินและสารประกอบแอลฟา หรือ บีตา-คาร์บอนิลไม่อิ่มตัว (α , β -unsaturated carbonyl compound) สามารถเกิดเรโซแนนซ์ได้ ทำให้พันธะมีสมบัติของพันธะเดี่ยว ความแข็งแรงของพันธะหรือค่า k จึงน้อยลง ทำให้ความถี่ของการสั่นของพันธะน้อยลงด้วย เช่น ความถี่ของพันธะ C=O (แบบยืด) ของคีโตน เท่ากับ $1,715 \text{ cm}^{-1}$ และมีระบบ conjugate จะอยู่ในช่วง $1,665\text{--}1,685 \text{ cm}^{-1}$ หรือความถี่ของพันธะ C=C (แบบยืด) ของเอทิลีน เท่ากับ $1,630 \text{ cm}^{-1}$ และ 1,3-บิวเทไดอิน เท่ากับ $1,600 \text{ cm}^{-1}$ เป็นต้น เช่นเดียวกับพันธะ C=O (แบบยืด) ของแอมไนด์ ($\bar{\nu}$ $1,690 \text{ cm}^{-1}$) ซึ่งน้อยกว่าความถี่ของพันธะ C=O (แบบยืด) ของแอลดีไฮด์ ($\bar{\nu}$ $1,725 \text{ cm}^{-1}$) เนื่องจากผลเรโซแนนซ์ของอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยวบนอะตอมไนโตรเจน



6. ผลเหนี่ยวนำ ความถี่ของพันธะ C=O (แบบยืด) ของสารประกอบคาร์บอนิลจะมากขึ้นเมื่ออะตอมที่มีค่าสภาพไฟฟ้าลบบสูง (electronegativity) เกาะกับหมู่คาร์บอนิล เช่น คลอรีนและออกซิเจน เป็นต้น ทำให้ พันธะ C=O สั่นลงหรือค่าคงที่ (k) เพิ่มขึ้น เนื่องจากผลเหนี่ยวนำ ความถี่ของการสั่นจึงมากขึ้นด้วย

$\bar{\nu}$ C=O stretching (cm^{-1})	1,725	1,735	1,800
			1,769 และ 1,810

กรณีอะตอมแอโลเจนแทนที่ในสารประกอบคาร์บอนิลที่ตำแหน่งแอลฟา ส่งผลให้ความยาวพันธะ C=O สั้นลงหรือค่าคงที่ (k) มากขึ้น ความถี่ของพันธะ C=O (แบบยืด) จึงมากกว่าเดิม

7. ความเครียดของวง การเปลี่ยนแปลงขนาดวงหรือมุมภายในของสารประกอบไซคลิก (cyclic compound) จะมีผลต่อการดูดกลืนของรังสีอินฟราเรด เรียกว่า ผลความเครียดของวง (ring strain effect) กล่าวคือ กรณีไซโคลแอลคีน (cycloalkene) มีพันธะคู่แบบเอ็นโดไซคลิก เมื่อขนาดวงลดลง ความถี่ของการสั่นของพันธะ C=C จะลดลง ยกเว้นไซโคลโพรเพน (cyclopropene) ในทางตรงข้าม ถ้าพันธะคู่แบบเอ็กโซไซคลิก ความถี่ของการสั่นของพันธะ C=C จะเพิ่มขึ้น ดังนี้

ไซโคลแอลคีนมีพันธะคู่แบบเอ็นโดไซคลิก

$\bar{\nu}$ C=C stretching (cm^{-1})	1,646	1,611	1,566
			1,641

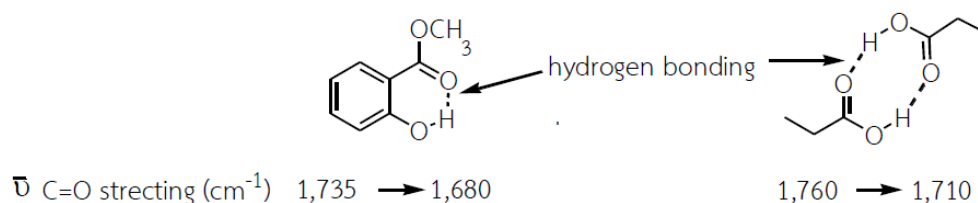
ไซโคลแอลคีนมีพันธะคู่แบบเอ็กโซไซคลิก

$\bar{\nu}$ C=C stretching (cm^{-1})	1,651	1,657	1,678
			1,780

กรณีคีโตนที่มีขนาดวงลดลง จะมีผลต่อความถี่ของการสั่นของพันธะ C=O (แบบยืด) เพิ่มขึ้น ดังนี้

$\bar{\nu}$ C=O stretching (cm^{-1})	1,715	1,745
		1,780

8. พันธะไฮโดรเจน โครงสร้างที่หมู่คาร์บอนิลเกิดพันธะไฮโดรเจนได้ จะทำให้พันธะ C=O มีสมบัติพันธะเดี่ยว นั่นคือ ความแข็งแรงของพันธะน้อยลง ค่าคงที่ (k) ลดลง จึงมีผลต่อความถี่ของการสั่นของพันธะ C=O (แบบยืด) เช่น เมทิลซาลิไซเลต (methyl salicylate) เกิดพันธะไฮโดรเจนภายในโมเลกุล (intramolecular hydrogen bonding) ความถี่ของการสั่นของพันธะ C=O (แบบยืด) เท่ากับ $1,680 \text{ cm}^{-1}$ ซึ่งน้อยกว่าหมู่คาร์บอนิลของเอสเทอร์ ($\bar{\nu}$ $1,735 \text{ cm}^{-1}$) สำหรับพันธะ C=O ของกรดคาร์บอกซิลิกในรูปสารละลายจะดูดกลืนรังสีที่มีความถี่ $1,760 \text{ cm}^{-1}$ แต่ถ้าอยู่ในรูปของแข็งหรือของเหลวบริสุทธิ์จะดูดกลืนรังสีที่มีความถี่ $1,710 \text{ cm}^{-1}$ เนื่องจากเกิดพันธะไฮโดรเจนระหว่างโมเลกุล (intermolecular hydrogen bonding)



2.1.2 อินฟราเรดสเปกตรัม

อินฟราเรดสเปกตรัม (infrared spectrum) เป็นการแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความถี่ (เลขคลื่น, cm^{-1}) หรือความยาวคลื่น และความส่องผ่าน (transmittance, T) ดังภาพที่ 2.6 ค่าความส่องผ่านเป็นอัตราส่วนระหว่างความเข้มของรังสีที่ผ่านสารตัวอย่าง (transmitted radiation, I) และความเข้มของรังสีที่ตกกระทบสารตัวอย่าง

สมการที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มของรังสีที่ผ่านสารตัวอย่างและความเข้มของรังสีที่ตกกระทบสารตัวอย่าง คือ

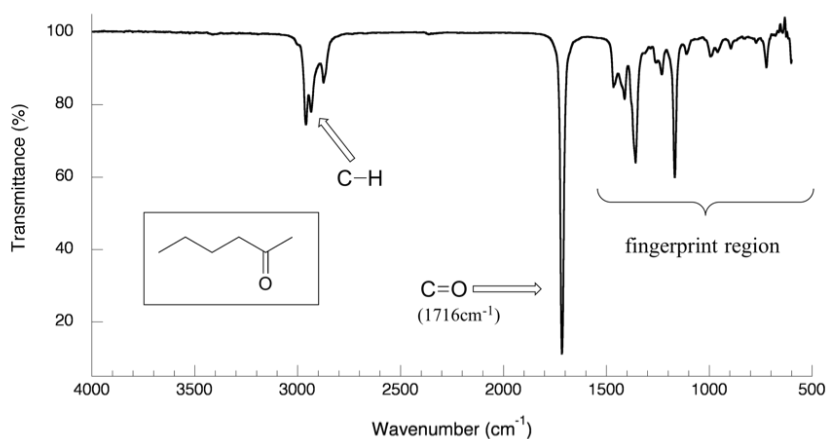
$$T = I/I_0 \quad \text{.....(2.1)}$$

เมื่อ I = ความเข้มของรังสีที่ผ่านตัวกลาง

I_0 = ความเข้มของรังสีที่ตกกระทบตัวกลาง

ดังนั้น

$$\% \text{ Transmittance} = 100 T \quad \text{.....(2.2)}$$



ภาพที่ 2.6 อินฟราเรดสเปกตรัม 2-hexanone

จากภาพที่ 2.6 แสดงตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัม แกนแนวตั้งของสเปกตรัมอินฟราเรด (IR) แสดงค่าร้อยละความส่องผ่าน (%T) ซึ่งเป็นตัวบ่งชี้ว่าปริมาณแสงที่สามารถผ่านตัวอย่างได้มากน้อยเพียงใดในแต่ละช่วงความถี่ของรังสีอินฟราเรด โดยเส้นกราฟแสดงค่าความส่องผ่านตลอดทุกความยาวคลื่นที่วัดได้ หากค่า %T อยู่ที่ 100% หมายความว่าไม่มีการดูดกลืนแสงเกิดขึ้นที่ความถี่นั้น ในทางกลับกัน หากค่า %T ต่ำกว่า 100% แสดงว่าพลังงานบางส่วนถูกดูดกลืนโดยสารตัวอย่าง ทำให้เกิด

แถบการดูดกลืน (absorption bands) ซึ่งแสดงเป็นจุดพุ่งลงในกราฟ แถบการดูดกลืนในอินฟราเรดสเปกตรัมเกิดจากการสั่นของพันธะโคเวเลนต์ภายในโมเลกุล โดยพันธะต่าง ๆ มีโหมดการสั่นสะเทือนเฉพาะตัว เช่น การยืดตัว (stretching) และการงอ (bending) ซึ่งสอดคล้องกับพลังงานของรังสีอินฟราเรดในช่วงที่เหมาะสม ดังนั้น สเปกตรัมของสารแต่ละชนิดจะแสดงแถบการดูดกลืนที่จำเพาะเจาะจง ซึ่งสามารถใช้ในการวิเคราะห์โครงสร้างและองค์ประกอบทางเคมีของสารได้

แกนนอนของอินฟราเรดสเปกตรัมแสดงตำแหน่งของแถบการดูดกลืน โดยใช้สัญลักษณ์ $\bar{\nu}$ แทนเลขคลื่น (wavenumber, cm^{-1}) แสดงความถี่หรือความยาวคลื่น เลขคลื่นคำนวณจากส่วนกลับของความยาวคลื่นและมีหน่วยเป็น cm^{-1} ซึ่งเป็นหน่วยมาตรฐานในการแสดงตำแหน่งของการดูดกลืนในอินฟราเรดสเปกตรัม ช่วงเลขคลื่นของรังสีอินฟราเรดที่ใช้ในการวิเคราะห์ทางเคมีโดยทั่วไปอยู่ในช่วง $4,000 \text{ cm}^{-1}$ ถึง 600 cm^{-1} ซึ่งสอดคล้องกับย่านความยาวคลื่น ประมาณ $2.5 - 17 \mu\text{m}$

เนื่องจากพันธะโคเวเลนต์ของหมู่ฟังก์ชันต่าง ๆ มีความสามารถในการดูดกลืนรังสีอินฟราเรดในช่วงความถี่จำเพาะแตกต่างกัน ซึ่งค่าความถี่ดังกล่าวแสดงเป็นเลขคลื่น การดูดกลืนนี้เกิดขึ้นเนื่องจากการเปลี่ยนแปลงของไดโพลโมเมนต์ (dipole moment) ของพันธะในระหว่างการสั่นสะเทือน (vibrational transition) เช่น ในสเปกตรัมของ 2-เฮกซานอน (2-hexanone) ดังภาพที่ 2.6 พบว่าแถบการดูดกลืนที่มีความเข้มสูงที่สุดเกิดจากการสั่นสะเทือนแบบยืด (stretching vibration) ของพันธะคาร์บอนิล ($\text{C}=\text{O}$) ซึ่งปรากฏที่เลขคลื่น $1,716 \text{ cm}^{-1}$ (สอดคล้องกับความยาวคลื่น 5.86 mm , ความถี่ $5.15 \times 10^{13} \text{ Hz}$ และค่า ΔE $4.91 \text{ กิโลแคลอรี/โมล}$) โดยที่การดูดกลืนในช่วงความถี่ $1,650-1,750 \text{ cm}^{-1}$ ถือเป็นลักษณะเฉพาะของหมู่คาร์บอนิล ($\text{C}=\text{O}$) โดยที่ตำแหน่งของแถบดูดกลืนจะแปรผันตามชนิดของหมู่ฟังก์ชันที่เกี่ยวข้อง เช่น หมู่ฟังก์ชันที่มีการดูดกลืนในช่วงเลขคลื่นสูง ($1,700-1,750 \text{ cm}^{-1}$) ได้แก่ กรดคาร์บอกซิลิก (carboxylic acids) เอสเทอร์ (esters) คีโตน (ketones) และแอลดีไฮด์ (aldehydes) หมู่ฟังก์ชันที่มีการดูดกลืนในช่วงเลขคลื่นต่ำกว่า ($1,650-1,700 \text{ cm}^{-1}$) ได้แก่ คีโตนไม่อิ่มตัวที่มีพันธะคู่เชื่อมโยงกับระบบคอนจูเกต และเอไมด์ (amides) บริเวณยอดหยักที่ประมาณ $2,900-3,000 \text{ cm}^{-1}$ เป็นลักษณะของพันธะ C-H ซึ่งจุดสูงสุดนี้ไม่ค่อยมีประโยชน์มากนัก เนื่องจากโมเลกุลอินทรีย์ทุกชนิดมีพันธะ C-H นี้ อย่างไรก็ตาม สามารถใช้เป็นจุดอ้างอิงของสเปกตรัมได้

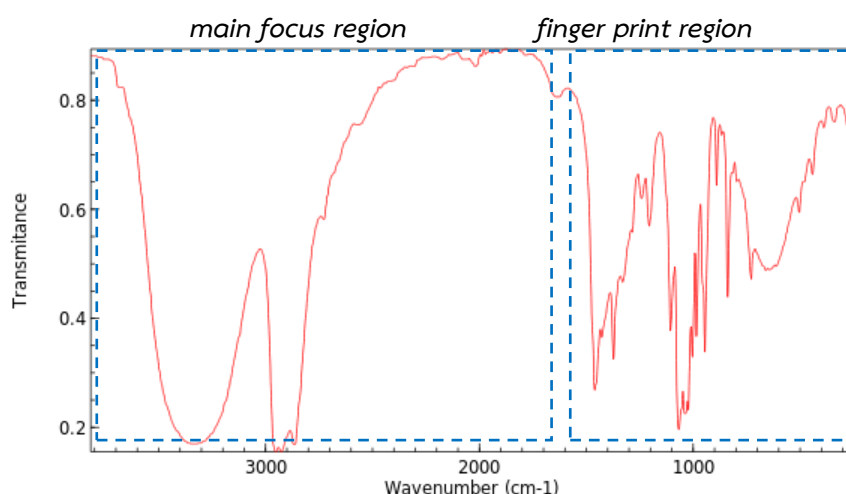
บริเวณช่วงเลขคลื่น $500-1,500 \text{ cm}^{-1}$ ของสเปกตรัมนี้พบว่ามีพีกเพิ่มเติมจำนวนมาก ซึ่งส่วนนี้ของสเปกตรัมเรียกว่า บริเวณลายนิ้วมือ (fingerprint region) แม้ว่าการระบุหมู่ฟังก์ชันเฉพาะจากบริเวณนี้จะเป็นไปได้ยาก แต่ก็ยังคงเป็นข้อมูลที่มีความสำคัญอย่างยิ่ง ทั้งนี้ เนื่องจากลักษณะของ fingerprint มีความเฉพาะตัวคล้ายกับลายนิ้วมือของมนุษย์ รูปแบบของพีกการดูดกลืนในบริเวณนี้จึงมีเอกลักษณ์เฉพาะสำหรับแต่ละโมเลกุล

