

# Identifikacija polimernih ambalažnih materijala FTIR spektroskopijom

---

**Perešin, Anita**

**Undergraduate thesis / Završni rad**

**2015**

*Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj:* **University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology / Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije**

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:149:701614>

*Rights / Prava:* [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

*Download date / Datum preuzimanja:* **2024-10-20**



*Repository / Repozitorij:*

[Repository of Faculty of Chemical Engineering and Technology University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE  
SVEUČILIŠNI PREDDIPLOMSKI STUDIJ

Anita Perešin

IDENTIFIKACIJA POLIMERNIH AMBALAŽNIH  
MATERIJALA  
FTIR SPEKTROSKOPIJOM

ZAVRŠNI RAD

Voditelj rada: Doc.dr.sc. Domagoj Vrsaljko

Članovi ispitnog povjerenstva: Prof. dr. sc. Vesna Volovšek  
Dr.sc. Zvonimir Katančić

Zagreb, 11.rujan 2015

*Završni rad je izrađen na Zavodu za termodinamiku, strojarstvo i energetiku Fakulteta  
kemijskog inženjerstva i tehnologije*

## SAŽETAK

Infracrvena spektroskopija proučava interakciju elektromagnetskog zračenja IR dijela spektra i materije. IR spektroskopija omogućava ispitivanje uzoraka na jednostavan, brz i nedestruktivan način. Može se primjeniti na plinovite, tekuće i krute uzorke.

Ovaj rad daje pregled spektara i identifikacije raznovrsnih ambalažnih materijala korištenih u svakodnevnom životu. Identifikacija se provodi na temelju položaja i intenziteta apsorpcijskih vrpca koje su specifične za određenu strukturnu skupinu. U ovome radu snimljeno je 44 različitih ambalažnih materijala, te su snimljenim vrpcama pripisane karakteristične skupine.

Identifikacija strukturnih skupina u uzorcima ambalažnih materijala analiziranih u ovome radu pokazuje da je većina ambalažnih materijala izrađena od polietilena, polistirena i poli(vinil-klorida).

Ključne riječi: IR spektroskopija, polimeri, ambalažni materijali.

# **Identification of polymeric packaging materials by FTIR spectroscopy**

Infrared spectroscopy studies the interaction between electromagnetic radiation of IR part of spectrum and matter. IR spectroscopy allows sample testing in a simple, fast and non-destructive manner. It can be applied on gaseous, liquid and solid samples.

This paper provides an overview of spectra and identification of various packaging materials used in everyday life. The identification is carried out based on the position and intensity of the absorption bands that are specific to a particular structural unit. In this paper 44 samples of various packaging materials were recorded. Characteristic groups were attributed to each recorded band.

Identification of structural groups of packaging materials studied in this paper showed that most packaging materials are made of polyethylene, polystyrene and poly (vinylchloride).

Key words: IR spectroscopy, polymers, packaging materials.

## Sadržaj

|  |    |
|--|----|
| 1. Uvod.....   | 1  |
| 2. Opći dio.....   | 2  |
| 2.1. Otkriće infracrvenog zračenja .....                     | 2  |
| 2.2. Elektromagnetski spektar .....                          | 3  |
| 2.3. Interakcija elektromagnetskog zračenja i materije ..... | 4  |
| 2.4. Radni princip FTIR spektrometra.....                    | 6  |
| 2.5. Analiza spektra .....                                   | 8  |
| 2.6. Transmisijsko mjerenje.....                             | 9  |
| 2.7. ATR spektrometrija .....                                | 13 |
| 2.8. Difuzna refleksija .....                                | 16 |
| 3. Eksperimentalni dio .....                                 | 17 |
| 4. Rezultati i rasprava .....                                | 19 |
| 5. Zaključak.....  | 81 |
| 6. Literatura.....   | 83 |

## 1. Uvod

Infracrvena spektroskopija (IR spektroskopija) jedna je od najvažnijih metoda u identifikaciji uzoraka, a jedno od najvažnijih značenja ove metode je visoka informacijska vrijednost spektra, te mogućnost proučavanja najraznovrsnijih uzoraka. Identifikacija strukturnih skupina određenog uzorka provodi se na temelju položaja i intenziteta apsorpcijskih vrpca. Na taj način možemo izravno dokazati postojanje određene strukturne skupine.

Infracrveni spektrometri dostupni su na tržištu od 1940ih, a najveći napredak svakako je bio uvođenje Fourierove transformacije. Time se uštedjelo vrijeme potrebno za dobivanje rezultata.

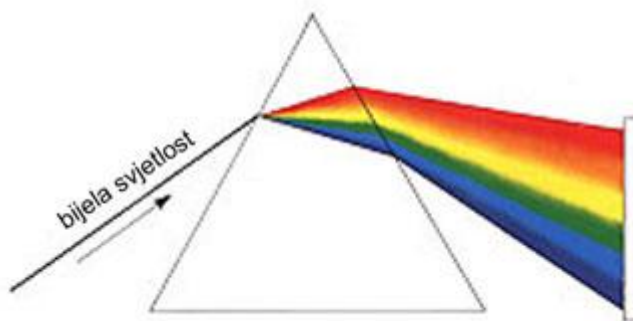
Najstarija metoda infracrvene spektroskopije je transmisijska metoda, a uz nju u ovom radu korištena je i ATR metoda, eng. *attenuated total reflectance (ATR)*.

Polimerni ambalažni materijali imaju vrlo raširenu upotrebu. Koriste se npr. za pakiranje hrane, lijekova, kozmetike i igračaka. Mogu sadržavati različite dodatke kako bi im se poboljšala svojstva [1].

## 2. Opći dio

### 2.1. Otkriće infracrvenog zračenja

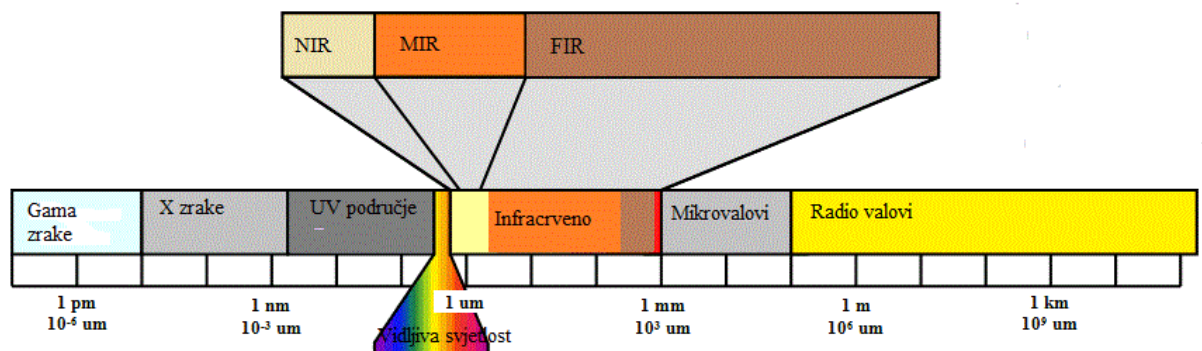
Infracrveno zračenje otkrio je 1800. godine astronom Friedrich Wilhelm Herschel. Analizirao je sunčeve zrake i napravio je spektar tako da je usmjerio zraku svjetlosti kroz staklenu prizmu (slika 1.). Zraka svjetlosti podijelila se na različite boje. Herschel je tada izmjerio sposobnost zagrijavanja (eng. *heating ability*) svake boje.



Slika 1. Spektar vidljive svjetlosti.

Kada je mjerio sposobnost zagrijavanja svake boje, Herschel je primjetio neku vrstu nevidljive radijacije iznad crvenog dijela spektra.

Zaključio je da iznad crvenog područja spektra postoji drugačija vrsta svjetla, nevidljiva ljudskom oku, tj. infracrvena svjetlost. Na temelju eksperimenata zaključio je i da određeni medij (npr. voda) može apsorbirati zračenje koje dolazi iz tog spektra. Ovo su bili početci spektroskopije [2].



Slika 2. Elektromagnetski spektar.



Spektroskopija je povijesno gledano nastala proučavanjem vidljive svjetlosti.

Infracrveno zračenje možemo podijeliti na (slika 2.):

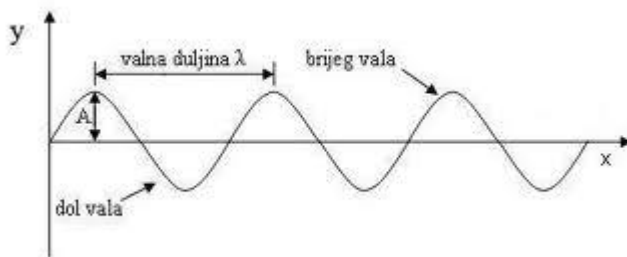
NIR (eng. *near infrared spectroscopy*) je spektroskopska metoda koja koristi dio elektromagnetskog spektra od 780 nm do 3000 nm.

MIR (eng. *mid infrared spectroscopy*) je spektroskopska metoda koja koristi dio elektromagnetskog spektra od 3000 nm do 50000 nm.

FIR (eng. *far infrared spectroscopy*) je spektroskopska metoda koja koristi dio elektromagnetskog spektra od 50000 nm pa sve do područja mikrovalova (1 mm) [3].

## 2.2. Elektromagnetski spektar

Vidljiva svjetlost i infracrvena svjetlost su dijelovi elektromagnetskog spektra različitih valnih duljina. Vidljiva svjetlost nalazi se u području od 390 nm do 780 nm, dok se infracrvena svjetlost nalazi u području između 780 nm i oko 1 mm.



Slika 3. Elektromagnetsko zračenje.

Valna duljina (slika 3.) ( $\lambda$ ) je udaljenost između dva vala na sinusoidalnoj krivulji.

Frekvencija ( $\nu$ ) je broj titraja u jedinici vremena.

Elektromagnetski valovi putuju brzinom svjetlosti  $c = 299\,792\,458$  m/s.

To se može i matematički prikazati ovako:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \quad (\text{Hz}) \quad (1)$$

Frekvencija zračenja elektromagnetskih valova proporcionalna je energiji elektromagnetskih valova.

To možemo opisati formulom:

$$E = h \cdot \nu \quad (\text{J}) \quad (2)$$

$h$  – Planckova konstanta, iznosi  $6,626 \cdot 10^{-34}$  Js

U IR spektrometriji važna je i treća veličina, a to je valni broj  $\tilde{\nu}$ , ( $\text{cm}^{-1}$ ) [4].

Valni broj je recipročna vrijednost valne duljine:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} \text{ cm}^{-1}, \quad (3)$$

a s frekvencijom stoji u sljedećem odnosu:

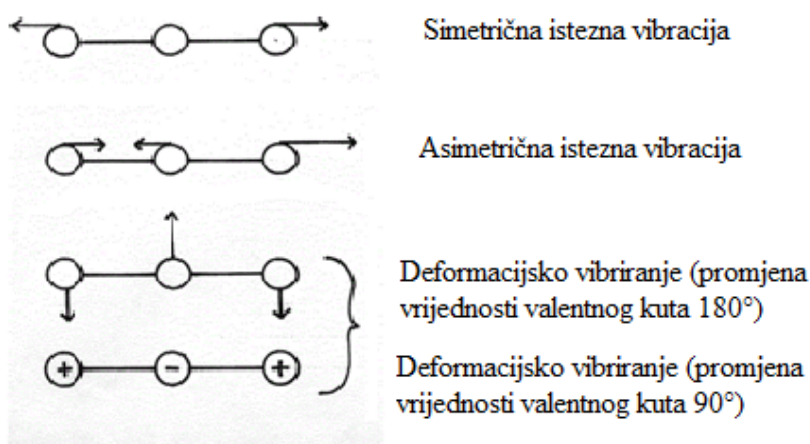
$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c} \text{ cm}^{-1} \quad (4)$$

### 2.3. Interakcija elektromagnetskog zračenja i materije

Elektromagnetska svjetlost koja se propušta kroz uzorak djeluje na molekule u tom uzorku. Molekule sadrže dva ili više atoma u svom sastavu, koji su međusobno povezani različitim vezama te imaju definiran prostorni položaj, odnosno imaju određenu kemijsku strukturu. Ako na atome pustimo elektromagnetsko zračenje, oni tim putem mogu primiti energiju te počnu vibrirati oko svojih ravnotežnih položaja. Vibriranje atoma u molekuli dogodit će se samo u slučaju kada se frekvencija zračenja podudara s frekvencijom pri kojoj vibriraju molekule. Ako dovedemo vrlo malu količinu energije molekula će moći samo rotirati.

Kada na molekule pustimo elektromagnetsko zračenje određene frekvencije, zračenje će biti apsorbirano ako su atomi u molekuli promjenjivog dipola, tj. ako se molekula sastoji iz različitih vrsta atoma.

Dvoatomne molekule imaju jedno vibracijsko gibanje. One imaju dva rotacijska stupnja i nisu vezane za gibanje atoma ili centara mase. Troatomne molekule imaju četiri vibracijska gibanja. U prvom nema gibanja atoma ili centra mase i naziva se simetrična istezna vibracija i ona je infracrveno neaktivna za razliku od ostale tri. U drugom načinu gibanja, dva vanjska atoma se gibaju u istom smjeru asimetrično prema centralnom atomu. Sam centralni atom giba se tako da centar mase miruje, odnosno giba se u suprotnom smjeru od dva vanjska atoma, kao što možemo vidjeti na slici 4. Ovakvo gibanje naziva se asimetrična istezna vibracija. U trećem načinu vibriranja vanjski atomi se gibaju okomito na smijer veza, a centralni atom u suprotnome smijeru. Ovakvo vibriranje naziva se deformacijsko vibriranje jer dolazi do promjene vrijednosti valentnog kuta od  $180^\circ$ . Posljednja deformacija se razlikuje od treće samo u vrijednosti valentnog kuta koja iznosi u ovom slučaju  $90^\circ$ . Jedna od takvih molekula je  $\text{CO}_2$ , ona je troatomna molekula s nesimetričnom raspodjelom mase [4].



Slika 4. Način vibriranja  $\text{CO}_2$  molekule.

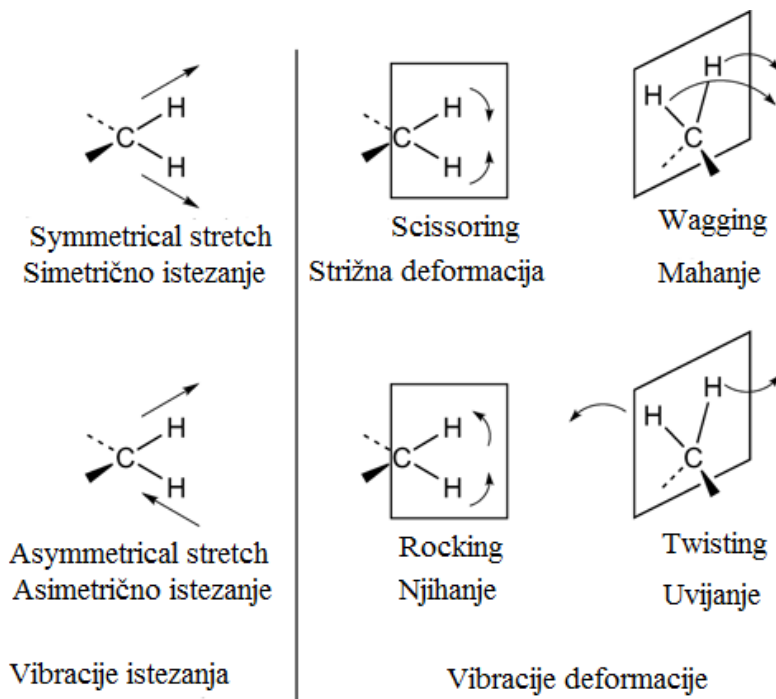
Valni broj pri kojem se događa apsorpcija ako na molekulu  $\text{CO}_2$  pustimo IR svjetlost za prvi slučaj je između  $1285\text{ cm}^{-1}$  i  $1388\text{ cm}^{-1}$ , za drugi slučaj to je pri  $2349\text{ cm}^{-1}$ , a za posljednja dva pri  $667\text{ cm}^{-1}$ . Svaka molekula apsorbira svjetlost na drugačijoj valnoj duljini i prema tome možemo odrediti o kojim se molekulama, skupinama spojeva radi, te u konačnici i o kojim materijalima.

S druge strane, za razliku od molekule  $\text{CO}_2$ , primjerice jednostavni karbonilni spojevi, koji također imaju vezu između atoma C i O, prepoznaju se po intenzivnoj apsorpciji između  $1800\text{ cm}^{-1}$  i  $1650\text{ cm}^{-1}$  [4].

Iz primjera vibracijskog gibanja troatomne molekule, molekulске vibracije zapravo možemo podijeliti na :

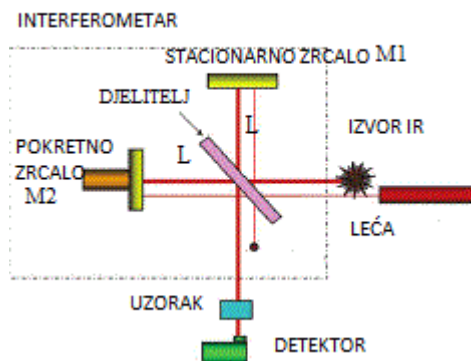
- a) vibracije istezanja i
- b) vibracije deformacije

Vibracije istezanja su vibracije duž kemijske veze, a mogu biti simetrične i asimetrične. Vibracije deformacije uzrokuju promjenu kuta između kemijskih veza u molekuli. Vibracijske deformacije su: njihanje, strižna deformacija, uvijanje i mahanje (slika 5.). Koja od vibracijskih deformacija će nastupiti ovisi o odnosu vanjskih atoma sa centralnim atomom molekule [5].



Slika 5. Prikaz vibracija istezanja i vibracija deformacija.

## 2.4. Radni princip FTIR spektrometra



Slika 6. Konstrukcija FTIR spektrometra.

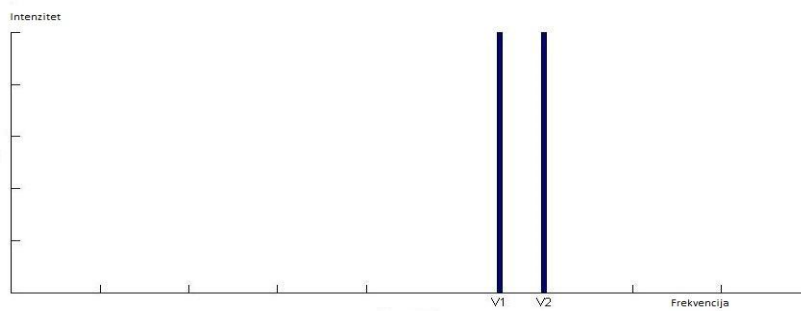
Glavni dijelovi spektrometra s Fourierovom transformacijom, FTIR spektrometra su: izvor zračenja, interferometar i detektor.

Izvor zračenja uglavnom je globar. Globar je termički izvor zračenja za IR spektrometre. Sastoji se od silicijeva karbida u obliku štapića ili spirale, te se zagrijava do oko 1500 K. Interferometar dijeli upadno infracrveno zračenje u dva snopa. Svaki od njih prolazi svoj optički put, zatim se sastaju i prolaze kroz uzorak. Detektori pretvaraju optičke signale u električne.

Na slici 6. vidi se konstrukcija FTIR spektrometra. Infracrveno zračenje iz termičkog izvora pada na djelitelj. On u idealnom slučaju pola upadnog svjetla propušta, a pola odbija. Odbijeni dio svjetla pada na stacionarno zrcalo M1 prešavši put  $L$ . Na stacionarnom zrcalu se ponovno odbija i vraća se na djelitelj prešavši ukupni put  $2L$ . Propušteni dio svjetla pada na pokretno zrcalo koje se kreće po optičkoj osi naprijed i natrag za korak  $x$ . I ovaj dio svjetlosti se vraća na djelitelj prešavši ukupni put  $2(L+x)$ .

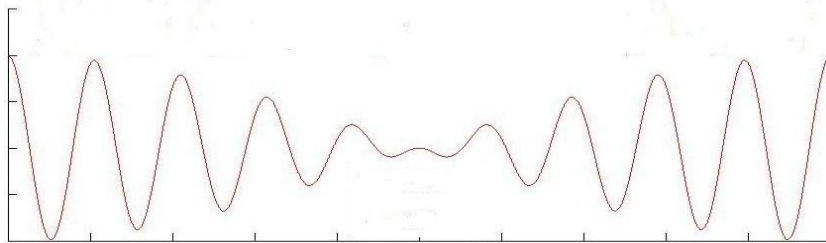
Ova dva dijela zračenja pokazuju razliku puteva od  $2x$ . Za određenu valnu duljinu  $\lambda$  na izlazu iz interferograma, postići će se konstruktivna interferencija ova dva snopa zračenja, ukoliko im je razlika puta  $2x$  cjelobrojni višekratnik te valne duljine. Svakom položaju  $x$  pomičnog zrcala, odgovara jedna valna duljina  $\lambda$ , odnosno jedan valni broj. Modulirana zraka izlazi iz interferograma, prolazi kroz uzorak i dolazi na detektor. Sve frekvencije infracrvenog izvora na detektor padaju istovremeno. To je velika prednost u odnosu na konvencionalne spektrometre gdje frekvencije infracrvenog izvora padaju jedna po jedna, a vrijeme dobivanja spektra se produljuje. Na detektoru se registrira signal, odnosno dobiva se interferogram [6].

Zamislamo da imamo izvor svjetla sa samo dvije frekvencije (slika 7.).



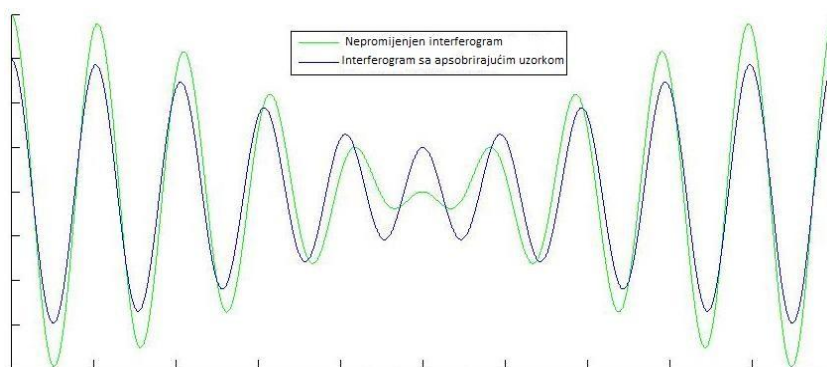
Slika 7. Spektar dikromatskog izvora svjetlosti.

Izvor svjetlosti podijelimo na dvije zrake. Jedna je zraka referentna (slika 8.) i služi za usporedbu, te prolazi kroz interferometar bez uzorka.



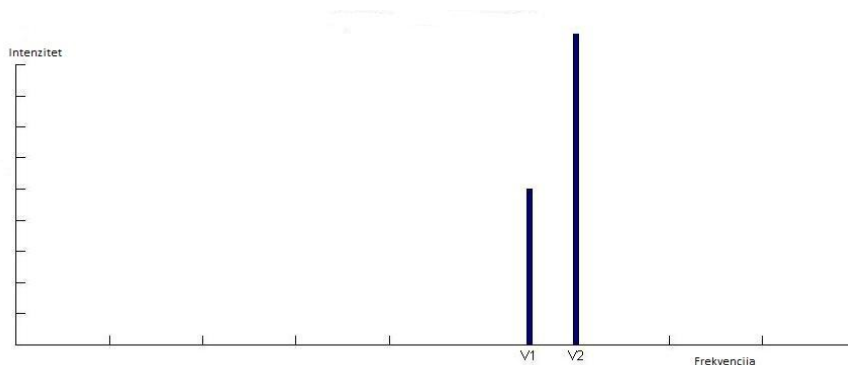
Slika 8. Interferogram referentne zrake.

Druga zraka je testna zraka (slika 9.) i prolazi kroz optički sustav interferometra i kroz uzorak koji promatramo.



Slika 9. Interferogram s uzorkom i referentni interferogram.

Pogledamo li spektar sada, slika 10. i usporedimo li ga sa spektrom na slici 7. zaključujemo da je uzorak apsorbirao svjetlost frekvencije  $\nu_1$  [6].



Slika 10. Spektar nakon apsorpcije uzorkom.

Rezultati dobiveni digitalnim interferogramom, koji su pretvoreni u spektar matematičkim oblicima nazivamo Fourierova transformacija.

## 2.5. Analiza spektra

Analizom infracrvenih spektara brojnih spojeva s uobičajenim skupinama, pronađeno je da te skupine apsorbiraju energiju u nekom uskom frekvencijskom području, neovisno od ostalog dijela molekule. Metilna skupina primjerice pokazuje više od dvije jake vrpce u području između  $3000\text{ cm}^{-1}$  i  $2800\text{ cm}^{-1}$ .

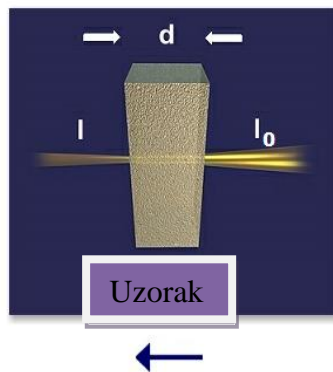
Infracrveni spektar možemo podijeliti na nekoliko područja s obzirom na to kakve se vrpce pojavljuju. Uzmemo li da je područje infracrvenog spektra između  $4000\text{ cm}^{-1}$  i  $400\text{ cm}^{-1}$ , prema tome, prvo područje pripada X-H istezanjima između  $4000\text{--}2500\text{ cm}^{-1}$ . Zatim slijedi područje istezanja trostrukih veza  $2500\text{--}2000\text{ cm}^{-1}$ , potom područje istezanja dvostrukih veza  $2000\text{--}1500\text{ cm}^{-1}$  te područje istezanja jednostrukih veza od  $1500\text{ cm}^{-1}$  do  $400\text{ cm}^{-1}$  [7].

Za prvo područje karakteristično je npr. C-H i O-H istezanje. C-H vrpca nalazi se pri oko  $3000\text{ cm}^{-1}$ , a vrpca O-H između  $3600$  i  $3700\text{ cm}^{-1}$ . Kao primjer trostruke veze možemo uzeti apsorpciju  $\text{C}\equiv\text{C}$  veze pri  $2000\text{ cm}^{-1}$ , dok npr.  $\text{C}=\text{C}$  zbog dvostruke veze apsorbira pri  $1600\text{ cm}^{-1}$ . Apsorpcija C-C veze kao što je i očekivano je pri manjem valnom broju, točnije pri  $1000\text{ cm}^{-1}$ .

Iako je moguća vrlo precizna identifikacija spojeva, kod složenije građenih molekula može doći do preklapanja apsorpcijskih područja različitih dijelova molekule. Tako se npr. preklapaju područja  $\text{C}=\text{O}$  i  $\text{C}=\text{C}$ . No i kada se to dogodi identifikacija je moguća na temelju različitog intenziteta i sl [7].

## 2.6. Transmisijsko mjerenje

Transmisijsko mjerenje je najstarija i najjednostavnija mjerna metoda. Temelji se na apsorpciji infracrvenog svjetla na određenim valnim duljinama tijekom prolaska kroz uzorak (slika 11.). Ovom tehnikom možemo analizirati krutine, plinove i tekućine.



Slika 11. Prolaz zrake kroz uzorak pri transmisijskom mjerenju.

Tekući uzorci stavljaju se u prikladne posude, kivete. Poznajemo tri tipa kiveta. Prvi i najjednostavniji tip su rastavljive kivete koje imaju dva kružna prozora između kojih je razdjelnica (razdjelni prsten) od aluminijske, olova ili teflona. Razdjelnica održava razmak između prozora kivete. Drugi tip su fiksne kivete, odnosno kivete s definiranom stalnom debljinom sloja. Kada se jednom sklope mogu se više puta primjenjivati. Sastavljene su kao i rastavljive kivete od dva prozora i razdjelnice, a razlika je u tome što na jednom od prozora imaju rupice za punjenje. Treći tip su kivete s promjenjivom debljinom sloja. One mogu zakretati vanjski dio čelije i tako mijenjati razmak između prozorskih površina, a samim time i debljinu sloja.

Važna stvar u izboru kiveta je i materijal od kojeg su izrađeni prozori. Najjeftiniji je natrijev klorid (NaCl) (slika 12.), no koriste se i brojni drugi (tablica 1.).

Najbitnije je da materijal od kojih je izrađena kiveta ne apsorbira propuštenu zraku, jer u tom slučaju ne dobijemo valjani spektar. Također, vrlo je bitno i da prozorski materijal ne reagira s uzorkom [8].

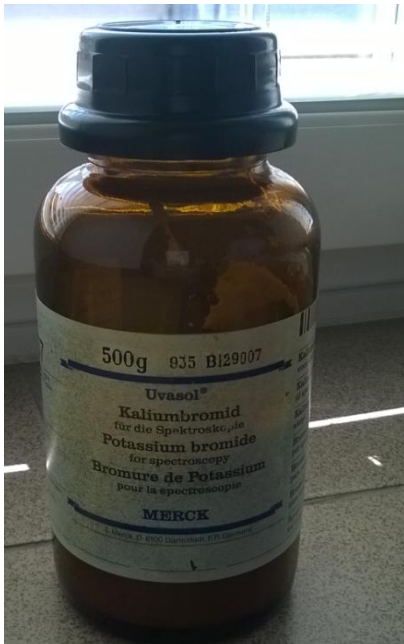


Slika 12. Kiveta od natrijeva klorida.

Tablica 1. Neki od optičkih materijala korištenih u transmisijskom mjerenju.

| MATERIJAL<br>PROZORA | KORISNO<br>PODRUČJE<br>( $\text{cm}^{-1}$ ) | INDEKS<br>REFRAKCIJE | SVOJSTVA  |
|----------------------|---|----------------------|---|
| NaCl                 | 40000-600                                   | 1,5                  | Topiv u vodi, slabo topiv u alkoholu, niske cijene, dobra otpornost na mehanički i toplinski šok, jednostavan za poliranje. |
| KBr                  | 43500-400                                   | 1,5                  | Topiv u vodi i alkoholu, slabo topivu u eteru, higroskopan, dobra otpornost na mehanički i toplinski udar.                  |
| CaF <sub>2</sub>     | 77000-900                                   | 1,4                  | Netopiv u vodi, odupire se kiselinama i bazama, ne magli se, koristan za visokotlačni rad.                                  |
| BaF <sub>2</sub>     | 66666-800                                   | 1,5                  | Netopiv u vodi, topiv u kiselinama i NH <sub>4</sub> Cl, ne magli se, osjetljiv na toplinske i mehaničke udarce.            |
| KCl                  | 33000-400                                   | 1,5                  | Slična svojstva kao za NaCl, ali manje topiv, higroskopan.  |
| CsBr                 | 42000-250                                   | 1,7                  | Topiv u vodi i kiselinama, higroskopan.   |





Slika 13. Kalijev bromid (KBr).

Glavne metode koje se koriste za ispitivanje krutih uzoraka su: alkalno halogeni diskovi-pastile, suspenzije u ulju, te filmovi.

Izrada pastila uključuje miješanje čvrstog uzorka sa suhim alkalnim halogenidom u prahu. Najčešće korišteni alkalni halogenid je kalijev bromid (KBr). Uzorak se samelje i izmješa u tarioniku s praškom KBr (slika 13., slika 14.), zatim se postavi u hidrauličku prešu. Ovako dobivena pastila ne smije biti predebela ili pretanka, pretanke pastile su krhke i teško je s njima raditi, a predebele pastile propuštaju premalo zračenja [8].



Slika 14. Aparatura za dobivanje pastila.

Suspenzija u ulju uključuje mljevenje uzorka i miješanje s jednom do dvije kapi parafinskog ulja. Za pripremanje suspenzije potrebne su dvije matirane staklene pločice. Na staklene pločice se stavi parafinsko ulje, u njega se doda tvar koja se istražuje, te se protrlja između pločica. Nastala suspenzija se prenosi na prozor rastavljive kivete, te se postavi u IR spektrometar.

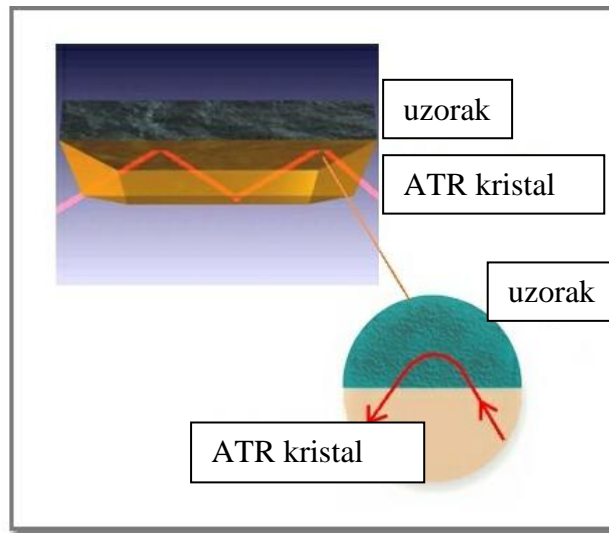
Filmovi se mogu napraviti ili razrijeđivanjem u otapalu ili lijevanjem iz taline. Uzorak se otopi u odgovarajućem otapalu. Otopina se izlije na staklenu ili metalnu ploču i pri visokoj temperaturi otapalo ispari tako da nam ostaje suhi film.

Plinski uzorci se stavljaju u plinske kivete. Zbog niskih gustoća plinova, debljina sloja je znatno veća nego u kivetama za tekućine. Cilindar kivete je od stakla ili mjedi s uobičajenim izborom prozora [8].

Iako je transmisijska metoda pogodna mjerna metoda za veliki broj različitih uzoraka, ipak dolazi do određenih problema ako je uzorak težak za mjerenje, npr. ako je predebeo. U tom slučaju mogu se primjeniti mjerne metode razvijene u novije vrijeme. To su npr. prigušena totalna refleksija, eng. *attenuated total reflectance* (ATR), poznata i pod nazivom interna refleksijska spektroskopija (IRS), te difuzna refleksija.

## 2.7. ATR spektrometrija

Prigušena totalna refleksija (ATR) je reflektivna metoda koja daje IR spektar površine tvari, te može dati valjane spektre uzoraka koji su predebeli ili koji prejako apsorbiraju zračenje. IR svjetlost je potpuno reflektirana kroz unutrašnjost refleksijskog elementa, do stražnje površine koja je u dodiru s uzorkom.



Slika 15. Prolaz zrake kroz kristal i odbijanje na granici faza.

Ako svjetlost dosegne do granice koja razdvaja dva medija, put svjetlosti se može opisati Snellovim zakonom (slika 15.).

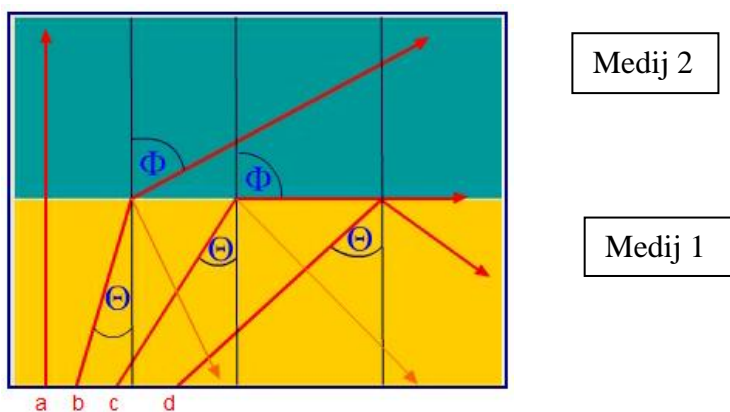
$$n_1 * \sin\theta = n_2 * \sin\phi \quad (12)$$

$\theta$  – upadni kut

$\phi$  – refrakcijski kut

$n_1$  – refrakcijski indeks medija 1 (kristal)

$n_2$  – refrakcijski indeks medija 2 (uzorak)



Slika 16. Refleksija i refrakcija zraka. Refrakcija je promjena smijera zrake (vala) zbog promjene brzine širenja. Refleksija je odbijanje valova na granici dvaju sredstava.

Lom svjetlosti se odvija na granici faza gdje se medij 1 dodiruje s medijem 2. Totalna refleksija (slika 16. pr.d) dogodit će se kada je upadni kut zračenja koje pada na graničnu površinu veći od kritičnog kuta (slika 16. pr.c) [9].

Dubinu prodiranja vala u uzorak možemo opisati Harrickovom aproksimacijom.

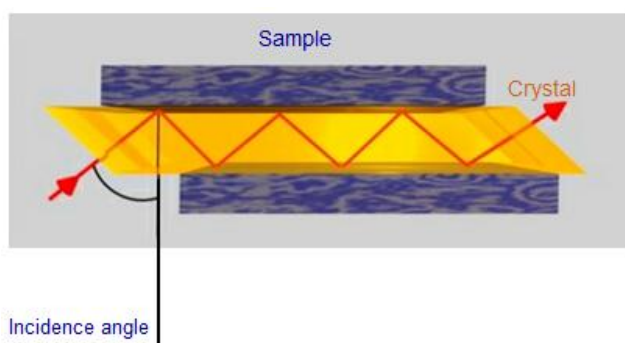
$$dp = \frac{\lambda_1}{2\pi(\sin^2\Theta - n_{sp}^2)^{1/2}} \quad (13)$$

$dp$  – dubina prodora

$\lambda_1$  – valna duljina zrake u optički gušćem mediju

$\Theta$  – upadni kut

$n_{sp}$  – omjer između refrakcijskog indeksa kristala i uzorka



Slika 17. Dubina prodiranja vala.

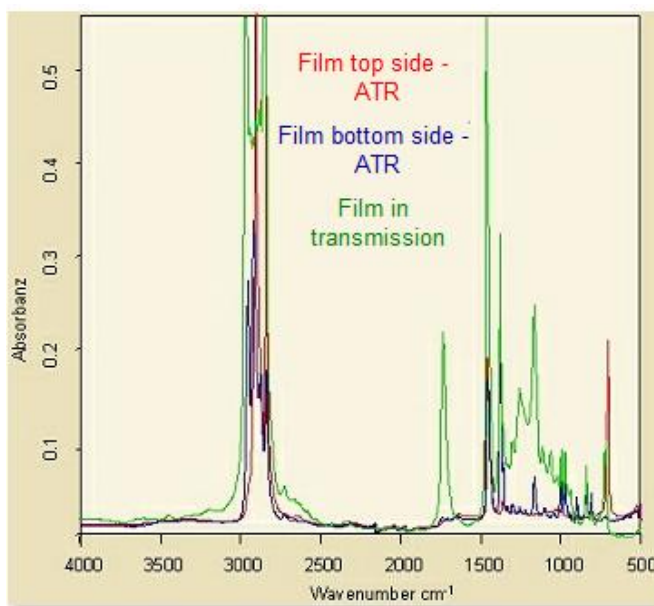
Dubina prodiranja (slika 17.) ovisi o nekoliko parametara: upadnom kutu, refrakcijskom indeksu i valnoj duljini svjetlosti. Ukoliko su poznati svi parametri, uvrste se u Harrickovu aproksimaciju (13) i dobije se dubina prodiranja.

Upadni kut: određuje se dizajnom ATR alata kojima je upadni kut uglavnom konstantan, no naravno postoje oni kojima kut varira. Za određivanje organskih tvari uglavnom se koristi kut upada od  $45^\circ$ , a ukoliko je kut upada npr.  $60^\circ$  spektri će biti slabijeg intenziteta zbog smanjene dubine prodora u površinu uzorka.

Refrakcijski indeks ATR kristala: što je veći indeks refrakcije, manja je dubina prodiranja u uzorak.

Valna duljina svjetla: što je duža valna duljina svjetla (što je manji valni broj), veća je dubina prodiranja u uzorak [9].

Možemo usporediti transmisijsko i ATR mjerenje na troslojnom filmu (slika 18).



Slika 18. ATR spektar troslojnog filma

Mogućnost prodiranja zrake u površinu, može biti velika prednost (npr. u kemiji). Premazi na tabletama i tanki polimerni filmovi samo su neki slučajevi u kojima ATR spektroskopija daje informacije koje teško možemo dobiti drugim metodama.

Kod ATR mjerenja, bitan je izbor pogodnog kristala. U obzir moramo uzeti tvrdoću uzorka, željenu dubinu prodiranja i opseg spektra. Broj refleksija koje dobijemo, ovisit će upravo o tipu kristala, dimenzijama, te upadnom kutu infracrvenih zraka.

Osim odabira pogodnog tipa ATR kristala, moramo razmotriti veličinu kristala zbog broja mogućih refleksija. Direktna je veza između broja refleksija ATR kristala i intenziteta rezultatnog spektra. Što je veći broj refleksija prepoznatljivije su vrpce i bolji je signal. Signal se može poboljšati i ako produžimo vrijeme mjerenja [9].

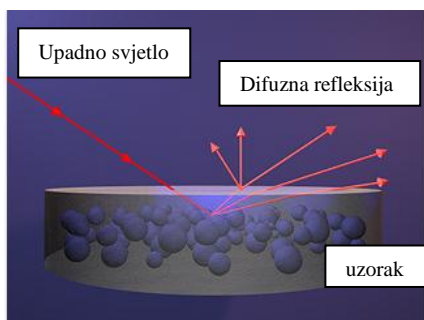
Možemo izabrati između nekoliko ATR jedinica.

U horizontalnom ATR-u (eng. *horizontal ATR* - HATR) kristal postavimo horizontalno. HATR alati često su korišteni u rutinskim mjerenjima kada uzorak ima veliku propusnu moć. HATR s jednom refleksijom koristi mali ATR kristal tako da se može dobiti samo jedna refleksija i koristi se za analizu malih uzoraka. Postoji i vertikalni ATR (VATR) u koji se uzorak postavlja vertikalno [9].

## 2.8. Difuzna refleksija

Kod difuzne refleksije (slika 19.) upadna svjetlost dolazi na površinu uzorka i reflektira se u mnogo različitih smjerova. Svjetlost se reflektira na dva načina. Jedan dio upadne svjetlosti reflektira se direktno s površine uzorka, drugi dio prodire u uzorak, djelomično se apsorbira, te se vraća na površinu procesima raspršenja u unutrašnjosti.

Difuzna refleksija se često koristi kod heterogenih uzoraka ili prašaka i krutina koje imaju grubu površinu. Difuzna refleksija koristi se u MIR i NIR spektroskopiji.



Slika 19. Difuzna refleksija.

Tipični uzorci su: prašci, papir, polimeri, čvrsti uzorci sa grubom površinom.

Uzorci se ne mjere izravno. Prašci se npr. pomiješaju sa KBr ili KCl prahom [9].

### 3. Eksperimentalni dio

FTIR spektri snimljeni su na PerkinElmer, Spectrum One spektrometru (slika 20.).



Slika 20. PerkinElmer, Spectrum One.

Svi uzorci snimljeni su ATR metodom, a jedan dio uzoraka snimljen je transmisijskom metodom. Uzorke nije bilo potrebno prethodno pripremati.

Mjerno područje za ATR metodu je između  $4000\text{ cm}^{-1}$  i  $650\text{ cm}^{-1}$ , a za transmisijsku metodu je između  $4000\text{ cm}^{-1}$  i  $400\text{ cm}^{-1}$  sa spektralnom rezolucijom od  $4\text{ cm}^{-1}$ . Da bi se povećao odnos signala prema šumu svaki uzorak snimljen je četiri puta.