นอกจากนี้ ปัจจัยที่อาจส่งผลต่อค่าการดูดกลืนของพันธะคาร์บอนิล ได้แก่ สภาพแวดล้อมทางเคมีของพันธะ เช่น อิทธิพลของแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุล (intermolecular forces) อิทธิพลจากหมู่เหนียวน้ำหรือหมู่ด่างที่เล็กรอบ ๆ ตำแหน่งคาร์บอนิล และการเกิดพันธะไฮโดรเจน ซึ่งปัจจัยเหล่านี้อาจทำให้ตำแหน่งของแถบดูดกลืนมีการเลื่อนไปทางเลขคลื่นที่สูงหรือต่ำกว่าเล็กน้อยจากค่าปกติ ดังนั้น การแปลผลสเปกตรัมอินฟราเรดจึงต้องอาศัยความเข้าใจในปัจจัยทางโครงสร้างของสาร และการอ้างอิงข้อมูลจากตารางค่ามาตรฐานร่วมด้วย เพื่อให้สามารถสรุปผลได้อย่างถูกต้องและแม่นยำ

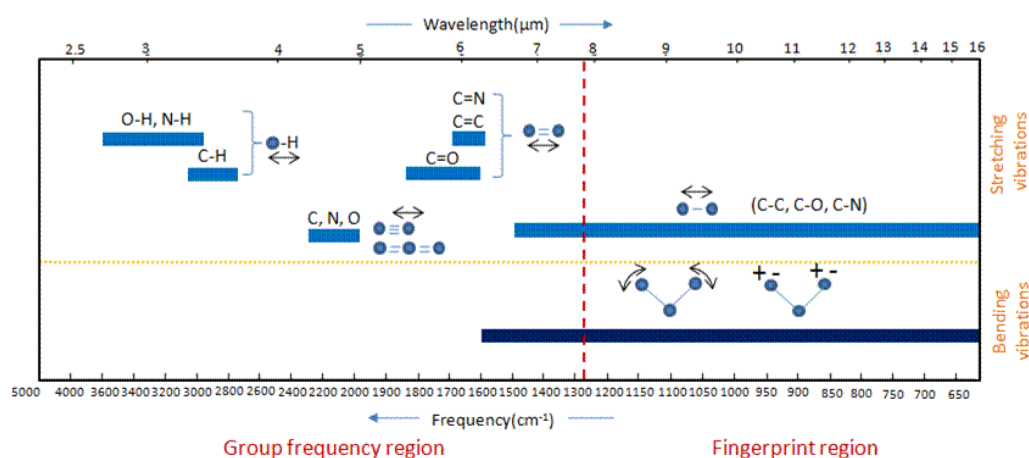
บริเวณลายนิ้วมือในอินฟราเรดสเปกตรัม

บริเวณด้านขวาของสเปกตรัมอินฟราเรด ซึ่งอยู่ในช่วงเลขคลื่นประมาณ $1,500\text{--}500\text{ cm}^{-1}$ มักแสดงการดูดกลืนที่มีความซับซ้อนสูง เนื่องจากเกิดจากการสั่นแบบงอ (bending vibrations) ของพันธะในโมเลกุล ซึ่งมีความหลากหลายและเกิดขึ้นพร้อมกัน ส่งผลให้สัญญาณการดูดกลืนในช่วงนี้มีลักษณะเฉพาะตัวของแต่ละสาร บริเวณนี้เรียกว่า fingerprint region เนื่องจากรูปแบบของพีคหรือร่องการดูดกลืนในบริเวณนี้มีความจำเพาะต่อแต่ละสารประกอบ เช่นเดียวกับลายนิ้วมือของมนุษย์ที่มีเอกลักษณ์เฉพาะตัว ทำให้สามารถใช้เปรียบเทียบระหว่างสเปกตรัมของสารตัวอย่างที่ไม่ทราบองค์ประกอบกับฐานข้อมูลของสารมาตรฐานที่รู้จัก เพื่อช่วยระบุตัวตนของสารได้อย่างแม่นยำ

แม้ว่าบริเวณนี้จะมีความซับซ้อนและยากต่อการระบุพันธะของหมู่ฟังก์ชันเดี่ยว ๆ เมื่อเปรียบเทียบกับบริเวณที่มีเลขคลื่นสูงกว่า (ซึ่งมักให้สัญญาณที่ชัดเจนของการสั่นแบบยืด-หดหรือ stretching vibrations ของพันธะเดี่ยว เช่น O-H, N-H, และ C=O) แต่ความสำคัญของบริเวณลายนิ้วมืออยู่ที่ ความจำเพาะของรูปแบบการดูดกลืนของแต่ละสารประกอบ ซึ่งสามารถใช้เป็นหลักฐานสำคัญในการพิสูจน์เอกลักษณ์ของสาร โดยเฉพาะอย่างยิ่งในงานด้านการวิเคราะห์ทางเคมี



ภาพที่ 2.7 อินฟราเรดสเปกตรัม 1-butanol



ภาพที่ 2.8 การสั่นบริเวณ fingerprint region

พันธะเคมีในโมเลกุลจะดูดกลืนพลังงานอินฟราเรดที่ความถี่จำเพาะ ซึ่งสอดคล้องกับโหมดการสั่นของพันธะนั้น ๆ การสั่นสามารถจำแนกได้เป็น การสั่นแบบยืด-หด และการสั่นแบบงอ ตารางแสดงช่วงเลขคลื่น (wavenumber, cm^{-1}) ที่ใช้บ่งชี้หมู่ฟังก์ชันสำคัญของสารอินทรีย์ ดังตารางที่ 2.1 และ 2.2

ตารางที่ 2.1 หมู่ฟังก์ชันสารอินทรีย์และประเภทการสั่น

หมู่ฟังก์ชัน	พันธะ	คุณลักษณะ IR Frequency (cm^{-1})
alcohol	O-H stretching	3,200-3,600 (broad)
carbonyl	C=O stretching	1,650-1,750 (strong)
aldehyde	C-H stretching	~2,800 and ~ 2,700 (medium)
carboxylic acid	C=O stretching	1,700-1,725 (strong)
	O-H stretching	2,500-3,300 (broad)
alkene	C=C stretching	1,620-1,680 (weak)
	vinyl =C-H stretching	3,020-3,080
benzene	C=C stretching	~1,600 and 1,500-1,430 (strong to weak)
alkyne	$\text{C}\equiv\text{C}$ stretching	2,100-2,250 (weak)
	terminal $\equiv\text{C-H}$ stretching	3,250-3,350
alkane	C-H stretching	2,850-2,950
amine	N-H stretching	3,300-3,500 (medium)

ตารางที่ 2.2 ช่วงเลขคลื่น (wavenumber, cm^{-1}) ที่ใช้บ่งชี้หมู่ฟังก์ชันสำคัญของสารอินทรีย์

Region (cm^{-1})	Group	Possible Compounds Present (or Absent)
3700-3100	-OH	Alcohol, aldehyde, carboxylic acids
	-NH	Amides, amines
	$\equiv\text{C-H}$	Alkynes
3100-3000	=C-H	Aromatic compounds
	-CH ₂ or -CH=CH-	Alkenes or unsaturated rings
3000-2800	-CH ₂ , -CH ₂ -, -CH ₃	Aliphatic groups
2800-2600	-CHO	Aldehydes (Fermi doublet)
2700-2400	-POH	Phosphorus compounds
	-SH	Mercaptans and thiols
	-PH	Phosphine
2400-2000	-C $\equiv$ N	Nitriles
	-N=N ⁺ =N ⁻	Azides
	-C $\equiv$ C-	Alkynes
1870-1650	C=O	Acid halides, aldehydes, amides, amino acids, anhydrides, carboxylic acids, esters, ketones, lactams, lactones, quinines
1650-1550	C=C, C=N, NH	Unsaturated aliphatics, aromatics, unsaturated heterocycles, amides, amines, amino acids
1550-1300	NO ₂	Nitro compound
	CH ₃ and CH ₂	Alkanes, alkenes, etc
1300-1000	C-O-C and C-OH	Ethers, alcohols, sugars
	S=O, P=O, C-F	Sulphur, phosphorus, and fluorine compounds
1100-800	Si-O and P-O	Organosilicon and phosphorus compounds
1000-650	=C-H	Alkenes and aromatic compounds
	-NH	Aliphatic amines
800-400	C-halogen	Halogen compounds
	Aromatic rings	Aromatic compounds

2.1.3 องค์ประกอบของเครื่อง FT-IR

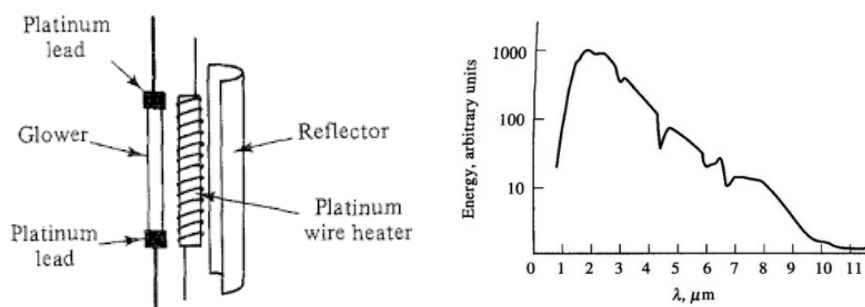
เครื่องอินฟราเรดสเปกโตรมิเตอร์สามารถแบ่งเป็น 2 แบบ ได้แก่ แบบกระจาย (dispersive) และแบบฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม (Fourier transform) โดยทั้งสองประเภทมีส่วนประกอบหลัก ดังนี้

1. แหล่งกำเนิดแสง (light sources) ส่วนใหญ่อาศัยการให้ความร้อนแก่ของแข็งจนปล่อยรังสีอินฟราเรดออกมา ซึ่งอยู่ในย่านความยาวคลื่น $2.5\text{--}25\text{ }\mu\text{m}$ ($4,000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$) ได้แก่

- Nernst glower ทำจากออกไซด์ของโลหะ เช่น ZrO_2 , Y_2O_3 และ Er_2O_3 ให้อินฟราเรดกว้าง ($2\text{--}25\text{ }\mu\text{m}$ หรือ $5,000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$) ใช้เวลาทำความร้อนก่อนเริ่มปล่อยรังสีอินฟราเรด โดยใช้กระแสไฟฟ้าเพื่อให้ความร้อนที่อุณหภูมิประมาณ $1,200\text{--}2,000^\circ\text{C}$

- Globar (silicon carbide rod) ทำจากซิลิคอนคาร์ไบด์ (SiC) ให้รังสีอินฟราเรดที่แรงและเสถียรกว่า Nernst glower ให้พลังงานสูงสุด $7,100\text{ cm}^{-1}$ นิยมใช้เป็นแหล่งกำเนิดแสงหลักใน FT-IR spectrometer

- Incandescent wire (nichrome or Kanthal filament) ทำจากโลหะผสม นิกเกิล-โครเมียม (nichrome) หรือ แคนธาล (Kanthal, Fe-Cr-Al) ทำงานที่อุณหภูมิ $1,100^\circ\text{C}$ ให้รังสีอินฟราเรดที่ค่อนข้างกว้าง แต่พลังงานต่ำกว่า Globar และ Nernst glower นิยมใช้ในเครื่องมือที่มีขนาดเล็กหรือเครื่องมือพกพา



ภาพที่ 2.9 แหล่งกำเนิดแสง Nernst glower

นอกจากยังมีแหล่งกำเนิดแสงประเภทอื่น เช่น แบบควอนตัม (quantum light sources) ใช้โฟตอนพลังงานสูง เช่น เลเซอร์ หรือไดโอดเปล่งแสง (LEDs) ซึ่งสามารถให้รังสีอินฟราเรดที่มีความเข้มสูงและความยาวคลื่นจำเพาะ เช่น infrared laser sources ใช้ใน tunable diode laser spectroscopy (TDLS) และ quantum cascade laser (QCL) ซึ่งให้แสงอินฟราเรดที่มีความเข้มสูงและความจำเพาะสูง เหมาะสำหรับงานวิเคราะห์ปริมาณน้อย (trace analysis) และการตรวจจับแก๊ส และประเภท light emitting diodes (LEDs) ใช้ในเซ็นเซอร์อินฟราเรดแบบพกพา ให้รังสีอินฟราเรดที่มีย่านความยาวคลื่นแคบ ใช้พลังงานต่ำและมีอายุการใช้งานยาวนาน

ตารางที่ 2.3 แหล่งกำเนิดแสง

แหล่งกำเนิดแสง	ช่วงเลขคลื่น (cm ⁻¹)	สมบัติเด่น	การใช้งานหลัก
Nernst glower	5,000–400	ให้รังสีอินฟราเรดกว้าง แต่ต้องอุ่นก่อน	ใช้ในเครื่อง Dispersive IR รุ่นเก่า
Globar (SiC Rod)	5,000–400	เสถียรและให้พลังงานสูงกว่า Nernst	ใช้ใน FT-IR Spectrometer
Nichrome/Kanthal filament	5,000–400	ราคาถูก ใช้พลังงานต่ำ	ใช้ในเครื่องมือขนาดเล็ก
Infrared Laser (QCL, TDLS)	5,000–1,000	ความเข้มสูง ความจำเพาะสูง	ใช้ในการตรวจจับแก๊ส และงานวิเคราะห์ที่แม่นยำ
Infrared LEDs	4,000–1,000	ความเข้มแคบ ใช้พลังงานต่ำ	ใช้ในเซ็นเซอร์ IR และเครื่องมือพกพา
Synchrotron Radiation	10,000–50	ให้ความเข้มสูงมาก ติดตั้งในสถานีวิจัย	ใช้ในงานวิจัยโครงสร้างโมเลกุลขั้นสูง