Ispitivani materijali su:

- Crna guma
- A4 papir
- Papir iz CD kutije, bijela strana
- Papir iz CD kutije, plava strana
- Ukrasna vrećica
- Poliamid 66 (PA 66)
- Poliamid 12 (PA 12)
- Komercijalni polietilen (PE)
- Plastična vrećica
- Čep s boce
- Nescafe 3u1
- Vrećica
- Šušakava vrećica
- Polietilen niske gustoće, (eng. *low density polyethylene*) LDPE
- Film polietilena niske gustoće debljine  $55\text{ }\mu\text{m}$  (LDPE 55)
- Debeli film polietilena niske gustoće
- Polietilen visoke gustoće (eng. *high density polyethylene*) HDPE
- Polietilenska vrećica (PE vrećica)

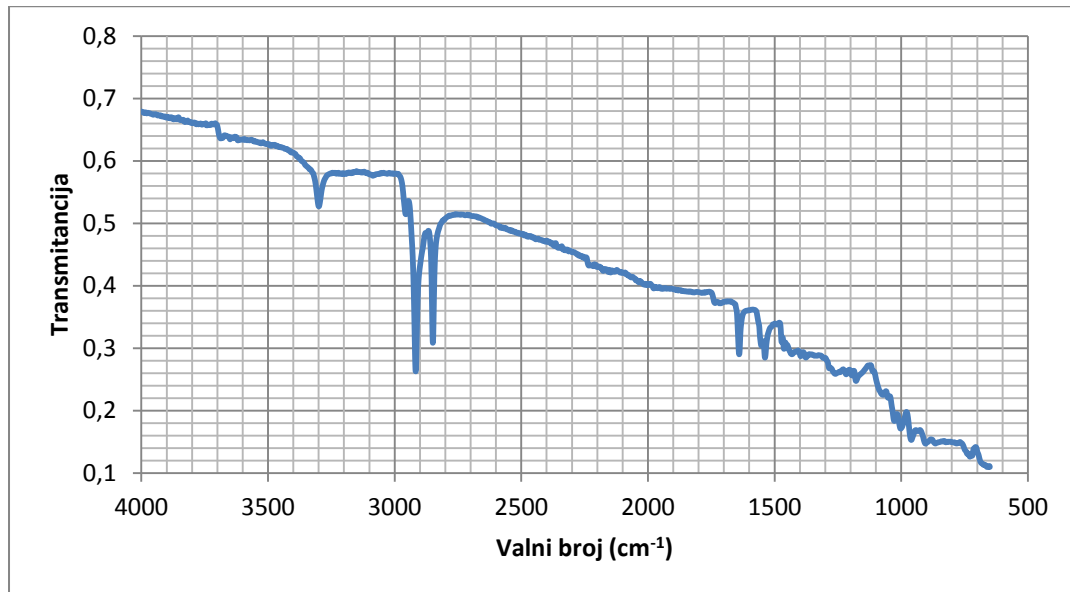
- Polietilenski vosak (PE vosak)
- Polietilenska folija debljine 25  $\mu\text{m}$  (PE 25)
- Polietilenska folija debljine 40  $\mu\text{m}$  (PE 40)
- Polietilenska folija debljine 50  $\mu\text{m}$  (PE 50)
- Polietilenska folija debljine 70  $\mu\text{m}$  (PE 70)
- Polietilenska folija debljine 25  $\mu\text{m}$  (PE 25), transmisijska metoda
- Polietilenska folija debljine 40  $\mu\text{m}$  (PE 40), transmisijska metoda
- Polietilenska folija debljine 50  $\mu\text{m}$  (PE 50), transmisijska metoda
- Polietilenska folija debljine 70  $\mu\text{m}$  (PE 70), transmisijska metoda
- Polietilenska folija debljine 1000  $\mu\text{m}$  (PE 1000), transmisijska metoda
- Kruta ambalaža 2
- Kruta ambalaža 3
- Poli(etlen-tereftalat) boca, PET boca
- Poli(etlen-tereftalat) folija, PET folija
- CD verbatim
- Komercijalni poli(kaprolakton), PCL
- Tehnički polilaktid, PLA
- Pleksiglas
- Božićna vrećica
- Mekana CD kutija
- Kutija od jagoda
- Polipropilenska folija debljine 20  $\mu\text{m}$  (PP 20)
- Polipropilenska folija debljine 30  $\mu\text{m}$  (PP 30)
- Polipropilenska folija debljine 500  $\mu\text{m}$  (PP 500)
- Polipropilenska folija debljine 20  $\mu\text{m}$  (PP 20), transmisijska metoda
- Polipropilenska folija debljine 30  $\mu\text{m}$  (PP 30), transmisijska metoda
- Polipropilenska folija debljine 500  $\mu\text{m}$  (PP 500), transmisijska metoda
- CD kutija, crni dio
- CD kutija, prozirni dio
- Poliuretan, PUR
- Folija s Ketchupa
- Uvez knjige
- Prozirna folija s CD kutije
- Kruta ambalaža 4



## 4. Rezultati i rasprava

Jedan od kriterija za uspješno snimanje FTIR-ATR-om je primjena dostatnog pritiska, kako bi se postigao bliski kontakt između uzorka i kristala.

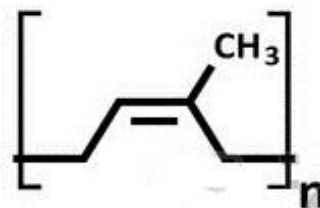
Kako bi se odredilo od kojeg materijala je izrađen pojedinačni uzorak, njegov FTIR spektar uspoređuje se s već poznatim spektrima.



Slika 21. ATR-FTIR spektar crne gume.

Tablica 2. Vrpce crne gume.

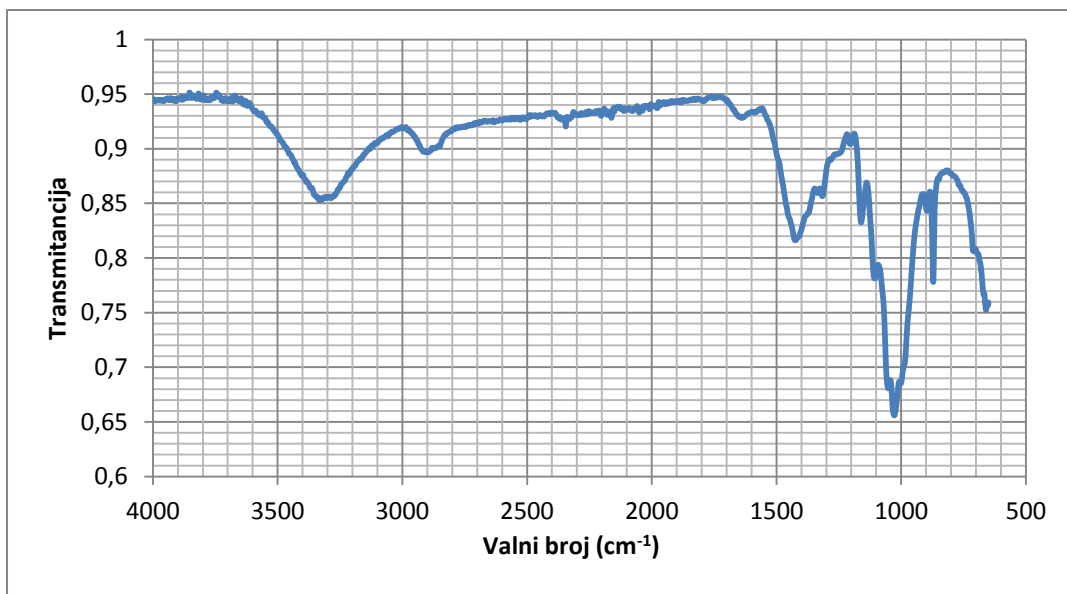
| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 3299                           | 0,5272         |
| 2916                           | 0,2632         |
| 2849                           | 0,3088         |
| 1640                           | 0,2906         |
| 1538                           | 0,2853         |



Slika 22. Ponavljajući dio strukture poliizoprena.

ATR-om kao mjernom metodom dobiju se informacije o materijalu do dubine od nekoliko  $\mu\text{m}$  u površinu uzorka. Crna guma, u svom sastavu sadrži čađu. Kako možemo vidjeti sa spektra na slici 21., bazna linija se sve više spušta prema manjim valnim brojevima i zaključujemo da je čađa apsorbirana preko cijelog mjernog područja.

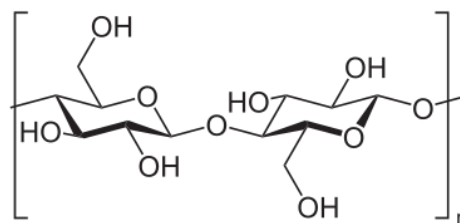
Na spektru (slika 21., tablica 2.) vidimo dvije izražene vrpce na  $2916\text{ cm}^{-1}$  i  $2849\text{ cm}^{-1}$  koje su karakteristične za  $\text{CH}_3$  i  $\text{CH}_2$  istezanje. Guma se dobiva iz prirodnog ili sintetskog kaučuka koji je po svojoj strukturi poliizopren (slika 22.) [10].



Slika 23. ATR-FTIR spektar A4 papira.

Tablica 3. Vrpce A4 papira.

| valni broj $\text{cm}^{-1}$ | transmitancija |
|-----------------------------|----------------|
| 3332                        | 0,8529         |
| 2900                        | 0,8966         |
| 1424                        | 0,8162         |
| 1052                        | 0,6806         |
| 1028                        | 0,6558         |
| 871                         | 0,7782         |

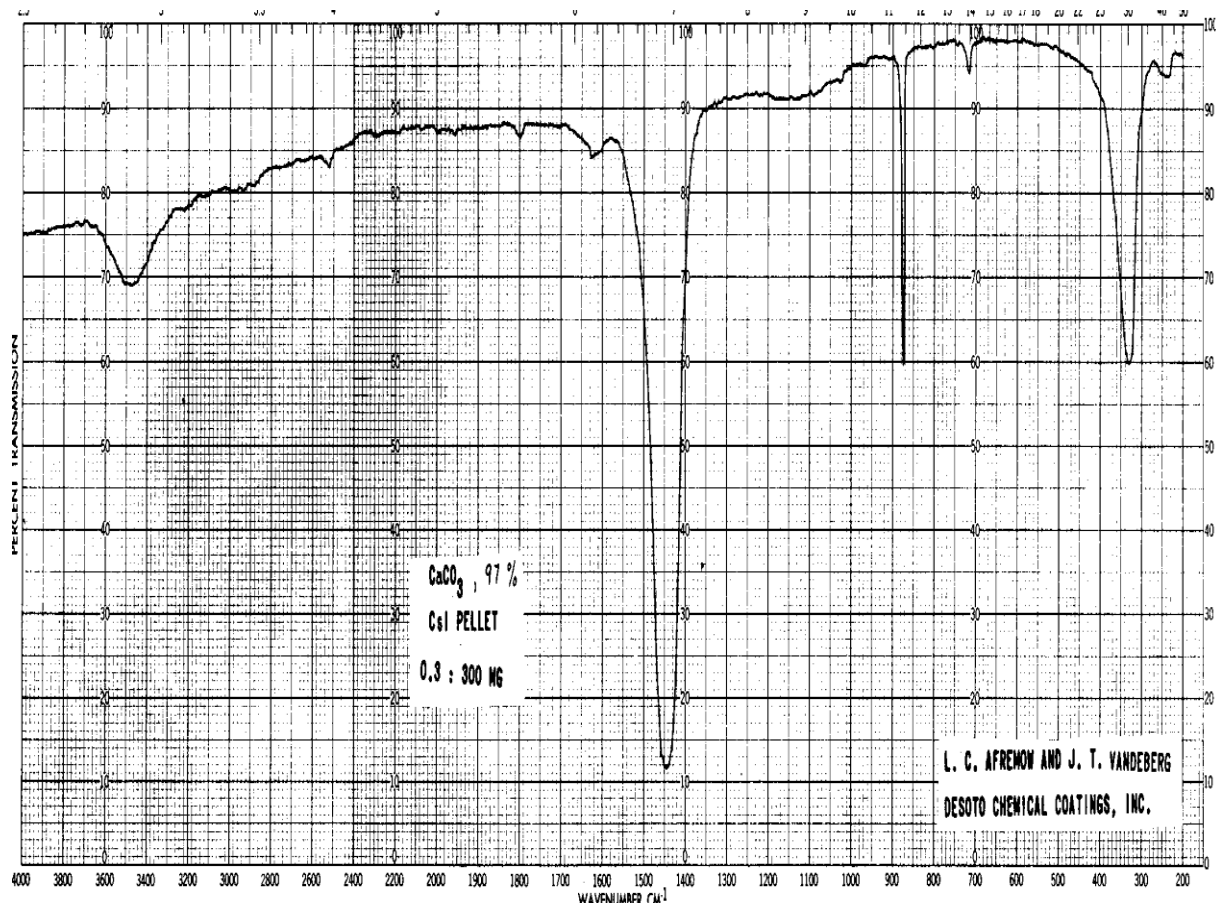


Slika 24. Ponavljajuća dio strukture celuloze.

U slučaju spektra A4 papira (slika 23., tablica 3.) izražene su vrpce na:  $3332 \text{ cm}^{-1}$ , koje su karakteristične za O-H istezanje, zatim na  $2900 \text{ cm}^{-1}$  je C-H istezanje, na  $1052 \text{ cm}^{-1}$  je C-O-C vibracija piranoznog prstena [11] i na oko  $1028 \text{ cm}^{-1}$  je C-O istezanje [12]. Ove vrpce karakteristične su za celulozu. Vrpce pri  $1424 \text{ cm}^{-1}$  i  $871 \text{ cm}^{-1}$  odgovaraju vrpčama kalcijeva karbonata ( $\text{CaCO}_3$ ).

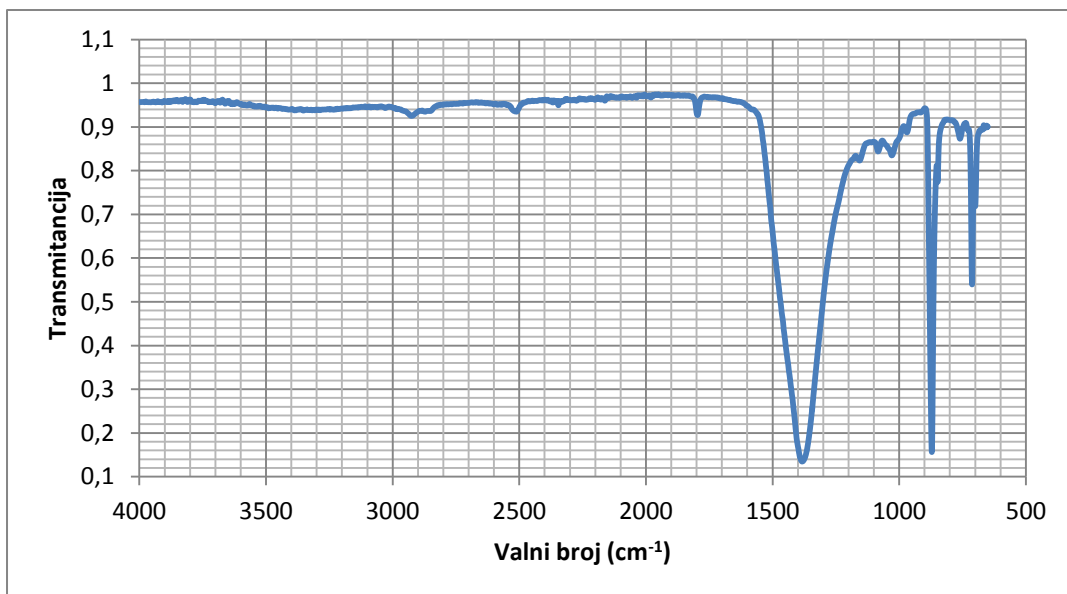
Papir je heterogen materijal izrađen većinom od celuloze (slika 24.) i hemiceluloze, te različitih veziva. Dodaju mu se tinta, boja i druge tvari, ovisno o primjeni. Jedan od takvih dodataka je i kalcijev karbonat ( $\text{CaCO}_3$ ).

Kalcijev karbonat jedan je od najčešće korištenih dodatnih tvari u industriji plastike. Najčešće se koristi jer je jeftin i time snizuje cijenu proizvoda, te kako bi se poboljšala morfološka, mehanička i termička svojstva određenog proizvoda.



Slika 25. IR spektar kalcijeva karbonata.

Sa spektra kalcijeva karbonata (slika 25.) vidi se da su najintenzivnije vrpce one oko  $1450\text{ cm}^{-1}$  i  $875\text{ cm}^{-1}$  i odgovaraju  $\text{-CO}_3$  asimetričnom istezanju i  $\text{-CO}_3$  deformaciji, te široka vrpca oko  $350\text{ cm}^{-1}$  koju nismo identificirali [13].



Slika 26. ATR–FTIR spektar papira iz CD kutije, bijela strana.

Tablica 4. Vrpce papira iz CD kutije, bijela strana.

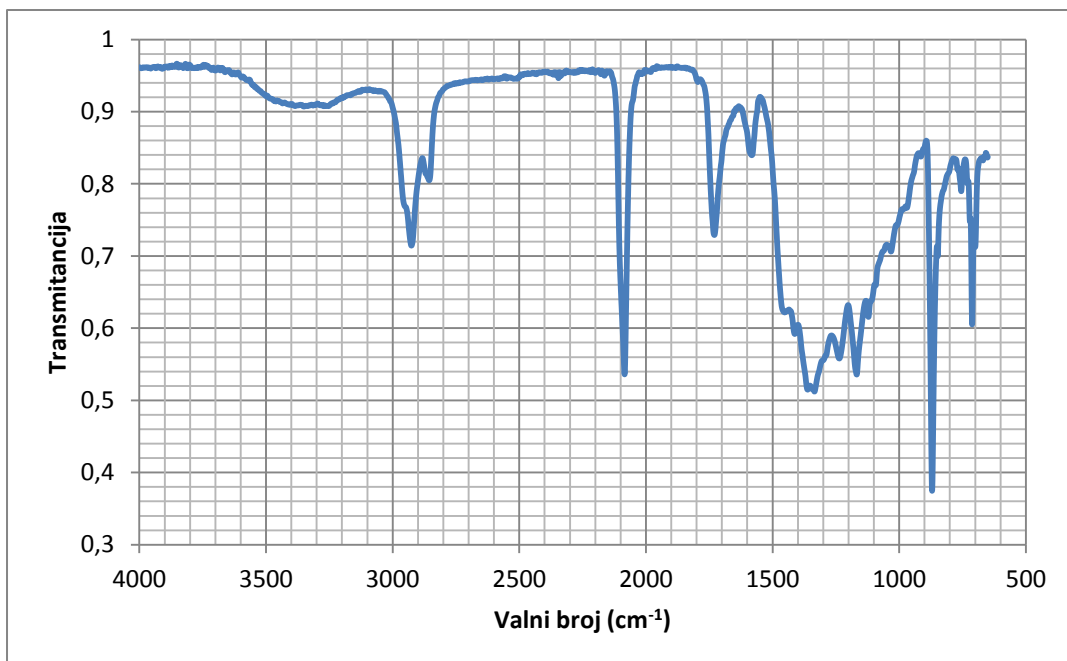
| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 1383                           | 0,1345         |
| 1156                           | 0,8230         |
| 1109                           | 0,8646         |
| 1083                           | 0,8438         |
| 1029                           | 0,8348         |
| 969                            | 0,8874         |
| 871                            | 0,1562         |
| 760                            | 0,8729         |
| 712                            | 0,5395         |



Slika 27. Papir iz CD kutije, bijela strana.

Usporedi li se spektar bijele strane papira iz CD kutije (slika 26., tablica 4.) sa spektrom bijelog A4 papira (slika 23.) jasno se vidi da su oni različiti. Spektar papira iz CD kutije ima dvije vrpce velikog intenziteta no različite širine, pri 1383 cm<sup>-1</sup> i 871 cm<sup>-1</sup>.

Općenito, širina vrpce određena je brojem kemijskih okruženja koja su povezana s međumolekulskim interakcijama. Ako je strukturna skupina okružena velikim brojem drugih strukturnih skupina koje utječu na tu strukturnu skupinu na različite načine doći će do stvaranja više različitih veza, a vrpca će biti široka. No ako u blizini nema drugih skupina s kojima bi mogle stvoriti vezu ili ih ima vrlo malo vrpca će biti uska [14]. Sa slike 27. na kojoj je prikazan papir iz CD kutije vidljivo je da on sadrži boju. Budući da ATR–FTIR metodom dobivamo spektar gornje površine tvari, može se pretpostaviti da je u ovom slučaju snimljen spektar boje.



Slika 28. ATR-FTIR spektar papira iz CD kutije, plava strana.

Tablica 5. Vrpce papira iz CD kutije, plava strana.

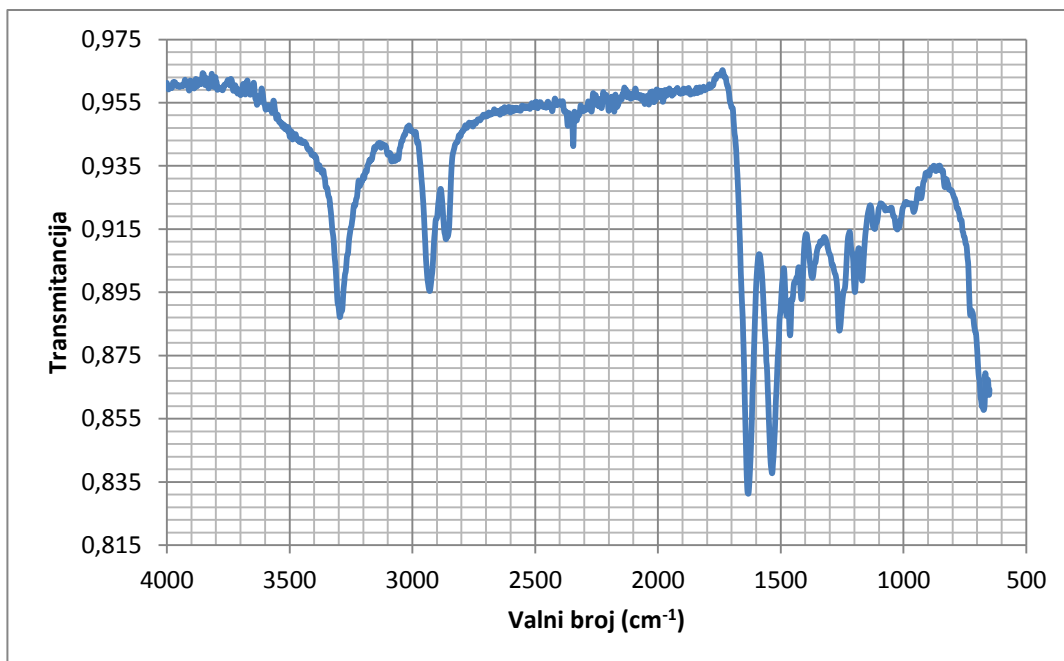
| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2926                           | 0,7143         |
| 2855                           | 0,8047         |
| 2084                           | 0,5359         |
| 1582                           | 0,8395         |
| 1361                           | 0,5148         |
| 1334                           | 0,5121         |
| 1236                           | 0,5579         |
| 1168                           | 0,5356         |
| 870                            | 0,3746         |
| 755                            | 0,7895         |
| 712                            | 0,6050         |



Slika 29. Papir iz CD kutije, plava strana.

Usporedi li se plava strana papira iz CD kutije (slika 28., tablica 5.) sa spektrom bijelog A4 papira (slika 23.) jasno se vidi da su oni različiti. Prisutne su vrpce velikog intenziteta pri 2084 cm<sup>-1</sup> i 870 cm<sup>-1</sup>, te široke vrpce između 1500-1000 cm<sup>-1</sup>.

Sa slike 29. na kojoj je prikazan papir iz CD kutije vidljivo je da on sadrži boju. Budući da ATR-FTIR metodom dobivamo spektar gornje površine tvari, može se pretpostaviti da je u ovom slučaju snimljen spektar boje.



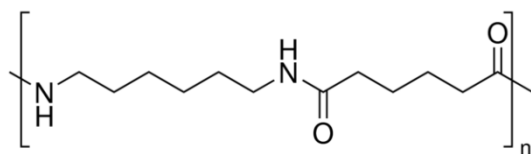
Slika 30. ATR-FTIR spektar ukrasne vrećice.

Tablica 6. Vrpce ukrasne vrećice.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 3295                           | 0,8872         |
| 2930                           | 0,8954         |
| 2857                           | 0,9015         |
| 1632                           | 0,8313         |
| 1535                           | 0,8377         |
| 1462                           | 0,8814         |
| 1416                           | 0,8928         |
| 1371                           | 0,8996         |
| 1261                           | 0,8829         |

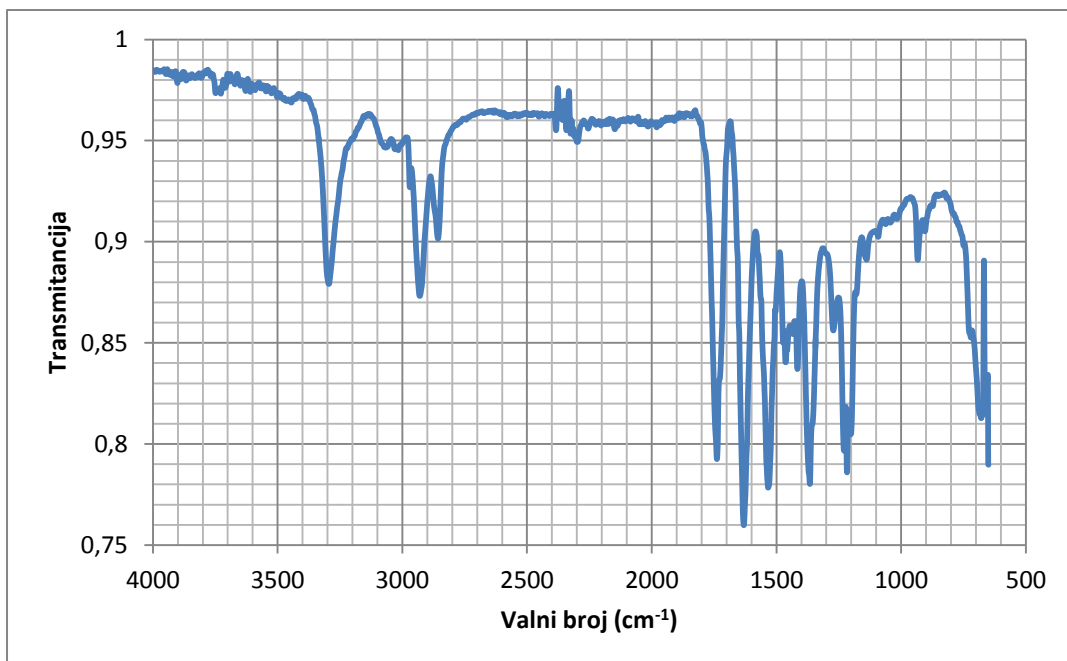


Slika 31. Ukrasna vrećica.



Slika 32. Ponavljajući dio strukture poliamida 66.

ATR-FTIR spektrometrom dobiven spektar (slika 30., tablica 6.) u slučaju ukrasne vrećice (slika 31.) daje vrpce pri: 3295 cm<sup>-1</sup> gdje se odvija N-H istežanje; zatim pri 2930 cm<sup>-1</sup> gdje je CH<sub>2</sub> asimetrično istežanje; pri 2857 cm<sup>-1</sup> je CH<sub>2</sub> istežanje, pri 1632 cm<sup>-1</sup> je amidna I vrpca; te pri 1535 cm<sup>-1</sup> je N-H uvijanje [15]. Ovakvo ponašanje uzorka karakteristično je za poliamid 66, a kemijska formula je (C<sub>12</sub>H<sub>22</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)<sub>n</sub> (slika 32.).

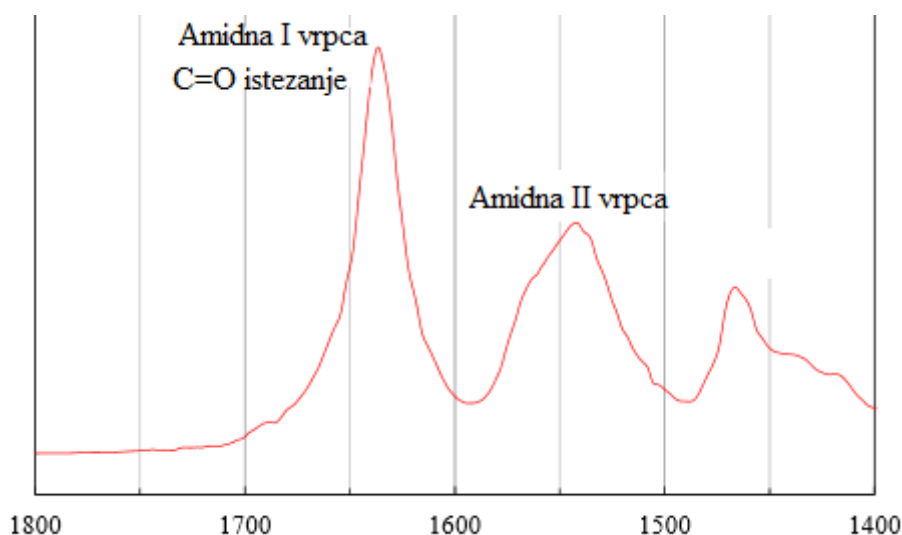


Slika 33. ATR-FTIR spektar PA 66.

Tablica 7. Vrpce PA 66.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 3295                           | 0,8790         |
| 2930                           | 0,8732         |
| 2857                           | 0,9015         |
| 1739                           | 0,7924         |
| 1631                           | 0,7598         |
| 1534                           | 0,7784         |
| 1463                           | 0,8403         |
| 1416                           | 0,8370         |
| 1366                           | 0,7802         |
| 1272                           | 0,8561         |
| 1217                           | 0,7859         |
| 1202                           | 0,8047         |

ATR-FTIR spektrometrom dobiven spektar (slika 33., tablica 7.) daje vrpce pri: 3295 cm<sup>-1</sup> gdje se odvija N-H istežanje; zatim pri 2930 cm<sup>-1</sup> gdje je CH<sub>2</sub> asimetrično istežanje; pri 2857 cm<sup>-1</sup> je CH<sub>2</sub> istežanje, pri 1631 cm<sup>-1</sup> je amidna I vrpca; pri 1463 cm<sup>-1</sup> je CH<sub>2</sub> simetrična strižna deformacija, te pri 1534 cm<sup>-1</sup> je N-H uvijanje, pri 1272 cm<sup>-1</sup> je C-N istežanje [15]. Kao i u prethodnom primjeru radi se o PA 66.

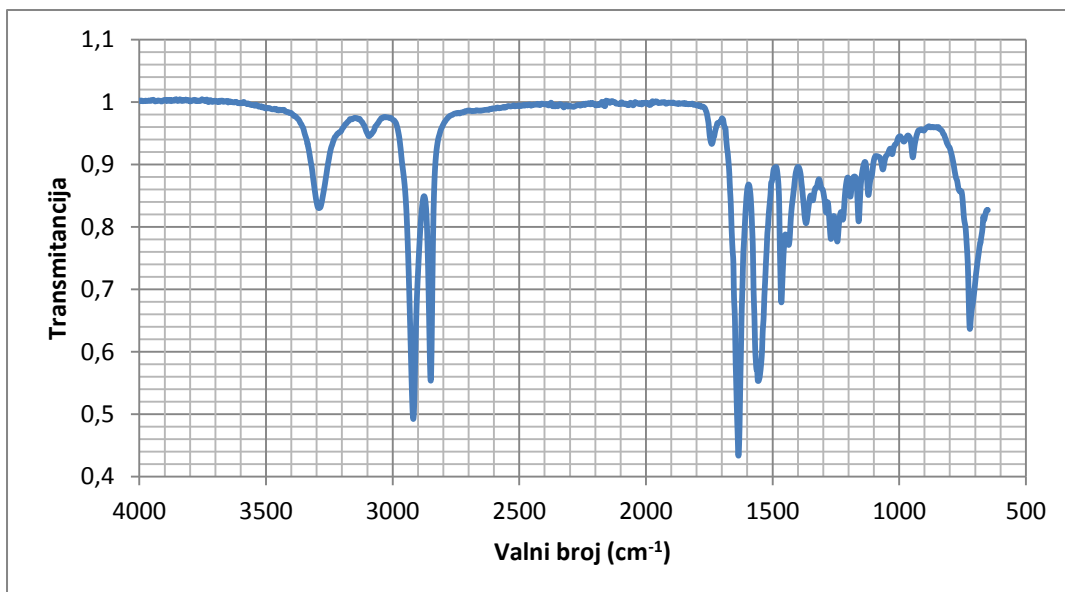


Slika 34. Amidna I i II vrpca poliamida 12 (PA 12).

Istraživanjem vibracijskih spektara amida pronađene su njihove karakteristične vrpce. Za sve amide karakteristična je apsorpcija vrpce u području karbonilne skupine (C=O), poznata kao amidna I vrpca. Kod primarnih amida u čvrstom stanju amidna I vrpca opaža se oko  $1650\text{ cm}^{-1}$ , kod sekundarnih amida u čvrstom stanju amidna I vrpca nalazi se oko  $1640\text{ cm}^{-1}$  i kod tercijarnih amida u čvrstom stanju amidna I vrpca je između  $1680\text{ cm}^{-1}$  i  $1630\text{ cm}^{-1}$ . Može se zaključiti da se amidna I vrpca amida u čvrstom stanju proteže od oko  $1630\text{ cm}^{-1}$  do  $1680\text{ cm}^{-1}$  kao što je vidljivo na slici 33.

Amidna II vrpca obično je uzrokovana  $\text{NH}_2$  deformacijom i ima upola manji intenzitet od prve amidne vrpce. U nekim slučajevima javlja se već u području I amidne vrpce, između  $1655\text{ cm}^{-1}$  i  $1620\text{ cm}^{-1}$ , dok sekundarni aciklički amidi imaju amidnu II vrpcu u području između  $1570\text{ cm}^{-1}$  i  $1515\text{ cm}^{-1}$ , što odgovara amidnoj II vrpce PA 12 na slici 34 [16].

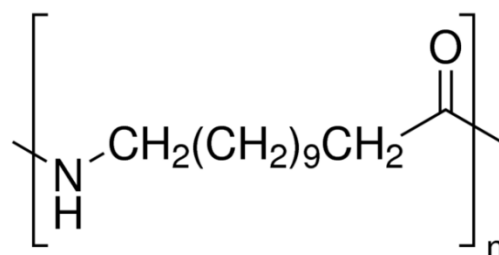




Slika 35. ATR-FTIR spektar PA 12.

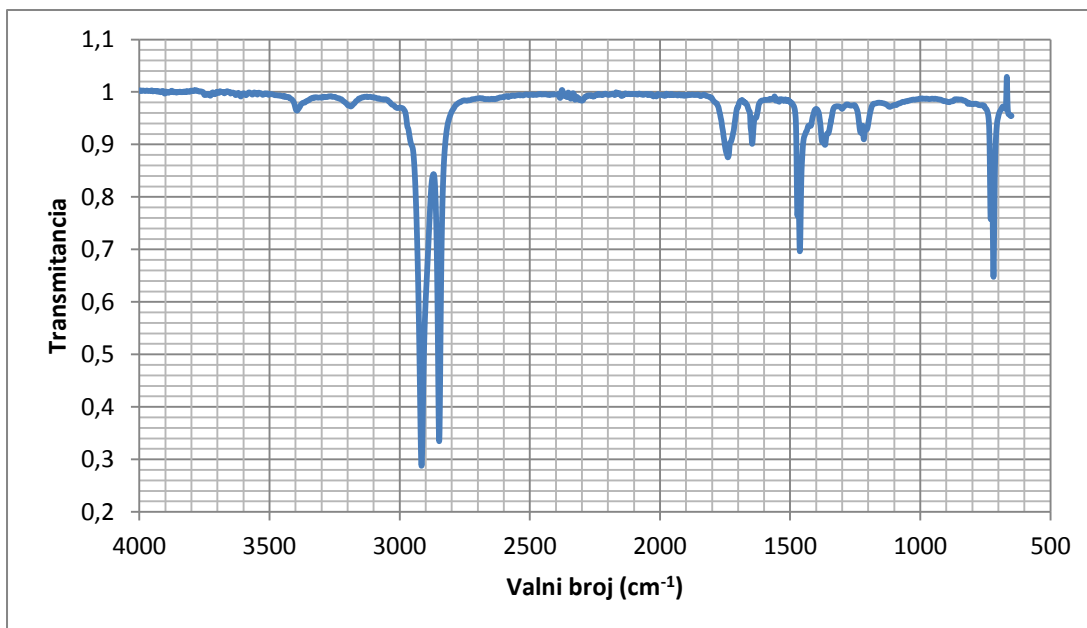
Tablica 8. Vrpce PA 12.

| valni broj( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 3290                           | 0,8300         |
| 3093                           | 0,9451         |
| 2918                           | 0,4923         |
| 2849                           | 0,5537         |
| 1634                           | 0,4337         |
| 1556                           | 0,5532         |
| 1465                           | 0,6790         |
| 1368                           | 0,8057         |
| 1269                           | 0,7806         |
| 1244                           | 0,7764         |
| 946                            | 0,9112         |
| 721                            | 0,6365         |



Slika 36. Ponavljajući dio strukture PA 12.

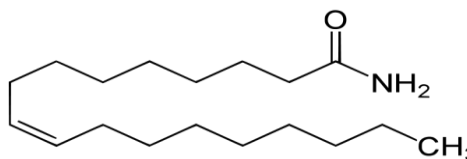
ATR-FTIR spektrometrom dobiven spektar (slika 35., tablica 8.) ima izražene vrpce pri:  $3290 \text{ cm}^{-1}$  gdje se nalazi N-H istezanje, pri  $2918 \text{ cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  asimetrično istezanje, pri  $2849 \text{ cm}^{-1}$  je simetrično  $\text{CH}_2$  istezanje, pri  $1634 \text{ cm}^{-1}$  je amidna I vrpca s C=O istezanjem, pri  $1556 \text{ cm}^{-1}$  je amidna II vrpca s C=O strižnom vibracijom, pri  $1465 \text{ cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  simetrična strižna deformacija, pri  $1368 \text{ cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  uvijanje, i pri  $1269 \text{ cm}^{-1}$  je C-N istezanje [17]. Ovakve vrpce karakteristične su za PA 12. Ponavljajuća struktura PA 12 vidljiva je na slici 36.



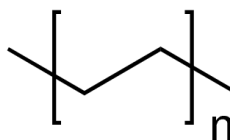
Slika 37. ATR-FTIR spektar komercijalnog polietilena.

Tablica 9. Vrpce komercijalnog polietilena.

| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 3394                            | 0,9641         |
| 3187                            | 0,9720         |
| 2916                            | 0,2875         |
| 2848                            | 0,3343         |
| 1739                            | 0,8752         |
| 1646                            | 0,9008         |
| 1463                            | 0,6962         |
| 1366                            | 0,8989         |
| 1217                            | 0,9094         |
| 719                             | 0,6474         |



Slika 38. Oleamid

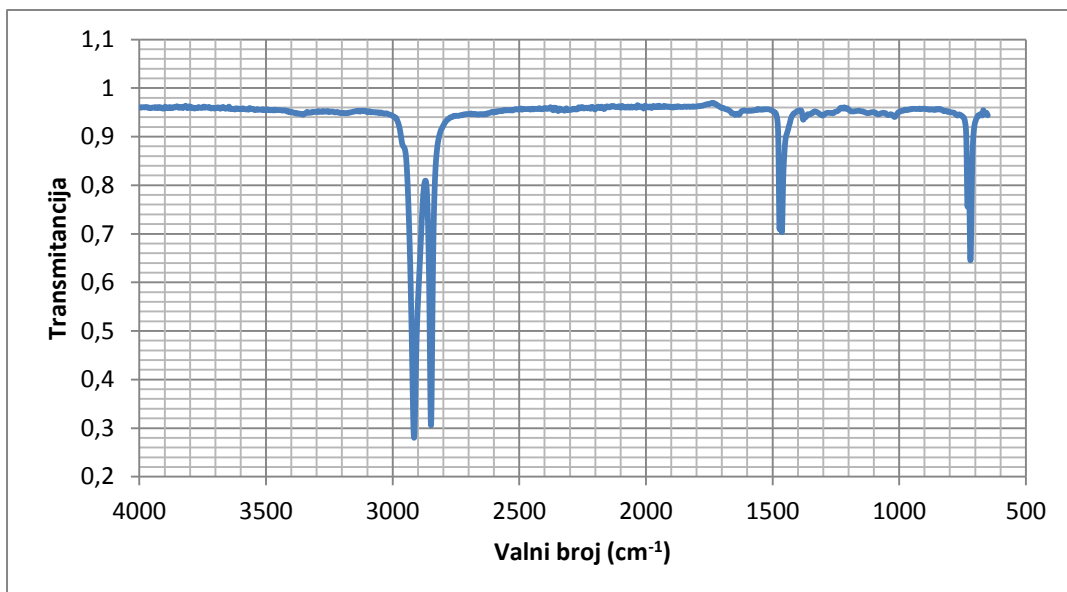


Slika 39. Ponavljajuća struktura polietilena (PE).

Polietilen (PE) ima jednostavnu strukturu izgrađenu od ponavljajućih jedinica  $\text{CH}_2$ . U ovom slučaju sa slike 37. i iz tablice 9. uočavamo vrpce pri  $3394 \text{ cm}^{-1}$  i  $3187 \text{ cm}^{-1}$  koje odgovaraju oleamidu (slika 38.). Oleamid pripada alifatskim amidima i služi kao klizno sredstvo, odnosno osigurava skliskost materijala [18].

Izražene su i vrpce pri  $2916 \text{ cm}^{-1}$ ,  $2848 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1463 \text{ cm}^{-1}$  i  $719 \text{ cm}^{-1}$ . Vrpce odgovaraju  $\text{CH}_3$  istežanju,  $\text{CH}_2$  istežanju,  $\text{CH}_2$  uvijanju i  $\text{CH}_2$  njihanju, koje su karakteristične za polietilen (PE), (slika 39.) [19].

Vrpce pri:  $1739 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1646 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1366 \text{ cm}^{-1}$  i  $1217 \text{ cm}^{-1}$  odgovaraju dodatku koji nismo identificirali. Predpostavljamo da je riječ o antiblokirajućem sredstvu koje je po strukturi masni amid (ima dugački ugljikovodični lanac i primarnu amidnu skupinu), ali ni u jednom atlasu nismo pronašli odgovarajuću strukturu.



Slika 40. ATR-FTIR spektar plastične vrećice.