2. เซลล์ตัวอย่าง สำหรับตัวอย่างบางชนิดต้องบรรจุในเซลล์ตัวอย่างก่อนวิเคราะห์ โดยส่วนใหญ่เซลล์ตัวอย่างทำมาจากเกลือของแฮไลด์ เช่น โซเดียมคลอไรด์ (NaCl) โพแทสเซียมโบรไมด์ (KBr) ลิเทียม-ฟลูออไรด์ (LiF) และซิลเวอร์คลอไรด์ (AgCl) เป็นต้น มีลักษณะโปร่งใสและไม่ดูดกลืนรังสีอินฟราเรดย่านเดียวกับตัวอย่าง

3. ตัวทำแสงเอกรงค์ (monochromator) เป็นส่วนประกอบเฉพาะเครื่องอินฟราเรดสเปกโตรมิเตอร์แบบกระจาย (dispersive infrared spectrometer) เท่านั้น ทำหน้าที่เลือกความยาวคลื่นนิยมใช้เกรตติงมากกว่าปริซึม เนื่องจากประสิทธิภาพการแยก (resolution) สูงกว่า

สำหรับเครื่องฟูเรียร์ทรานสฟอร์มอินฟราเรดสเปกโตรมิเตอร์ (Fourier transform infrared, FT-IR) จะใช้อุปกรณ์ที่เรียกว่าอินเตอร์เฟอโรมิเตอร์ (interferometers) หรือ Michelson interferometer ทำหน้าที่ปรับลำแสง

4. ตัวตรวจวัด (detector) มีหน้าที่ตรวจจับและแปลงสัญญาณรังสีอินฟราเรดที่ถูกดูดกลืนหรือส่งผ่านโดยตัวอย่างให้อยู่ในรูปของสัญญาณไฟฟ้า จากนั้นนำไปวิเคราะห์เพื่อสร้างสเปกตรัมอินฟราเรด โดยตัวตรวจวัดสามารถแบ่งออกเป็น 2 ประเภทหลัก ได้แก่ ตัวตรวจวัดความร้อน (thermal detectors) และ ตัวตรวจวัดโฟตอน (photon detectors)

1) ตัวตรวจวัดความร้อน ตัวตรวจวัดประเภทนี้ทำงานโดยตรวจจับการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิเมื่อพลังงานอินฟราเรดตกกระทบ เช่น

- เทอร์โมคัพเพิล (thermocouple) ใช้หลักของ Seebeck Effect วัดความต่างศักย์ไฟฟ้าที่เกิดจากอุณหภูมิที่เปลี่ยนแปลง มีการตอบสนองสัญญาณช้าจึงเหมาะสำหรับเครื่องอินฟราเรดสเปกโตรมิเตอร์แบบกระจาย

- โบโลมิเตอร์ (Bolometer) ตรวจจับการเปลี่ยนแปลงความต้านทานไฟฟ้าของวัสดุเมื่อได้รับพลังงานอินฟราเรด

- ตัวตรวจวัดไพโรอิเล็กทริก (pyroelectric) ใช้วัสดุไพโรอิเล็กทริก (เช่น LiTaO_3) ที่สร้างสัญญาณไฟฟ้าเมื่ออุณหภูมิเปลี่ยนแปลง

โดยข้อดีตัวตรวจวัดความร้อนคือ ราคาถูก ไม่ต้องใช้อุณหภูมิต่ำมาก แต่ข้อเสียคือ ความไวต่ำกว่าประเภทตัวตรวจวัดโฟตอนและตอบสนองช้า

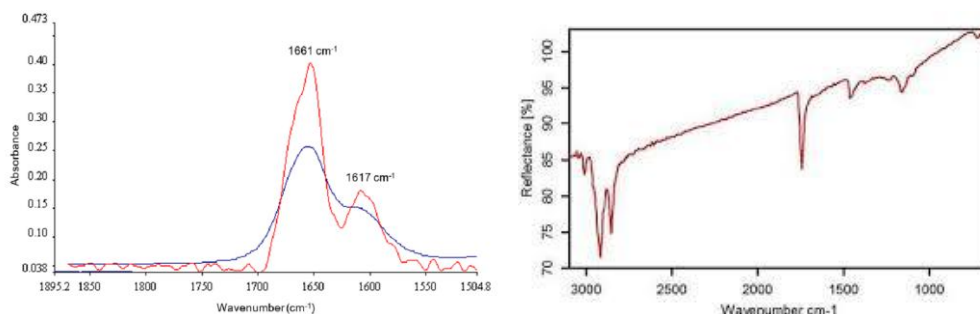
2) ตัวตรวจวัดโฟตอน ตัวตรวจวัดประเภทนี้ทำงานโดยตรวจจับพลังงานของโฟตอนอินฟราเรดที่กระทบและทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของสมบัติไฟฟ้าในวัสดุ

- Photoconductive detector (เช่น HgCdTe -MCT detector) ตรวจจับการเปลี่ยนแปลงของความต้านทานไฟฟ้าเมื่อโฟตอนอินฟราเรดกระทบ

- Photovoltaic detector (เช่น PbS , PbSe) ใช้หลักของโฟโตอิเล็กทริกแปลงพลังงานแสงเป็นกระแสไฟฟ้าโดยตรง

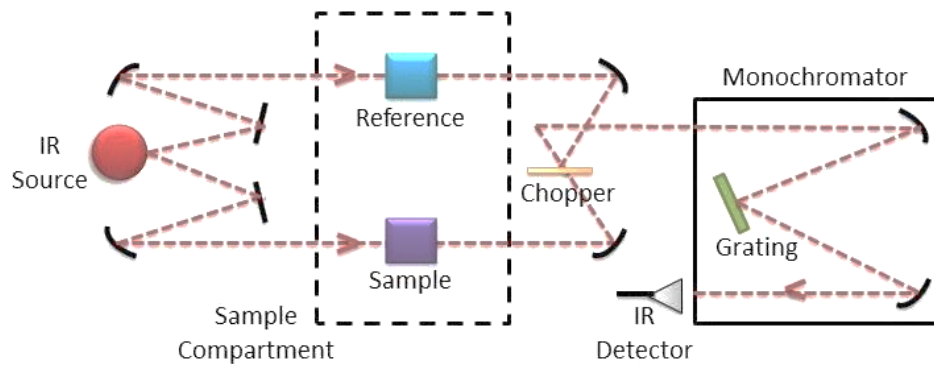
ข้อดีของตัวตรวจวัดโฟตอนคือ ความไวสูงมาก ตอบสนองเร็ว แต่ข้อเสียคือ ต้องทำงานที่อุณหภูมิต่ำ (เช่น ใช้ไนโตรเจนเหลวในการระบายความร้อน)

5. เครื่องบันทึก ทำหน้าที่บันทึกสัญญาณที่ออกมาจากตัวตรวจวัด ส่วนใหญ่การวิเคราะห์หุ้มฟังก์ชันของสารอินทรีย์ด้วยเครื่องอินฟราเรดสเปกโตรมิเตอร์จะเป็นแบบการดูดกลืน (absorbance) มากกว่าการสะท้อน (reflectance) ลักษณะสเปกตรัมดังภาพที่ 2.10 ปัจจุบันสเปกตรัมแบบดูดกลืนนิยมพลอต (plot) ความสัมพันธ์ระหว่างร้อยละความส่องผ่าน (%T) และเลขคลื่น (wave number, cm^{-1}) ตามกฎของเบียร์-แลมเบิร์ต



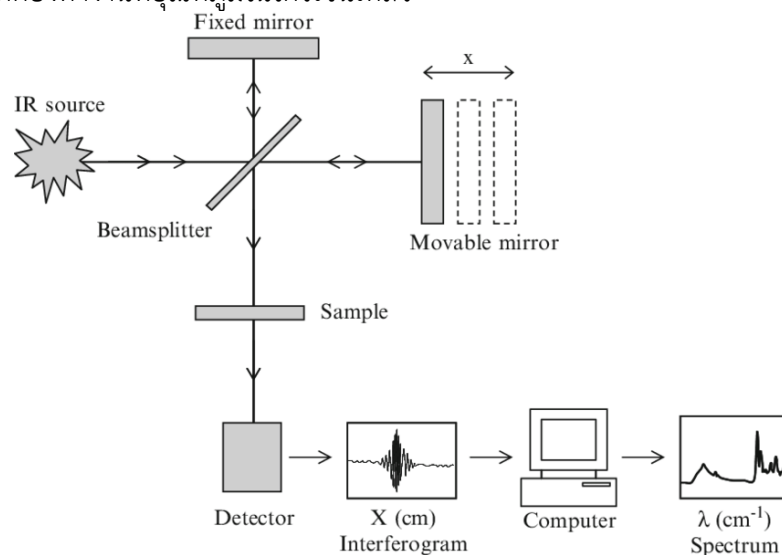
ภาพที่ 2.10 รูปแบบอินฟราเรดสเปกตรัม (ก) การดูดกลืน และ (ข) การสะท้อน

เครื่องอินฟราเรดสเปกโตรมิเตอร์แบบกระจายแสงใช้ Nernst glower เป็นแหล่งกำเนิดรังสี เมื่อถูกเผาด้วยไฟฟ้าแรงสูง จะปล่อยรังสีอินฟราเรด (IR) ออกมา รังสี IR ถูกแบ่งออกเป็นสองลำแสง โดยกระจกสะท้อน ลำแสงแรกผ่านเซลล์ที่บรรจุตัวอย่าง ลำแสงที่สอง เรียกว่า ลำแสงอ้างอิง ผ่านเซลล์ที่มีสารอ้างอิง จากนั้นทั้งสองลำแสงจะเข้าสู่ beam chopper ซึ่งเป็นกระจกหมุนที่ใช้ในการปรับสัญญาณก่อนส่งไปยังตัวตรวจวัด ดังภาพที่ 2.11 กระบวนการนี้ช่วยให้สามารถเปรียบเทียบการดูดกลืนรังสีของตัวอย่างกับสารอ้างอิงได้อย่างแม่นยำ



ภาพที่ 2.11 ส่วนประกอบของเครื่องอินฟราเรดสเปกโตรมิเตอร์แบบกระจายแสง

ปัจจุบันเครื่องอินฟราเรดสเปกโตรมิเตอร์จะเป็นแบบฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม (FT-IR) สามารถวิเคราะห์ตัวอย่างได้ทั้งของแข็ง ของเหลวและแก๊ส มีความเร็วและความไวสูงกว่า ระบบของเครื่อง FT-IR ประกอบด้วย 3 ส่วนหลัก ได้แก่ แหล่งกำเนิดรังสี อินเทอร์เฟอโรมิเตอร์ (interferometer) และตัวตรวจวัด โดยแหล่งกำเนิดรังสียังคงใช้แบบเดียวกับเครื่องเดิม แต่มีระบบระบายความร้อน ส่วนอินเทอร์เฟอโรมิเตอร์ทำหน้าที่แทนโมโนโครเมเตอร์ในเครื่องแบบกระจาย (dispersive) โดยแยกลำแสงและสร้างความแตกต่างของระยะทาง (path difference) ก่อนรวมสัญญาณการแทรกสอดเพื่อวิเคราะห์ข้อมูล และตัวตรวจวัดที่ใช้ใน FT-IR มีสองประเภทหลัก ได้แก่ deuterated triglycine sulfate (DTGS) และ mercury cadmium telluride (MCT) โดย DTGS เป็นตัวตรวจวัดแบบไพโรอิเล็กทริกที่ตอบสนองรวดเร็วโดยตรวจจับการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิ และสามารถทำงานได้ที่อุณหภูมิห้อง ส่วน MCT เป็นตัวตรวจวัดโฟตอนที่ขึ้นกับคอนดักตัมของรังสี มีความไวและความเร็วสูงกว่า DTGS แต่ต้องทำงานที่อุณหภูมิไนโตรเจนเหลว



ภาพที่ 2.12 ส่วนประกอบของเครื่อง FT-IR ใช้ Michelson interferometer

หลักการทำงานของเครื่อง FT-IR สรุปได้คือ เมื่อให้ความร้อนช่วงอุณหภูมิ 1,000-8,000°C กับแหล่งกำเนิดรังสี รังสีอินฟราเรดที่ถูกปล่อยออกมาจะผ่านไปยังเซลล์ตัวอย่าง ทำให้ดูดกลืนรังสี

ตรงกับความสัมพันธ์การสั่นแบบพื้นฐานของพันธะ ซึ่งความเข้มของสัญญาณจะวิเคราะห์ได้ด้วยตัวตรวจหาได้ ลักษณะเป็นคลื่น หลังจากประมวลผลโดยการแปลงฟูเรียร์ (Fourier transformation) จะเปลี่ยนเป็นเส้นสเปกตรัมความสัมพันธ์ระหว่างความถี่และความถี่

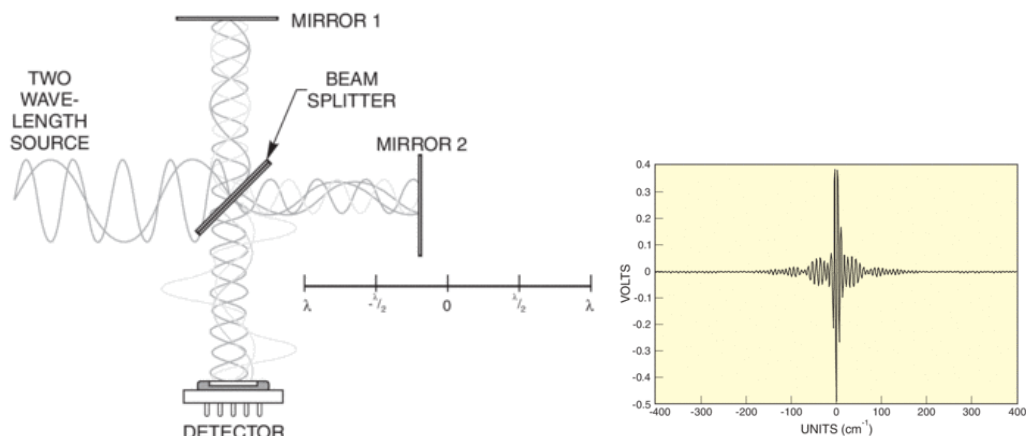
เครื่อง FT-IR ใช้ไมเคิลสันอินเทอร์เฟอโรมิเตอร์ (Michelson interferometer) เป็นองค์ประกอบหลัก ซึ่งประกอบด้วยกระจกเคลื่อนที่ กระจกตรึงอยู่กับที่ และตัวแยกแสง (beam splitter) ดังภาพที่ 2.12 โดยตัวแยกแสงมักทำจากฟิล์มบางของเจอร์เมเนียมบนโพแทสเซียมโบรไมด์ (KBr) เมื่อรังสีอินฟราเรดจากแหล่งกำเนิดเข้าสู่อินเทอร์เฟอโรมิเตอร์ ลำแสงจะถูกแบ่งเป็นสองส่วน ส่วนหนึ่งทะลุผ่านไปยังกระจกตรึงอยู่กับที่ และอีกส่วนหนึ่งสะท้อนไปยังกระจกเคลื่อนที่ หลังจากสะท้อนกลับมายังตัวแยกแสง ทั้งสองลำแสงจะรวมกัน ทำให้เกิดการแทรกสอด (interference) ก่อนส่งผ่านไปยังตัวตรวจวัด โดยหลักการของการแทรกสอด คือ