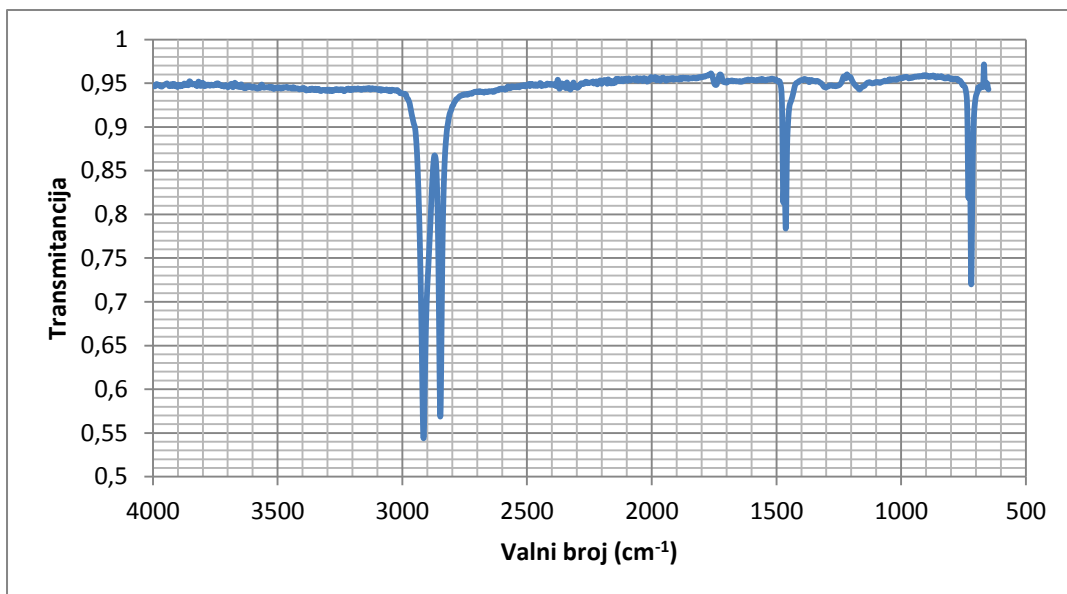
Tablica 10. Vrpce plastične vrećice.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2915                           | 0,2798         |
| 2848                           | 0,3055         |
| 1463                           | 0,7030         |
| 1379                           | 0,9349         |
| 719                            | 0,6455         |



41. Plastična vrećica.

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 40., tablica 10.) plastične vrećice (slika 41.) ima izražene vrpce pri 2915 cm<sup>-1</sup>, 2848 cm<sup>-1</sup>, 1463 cm<sup>-1</sup> i 719 cm<sup>-1</sup>. Vrpce odgovaraju CH<sub>3</sub> istezanju, CH<sub>2</sub> istezanju, CH<sub>2</sub> uvijanju i CH<sub>2</sub> njihanju [19]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o PE.



Slika 42. ATR–FTIR spektar čepa s boce.

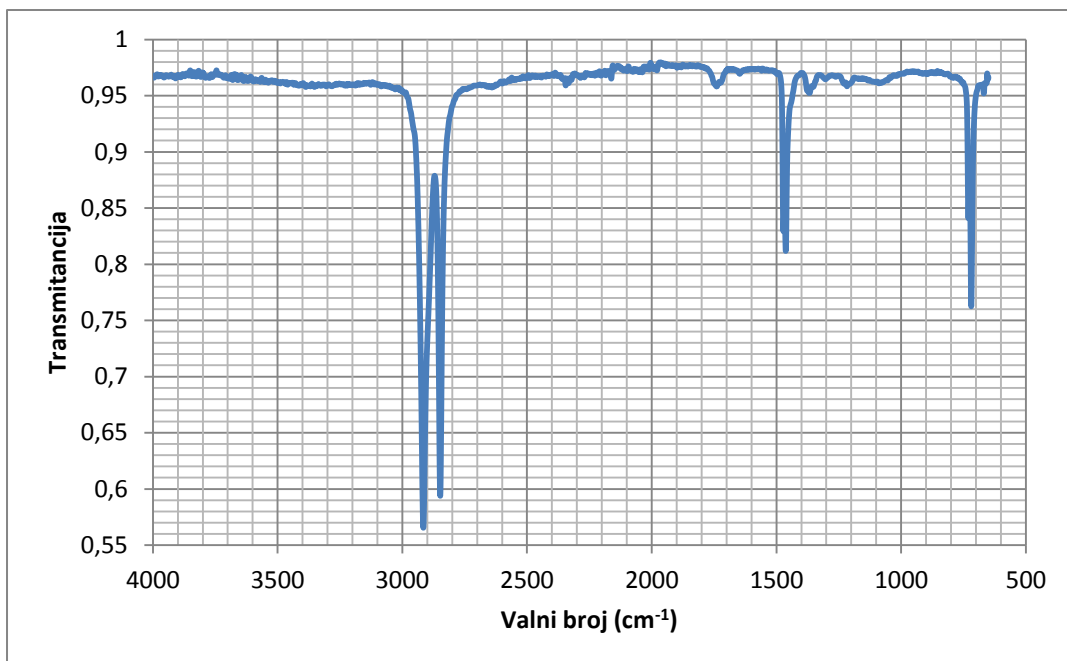
Tablica 11. Vrpce čepa s boce.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2915                           | 0,5438         |
| 2848                           | 0,5686         |
| 1463                           | 0,7836         |
| 719                            | 0,7198         |



Slika 43. Čep s boce.

ATR–FTIR metodom dobiven spektar (slika 42., tablica 11.) čepa s boce (slika 43.) ima izražene vrpce pri 2915 cm<sup>-1</sup>, 2848 cm<sup>-1</sup>, 1463 cm<sup>-1</sup> i 719 cm<sup>-1</sup>. Vrpce odgovaraju CH<sub>3</sub> istezanju, CH<sub>2</sub> istezanju, CH<sub>2</sub> uvijanju i CH<sub>2</sub> njihanju [19]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o PE.



Slika 44. ATR-FTIR spektar Nescafe 3u1.

Tablica 12. Vrpce Nescafe 3u1.

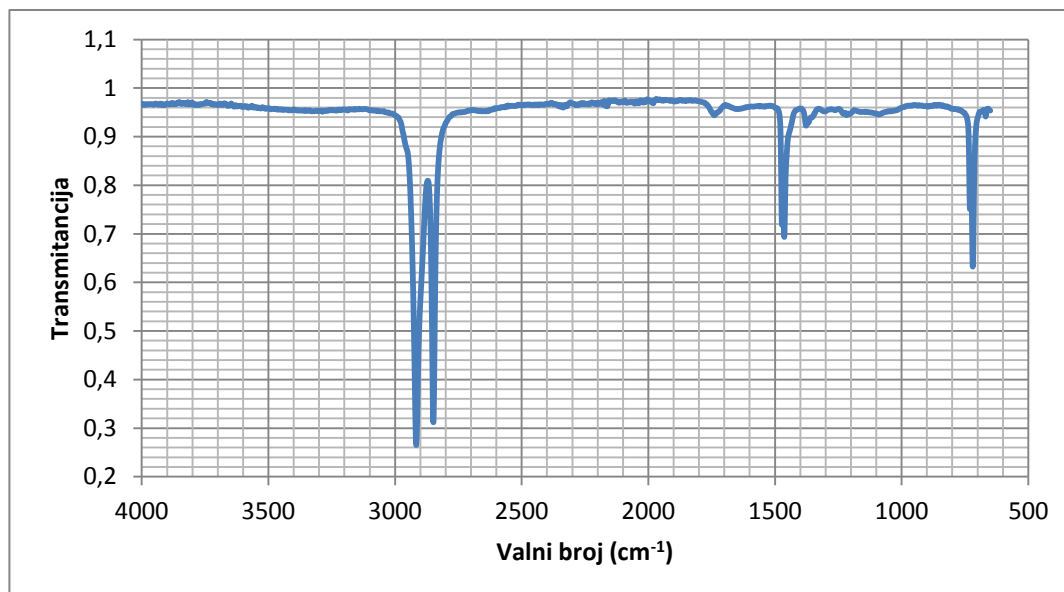
| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 2916                            | 0,5653         |
| 2848                            | 0,5937         |
| 1740                            | 0,9580         |
| 1463                            | 0,7836         |
| 1367                            | 0,9523         |
| 1217                            | 0,9584         |
| 719                             | 0,7624         |



Slika 45. Nescafe 3u1.

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 44., tablica 12.) unutarnjeg filma Nescafe 3u1 (slika 45.) ima izražene vrpce pri  $2916 \text{ cm}^{-1}$ ,  $2848 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1463 \text{ cm}^{-1}$  i  $719 \text{ cm}^{-1}$ . Vrpce odgovaraju  $\text{CH}_3$  istežanju,  $\text{CH}_2$  istežanju,  $\text{CH}_2$  uvijanju i  $\text{CH}_2$  njihanju [19]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o PE.

Vrpce pri:  $1740 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1367 \text{ cm}^{-1}$  i  $1217 \text{ cm}^{-1}$  odgovaraju dodatku koji nismo identificirali. Predpostavljamo da je riječ o antiblokirajućem sredstvu koje je po strukturi masni amid (ima dugački ugljikovodični lanac i primarnu amidnu skupinu), ali ni u jednom atlasu nismo pronašli odgovarajuću strukturu.



Slika 46. ATR-FTIR spektar vrećice.

Tablica 13. Vrpce za vrećicu.

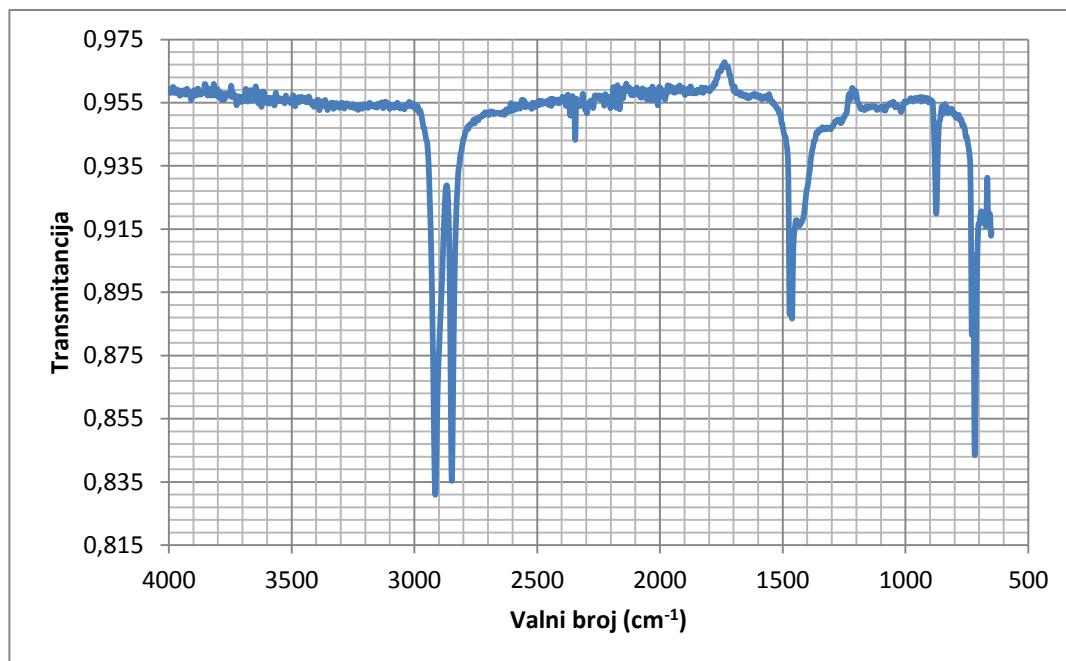
| valni broj $\text{cm}^{-1}$ | transmitancija |
|-----------------------------|----------------|
| 2916                        | 0,2654         |
| 2848                        | 0,3123         |
| 1739                        | 0,9438         |
| 1463                        | 0,6935         |
| 1377                        | 0,9225         |
| 1217                        | 0,9440         |
| 719                         | 0,6325         |



Slika 47. Vrećica

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 46., tablica 13.) vrećice (slika 47.) ima izražene vrpce pri  $2916 \text{ cm}^{-1}$ ,  $2848 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1463 \text{ cm}^{-1}$  i  $719 \text{ cm}^{-1}$ . Vrpce odgovaraju  $\text{CH}_3$  istežanju,  $\text{CH}_2$  istežanju,  $\text{CH}_2$  uvijanju i  $\text{CH}_2$  njihanju [19]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o PE.

Vrpce pri:  $1739 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1377 \text{ cm}^{-1}$  i  $1217 \text{ cm}^{-1}$  odgovaraju dodatku koji nismo identificirali. Predpostavljamo da je riječ o antiblokirajućem sredstvu koje je po strukturi masni amid (ima dugački ugljikovodični lanac i primarnu amidnu skupinu), ali ni u jednom atlasu nismo pronašli odgovarajuću strukturu.



Slika 48. ATR-FTIR spektar šušlave vrećice.

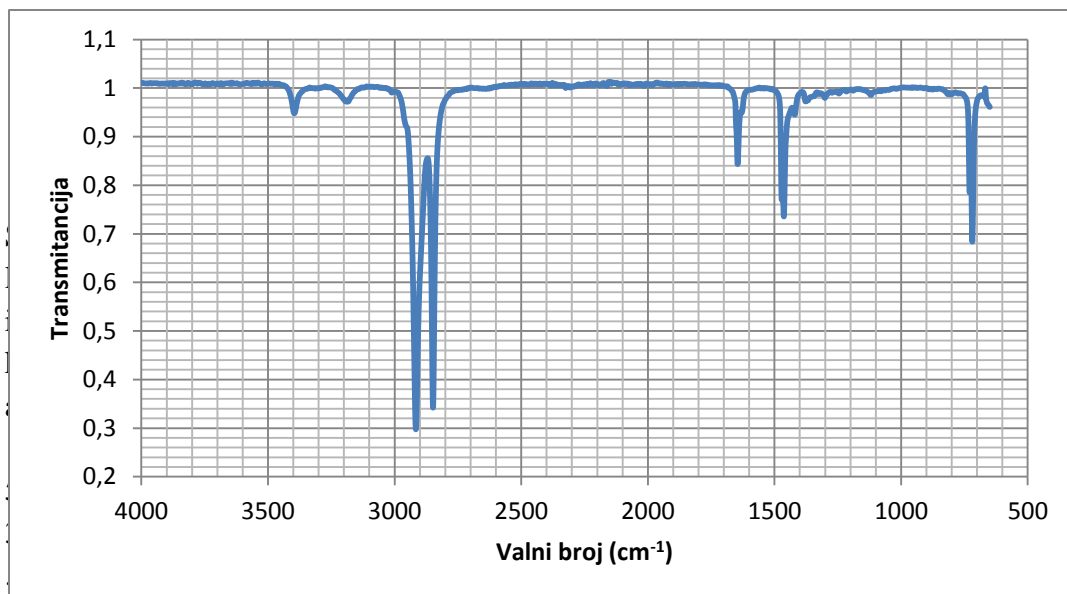
Tablica 14. Vrpce šušlave vrećice.

| valni broj $\text{cm}^{-1}$ | transmitancija |
|-----------------------------|----------------|
| 2915                        | 0,8309         |
| 2848                        | 0,8353         |
| 1462                        | 0,8866         |
| 875                         | 0,9199         |
| 718                         | 0,8435         |



Slika 49. Šušlava vrećica.

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 48., tablica 14.) šušlave vrećice (slika 49.) ima izražene vrpce pri  $2915 \text{ cm}^{-1}$ ,  $2848 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1462 \text{ cm}^{-1}$  i  $718 \text{ cm}^{-1}$ . Vrpce odgovaraju  $\text{CH}_3$  istezanju,  $\text{CH}_2$  istezanju,  $\text{CH}_2$  uvijanju i  $\text{CH}_2$  njihanju. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o PE. No vrpce pri  $1462 \text{ cm}^{-1}$  i  $875 \text{ cm}^{-1}$  nisu karakteristične za PE, nego odgovaraju vrpcama kalcijeva karbonata ( $\text{CaCO}_3$ ), koji se dodaje kako bi se modificirala mehanička svojstva materijala. Vrpca pri  $1462 \text{ cm}^{-1}$  karakteristična je za  $-\text{CO}_3$  asimetrično istezanje, a vrpca pri  $875 \text{ cm}^{-1}$  za  $-\text{CO}_3$  deformaciju [19].



Slika 50. ATR–FTIR spektar LDPE.

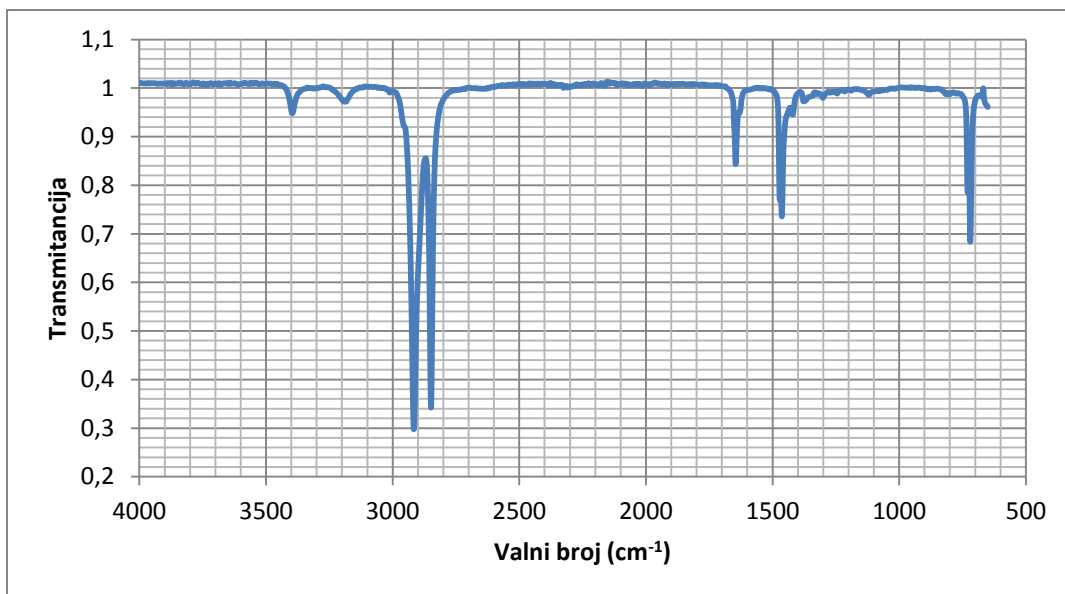
Tablica 15. Vrpce LDPE.

| valna duljina (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|-----------------------------------|----------------|
| 3400                              | 0,9492         |
| 3200                              | 0,9808         |
| 2916                              | 0,2975         |
| 2848                              | 0,3421         |
| 1646                              | 0,8437         |
| 1463                              | 0,7358         |
| 1377                              | 0,9686         |
| 719                               | 0,6839         |

Kao što je već poznato polietilen se sastoji od lanca ponavljajućih jedinica CH<sub>2</sub>. Molekule PE imaju ravnu strukturu uz određeni broj bočnih lanaca. Sadržaj kristalne faze ovisi upravo o razgranatosti PE, što je veća razgranatost manji je stupanj kristaliničnosti, odnosno manja je gustoća. Polietilen je jedna od najviše korištenih plastičnih masa i prema gustoći strukture razlikujemo LDPE, odnosno polietilen niske gustoće, HDPE, odnosno polietilen visoke gustoće i druge [20].

Na slici 50. (tablica 15.) prikazan je spektar LDPE. Vrpce pri 3400 cm<sup>-1</sup> i 3200 cm<sup>-1</sup> odgovaraju kliznom sredstvu oleamidu, vrpce pri 2916 cm<sup>-1</sup>, 2848 cm<sup>-1</sup>, 1463 cm<sup>-1</sup> i 719 cm<sup>-1</sup> odgovaraju nesimetričnom istezanju CH<sub>3</sub>, simetričnom istezanju CH<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub> uvijanju i CH<sub>2</sub> njihanju. Prisutna je i vrpca pri 1377 cm<sup>-1</sup> koja odgovara slaboj simetričnoj deformaciji CH<sub>3</sub> karakterističnoj za LDPE [21].



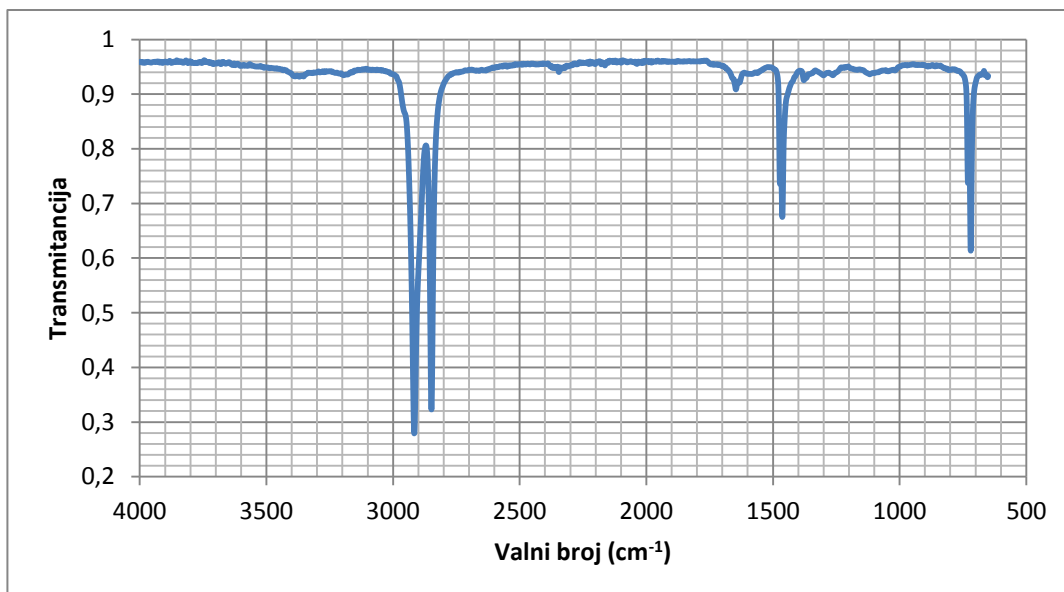


Slika 51. ATR–FTIR spektar LDPE filma debljine 55 $\mu\text{m}$ .

Tablica 16. Vrpce za LDPE filma debljine 55  $\mu\text{m}$ .

| valna duljina( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|-----------------------------------|----------------|
| 3400                              | 0,9492         |
| 3200                              | 0,9808         |
| 2916                              | 0,2975         |
| 2848                              | 0,3421         |
| 1646                              | 0,8437         |
| 1463                              | 0,7358         |
| 1377                              | 0,9686         |
| 719                               | 0,6839         |

Na slici 51. (tablica 16.) prikazan je spektar LDPE debljine 55  $\mu\text{m}$ . Vrpce pri 3400  $\text{cm}^{-1}$  i 3200  $\text{cm}^{-1}$  odgovaraju kliznom sredstvu, oleamidu. Vrpce pri 2916  $\text{cm}^{-1}$ , 2848  $\text{cm}^{-1}$ , 1463  $\text{cm}^{-1}$  i 719  $\text{cm}^{-1}$  odgovaraju nesimetričnom istezanju  $\text{CH}_3$ , simetričnom istezanju  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_2$  uvijanju i  $\text{CH}_2$  njihanju [21]. Vrpca pri 1646  $\text{cm}^{-1}$  je dodatak koji nismo identificirali. Predpostavljamo da je riječ o antiblokirajućem sredstvu koje je po strukturi masni amid (ima dugački ugljikovodični lanac i primarnu amidnu skupinu), ali ni u jednom atlasu nismo pronašli odgovarajuću strukturu.