- ถ้าระยะทางที่ลำแสงทั้งสองเดินทางเท่ากัน (path difference = 0) เฟสของคลื่นจะตรงกัน ทำให้สัญญาณมีค่าสูงสุด

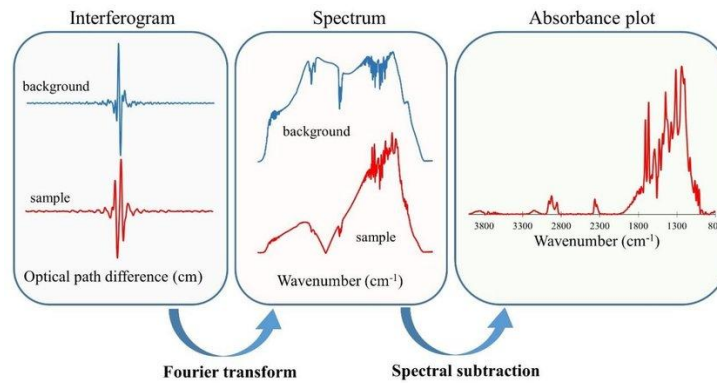
- เมื่อกระจกเคลื่อนที่ไป $\lambda/4$ ระยะทางเดินแสงเปลี่ยนเป็น $\lambda/2$ ทำให้เฟสของคลื่นต่างกัน 180° และเกิดการหักล้าง

- หากเคลื่อนที่อีก $\lambda/4$ เฟสของคลื่นกลับมาตรงกันอีกครั้ง

เมื่อกระจกเคลื่อนที่ด้วยความเร็วคงที่ สัญญาณที่ตัวตรวจวัดได้รับจะอยู่ในรูปของอินเทอร์เฟอโรแกรม (interferogram) ซึ่งเป็นฟังก์ชันของเวลาที่สัมพันธ์กับการเคลื่อนที่ของกระจก หากตัวอย่างดูดกลืนรังสีที่ความถี่ใด ความเข้มของสัญญาณในช่วงนั้นจะลดลงตามปริมาณของสารนั้น สุดท้าย Fourier transform (FT) จะถูกนำมาใช้แปลง interferogram จากโดเมนเวลาไปเป็นสเปกตรัมความถี่ ดังภาพที่ 2.13 และ 2.14



ภาพที่ 2.13 แผนภาพการทำงานของ FT-IR (ก) การแทรกสอด และ (ข) ลักษณะ interferogram



ภาพที่ 2.14 ฟูเรียร์แปลง interferogram

การวิเคราะห์สารด้วยเทคนิค FT-IR spectroscopy มีวิธีดังนี้

1. เทคนิคการส่องผ่าน (transmission) เป็นเทคนิคที่นิยมกันแพร่หลาย โดยการให้แสงผ่านสารตัวอย่างโดยตรง ให้ signal to noise ratio ที่ดี เหมาะกับตัวอย่างที่เป็นของแข็ง ของเหลว และแก๊ส แต่มีข้อจำกัดที่สารตัวอย่างต้องให้แสงผ่านได้ และความหนาของสารตัวอย่างมีผลต่อค่าการดูดกลืน หรือการส่องผ่าน (ภาพที่ 2.15)

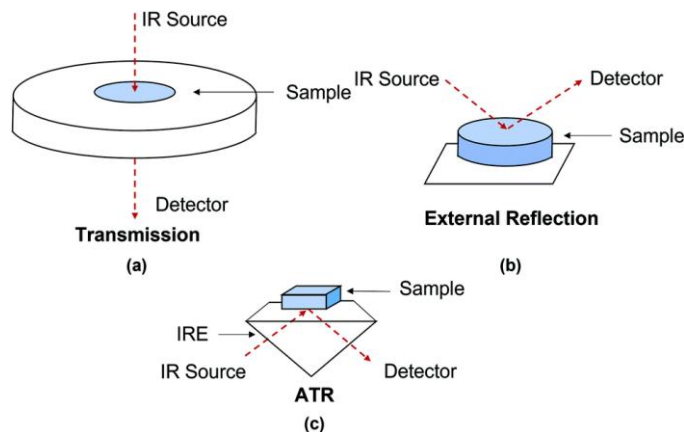
2. เทคนิคการสะท้อน (refraction) เทคนิคนี้จะใช้กับสารตัวอย่างที่ไม่สามารถวัดโดยวิธีการส่องผ่านได้ หรือสารตัวอย่างที่มีการสะท้อนที่ผิวที่ดี เช่น พลาสติก สีทาไม้ ยาง กระจก เทคนิคการสะท้อน แบ่งออกเป็น 3 วิธี ได้แก่

2.1 specular reflectance อาศัยหลักการสะท้อนของแสง คือ วัดการสะท้อนที่เกิดขึ้นเมื่อมุมของแสงตกกระทบบมีค่าเท่าแสงสะท้อนให้กับตัวอย่างที่มีผิวหน้าเรียบ (smooth surface) การวัดจะมีสองแบบคือ วัดสะท้อนคลื่นอินฟราเรดที่ผิวหน้าของสารตัวอย่าง และอีกวิธีให้กับการวัดฟิล์มบางที่เคลือบสารผิวหน้าเรียบไว้ โดยวัดการสะท้อนของฟิล์มที่เคลือบไว้บนสารตัวอย่าง เมื่อผ่านแสงอินฟราเรดให้ผ่านสารเคลือบ แสงตกไปผิวหน้าเรียบของสารตัวอย่างและเกิดการสะท้อนกลับไปยังสารเคลือบอีกครั้ง เรียกเทคนิคนี้ว่า reflection-absorption หรือ double transmission

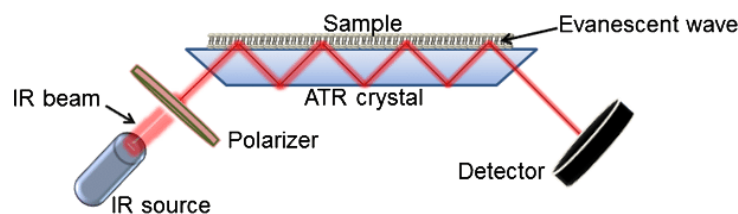
2.2 diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy (DRIFTS) เป็นเทคนิคสำหรับวิเคราะห์การสะท้อนแบบ diffuse reflectance เหมาะสำหรับตัวอย่างที่เป็นของแข็งผิวหน้าไม่เรียบ หยาบหรือเป็นผง แต่ในการวิเคราะห์จริงนั้น เมื่อผ่านคลื่นอินฟราเรดไปยังสารตัวอย่างจะทำให้เกิดปรากฏการณ์การสะท้อน 2 แบบ คือแบบ specular reflection และ diffuse reflectance (แสงอินฟราเรดจะผ่านเข้าไปในสารตัวอย่างก่อนที่จะชนอนุภาคต่าง ๆ แล้วสะท้อนกลับออกมา)

2.3 attenuated total reflectance (ATR) เป็นเทคนิคสำหรับวิเคราะห์ของแข็งของเหลว ฟิล์มบางหรือวัสดุทึบแสง โดยอาศัยหลักการสะท้อนกลับหมดของแสงอินฟราเรด (total internal reflection) แสงอินฟราเรดจะถูกส่งผ่านตัวกลางที่เป็นแท่งผลึก (ATR crystal) ที่มีค่าดัชนีหักเหสูง (ความหนาแน่นสูง) เช่น คริสตัลชนิดเพชร (diamond) หรือเจอร์เมเนียม จากนั้นจะตกกระทบบริเวณรอยต่อระหว่างคริสตัลกับตัวอย่างที่มีค่าดัชนีหักเหต่ำกว่า ด้วยมุมที่มากกว่ามุมวิกฤต (critical angle) ทำให้เกิดการสะท้อนกลับหมดที่ตรงผิวยรอยต่อ (interface) ระหว่างตัวกลางทั้งสอง

นั้น ในขณะเดียวกัน จะเกิดคลื่นแสงอินฟราเรดขนาดเล็กเรียกว่า evanescent wave ทะลุผ่านเข้าไปในตัวอย่างในระยะประมาณ 0.1–5 ไมครอน ขึ้นอยู่กับความยาวคลื่น มุมตกกระทบ และค่าดัชนีหักเหของทั้งสองวัสดุ สารตัวอย่างจะดูดกลืนบางส่วนของคลื่นนี้ ทำให้ความเข้มแสงลดลงจากเดิม เมื่อเทียบกับ background spectrum ที่ไม่มีสารตัวอย่าง แสงที่เหลือจะเกิดการสะท้อนกลับหมดออกมาและถูกวัดไว้ แสดงผลออกมาเป็น ATR สเปกตรัม



ภาพที่ 2.15 เทคนิคการวิเคราะห์ด้วย FT-IR แบบ transmittance และ reflectance



ภาพที่ 2.16 เทคนิคการวิเคราะห์ด้วย ATR-FT-IR

2.1.4 ปฏิบัติการวิเคราะห์อินฟราเรดสเปกตรัมของสารอินทรีย์

- 1) ปฏิบัติการส่วนประกอบของเครื่อง IR
 - 2) ปฏิบัติการวิเคราะห์หมู่ฟังก์ชันสารอินทรีย์
 - 3) ปฏิบัติการวิเคราะห์สารตัวอย่างด้วยเครื่อง FT-IR
- (ดูคู่มือปฏิบัติการ)

สรุปท้ายบทเรียน

เทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีเป็นเทคนิคที่นิยมใช้ในการวิเคราะห์ตรวจสอบเกี่ยวกับโมเลกุลของสาร โดยอาศัยหลักการเกี่ยวกับการสั่นของโมเลกุลแสงอินฟราเรดย่านกลาง (2.5-25 μm) มีความถี่ตรงกับความถี่การสั่นของพันธะโคเวเลนต์ในโมเลกุลของสาร เมื่อตัวอย่างได้รับพลังงานจากคลื่นรังสีอินฟราเรดที่เหมาะสม จะเกิดการสั่นของโมเลกุลทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงไดโพลโมเมนต์

ของโมเลกุล ทำให้โมเลกุลเกิดการดูดกลืนแสงแล้ววัดแสงที่ส่งผ่านออกมาแสดงผลเป็นความสัมพันธ์ของความถี่ หรือเลขคลื่น (wave number) กับค่าความส่งผ่านของแสง เรียกว่า อินฟราเรดสเปกตรัม ซึ่งลักษณะการดูดกลืนแสงของสารแต่ละชนิดจะมีสมบัติเฉพาะโมเลกุลของสาร จึงสามารถดูดกลืนแสงอินฟราเรดได้ที่ความถี่ที่แตกต่างกัน ขึ้นอยู่กับความแข็งแรงของพันธะและน้ำหนักอะตอมของหมู่ฟังก์ชันในโมเลกุลนั้น ๆ

วิธีการสอนและกิจกรรม

1. ทำกิจกรรมกลุ่ม
2. ใบกิจกรรม

สื่อการสอนและอุปกรณ์การสอน

1. เอกสาร power point
2. เอกสารประกอบการสอน
3. <https://kpu.pressbooks.pub/organicchemistry/chapter/6-2-infrared-ir-spectroscopy/>
4. <https://agora.cs.wcu.edu/~huffman/lectures/FT-IR.html>
5. https://youtu.be/WkaAvJ-OPDA?si=oOWuoUv53EW0_J3S

งานที่มอบหมาย

1. ทำกิจกรรมกลุ่ม
2. ใบกิจกรรม

การวัดผล

1. ทำกิจกรรมกลุ่ม
2. ใบกิจกรรม

แบบฝึกหัด

1. ทำกิจกรรม
2. ใบกิจกรรม

บรรณานุกรม

1. แม้น อมรสิทธิ์, และอมร เพชรสม. (2550). *หลักการและเทคนิคการวิเคราะห์เชิงเครื่องมือ*. สำนักพิมพ์ชวนชม.
2. เย็นหทัย แนนหนา. (2549). *สเปกโทรสโกปีสำหรับเคมีอินทรีย์*. สำนักพิมพ์แห่งจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย.
3. นิพนธ์ ตั้งคณานุรักษ์ และคณิดา ตั้งคณานุรักษ์. (2547). *สเปกโทรสโกปีด้านการวิเคราะห์*. สำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

4. Averill, B. A. (2012). *Principles of General Chemistry*.
<https://2012books.lardbucket.org/books/principles-of-general-chemistry-v1.0m/index.html>
5. Christian, G. D., Dasgupta, P. K., & Schug, K. A. (2014). *Analytical Chemistry* (7th ed.). John Wiley & Sons.
6. Harris, D. C. (2010). *Quantitative Chemical Analysis* (8th ed.). W.H. Freeman and Company.
7. *Infrared Spectroscopy*. (2020).
<https://agora.cs.wcu.edu/~huffman/lectures/FT-IR.html>
8. *Introduction to FT-IR Spectroscopy*. (n.d.).
<https://www.newport.com/n/introduction-to-FT-IR-spectroscopy>
9. Harvey, D. (2019). *Analytical Chemistry 2.1*. <https://chem.libretexts.org/>
10. Pavia, D. L., Lampman, G. M., Kriz, G. S., & Vyvyan, J. R. (2009). *Introduction to Spectroscopy* (4th ed.). Brooks/Cole Publishing
11. Robinson, J. W., Frame, E. M. S., & Frame G. M. (2021). *Instrumental Analytical Chemistry*. CRC Press

หน่วยที่ 2 วิธีอินฟราเรด สเปกโทรสโกปี

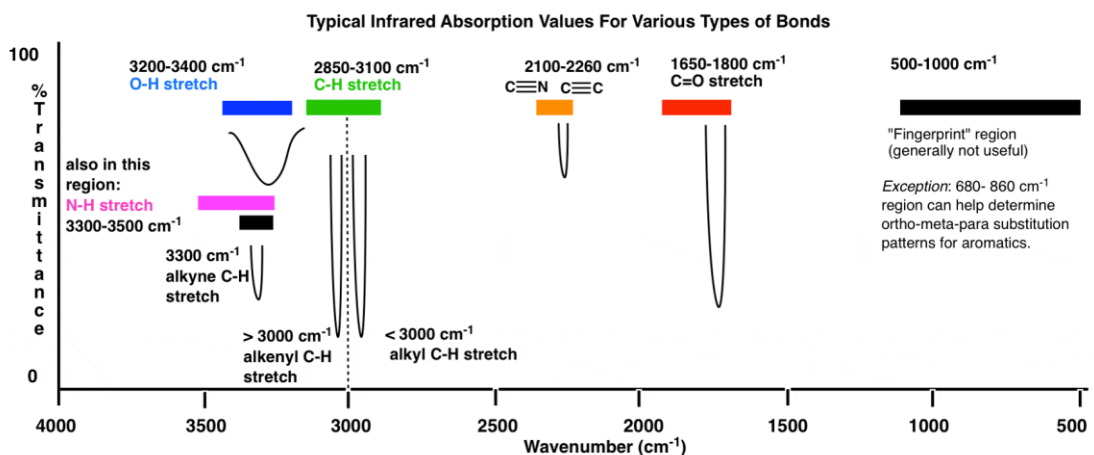
บทเรียน 2.2 การวิเคราะห์ด้วยเครื่อง FT-IR

จุดประสงค์การสอน

1. บอกการแปลผลอินฟราเรดสเปกตรัม
2. บอกวิธีการเตรียมตัวอย่าง
3. อธิบายการประยุกต์ใช้เทคนิค FT-IR ในด้านอาหารและเครื่องสำอาง
4. ปฏิบัติการวัดสารตัวอย่างด้วยเทคนิค FT-IR

2.2.1 การแปลผลอินฟราเรดสเปกตรัม

ลักษณะทั่วไปของอินฟราเรดสเปกตรัม แสดงดังภาพที่ 2.17 ซึ่งได้กล่าวมาข้างต้นแล้ว ประกอบด้วยย่านหมู่ฟังก์ชัน และย่านลายนิ้วมือ (finger print region)



ภาพที่ 2.17 ลักษณะทั่วไปของอินฟราเรดสเปกตรัม

เนื่องจากมีพิกจำนวนมาปรากฏในอินฟราเรดสเปกตรัม เราคงไม่สามารถคาดหวังว่าจะรู้ทุกพิกในอินฟราเรดสเปกตรัม ขั้นตอนต่อไปนี้อาจเป็นแนวทางเริ่มต้นในการแปรข้อมูลจากอินฟราเรดสเปกตรัมได้

1. ตรวจสอบว่ามีหมู่คาร์บอนิล ($\text{C}=\text{O}$) หรือไม่ เนื่องจากหมู่คาร์บอนิลให้แถบที่มีความเข้มสูงในย่าน $1,680\text{--}1,820\text{ cm}^{-1}$

2. ถ้ามีหมู่คาร์บอนิล ให้วิเคราะห์ต่อไปว่า เป็นสารประกอบคาร์บอนิลประเภทใด โดยตรวจสอบว่าสารประกอบคาร์บอนิลนั้นยังมีหมู่ฟังก์ชันอื่นที่พบใน IR สเปกตรัม หรือไม่

- กรดคาร์บอกซิลิก (-COOH): การยืด O-H ให้แถบกว้างและความเข้มสูงมาก ในย่าน $2,400\text{-}3,400\text{ cm}^{-1}$ และมักเกยกับแถบการยืด C-H

- แอลดีไฮด์ (-CHO): การยืด C-H ให้แถบที่มีความเข้มปานกลางถึงอ่อนที่ $2,750\text{ cm}^{-1}$ และ $2,850\text{ cm}^{-1}$ แถบ $2,850\text{ cm}^{-1}$ อาจถูกบดบังจากแถบการยืด C-H ของหมู่ CH_3 , CH_2

- เอไมด์ : การยืด N-H ให้แถบที่มีความเข้มปานกลางใกล้ $3,500\text{ cm}^{-1}$ อาจมีหนึ่งหรือสองแถบ

- แอนไฮไดรด์ : แถบการยืด C=O มี 2 แถบใกล้ $1,760\text{-}1,810\text{ cm}^{-1}$

- เอสเทอร์ : การยืด C-O ให้แถบที่มีความเข้มปานกลางถึงเข้มในย่าน $1,000\text{-}1,300\text{ cm}^{-1}$ อาจมี มากกว่าหนึ่งแถบ

- คีโตน : ถ้าไม่มีแถบสำคัญอื่น ๆ ที่กล่าวมาข้างต้น สารประกอบน่าเป็นคีโตน

3. ถ้าไม่ใช่สารประกอบคาร์บอนิล

- แอลกอฮอล์และฟีนอล : การยืด O-H ให้แถบที่มีความเข้มสูงและกว้างในย่าน $3,200\text{-}3,600\text{ cm}^{-1}$ และแถบการยืด C-O ในย่าน $1,000\text{-}1,300\text{ cm}^{-1}$

- เอมีน : การยืด N-H ให้หนึ่งหรือสองแถบที่มีความเข้มปานกลางใกล้ $3,500\text{ cm}^{-1}$

- อีเทอร์ : การยืด C-O ให้แถบที่มีความเข้มปานกลางถึงเข้มในย่าน $1,000\text{-}1,300\text{ cm}^{-1}$ อาจมีมากกว่าหนึ่งแถบ

- แอลคิลอีเทอร์ ให้แถบเดียวในย่าน $1,085\text{-}1,150\text{ cm}^{-1}$

- แอริลแอลคิลอีเทอร์ ให้ 2 แถบ แถบหนึ่งในย่าน $1,200\text{-}1,275\text{ cm}^{-1}$ และอีกหนึ่งในย่าน $1,020\text{-}1,075\text{ cm}^{-1}$

- สารประกอบไนโตร : การยืด N=O ให้แถบที่มีความเข้มสูง 2 แถบในย่าน $1,500\text{-}1,600\text{ cm}^{-1}$ และย่าน $1,300\text{-}1,390\text{ cm}^{-1}$

- ไนไตรล์ : การยืด $\text{C}\equiv\text{N}$ ให้แถบที่มีความเข้มค่อนข้างอ่อนในย่าน $2,150\text{-}2,260\text{ cm}^{-1}$

- แฮโลเจน

- ฟลูออรีน : การยืด C-F ให้แถบที่มีความเข้มสูงในย่าน $1,000\text{-}1,400\text{ cm}^{-1}$

- คลอรีน : การยืด C-Cl ให้แถบที่มีความเข้มสูงในย่าน $600\text{-}800\text{ cm}^{-1}$

- โบรมีน : การยืด C-Br ให้แถบในย่าน $400\text{-}600\text{ cm}^{-1}$ ซึ่งมักไม่เห็นใน IR

สเปกตรัม

- ไอโอดีน : การยืด C-I ให้แถบในย่าน $400\text{-}600\text{ cm}^{-1}$ ซึ่งมักไม่เห็นใน IR

สเปกตรัม

4. ไฮโดรคาร์บอน

- แอโรเมติก :

การยืด C-H ที่ $3,000\text{-}3,100\text{ cm}^{-1}$ ซึ่งเป็นพีคเล็กและแหลมคม อาจมีหลายพีค

การยืด C=C เกิดในช่วง $1,450\text{-}1,600\text{ cm}^{-1}$ อาจมีถึง 4 แถบคือที่ $1,450, 1,500, 1,580$ และ $1,600\text{ cm}^{-1}$

การงอของ C-H (ออกนอกระนาบ) เป็นแถบที่มีความเข้มสูงเกิดในย่าน $675\text{-}900\text{ cm}^{-1}$ ใช้บอกรูปแบบการแทนที่บนวงเบนซีนได้

- วงเบนซีนที่มีหมู่แทนที่ 1 หมู่ เกิดที่ 690 และ 750 cm^{-1}
- วงเบนซีนที่มีหมู่แทนที่ 2 หมู่แบบอโท เกิดที่ 750 cm^{-1}
- วงเบนซีนที่มีหมู่แทนที่ 2 หมู่แบบเมตา เกิดที่ $690, 780\text{ cm}^{-1}$ และ

อาจมีอีก 1 แถบที่มีความเข้มปานกลางใกล้ 880 cm^{-1}

- วงเบนซีนที่มีหมู่แทนที่ 2 หมู่แบบพารา เกิดที่ $800\text{-}850\text{ cm}^{-1}$ แถบคอมปีเนชันและโอเวอร์โทน (overtone) เกิดในย่าน $1,667\text{-}2,000\text{ cm}^{-1}$

- แอลเคน

การยืดของ C-H (C-H stretching) ให้แถบที่มีความเข้มสูงที่ $2,850\text{-}2,960\text{ cm}^{-1}$

การงอของ C-H (C-H bending) ให้แถบที่มีความเข้มปานกลางใกล้ $1,375\text{ cm}^{-1}$ และ $1,450\text{ cm}^{-1}$

- แอลคีน

การยืด C=C (C=C stretching) ให้แถบที่มีความเข้มต่ำใกล้ $1,650\text{ cm}^{-1}$ (ถ้าเป็นแอลคีนที่มีความสมมาตร แถบนี้จะไม่ปรากฏใน IR สเปกตรัม)

การยืด =C-H ของไวนิลที่ $3,000\text{-}3,100\text{ cm}^{-1}$ ซึ่งเป็นพีคเล็กและแหลมคม

- แอลไคน์

การยืด $\text{C}\equiv\text{C}$ ให้แถบที่มีความเข้มต่ำใกล้ $2,150\text{ cm}^{-1}$ (ถ้าเป็นแอลไคน์ที่มีความสมมาตร แถบนี้จะไม่ปรากฏใน IR สเปกตรัม)

การยืด $\text{C}\equiv\text{C-H}$ ที่มีความเข้มสูงใกล้ $3,300\text{ cm}^{-1}$

ตารางสหสัมพันธ์ (ตารางที่ 2.4) เป็นตารางที่รวบรวมความยาวคลื่นของแถบ IR ของหมู่ฟังก์ชันต่าง ๆ ในย่าน $4,000\text{-}600\text{ cm}^{-1}$

ตารางที่ 2.4 ความยาวคลื่นของแถบ IR ของหมู่ฟังก์ชันต่าง ๆ

Wave number (cm ⁻¹)	หมู่ฟังก์ชัน	รายละเอียด (ตัวอย่าง)
3,600-3,400	O-H stretching	3,650-3,590 (sh, w) แอลกอฮอล์อิสระ 3,400-3,200 (b) แอลกอฮอล์เกิด H-bond 3,400-2,400 (vs, vb) กรดคาร์บอกซิลิก
3,500-3,200	N-H stretching	3,200-3,400 (m) 1°เอมีนและเอไมด์ มี 2 แถบ 3,200-3,400 (w) 2°เอมีนและเอไมด์ มี 1 แถบ
3,300 (vs)	=C-H stretching	3,300 แอลไคน์ =C-H ที่ปลายโซ่
3,100-3,000 (w, sh)	=C-H stretching	แอลคีนและเบนซีน (อาจมีหลายพีก)
3,000-2,800	C-H stretching	หมู่ CH ₃ , CH ₂ และ CH ของแอลเคน
2,850-2,780	C-H stretching	แอลดีไฮด์
2,250-2,225	C-H stretching	ไนทริล (m)
2,260-2,100	C=C stretching	แอลไคน์ (w) โมเลกุลที่สมมาตรจะไม่มีแถบนี้อปรากฏ
1,820-1,760 (s)	C=O stretching	แอนไฮไดรด์ (s) มี 2 แถบ
1,800 (s)	C=O stretching	กรดคลอไรด์
1,770 (s)	C=O stretching	แกมมา-แลกโตน
1,735 (s)	C=O stretching	เอสเทอร์
1,725 (s)	C=O stretching	แอลดีไฮด์
1,715 (s)	C=O stretching	คีโตน
1,710 (s)	C=O stretching	กรดคาร์บอกซิลิก
1,690-1,650 (s)	C=O stretching	เอไมด์
1,650-1,600 (w)	C=C stretching	แอลคีน
1,650-1,690 (s-m)	N-H bending	1°เอมีน
1,650-1,550 (w)	N-H bending	2°เอมีน
1,620-1,590 (s)	N-H bending	1°เอไมด์
1,550-1,510 (s)	N-H bending	2°เอไมด์
1,600, 1,580, 1,500 และ 1,450	C=C stretching	เบนซีนและเบนซีนที่มีหมู่แทนที่ อาจมี 2, 3 แถบ หรือ ทั้ง 4 แถบ
1,520 (s), 1,350 (s)	NO ₂ bending	สารประกอบไนโตร
1,450-1,450	C-H bending	หมู่ CH ₂
1,450-1,375	C-H bending	หมู่ CH ₂
1,400-1,000	C-F stretching	สารประกอบฟลูออไรด์
1,300-1,150	CH ₂ -X	สารประกอบแฮโลเจน
1,300-1,000	C-O stretching	อีเทอร์และเอสเทอร์
1,220	C-O stretching	ฟีนอล
1,150	C-O stretching	3°แอลกอฮอล์
1,100	C-O stretching	2°แอลกอฮอล์
1,050	C-O stretching	1°แอลกอฮอล์
990 และ 910	C-H (OOP bending)	แอลคีน (หมู่แทนที่ 1 หมู่) RCH=CH ₂
970	C-H (OOP bending)	แอลคีน (หมู่แทนที่ 2 หมู่) RCH=CHR (trans)
890	C-H (OOP bending)	แอลคีน (หมู่แทนที่ 2 หมู่) R ₂ C=CH ₂
815	C-H (OOP bending)	แอลคีน (หมู่แทนที่ 3 หมู่) R ₂ C=CHR

Wave number (cm ⁻¹)	หมู่ฟังก์ชัน	รายละเอียด (ตัวอย่าง)
700-690	C-H (OOP bending)	แอลคีน (หมู่แทนที่ 2 หมู่) RCH=CHR (cis)
750 และ 690	C-H (OOP bending)	เบนซีน (หมู่แทนที่ 1 หมู่)
750	C-H (OOP bending)	เบนซีน (หมู่แทนที่ 2 หมู่ แบบ ortho-)
780 และ 700	C-H (OOP bending)	เบนซีน (หมู่แทนที่ 2 หมู่ แบบ meta-)
825-800	C-H (OOP bending)	เบนซีน (หมู่แทนที่ 2 หมู่ แบบ para-)
800-600	C-Cl	สารประกอบคลอไรด์
600-500	C-Br	สารประกอบโบรมൈด์
~500	C-I	สารประกอบไอโอไดด์

หมายเหตุ.

s = ความเข้มสูง, vs = ความเข้มสูงมาก, m = ความเข้มปานกลาง, w = ความเข้มต่ำ, vw = ความเข้มต่ำมาก
sh = แหลมคม, b = กว้าง, vb = กว้างมาก, OOP = การสั่นนอกระนาบ

1) แอลเคน

แอลเคนเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอน ภายในโครงสร้างประกอบด้วยพันธะ C-C และพันธะ C-H เท่านั้น การสั่นแบบพื้นฐานมี 4 แบบ คือ การสั่นแบบยืดและแบบงอของพันธะ C-C และพันธะ C-H แต่เนื่องจากการสั่นของพันธะ C-C พิกจะปรากฏที่ความถี่ <1,200 cm⁻¹ และมีความเข้มต่ำ ดังนั้นในการศึกษาทางเคมีจึงสนใจความถี่ของการสั่นของพันธะ C-H ดังนี้