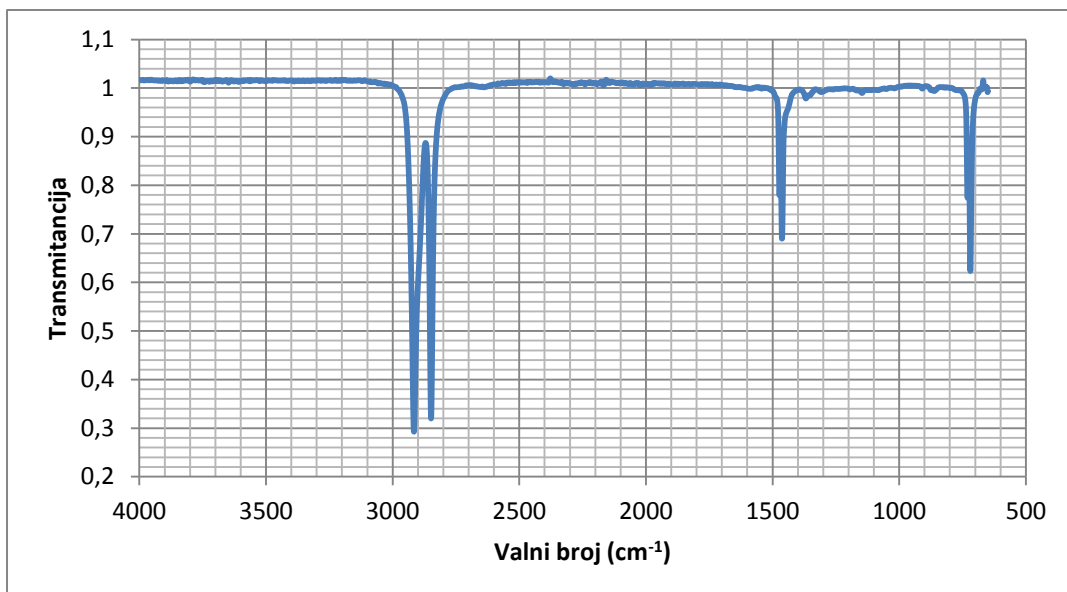


Slika 52. ATR-FTIR spektar debelog filma LDPE.

Tablica 17. Vrpce debelog filma LDPE.

| valna duljina (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|-----------------------------------|----------------|
| 3370                              | 0,9320         |
| 3194                              | 0,9348         |
| 2916                              | 0,2790         |
| 2848                              | 0,3228         |
| 1646                              | 0,9087         |
| 1463                              | 0,6752         |
| 1377                              | 0,9686         |
| 719                               | 0,6135         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 52., tablica 17.) debelog filma LDPE ima vrpce pri 3370 cm<sup>-1</sup> i 3194 cm<sup>-1</sup> koje odgovaraju kliznom sredstvu oleamidu. Vrpce pri: 2916 cm<sup>-1</sup>, 2848 cm<sup>-1</sup>, 1463 cm<sup>-1</sup>, 1377 cm<sup>-1</sup> i 719 cm<sup>-1</sup> svojstvene su: nesimetričnom istezanju CH<sub>3</sub>, simetričnom istezanju CH<sub>2</sub>, uvijanju CH<sub>2</sub>, slaboj deformaciji CH<sub>3</sub> i CH<sub>2</sub> njihanju [21].

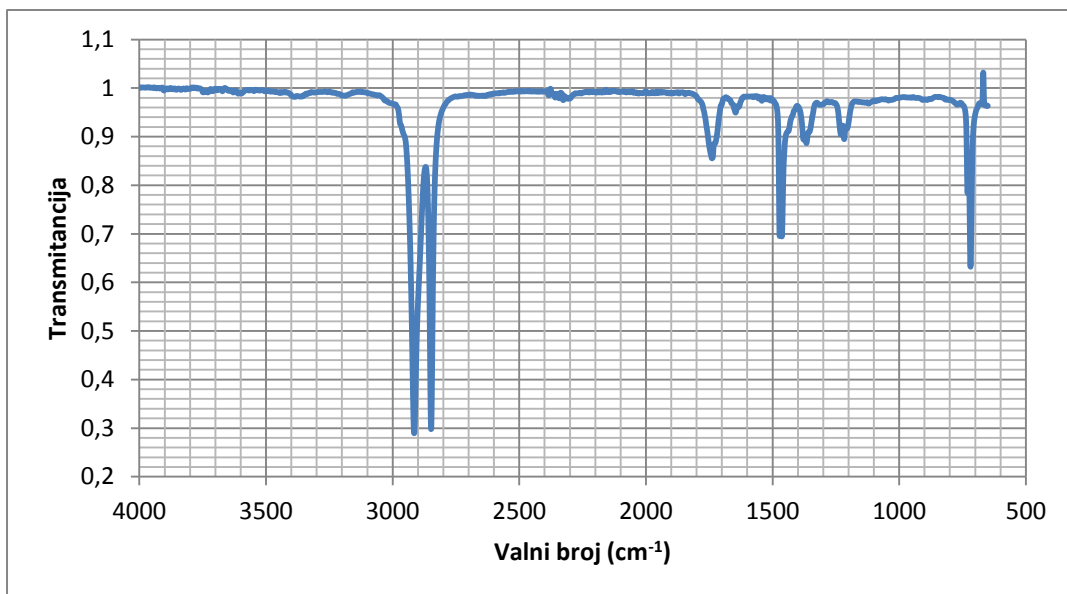


Slika 53. ATR–FTIR spektar HDPE.

Tablica 18. Vrpce HDPE.

| valni broj $\text{cm}^{-1}$ | transmitancija |
|-----------------------------|----------------|
| 2915                        | 0,2926         |
| 2848                        | 0,3197         |
| 1463                        | 0,6899         |
| 719                         | 0,6233         |

ATR–FTIR metodom dobiven spektar (slika 53., tablica 18.) HDPE ima izražene vrpce pri  $2915 \text{ cm}^{-1}$ ,  $2848 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1463 \text{ cm}^{-1}$  i  $719 \text{ cm}^{-1}$ . Vrpce odgovaraju  $\text{CH}_3$  istežanju, C-H istežanju, C-C istežanju i C-C uvijanju [22]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o HDPE.



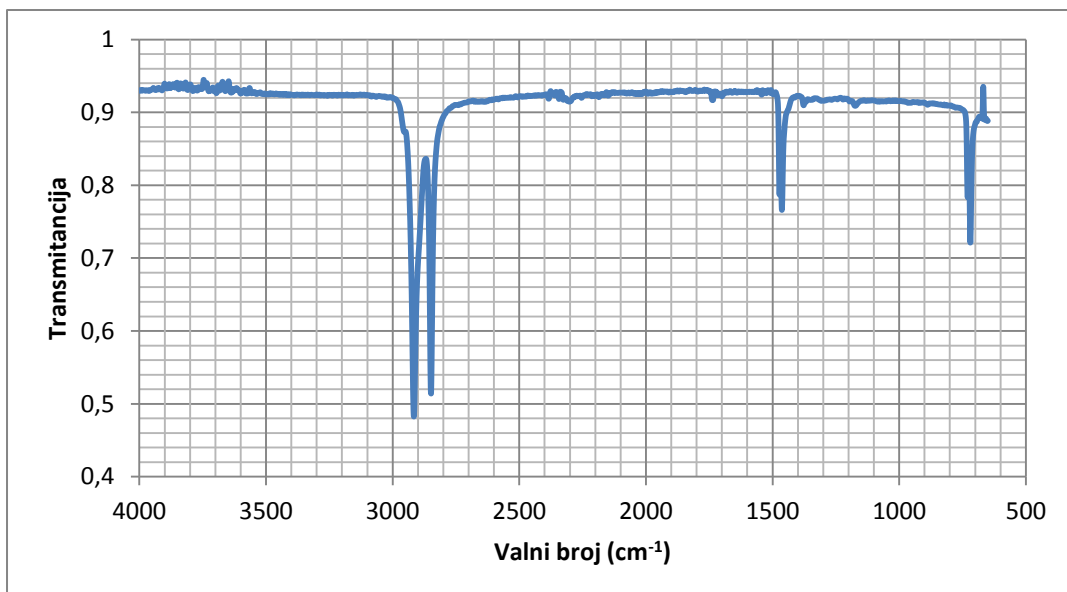
Slika 54. ATR-FTIR spektar PE vrećice.

Tablica 19. Vrpce PE vrećice.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 3394                           | 0,9826         |
| 3188                           | 0,9843         |
| 2915                           | 0,2894         |
| 2848                           | 0,2977         |
| 1739                           | 0,8555         |
| 1646                           | 0,9494         |
| 1463                           | 0,6946         |
| 1366                           | 0,8867         |
| 1217                           | 0,8950         |
| 718                            | 0,6323         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 54., tablica 19.) PE vrećice ima izražene vrpce pri 3394 cm<sup>-1</sup>, 3188 cm<sup>-1</sup> koje odgovaraju kliznom sredstvu oleamidu, vrpce pri: 2915 cm<sup>-1</sup>, 2848 cm<sup>-1</sup>, 1463 cm<sup>-1</sup> i 718 cm<sup>-1</sup> odgovaraju CH<sub>3</sub> istežanju, CH<sub>2</sub> istežanju, CH<sub>2</sub> uvijanju i CH<sub>2</sub> njihanju [23]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o PE.

Vrpce pri: 1739 cm<sup>-1</sup>, 1646 cm<sup>-1</sup>, 1366 cm<sup>-1</sup> i 1217 cm<sup>-1</sup> odgovaraju dodatku koji nismo identificirali. Predpostavljamo da je riječ o antiblokirajućem sredstvu koje je po strukturi masni amid (ima dugački ugljikovodični lanac i primarnu amidnu skupinu), ali ni u jednom atlasu nismo pronašli odgovarajuću strukturu.

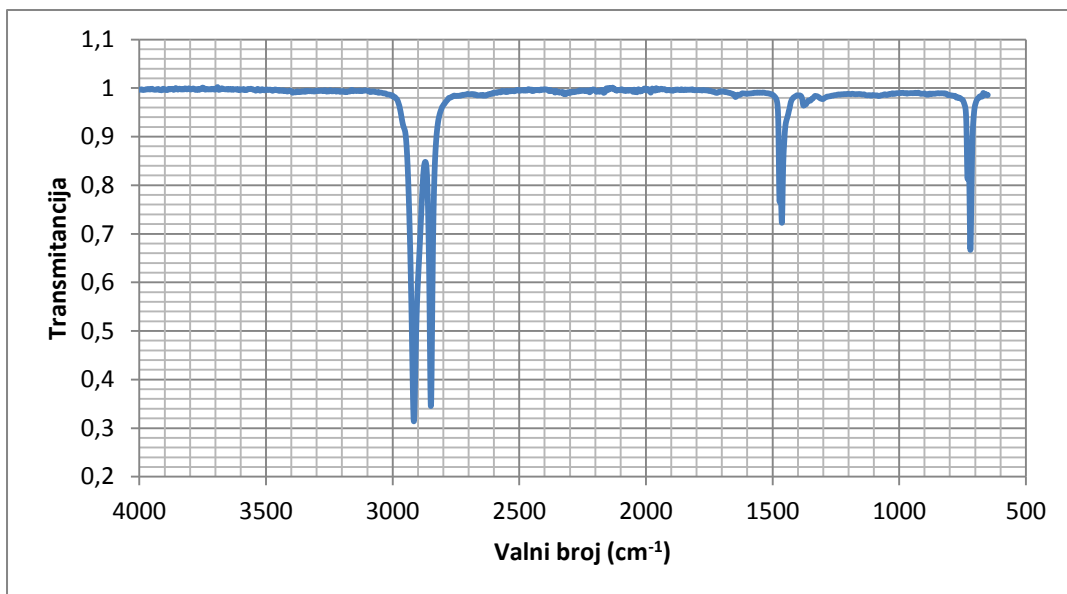


Slika 55. ATR-FTIR spektar PE voska.

Tablica 20. Vrpce PE voska.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2916                           | 0,4827         |
| 2848                           | 0,5142         |
| 1463                           | 0,7760         |
| 719                            | 0,7212         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 55., tablica 20.) PE voska ima izražene vrpce pri 2916 cm<sup>-1</sup>, 2848 cm<sup>-1</sup>, 1463 cm<sup>-1</sup> i 719 cm<sup>-1</sup>. Vrpce odgovaraju CH<sub>3</sub> istežanju, CH<sub>2</sub> istežanju, CH<sub>2</sub> uvijanju i CH<sub>2</sub> njihanju [23]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o vosku na bazi PE.

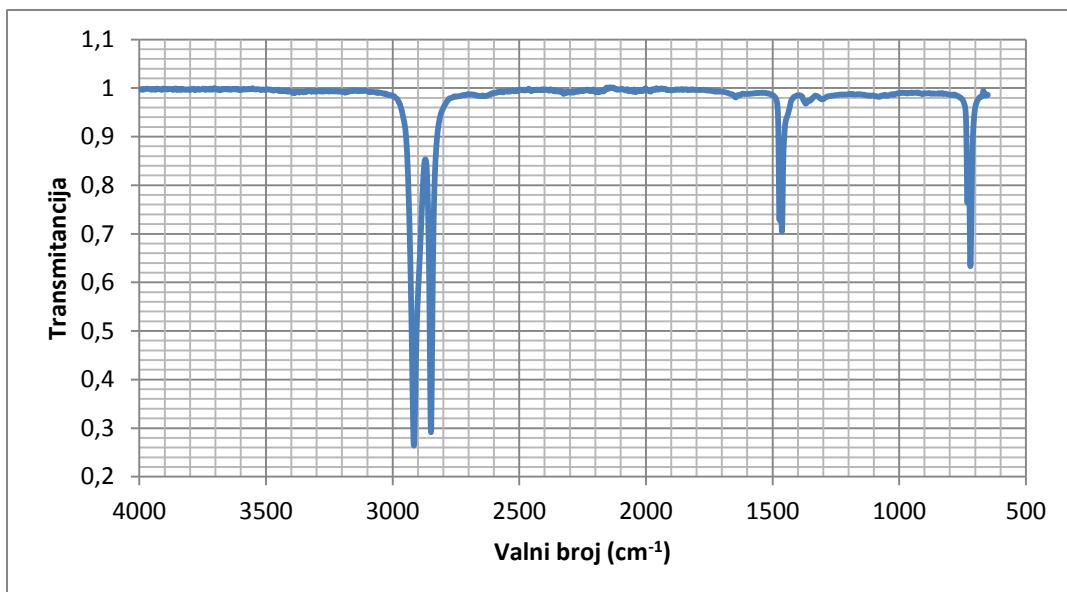


Slika 56. ATR-FTIR spektar PE folije debljine 25  $\mu\text{m}$ .

Tablica 21. Vrpce PE folije debljine 25  $\mu\text{m}$ .

| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 2916                            | 0,3138         |
| 2849                            | 0,3453         |
| 1463                            | 0,7225         |
| 719                             | 0,6668         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 56., tablica 21.) PE folije debljine 25  $\mu\text{m}$  ima izražene vrpce pri 2916  $\text{cm}^{-1}$ , 2849  $\text{cm}^{-1}$ , 1463  $\text{cm}^{-1}$  i 719  $\text{cm}^{-1}$ . Vrpce odgovaraju  $\text{CH}_3$  istežanju,  $\text{CH}_2$  istežanju,  $\text{CH}_2$  uvijanju i  $\text{CH}_2$  njihanju [23]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o PE.

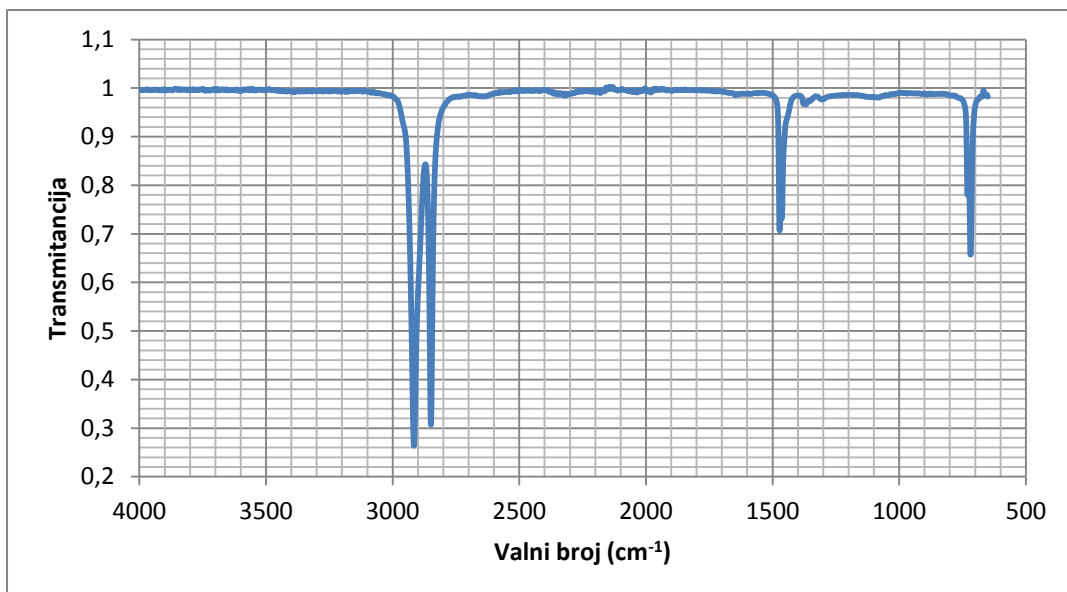


Slika 57. ATR-FTIR spektar PE folije debljine 40  $\mu\text{m}$ .

Tablica 22. Vrpce PE folije debljine 40  $\mu\text{m}$ .

| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 2916                            | 0,2640         |
| 2848                            | 0,2916         |
| 1463                            | 0,7048         |
| 719                             | 0,6335         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 57., tablica 22.) PE folije debljine 40  $\mu\text{m}$  ima izražene vrpce pri 2916  $\text{cm}^{-1}$ , 2848  $\text{cm}^{-1}$ , 1463  $\text{cm}^{-1}$  i 719  $\text{cm}^{-1}$ . Vrpce odgovaraju  $\text{CH}_3$  istezanju,  $\text{CH}_2$  istezanju,  $\text{CH}_2$  uvijanju i  $\text{CH}_2$  njihanju [23]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o PE.



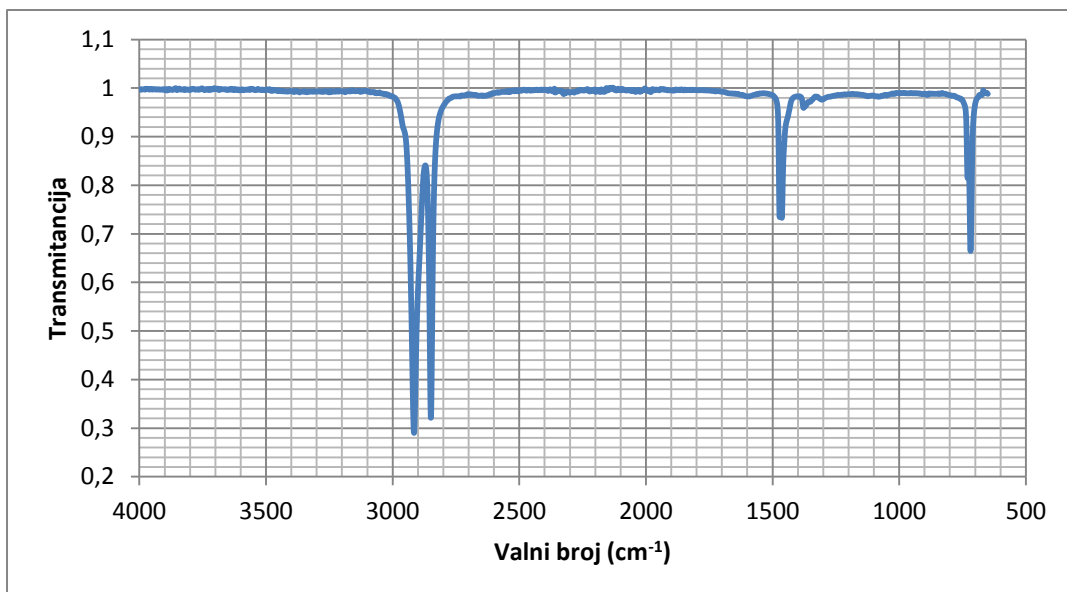
Slika 58. ATR-FTIR spektar PE folije debljine 50  $\mu\text{m}$ .

Tablica 23. Vrpce PE folije debljine 50  $\mu\text{m}$ .

| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 2916                            | 0,2636         |
| 2848                            | 0,3070         |
| 1472                            | 0,7069         |
| 718                             | 0,6571         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 58., tablica 23.) PE folije debljine 50  $\mu\text{m}$  ima izražene vrpce pri 2916  $\text{cm}^{-1}$ , 2848  $\text{cm}^{-1}$ , 1472  $\text{cm}^{-1}$  i 718  $\text{cm}^{-1}$ . Vrpce odgovaraju  $\text{CH}_3$  istežanju,  $\text{CH}_2$  istežanju,  $\text{CH}_2$  uvijanju i  $\text{CH}_2$  njihanju [23]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o PE.