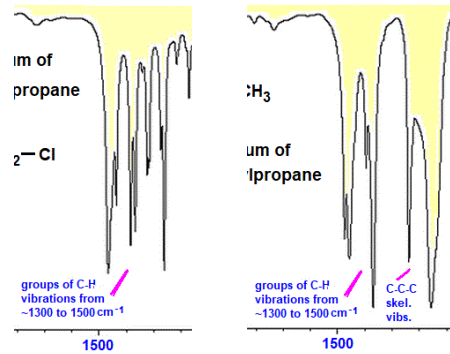
- พันธะ C-H (แบบยืด) ของหมู่เมทิล (methyl, -CH₃) แบบสมมาตรที่ความถี่ 2,872 cm⁻¹ และแบบไม่สมมาตรที่ความถี่ 2,962 cm⁻¹ และความเข้มของแต่ละพิกจะขึ้นอยู่กับจำนวนหมู่เมทิล

- พันธะ C-H (แบบยืด) ของหมู่เมทิลีน (methylene group, -CH₂-) แบบสมมาตรที่ความถี่ 2,853 cm⁻¹ และแบบไม่สมมาตรที่ความถี่ 2,926 cm⁻¹ ทั้งนี้ถ้าหมู่เมทิลีนในโครงสร้างเป็นวง ความถี่จะขึ้นอยู่กับผลความเครียดของวง

ขนาดวง	3 เหลี่ยม	4 เหลี่ยม	5 เหลี่ยม	6 เหลี่ยม
$\bar{\nu}$ (cm ⁻¹) แบบสมมาตร	3,020	2,900	3,870	2,850
$\bar{\nu}$ (cm ⁻¹) แบบไม่สมมาตร	3,100	2,990	2,950	2,930

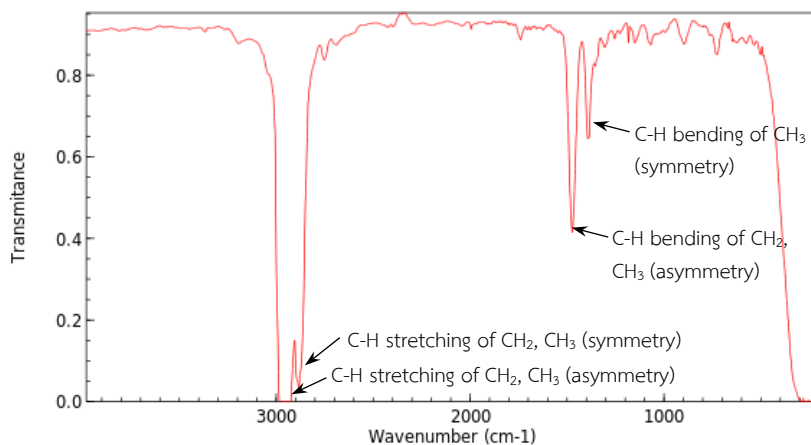
- พันธะ C-H (แบบงอ) ของหมู่เมทิลแบบสมมาตรที่ความถี่ 1,375 cm⁻¹ ความเข้มต่ำและแบบไม่สมมาตรที่ความถี่ 1,450 cm⁻¹ ความเข้มปานกลาง แต่ถ้าโครงสร้างมีหมู่ไอโซโพรพิล (iso-propyl group, -CH(CH₃)₂) พิกของพันธะ C-H (แบบงอ) ของหมู่เมทิลแบบสมมาตรจะแยกเป็นสองแถบที่ย่านความถี่ 1,365-1,370 และ 1,380-1,385 cm⁻¹ ซึ่งแถบทั้งสองมีความเข้มเท่ากัน กรณีพันธะ C-H (แบบงอ) ของหมู่เมทิลของหมู่เทอเทียรีบิวทิล (t-butyl group, -C(CH₃)₃) จะเกิดที่ความถี่ 1,370 และ 1,390 cm⁻¹ ลักษณะลายบ่งชี้ในสเปกตรัมดังภาพที่ 2.18

- พันธะ C-H (แบบงอ) ของหมู่เมทิลีนเกิดการสั่นได้ทั้งแบบกรรไกร การโยก การบิด และการกระดิก แต่เฉพาะการสั่นแบบกรรไกรเท่านั้น (~1,465 cm⁻¹) ที่มีความเข้มไม่ต่ำมากและปรากฏในสเปกตรัมได้ ซึ่งจะมีความถี่น้อยลงถ้าเมื่ออยู่ในโครงสร้างแอลเคนไซคลิก

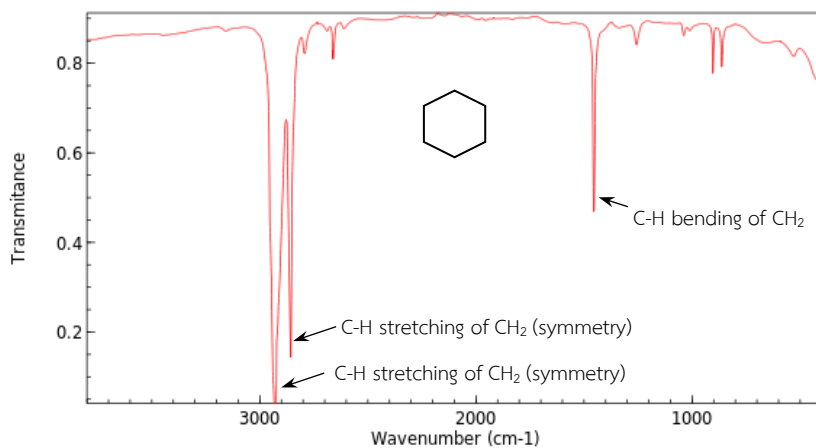


ภาพที่ 2.18 ลักษณะฟีกของพันธะ C-H (แบบงอ) ของหมู่ไอโซโพรพิลและหมู่เทอเทียรีบิวทิล

ตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมของแอลเคน เช่น เฮกเซน ดังภาพที่ 2.19 มีความถี่ของการสั่นของพันธะ C-H (แบบยืด) ของหมู่เมทิลและหมู่เมทิลีน เท่ากับ $2,900\text{ cm}^{-1}$ ส่วนพันธะ C-C (แบบยืด) ที่ย่านความถี่ $800\text{--}1,300\text{ cm}^{-1}$ และความเข้มสัญญาณต่ำ นอกจากนี้ การสั่นของพันธะ C-H ของ หมู่เมทิลและหมู่เมทิลีนจะอยู่ที่ย่านความถี่ $1,300\text{--}1,500\text{ cm}^{-1}$ ซึ่งฟีกของความถี่ของการสั่นแบบงอของ -CH_3 นี้ จะไม่ปรากฏในสเปกตรัมของไซโคลเฮกเซน ดังภาพที่ 2.20



ภาพที่ 2.19 อินฟราเรดสเปกตรัมของเฮกเซน (n-hexane)



ภาพที่ 2.20 อินฟราเรดสเปกตรัมของไซโคลเฮกเซน

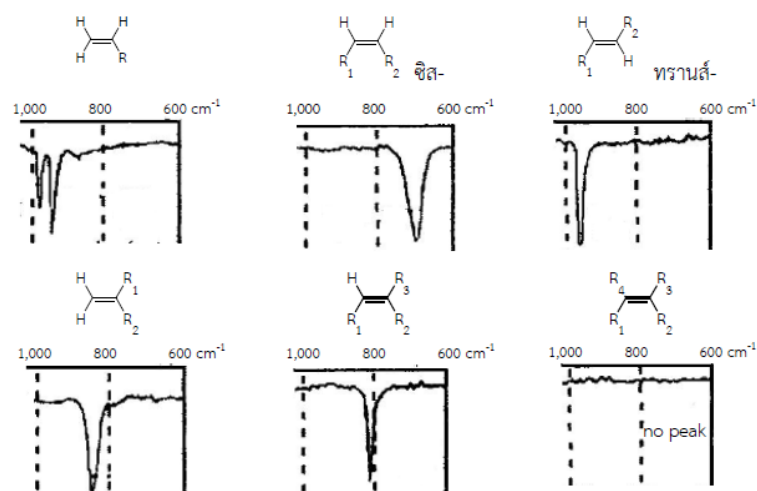
2) แอลคีน

หมู่แอลคีนเป็นไฮโดรคาร์บอนที่มีพันธะคู่ (C=C) จะมีไวนิลโปรตอน (vinyl proton, =C-H) คือ อะตอมไฮโดรเจนบนอะตอมคาร์บอนชนิดไฮบริดไคเซน sp^2 ซึ่งการสั่นทั้งพันธะ C=C และ =C-H ของแอลคีน ดังนี้

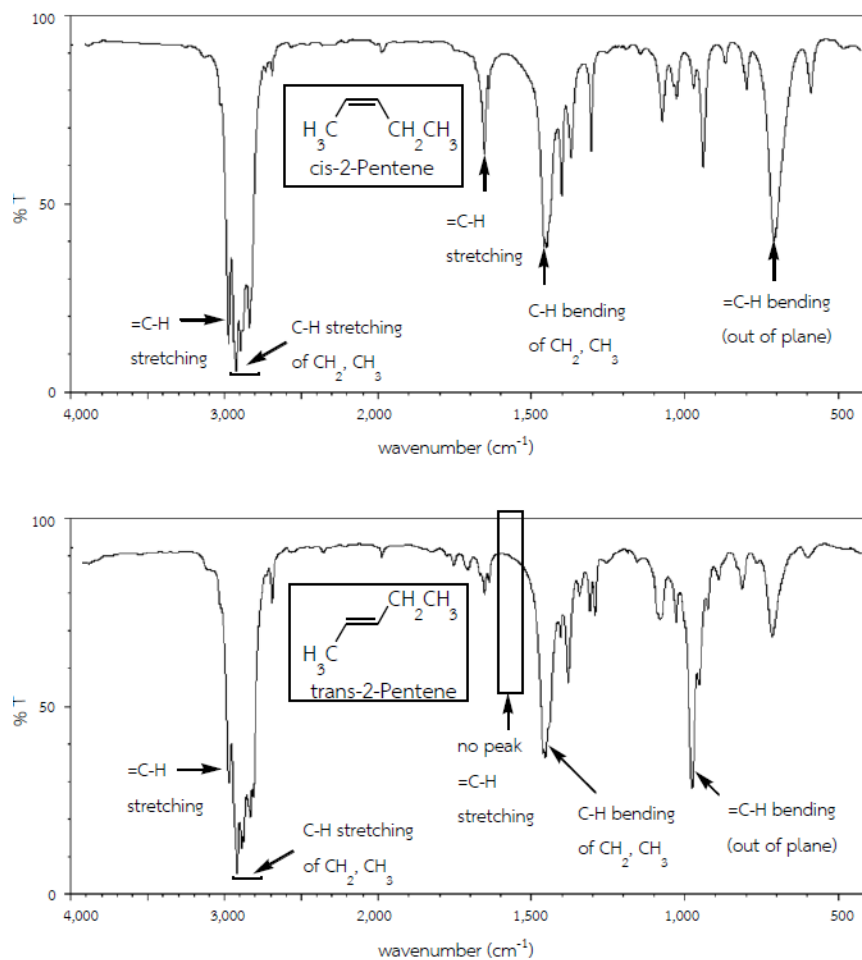
- พันธะ =C-H (แบบยึด) ของไวนิลโปรตอนที่ย่านความถี่ 3,000-3,100 cm^{-1} ความเข้มปานกลาง ซึ่งความถี่และความเข้มจะขึ้นอยู่กับจำนวนหมู่แทนที่บนพันธะคู่ ดังตารางที่ 2.5
- พันธะ =C-H (แบบงอ) ของไวนิลโปรตอน พบการสั่นในระนาบที่ความถี่ 1,415 cm^{-1} ความเข้มปานกลางถึงต่ำ และการสั่นตั้งฉากกับระนาบที่ย่านความถี่ 650-1,000 cm^{-1} ความเข้มสูง ซึ่งลักษณะบ่งชี้ของย่านความถี่ของการสั่นตั้งฉากกับระนาบนี้จะใช้บอกจำนวนหมู่แทนที่บนพันธะคู่ได้ ดังตารางที่ 2.5 และภาพที่ 2.21
- พันธะ C=C (แบบยึด) ที่ย่านความถี่ 1,620-1,680 cm^{-1} ความเข้มปานกลางและต่ำมาก สำหรับแอลคีนแบบทรานส์-สมมาตร และแอลคีนมีหมู่แทนที่ 4 หมู่ จะไม่ปรากฏในสเปกตรัม เช่น อินฟราเรดสเปกตรัมของโมเลกุล *cis*-2-pentene และ *trans*-2-pentene จะสังเกตว่าไม่ปรากฏ ความถี่ของพันธะ C=C (แบบยึด) ในสเปกตรัมของ *trans*-2-pentene ดังภาพที่ 2.21 ปัจจัยต่อความถี่ของพันธะ C=C (แบบยึด) ขึ้นอยู่กับระบบคอนจูเกต (conjugate) และขนาดวง

ตารางที่ 2.5 ความถี่ของการสั่นของพันธะในโมเลกุลแอลคีน

โครงสร้างแอลคีน	ความถี่ (cm^{-1})		
	พันธะ =C-H (แบบยึด)	พันธะ =C-H (แบบงอ) การสั่นตั้งฉากกับระนาบ	พันธะ C=C (แบบยึด)
	3,010-3,040 (ปานกลาง) และ 3,075-3,095 (ปานกลาง)	985-995 (สูง) และ 905-915 (สูง)	~1,645 (ปานกลาง)
	3,010-3,040 (ปานกลาง)	~690 (สูง)	~1,658 (ปานกลาง)
	3,010-3,040 (ปานกลาง)	960-970 (สูง)	~1,675 (ปานกลาง)
	3,075-3,095 (ปานกลาง)	885-895 (สูง)	~1,653 (ปานกลาง)
	3,010-3,040 (ปานกลาง)	790-840 (สูง)	~1,669 (ปานกลาง)
	ไม่ปรากฏ	ไม่ปรากฏ	~1,669 (ต่ำ)



ภาพที่ 2.21 ลักษณะบ่งชี้ของการสั่นของพันธะ =C-H (แบบงอ) ที่ย่านความถี่ 650-1,000 cm^{-1}



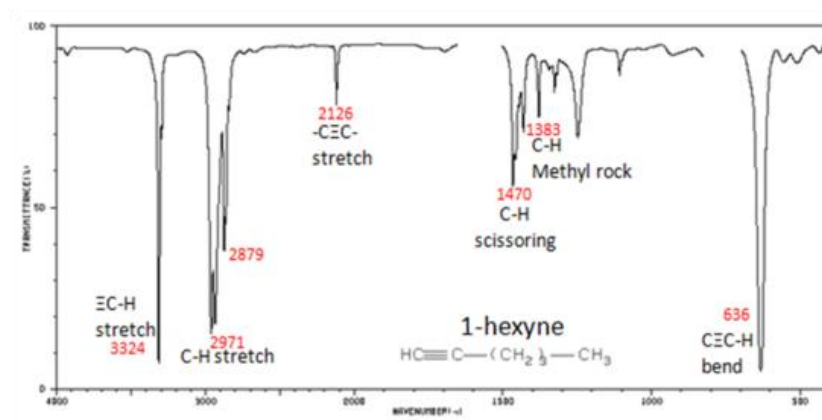
ภาพที่ 2.22 อินฟราเรดสเปกตรัม *cis*-2-pentene และ *trans*-2-pentene

3) แอลไคน์

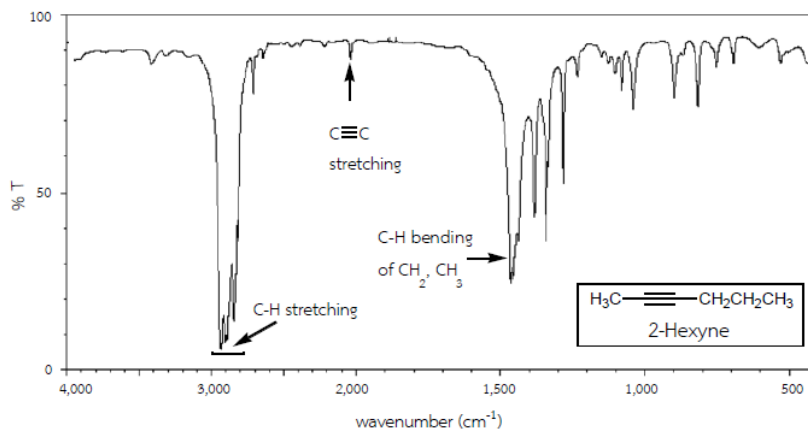
แอลไคน์เป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีหมู่ฟังก์ชันพันธะสาม ($\text{C}\equiv\text{C}$) แอลไคน์โซ่เปิดสามารถจำแนกออกเป็น 2 ประเภท ได้แก่ พันธะสามตรงปลายโซ่ (terminal alkyne, $\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$) และพันธะสามภายในโซ่ (internal alkyne, $\text{C}\equiv\text{C}$) จึงมีการสั่นของพันธที่สำคัญ ดังนี้

- พันธะ $\text{C}-\text{H}$ (แบบยึด) ที่ย่านความถี่ $3,333\text{--}3,627\text{ cm}^{-1}$ มีความเข้มสูง จะพบเฉพาะแอลไคน์ที่มีพันธะสามตรงปลายโซ่เท่านั้น เช่น 1-hexyne ดังภาพที่ 2.23 แต่ความถี่ของการสั่น $\text{C}-\text{H}$ (แบบยึด) ในย่านนี้จะใกล้เคียงกับการสั่นแบบยึดของพันธะ $\text{O}-\text{H}$ และพันธะ $\text{N}-\text{H}$ การพิสูจน์โครงสร้างของแอลไคน์จึงจำเป็นต้องใช้ข้อมูลอื่นประกอบด้วย

- พันธะ $\text{C}\equiv\text{C}$ (แบบยึด) สามารถใช้แยกประเภทแอลไคน์ได้ กรณีโครงสร้างมีพันธะสามตรงปลายโซ่ที่ย่านความถี่ $2,100\text{--}2,150\text{ cm}^{-1}$ ความเข้มต่ำ (ดังภาพที่ 2.23) ส่วนกรณีโครงสร้างมีพันธะสามภายในโซ่ที่ย่านความถี่ $2,190\text{--}2,260\text{ cm}^{-1}$ ความเข้มต่ำ (ดังภาพที่ 2.24) แต่ถ้าพันธะสามมีระบบคอนจูเกตกับหมู่คาร์บอนิล จะทำให้ความถี่ของพันธะ $\text{C}\equiv\text{C}$ (แบบยึด) เข้มมากขึ้น ข้อสังเกตคือ ความถี่ของพันธะ $\text{C}\equiv\text{C}$ (แบบยึด) อาจไม่ปรากฏในแอลไคน์บางชนิดและใกล้เคียงกับย่านความถี่ของพันธะ $\text{C}\equiv\text{N}$ ของสารประกอบไนไตรล์ (nitrile compound)



ภาพที่ 2.23 อินฟราเรดสเปกตรัมของ 1-hexyne



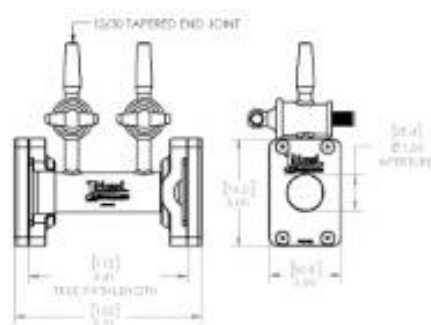
ภาพที่ 2.24 อินฟราเรดสเปกตรัมของ 2-hexyne

2.2.2 วิธีการเตรียมตัวอย่าง

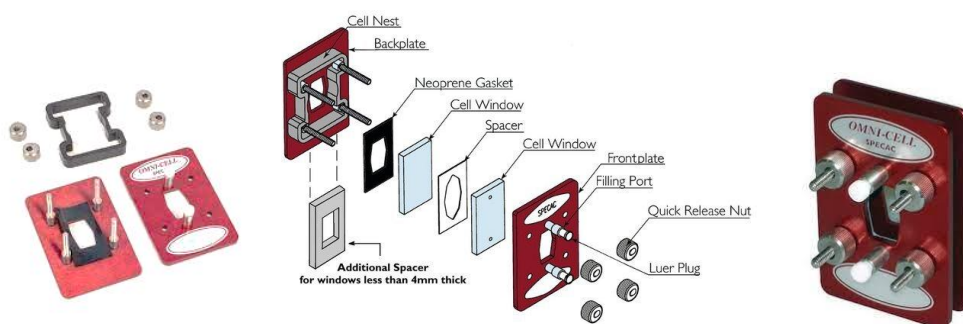
ตัวอย่างที่นำมาวิเคราะห์หมู่ฟังก์ชันด้วยเครื่องอินฟราเรดสเปกโทรมิเตอร์นั้น สถานะอาจมีได้ทั้งแก๊ส ของเหลวและของแข็ง โดยตัวอย่างแต่ละชนิดมีวิธีการเตรียมตัวอย่างแตกต่างกัน ดังนี้

1. ตัวอย่างสถานะแก๊ส จะบรรจุตัวอย่างตรงปลายก๊อกปิดเปิด (stopcock) ของเซลล์ตัวอย่างที่มีระบบสุญญากาศ ดังภาพที่ 2.25 ตัวอย่างจะดูดกลืนรังสีอินฟราเรดผ่านหน้าต่างโซเดียมคลอไรด์ (NaCl window)

2. ตัวอย่างสถานะของเหลว ลักษณะเซลล์ตัวอย่างดังภาพที่ 2.26 กรณีตัวอย่างเป็นของเหลวนั้นเตรียมโดยทำเป็นฟิล์มบาง ๆ บนจาน (disc) แล้วประกบด้วยจานอีกแผ่นหนึ่ง กรณีตัวอย่างเป็นสารละลายเตรียมโดยฉีดตัวอย่างตรงช่องฉีดของเซลล์ตัวอย่าง



ภาพที่ 2.25 เซลล์บรรจุตัวอย่างสถานะแก๊ส



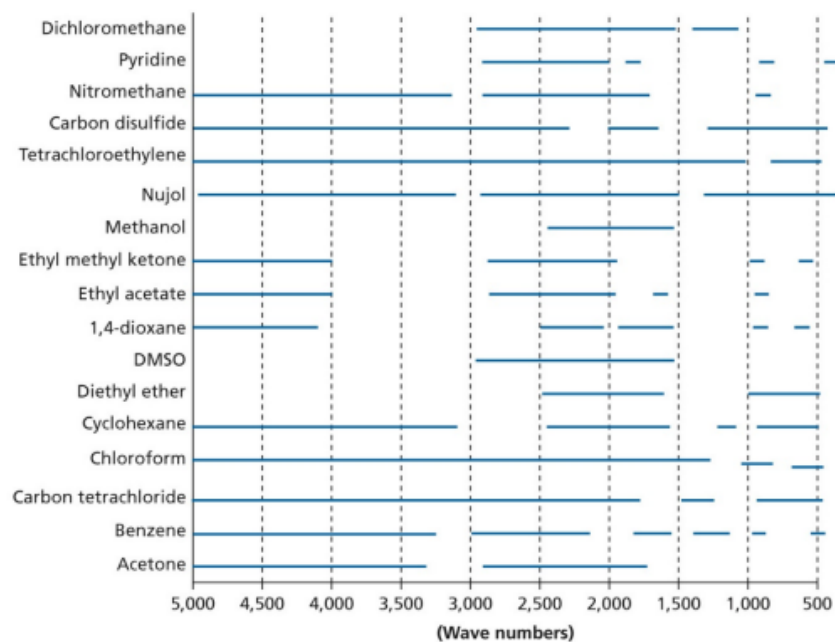
ภาพที่ 2.26 เซลล์บรรจุตัวอย่างสถานะของเหลว

จานหรือหน้าต่างสำหรับวิเคราะห์ตัวอย่างที่เป็นสารอินทรีย์ นิยมทำจากโซเดียมคลอไรด์ แต่ถ้าตัวอย่างก่าจืดน้ำออกไม่หมด จะทำให้จานโซเดียมคลอไรด์ละลายได้ นอกจากนี้ ยังมีจานชนิดอื่นดังตารางที่ 2.6 การเลือกใช้ขึ้นอยู่กับช่วงสเปกตรัมการดูดกลืนของตัวอย่าง รวมทั้งสมบัติทางเคมีและการละลายของวัสดุที่ใช้ผลิตจาน กรณีต้องละลายตัวอย่างก่อนวิเคราะห์ ควรพิจารณาการดูดกลืนรังสีอินฟราเรดของตัวทำละลายไม่ให้อยู่ในช่วงเดียวกับตัวอย่าง บางครั้งอาจหลีกเลี่ยงปัญหาดังกล่าวได้โดยใช้ตัวทำละลายดิวเทอเรต (deuterated solvent) ซึ่งความถี่ของการสั่นของพันธะ C-D จะน้อยกว่าความถี่ของการสั่นของพันธะ C-H

น้ำเป็นตัวทำละลายสามารถดูดซับรังสีอินฟราเรดได้ดีมาก ดังนั้นจึงไม่ค่อยใช้ในเทคนิคอินฟราเรด ภาพที่ 2.27 แผนภูมิของตัวทำละลายที่ใช้ในเทคนิค IR

ตารางที่ 2.6 สมบัติของจานหรือหน้าต่างสำหรับวิเคราะห์ตัวอย่างที่เป็นสารอินทรีย์

วัสดุ	ย่านความถี่ที่ใช้วิเคราะห์ (cm ⁻¹)	การละลาย	หมายเหตุ
โซเดียมคลอไรด์	625-40,000	ละลายในน้ำ	เช็ดออกง่าย ดูดความชื้นและเปราะแตกง่าย
แซปไฟร์ (sapphire)	1,780-20,000	-	-
ผลึกเพชร (diamond crystal)	200-1,800 และ 2,500-40,000	-	ราคาแพง มีความแข็งแรง การใช้งานไม่ต้องเตรียมเป็นแผ่น
แคลเซียมฟลูออไรด์ (CaF ₂)	1,110-70,000	ละลายในกรด	ควรหลีกเลี่ยงเกลือแอมโมเนียม
ซิลเวอร์คลอไรด์	400-25,000	-	มีความนิ่ม และไวต่อแสง
โพแทสเซียมโบรไมด์	400-40,000	ละลายในน้ำและเอทานอล	เช็ดออกง่าย ดูดความชื้นและเปราะแตกง่าย



ภาพที่ 2.27 แผนภูมิของตัวทำละลายที่ใช้ในเทคนิค IR

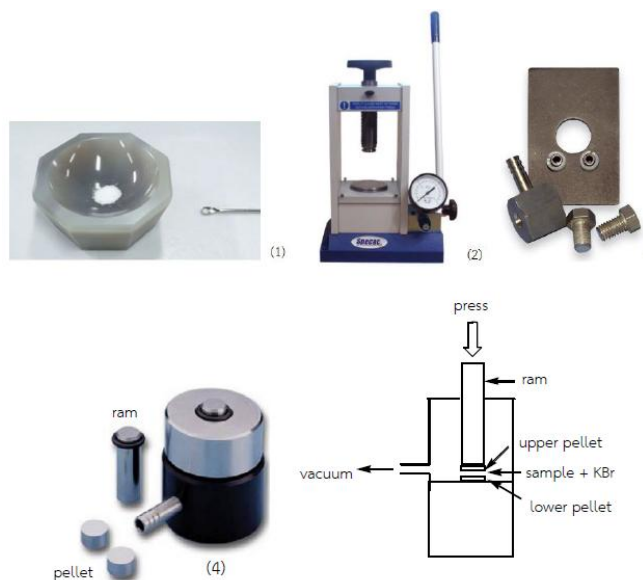
การใช้เซลล์ตัวอย่างที่มีลักษณะเป็นแผ่น ได้แก่ โซเดียมคลอไรด์และโพแทสเซียมโบรไมด์ มีข้อควรระวัง ดังนี้

1. หลีกเลี่ยงการสัมผัสกับตัวทำละลายที่สามารถละลายเซลล์ตัวอย่างได้
2. ควรเก็บไว้ใน desiccator ที่มีซิลิกาเจลดูดความชื้น

3. ควรใช้ถุงมือขณะจับเซลล์ตัวอย่าง
4. ควรใช้ผ้าเช็ดทำความสะอาดเฉพาะ เพื่อป้องกันรอยขีดข่วน
5. ต้องกำจัดน้ำในตัวอย่างออกให้หมด เพราะเซลล์ตัวอย่างจะละลายได้

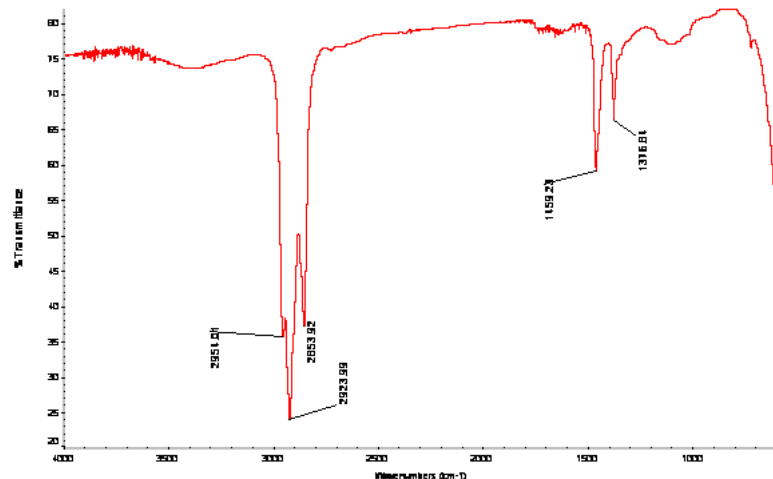
ตัวอย่างสถานะของแข็ง ของแข็งที่เตรียมเป็นสารละลายได้ จะวิเคราะห์โดยฉีดเข้าช่องของเซลล์ตัวอย่าง แต่ถ้าของแข็งไม่สามารถละลายตัวทำละลายได้ มีวิธีการเตรียมดังนี้