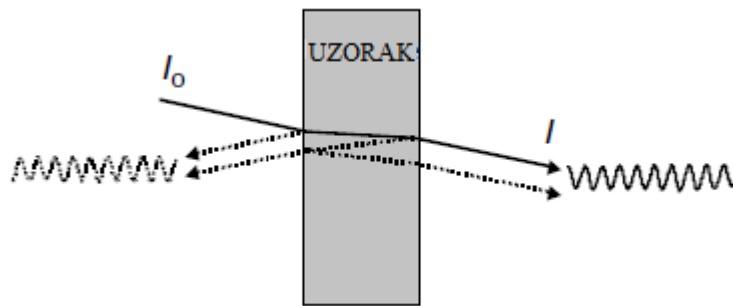
Slika 59. ATR-FTIR spektar PE folije debljine 70  $\mu\text{m}$ .

Tablica 24. Vrpce PE folije debljine 70  $\mu\text{m}$ .

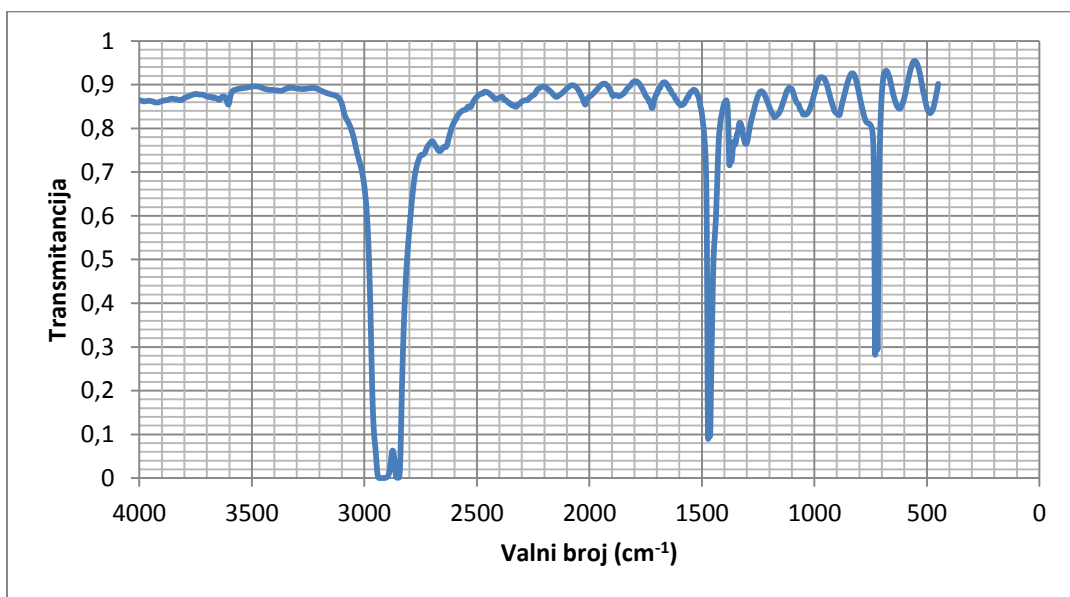
| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 2915                            | 0,2886         |
| 2849                            | 0,3202         |
| 1472                            | 0,7297         |
| 718                             | 0,6652         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 59., tablica 24.) PE folije debljine 70  $\mu\text{m}$  ima izražene vrpce pri 2915  $\text{cm}^{-1}$ , 2849  $\text{cm}^{-1}$ , 1472  $\text{cm}^{-1}$  i 718  $\text{cm}^{-1}$ . Vrpce odgovaraju  $\text{CH}_3$  istežanju,  $\text{CH}_2$  istežanju,  $\text{CH}_2$  uvijanju i  $\text{CH}_2$  njihanju [23]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama možemo zaključiti da se radi o PE.

A)



B)



Slika 60. A) Shema nastanka spektralne interferencije.

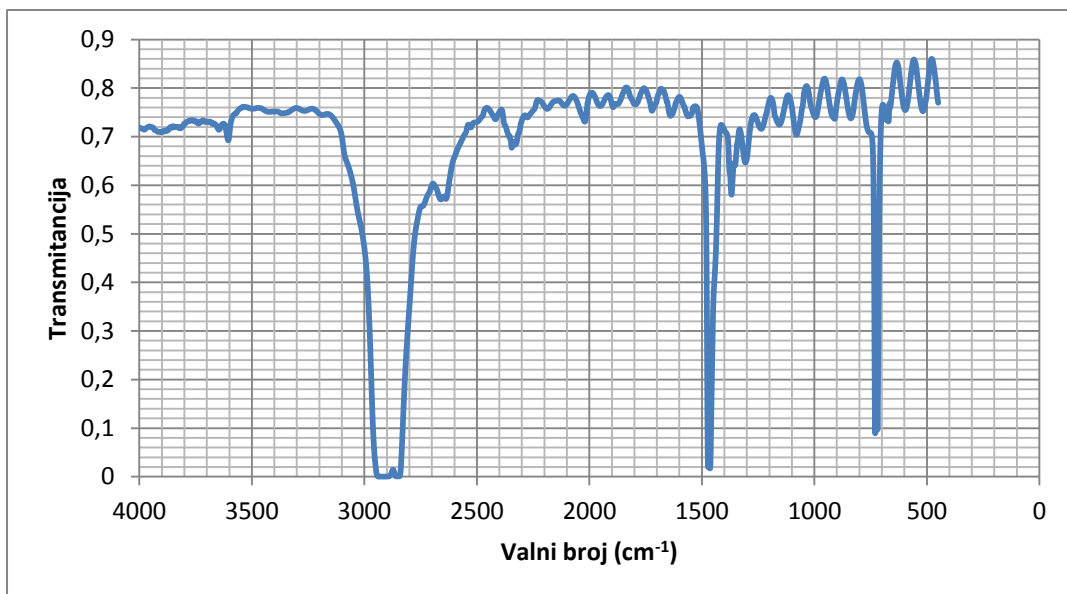
B) Spektar PE folija debljine 25 µm, transmisijska metoda.

Tablica 25. Vrpce PE folije debljine 25 µm, transmisijska metoda.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2929                           | 0,0000         |
| 2918                           | 0,0001         |
| 2849                           | 0,0007         |
| 1472                           | 0,0894         |
| 730                            | 0,2818         |

Transmisijski spektar PE folije debljine 25 µm (slika 60. B, tablica 25.) razlikuje se od spektara dobivenih ATR metodom. Apsorbirane vrpce su velikog inenziteta i širine pa se vrijednosti ne mogu precizno očitati. To se događa jer je uzorak predebeo.

Ako IR zračenje pada na takav predebeo uzorak, neke zrake će se reflektirati, te će pri određenoj valnoj duljini doći do konstruktivne ili destruktivne interferencije (slika 60. A) [24]. Na spektru se tada može primjetiti sinusoidalna promjena kao što se i vidi na spektru u području između  $2400\text{ cm}^{-1}$  i  $450\text{ cm}^{-1}$ . Usporedbom ovih spektara dobivenih transmisijskom metodom sa spektrom istog uzorka dobivenog ATR metodom (slika 56.) primjećuju se prednosti ATR metode. Budući da su uzorci deblji, bolji spektri se dobiju ATR metodom.

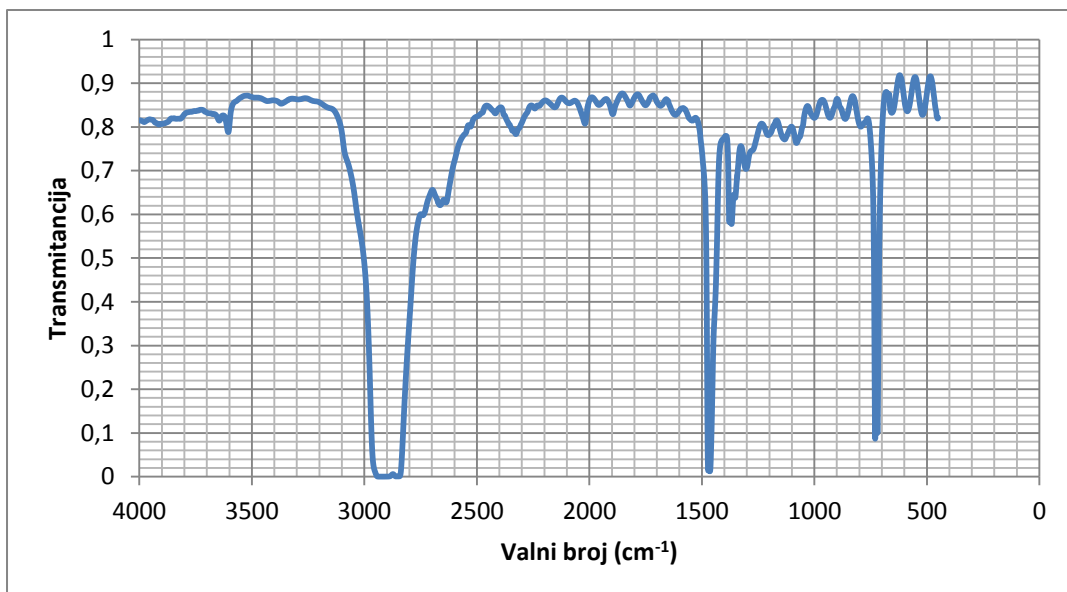


Slika 61. Spektar PE folije debljine 40 µm, transmisijska metoda.

Tablica 26. Spektar PE folije debljine 40 µm , transmisijska metoda.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2913                           | 0,0001         |
| 2857                           | 0,0005         |
| 2660                           | 0,5709         |
| 2637                           | 0,5717         |
| 1464                           | 0,0168         |
| 1368                           | 0,5807         |
| 730                            | 0,0892         |

Transmisijski spektar PE folije debljine 40 µm (slika 61., tablica 26.) razlikuje se od spektara dobivenih ATR metodom. Apsorbirane vrpce su velikog inenziteta i širine pa se vrijednosti ne mogu precizno očitati. To se događa jer je uzorak predebeo [24].

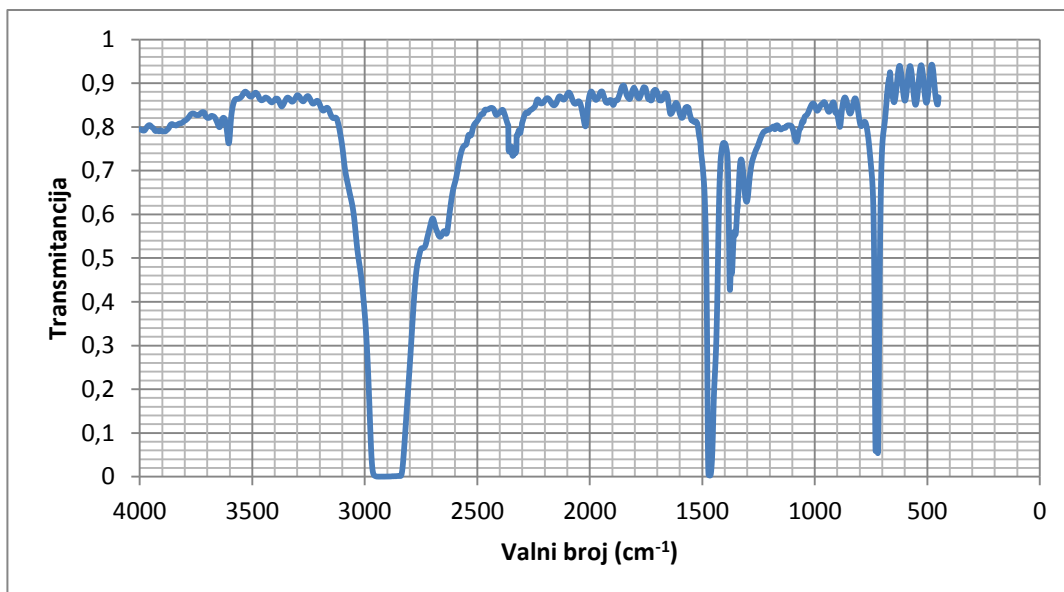


Slika 62. Spektar PE folije debljine 50 µm, transmisijaska.

Tablica 27. Spektar PE folije debljine 50 µm, transmisijaska metoda.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2929                           | 0,0000         |
| 2909                           | 0,0000         |
| 2858                           | 0,0004         |
| 1464                           | 0,0121         |
| 730                            | 0,0867         |

Transmisijски spektar PE folije debljine 50 µm (slika 62., tablica 27.) razlikuje se od spektara dobivenih ATR metodom. Apsorbirane vrpce su velikog inenziteta i širine pa se vrijednosti ne mogu precizno očitati. To se događa jer je uzorak predebeo [24].

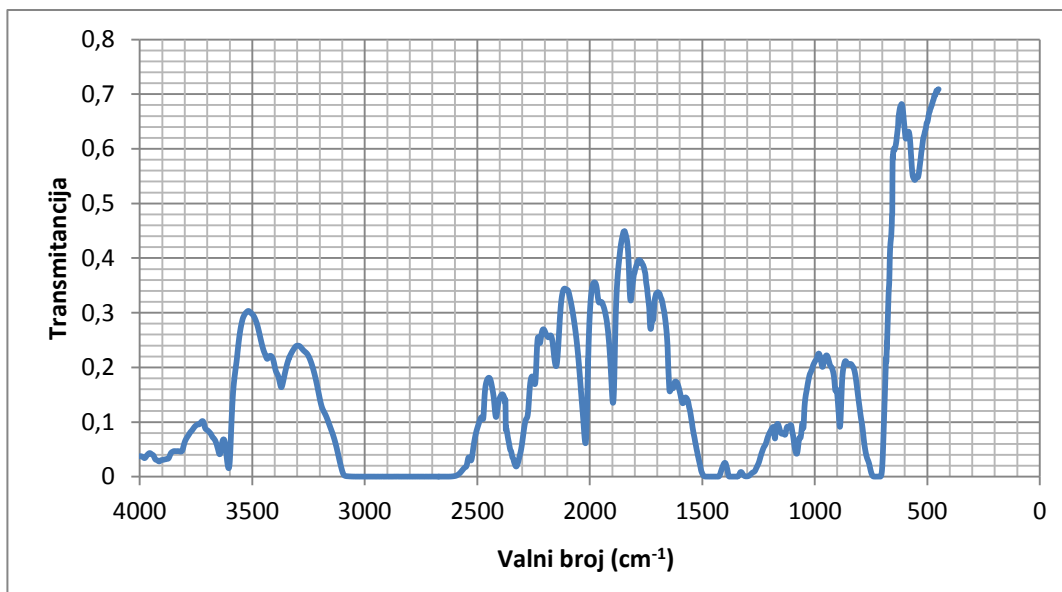


Slika 63. Spektar PE folija debljine 70  $\mu\text{m}$ , transmisijska metoda.

Tablica 28. Spektar PE folije debljine 70  $\mu\text{m}$ , transmisijska metoda.

| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 2933                            | 0,0000         |
| 2665                            | 0,5486         |
| 2638                            | 0,5556         |
| 1465                            | 0,0024         |
| 1377                            | 0,4269         |
| 720                             | 0,0536         |

Transmisijski spektar PE folije debljine 70  $\mu\text{m}$  (slika 63., tablica 28.) razlikuje se od spektara dobivenih ATR metodom. Apsorbirane vrpce su velikog inenziteta i širine pa se vrijednosti ne mogu precizno očitati. To se događa jer je uzorak predebeo [24].

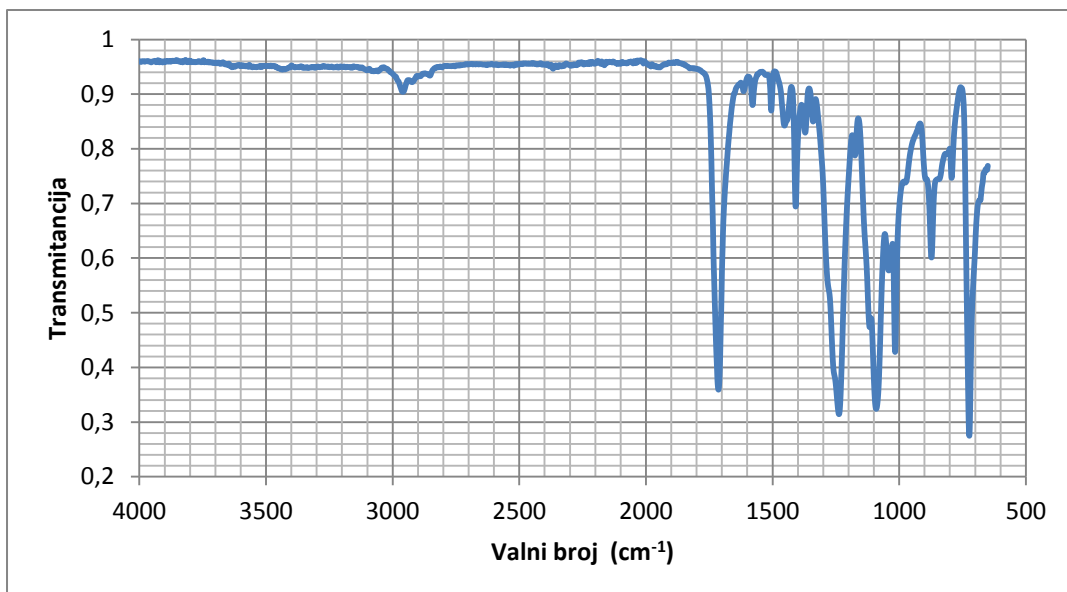


Slika 64. Spektar PE folije debljine 1000 µm, transmisijska metoda.

Tablica 29. Spektar PE folije debljine 1000 µm, transmisijska metoda.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 3644                           | 0,0409         |
| 3604                           | 0,0154         |
| 3040                           | 0,0000         |
| 2629                           | 0,0000         |
| 2327                           | 0,0185         |
| 2150                           | 0,2021         |
| 2019                           | 0,0610         |
| 1897                           | 0,1350         |
| 1818                           | 0,3223         |
| 1729                           | 0,2703         |
| 1644                           | 0,1560         |
| 1587                           | 0,1343         |
| 1475                           | 0,0000         |
| 1351                           | 0,0000         |
| 966                            | 0,2008         |
| 889                            | 0,0911         |
| 729                            | 0,0000         |

Transmisijski spektar PE folije debljine 1000 µm (slika 64., tablica 29.) razlikuje se od spektara dobivenih ATR metodom. Apsorbirane vrpce su velikog inenziteta i širine pa se vrijednosti ne mogu precizno očitati. To se događa jer je uzorak predebeo [24].



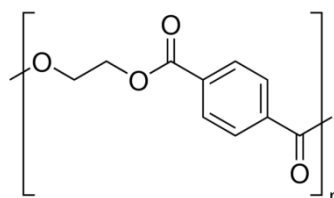
Slika 65. ATR–FTIR spektar krute ambalaže 2.

Tablica 30. Vrpce krute ambalaže 2.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2956                           | 0,9049         |
| 1713                           | 0,3592         |
| 1409                           | 0,6944         |
| 1238                           | 0,3143         |
| 1091                           | 0,3240         |
| 1016                           | 0,4281         |
| 723                            | 0,2747         |



Slika 66. Kruta ambalaža 2.

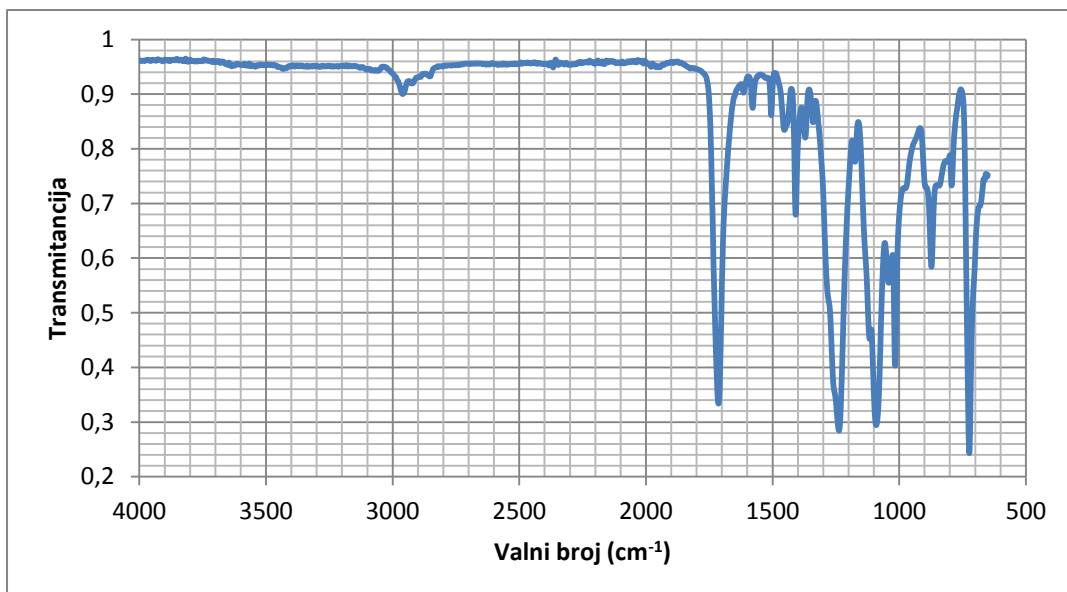


67. Ponavljajući dio strukture poli(etilen-tereftalata).

Karakteristične vrpce za poli(etilen-tereftalat) (PET) koje se mogu vidjeti nakon ATR-FTIR spektroskopije (slika 65. Tablica 30.) krute ambalaže 2 (slika 66.) nalaze se pri 2956 cm<sup>-1</sup> gdje je C-H istežanje na aromatskom prstenu, pri 1713 cm<sup>-1</sup> je C=O istežanje, pri 1409 cm<sup>-1</sup> je istežanje aromatskog prstena, pri 1238 cm<sup>-1</sup> je istežanje -COO, pri 1091 cm<sup>-1</sup> je C-H istežanje, pri 1016 cm<sup>-1</sup> i 723 cm<sup>-1</sup> nalaze se C-H istežanje i C=H uvijanje [25].

Poli(etilen-tereftalat) ili PET (slika 67.) je polimerni materijal koji se upotrebljava za izradu plastične ambalaže. Kao materijal PET je lagan, nelomljiv i otporan na mehanička oštećenja, stoga mu je primjena vrlo raširena.