1. วิธีจานโพแทสเซียมโบรไมด์ (KBr disc) โดยบดตัวอย่างกับโพแทสเซียมโบรไมด์ (KBr) ที่อบไล่ความชื้นแล้ว ผสมให้เข้ากันในโถงที่มีพื้นผิวมันเพื่อป้องกันไม่ให้ตัวอย่างติด จากนั้นใส่ของผสมในชุดเตรียมจานโพแทสเซียมโบรไมด์ ดังภาพที่ 2.28 โดยเกลี่ยของผสมให้สม่ำเสมอ แล้วนำไปวางบนแท่นเครื่องอัดไฮดรอลิก (hydraulic press) จะได้จานโพแทสเซียมโบรไมด์มีลักษณะเป็นทรงกลมและโปร่งใส โดยเฉพาะบริเวณตรงกลางซึ่งรังสีอินฟราเรดจะส่องผ่าน เมื่อต้องการวิเคราะห์จะยึดจานโพแทสเซียมโบรไมด์ด้วยเซลล์เฉพาะดังภาพที่ 2.28



ภาพที่ 2.28 ชุดอุปกรณ์เตรียมจานโพแทสเซียมโบรไมด์

2. วิธีนุจอลมูลล์ (Nujol mull) นุจอลหรือน้ำมันพาราฟิน (paraffin oil) มีสูตรทั่วไป คือ $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$ โดยที่ $n=18-20$ วิธีนี้เตรียมโดยบดตัวอย่างในโถงจนกระทั่งของผสมมีลักษณะหนืดข้นรวมเป็นเนื้อเดียวกัน จากนั้นทำเป็นฟิล์มบาง ๆ ลงบนจานสำหรับวิเคราะห์ตัวอย่าง โดยนุจอลจะดูดกลืนรังสีเฉพาะความถี่ของการสั่นของพันธะ C-H เท่านั้น ลักษณะสเปกตรัมดังภาพที่ 2.29 เนื่องจากสารอินทรีย์จะประกอบด้วยพันธะ C-H พิกการดูดกลืนของนุจอลจึงไม่มีผลต่อการวิเคราะห์หมู่ฟังก์ชันของตัวอย่าง



ภาพที่ 2.29 อินฟราเรดสเปกตรัมของนุจอล

สำหรับเครื่อง FT-IR รุ่นใหม่ถูกพัฒนาให้สามารถวิเคราะห์ตัวอย่างได้โดยตรง ผ่านอุปกรณ์ ได้แก่ ผลึกเพชร ซึ่งเหมาะกับของแข็งทั่วไปและของแข็งที่มีผิวไม่เรียบ และต้องทนต่อแรงกดได้ และผลึกเจอร์มานีียม (germanium crystal) เหมาะกับตัวอย่างที่ค่อนข้างนิ่ม เช่น ฟิล์มและยาง เป็นต้น ข้อดีของการวิเคราะห์ตัวอย่างโดยตรง คือ ช่วยทำความสะอาดง่ายด้วยแอลกอฮอล์และกระดาษชำระ

2.2.3 การประยุกต์ใช้เทคนิค FT-IR ในด้านอาหารและเครื่องสำอาง

เทคนิค Fourier transform infrared spectroscopy (FT-IR) เป็นเทคนิควิเคราะห์ที่ใช้ตรวจสอบองค์ประกอบทางเคมีของตัวอย่างโดยการวัดการดูดกลืนรังสีอินฟราเรด เทคนิคนี้มีข้อดีหลายประการ เช่น ไม่ต้องเตรียมตัวอย่างซับซ้อน รวดเร็ว และสามารถใช้ได้ทั้งในของแข็ง ของเหลว และแก๊ส ในปัจจุบัน FT-IR ถูกนำมาใช้ในการตรวจสอบคุณภาพและความปลอดภัยของผลิตภัณฑ์อาหารและเครื่องสำอางอย่างแพร่หลาย

1) การประยุกต์ใช้ FT-IR ในอุตสาหกรรมอาหาร ตัวอย่างงานวิจัย

1.1) การตรวจสอบองค์ประกอบทางเคมีของอาหาร FT-IR สามารถใช้วิเคราะห์ปริมาณไขมัน โปรตีน และคาร์โบไฮเดรตในอาหาร เช่น การตรวจสอบองค์ประกอบของนมและผลิตภัณฑ์นม (Baldassarre et al., 2016)

1.2) การตรวจจับการปนเปื้อนและของปลอมในอาหาร เทคนิคนี้สามารถใช้ตรวจจับการปนเปื้อนของสารต้องห้าม เช่น เมลามีนในนม (Zhang et al., 2018) และการปลอมปนของน้ำมันพืช (Guillén & Cabo, 2002)

1.3) การตรวจสอบความสดและอายุการเก็บรักษา FT-IR ถูกใช้ในการตรวจสอบการเสื่อมสภาพของไขมันและน้ำมันในผลิตภัณฑ์อาหาร เช่น น้ำมันมะกอกและน้ำมันปลา (Reid et al., 2006)

2) การประยุกต์ใช้ FT-IR ในอุตสาหกรรมเครื่องสำอาง ตัวอย่างงานวิจัย

2.1) การตรวจสอบส่วนประกอบของผลิตภัณฑ์เครื่องสำอาง สามารถใช้ FT-IR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบของสารออกฤทธิ์ เช่น กรดไฮยาลูโรนิกในผลิตภัณฑ์บำรุงผิว (Silva et al., 2019)

2.2) การตรวจสอบความเข้ากันได้ของสารผสม เทคนิคนี้สามารถใช้ในการศึกษาการเข้ากันได้ของสารออกฤทธิ์และสารช่วยในสูตรเครื่องสำอาง เช่น การศึกษาความเข้ากันได้ของสารลดแรงตึงผิว (อิมัลซิไฟเออร์) ในครีม (Schneider et al., 2017)

2.3) การตรวจสอบความเสถียรของผลิตภัณฑ์ FT-IR สามารถช่วยตรวจสอบการเปลี่ยนแปลงทางเคมีที่อาจเกิดขึ้นในผลิตภัณฑ์เครื่องสำอางระหว่างการเก็บรักษา เช่น การเกิดออกซิเดชันของน้ำมันหอมระเหย (Noureddini et al., 2018)

ยกตัวอย่างงานวิจัย Silva et al. (2019) เรื่อง characterization of cosmetic formulations using FT-IR งานวิจัยดังกล่าวมุ่งเน้นไปที่การใช้เทคนิค FT-IR spectroscopy เพื่อวิเคราะห์องค์ประกอบและสมบัติของสูตรเครื่องสำอาง โดยมีสาระสำคัญดังนี้

1. FT-IR ช่วยตรวจสอบส่วนประกอบของเครื่องสำอาง
 - นักวิจัยใช้ FT-IR เพื่อระบุชนิดของสารออกฤทธิ์และสารเติมแต่งที่อยู่ในสูตรเครื่องสำอาง เช่น ครีม โลชั่น และเซรัม
 - ตัวอย่างที่ใช้ทดสอบ ได้แก่ กรดไฮยาลูโรนิก (hyaluronic acid) และ สารให้ความชุ่มชื้น ที่นิยมใช้ในผลิตภัณฑ์บำรุงผิว
2. FT-IR ตรวจสอบความเข้ากันได้ของสารในสูตร
 - เทคนิคนี้สามารถตรวจจับการเปลี่ยนแปลงทางเคมีของสารต่าง ๆ ที่ถูกผสมกันในเครื่องสำอาง
 - ถ้าสารบางตัวไม่เข้ากัน จะเกิดการเปลี่ยนแปลงของสเปกตรัม ซึ่งช่วยให้สามารถปรับปรุงสูตรให้เสถียรขึ้น
3. FT-IR ใช้วิเคราะห์ความเสถียรของผลิตภัณฑ์
 - งานวิจัยใช้ FT-IR เพื่อติดตามว่าสูตรเครื่องสำอางมีการเปลี่ยนแปลงเมื่อเก็บรักษาเป็นเวลานานหรือไม่
 - ตัวอย่างเช่น ถ้ามีการเสื่อมสภาพของน้ำมันหรือสารออกฤทธิ์ จะเห็นการเปลี่ยนแปลงของค่าพีคในสเปกตรัมอินฟราเรด

สรุปได้ว่า FT-IR เป็นเครื่องมือที่มีประโยชน์มากในการตรวจสอบสูตรเครื่องสำอาง สามารถใช้ระบุสารออกฤทธิ์ ตรวจสอบว่าสารแต่ละตัวเข้ากันได้หรือไม่ และช่วยวิเคราะห์ว่าเครื่องสำอางมีความเสถียรหรือไม่เมื่อเก็บไว้เป็นระยะเวลานาน งานวิจัยนี้แสดงให้เห็นว่า FT-IR เป็นเครื่องมือสำคัญที่ช่วยให้การพัฒนาผลิตภัณฑ์เครื่องสำอางมีคุณภาพและมีประสิทธิภาพมากขึ้น

2.2.4 ปฏิบัติการวัดสารตัวอย่างด้วยเทคนิค FT-IR

- 1) ปฏิบัติการเตรียมตัวอย่างสำหรับการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค FT-IR
- 2) ปฏิบัติการวิเคราะห์หมู่ฟังก์ชันสารอินทรีย์จากอินฟราเรดสเปกตรัม
- 3) ปฏิบัติการวิเคราะห์สารตัวอย่างด้วยเครื่อง FT-IR
(คู่มือปฏิบัติการ)

สรุปท้ายบทเรียน

การแปลผลอินฟราเรดสเปกตรัม (FT-IR) เป็นกระบวนการวิเคราะห์การดูดกลืนรังสีอินฟราเรดของโมเลกุล โดยสเปกตรัมที่ได้จะแสดง พีกการดูดกลืน (absorption peaks) ซึ่งเกิดจากการสั่นของพันธะเคมีในย่านความยาวคลื่น $4,000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$ หมู่ฟังก์ชัน (functional group region, $4,000\text{--}1,500\text{ cm}^{-1}$) ใช้ระบุหมู่ฟังก์ชันของสาร เช่น หมู่ไฮดรอกซิล (O-H) $\sim 3,400\text{ cm}^{-1}$ หมู่คาร์บอนิล (C=O) $\sim 1,700\text{ cm}^{-1}$ หมู่เอมีน (N-H) $\sim 3,200\text{--}3,400\text{ cm}^{-1}$ และ fingerprint region ($1,500\text{--}400\text{ cm}^{-1}$) เป็นบริเวณที่ให้ลักษณะเฉพาะของโมเลกุล ซึ่งสามารถใช้เปรียบเทียบกับฐานข้อมูลเพื่อระบุสาร การแปลผลสามารถทำได้โดยการเปรียบเทียบตำแหน่งและความเข้มของพีกกับฐานข้อมูลมาตรฐานหรือการใช้ซอฟต์แวร์วิเคราะห์ ทำให้ FT-IR เป็นเทคนิคสำคัญในการตรวจสอบองค์ประกอบทางเคมีและคุณภาพของสารอย่างรวดเร็วและแม่นยำ

การเตรียมตัวอย่างสำหรับ FT-IR ขึ้นอยู่กับสถานะของตัวอย่าง ตัวอย่างของแข็ง มีวิธีการเตรียมที่นิยม เช่น KBr pellet method คือผสมตัวอย่างกับ KBr บดให้ละเอียด แล้วอัดเป็นแผ่นบางก่อนนำไปวิเคราะห์ หรือ mull method เป็นการผสมตัวอย่างกับน้ำมันแร่ เช่น nujol แล้วหยดบนแผ่นเกลือ NaCl หรือ KBr ตัวอย่างของเหลวทำได้โดยหยดตัวอย่างลงบนแผ่นเกลือ NaCl หรือ KBr แล้วนำไปวิเคราะห์ และตัวอย่างที่เป็นแก๊ส จะบรรจุตัวอย่างแก๊สลงในเซลล์แก๊สที่มีหน้าต่างโปร่งแสงต่ออินฟราเรด เช่น KBr หรือ CaF_2

วิธีการสอนและกิจกรรม

1. ทำกิจกรรมกลุ่ม
2. ใบกิจกรรม

สื่อการสอนและอุปกรณ์การสอน

1. เอกสาร power point
2. เอกสารประกอบการสอน
3. <https://kpu.pressbooks.pub/organicchemistry/chapter/6-2-infrared-ir-spectroscopy>
4. <https://agora.cs.wcu.edu/~huffman/lectures/FT-IR.html>
5. https://youtu.be/WkaAvJ-OPDA?si=oQWuoUv53EW0_J3S

งานที่มอบหมาย

1. ทำกิจกรรมกลุ่ม
2. ใบกิจกรรม

การวัดผล

1. ทำกิจกรรมกลุ่ม
2. ใบกิจกรรม

แบบฝึกหัด

1. ทำกิจกรรม
2. ใบกิจกรรม

บรรณานุกรม

1. แม้น อมรสิทธิ์, และอมร เพชรสม. (2550). *หลักการและเทคนิคการวิเคราะห์เชิงเครื่องมือ*. สำนักพิมพ์ชวนชม.
2. เย็นหทัย เน้นหนา. (2549). *สเปกโทรสโกปีสำหรับเคมีอินทรีย์*. สำนักพิมพ์แห่งจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย.
3. นิพนธ์ ตั้งคณานุรักษ์ และคณิดา ตั้งคณานุรักษ์. (2547). *สเปกโทรสโกปีด้านการวิเคราะห์*. สำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
4. Averill, B. A. (2012). *Principles of General Chemistry*.
<https://2012books.lardbucket.org/books/principles-of-general-chemistry-v1.0m/index.html>
5. Christian, G. D., Dasgupta, P.K., & Schug, K.A. (2014). *Analytical Chemistry* (7th ed.). John Wiley & Sons.
6. Harris, D. C. (2010). *Quantitative Chemical Analysis* (8th ed.). W. H. Freeman and Company.
7. Harvey, D. (2019). *Analytical Chemistry 2.1*. <https://chem.libretexts.org/>
8. Pavia, D. L., Lampman, G. M., Kriz, G. S., & Vyvyan, J. R. (2009). *Introduction to Spectroscopy* (4th ed.). Brooks/Cole Publishing
9. Robinson, J. W., Frame, E. M. S, & Frame G. M. (2021). *Instrumental Analytical Chemistry*. CRC Press