Slika 68. ATR-FTIR spektar krute ambalaže 3.

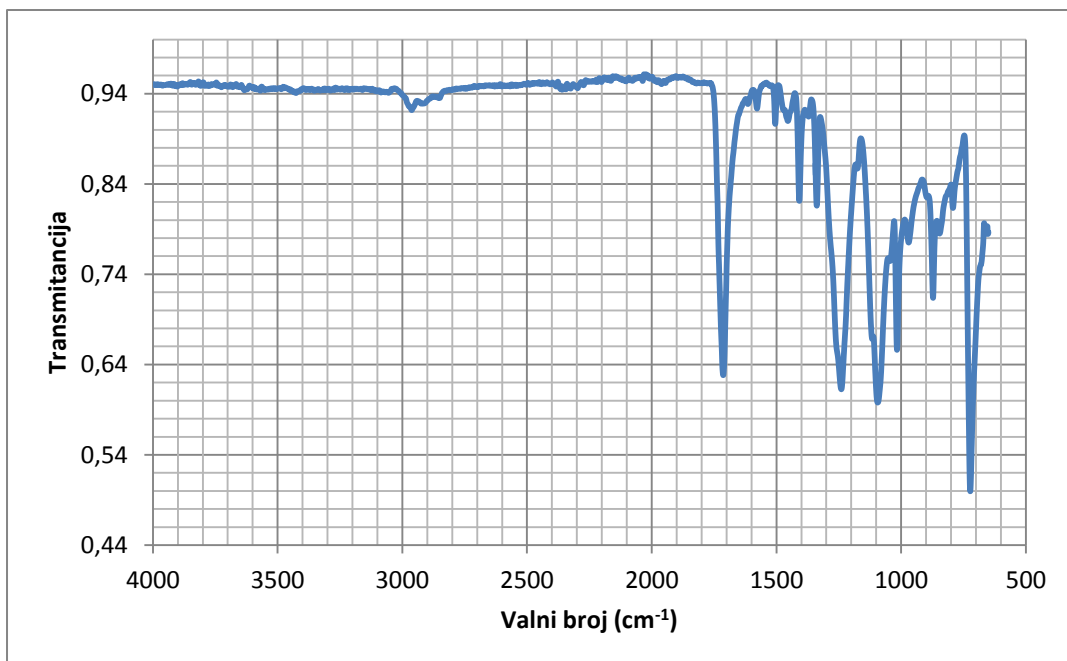
Tablica 31. Vrpce krute ambalaže 3.

| valna duljina (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|-----------------------------------|----------------|
| 2956                              | 0,9049         |
| 1713                              | 0,3336         |
| 1409                              | 0,6499         |
| 1238                              | 0,2842         |
| 1091                              | 0,2942         |
| 1016                              | 0,4032         |
| 723                               | 0,2429         |



Slika 69. Kruta ambalaža 3.

Karakteristične vrpce za PET koje se mogu vidjeti nakon ATR-FTIR spektroskopije (slika 68. Tablica 31.) krute ambalaže 3 (slika 69.) nalaze se pri 2956 cm<sup>-1</sup> gdje je C-H istežanje na aromatskom prstenu, pri 1713 cm<sup>-1</sup> C=O istežanje, pri 1409 cm<sup>-1</sup> je istežanje aromatskog prstena, pri 1238 cm<sup>-1</sup> je istežanje -COO, pri 1091 cm<sup>-1</sup> je C-H istežanje, pri 1016 cm<sup>-1</sup> i 723 cm<sup>-1</sup> nalaze se C-H istežanje i C=H uvijanje [25].



Slika 70. ATR-FTIR spektar PET boce.

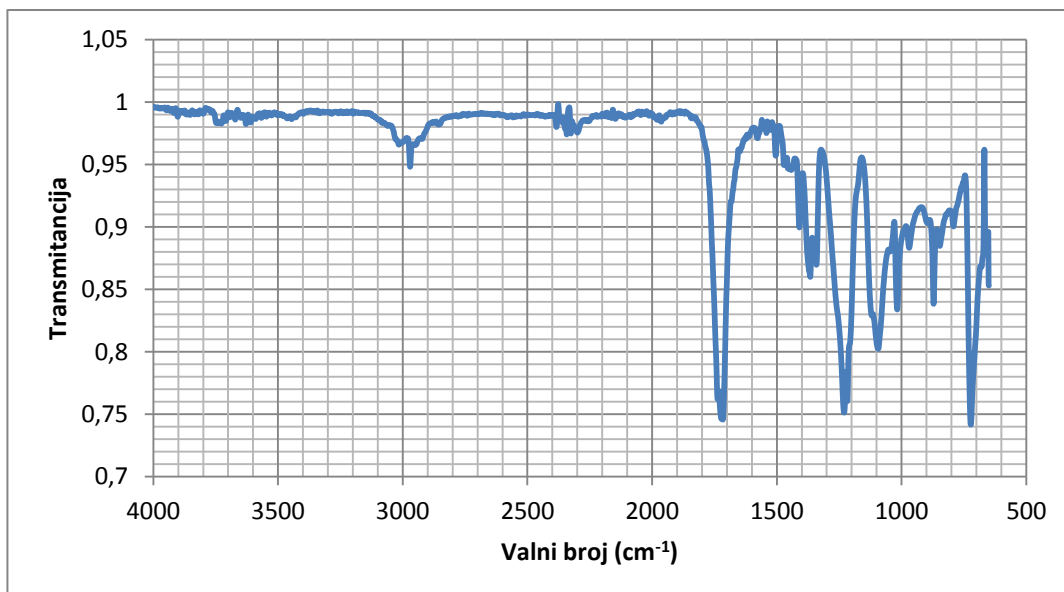
Tablica 32. Vrpce PET boce.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2963                           | 0,9219         |
| 1714                           | 0,6282         |
| 1408                           | 0,8213         |
| 1338                           | 0,8160         |
| 1240                           | 0,6125         |
| 1094                           | 0,5979         |
| 1017                           | 0,6562         |
| 723                            | 0,4995         |



Slika 71. PET boca.

Karakteristične vrpce za PET koje se mogu vidjeti nakon ATR-FTIR spektroskopije (slika 70. Tablica 32.) PET boce (slika 71.) nalaze se pri 2963 cm<sup>-1</sup> gdje je CH<sub>2</sub> istežanje na aromatskom prstenu, pri 1714 cm<sup>-1</sup> C=O istežanje, pri 1408 cm<sup>-1</sup> je istežanje aromatskog prstena, pri 1338 cm<sup>-1</sup> i 1240 cm<sup>-1</sup> je istežanje -COO, pri 1017 cm<sup>-1</sup> je C-H istežanje, pri 723 cm<sup>-1</sup> nalazi se C-H uvijanje [25].

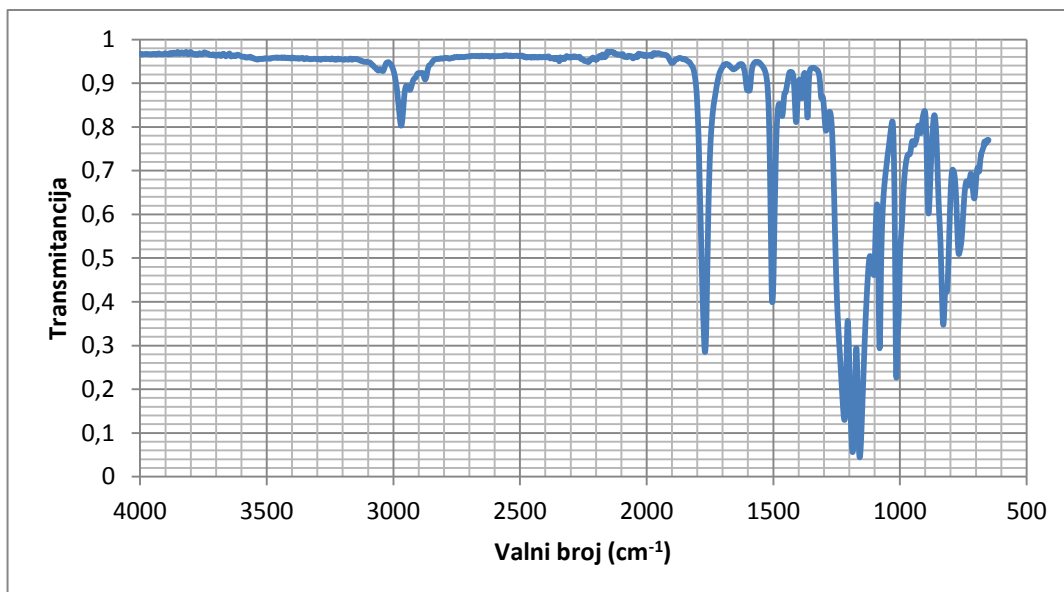


Slika 72. ATR-FTIR spektar PET folije.

Tablica 33. Vrpce PET folije.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2971                           | 0,9481         |
| 1717                           | 0,7458         |
| 1366                           | 0,8600         |
| 1342                           | 0,8698         |
| 1231                           | 0,7514         |
| 1094                           | 0,8024         |
| 872                            | 0,8385         |
| 722                            | 0,7418         |

Karakteristične vrpce za PET koje se mogu vidjeti nakon ATR-FTIR spektroskopije (slika 72. Tablica 33.) PET folije nalaze se pri 2971 cm<sup>-1</sup> gdje je CH<sub>2</sub> istežanje na aromatskom prstenu, pri 1717 cm<sup>-1</sup> C=O istežanje, 1342 cm<sup>-1</sup> je CH<sub>2</sub> uvijanje, 1231 cm<sup>-1</sup> je –COO istežanje, pri 722 cm<sup>-1</sup> nalazi se C=H uvijanje [25].



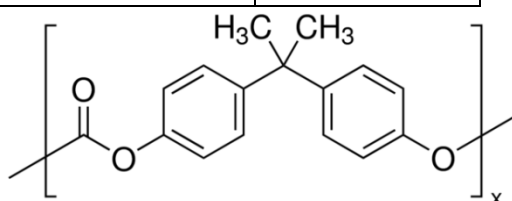
Slika 73. ATR-FTIR spektar CD verbatima.

Tablica 34. Vrpce CD verbatima.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2969                           | 0,8028         |
| 1769                           | 0,2852         |
| 1504                           | 0,3989         |
| 1219                           | 0,1296         |
| 1187                           | 0,0561         |
| 1159                           | 0,0445         |
| 1080                           | 0,2936         |



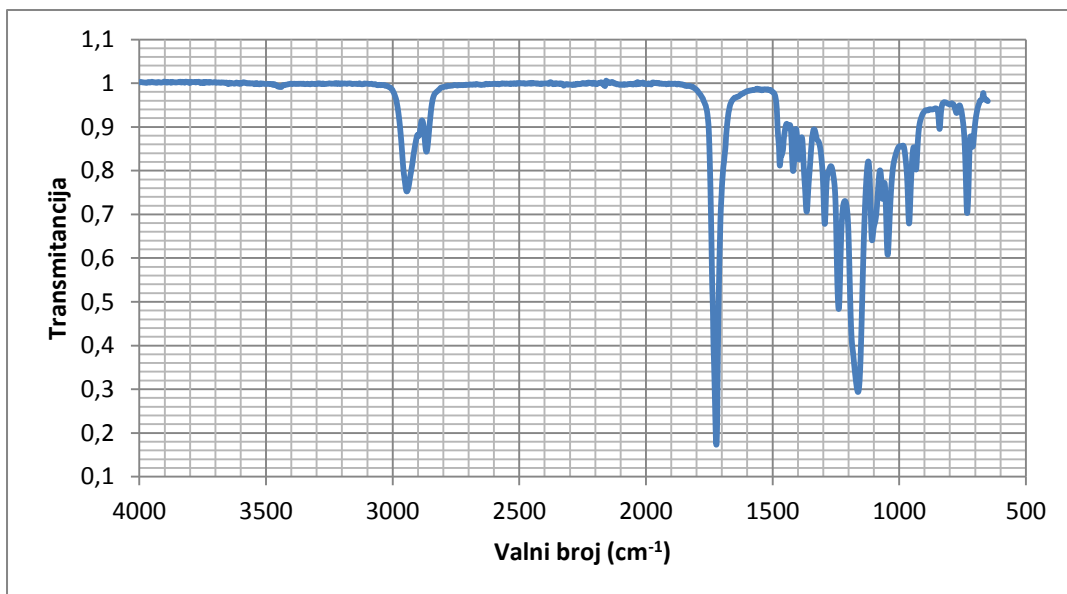
Slika 74. CD verbatim.



Slika 75. Ponavljajući dio strukture polikarbonata dobivenog polimerizacijom bisfenola A.

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 73., tablica 34.) CD verbatima (slika 74.) ima izražene vrpce pri: 2969 cm<sup>-1</sup> koja odgovara C-H deformaciji, pri 1769 cm<sup>-1</sup> je deformacija C=O, pri 1504 cm<sup>-1</sup> je C=C vibracija, između 1219 cm<sup>-1</sup> i 1159 cm<sup>-1</sup> je asimetrična deformacija O-C-O, pri 1080 cm<sup>-1</sup> je CH<sub>3</sub> vibracija [26]. Usporedbom s već dobivenim spektrima i tablicama može se zaključiti da se radi o polikarbonatu (PC) dobivenom polimerizacijom bisfenola A.

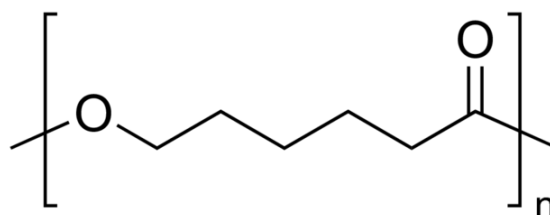
Na slici 75. je ponavljajući dio strukture polikarbonata dobivenog polimerizacijom bisfenola A.



Slika 76. ATR-FTIR spektar polikaprolaktona (PCL).

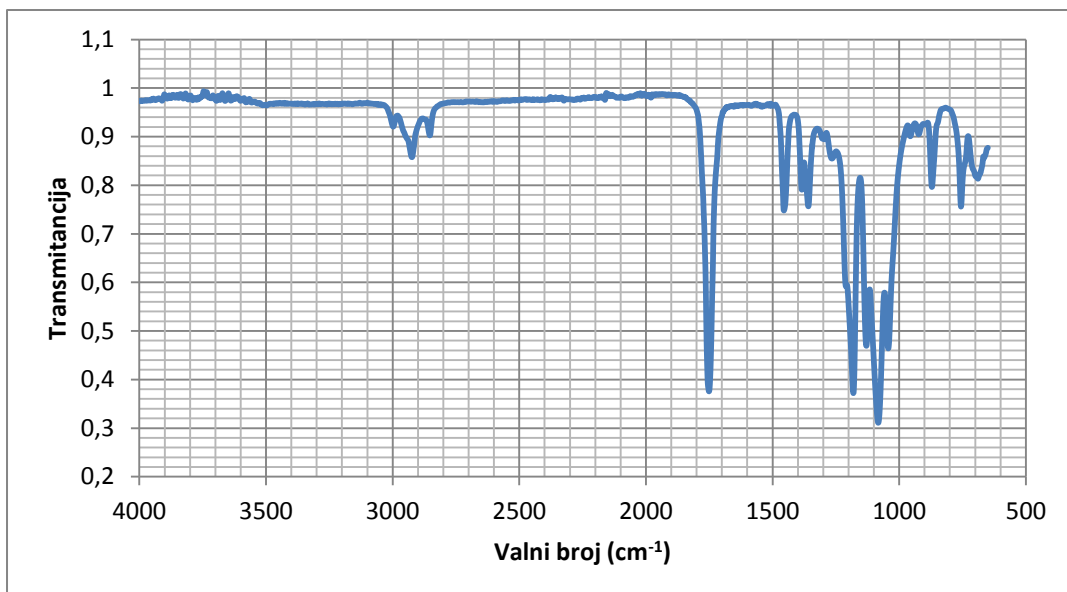
Tablica 35. Vrpce PCL.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2944                           | 0,7526         |
| 2866                           | 0,8435         |
| 1722                           | 0,1734         |
| 1471                           | 0,8116         |
| 1419                           | 0,7994         |
| 1365                           | 0,7063         |
| 1294                           | 0,6783         |
| 1239                           | 0,4838         |
| 1163                           | 0,2941         |
| 1107                           | 0,6407         |
| 1045                           | 0,6078         |
| 961                            | 0,6792         |
| 710                            | 0,8548         |



Slika 77. Ponavljajući dio strukture PCL.

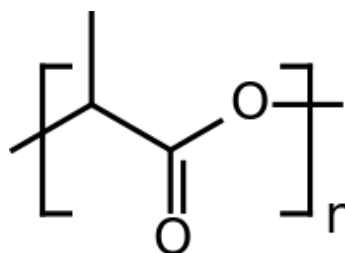
ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 76., tablica 53.) ima izražene vrpce na: 2944 cm<sup>-1</sup> gdje se nalazi asimetrično istezanje CH<sub>2</sub>, 2866 cm<sup>-1</sup> je simetrično istezanje CH<sub>2</sub>, na 1722 cm<sup>-1</sup> nalazi se istezanje u C=O, pri 1294 cm<sup>-1</sup> je C-O i C-C istezanje u kristaliničnoj fazi, pri 1239 cm<sup>-1</sup> je asimetrično C-O-C istezanje, a pri 1163 cm<sup>-1</sup> je C-O i C-C istezanje u amorfnoj fazi [27]. Usporedbom s već dobivenim spektrima može se zaključiti da se radi o polikaprolaktonu. Polikaprolakton (PCL) (slika 77.) je polukristalinični poliester. Poznat je po svojoj biodegradibilnosti.



Slika 78. ATR-FTIR spektar polimljične kiseline (PLA).

Tablica 36. Vrpce PLA tehnički.

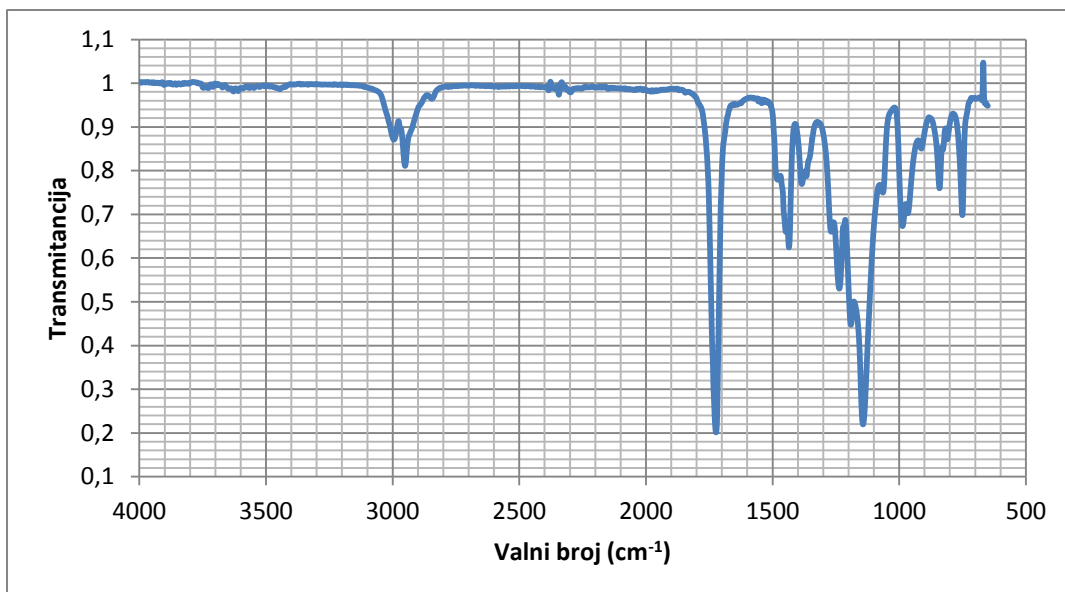
| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2997                           | 0,9209         |
| 2924                           | 0,8580         |
| 2853                           | 0,9028         |
| 1751                           | 0,3757         |
| 1455                           | 0,7481         |
| 1359                           | 0,7566         |
| 1181                           | 0,3721         |
| 1130                           | 0,4697         |
| 1083                           | 0,3111         |
| 1043                           | 0,4641         |
| 871                            | 0,7966         |
| 756                            | 0,7562         |
| 689                            | 0,8136         |



Slika 79. Ponavljajući dio strukture polimljične kiseline.

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 78., tablica 36.) ima izražene vrpce na: 2997 cm<sup>-1</sup>, 2924 cm<sup>-1</sup>, koje odgovaraju CH<sub>3</sub> asimetričnom istežanju i CH<sub>3</sub> simetričnom istežanju [29], 2853 cm<sup>-1</sup> gdje se nalazi C-H istežanje, pri 1751 cm<sup>-1</sup> je C=O istežanje, na 1455 cm<sup>-1</sup> je CH<sub>3</sub> istežanje, pri 1359 cm<sup>-1</sup> je C-H asimetrična deformacija, pri 1181 cm<sup>-1</sup> je C-O-C asimetrično istežanje, na 1130 cm<sup>-1</sup> je CH<sub>3</sub> istežanje, pri 1083 cm<sup>-1</sup> je C-O-C simetrično istežanje, pri 1043 cm<sup>-1</sup> je C-CH<sub>3</sub> istežanje [29]. Usporedbom s već dobivenim spektrima može se zaključiti da se radi o polimljičnoj kiselinu. Zove se još i polilaktid.

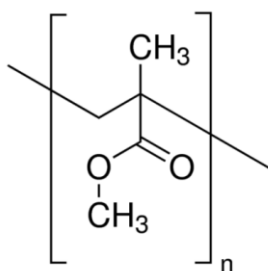
Polimljična kiselina (PLA) (slika 79.), je biorazgradivi polimer dobiven iz obnovljivih izvora kao što je kukuruzni škrob.



Slika 80. ATR-FTIR spektar pleksiglasa.

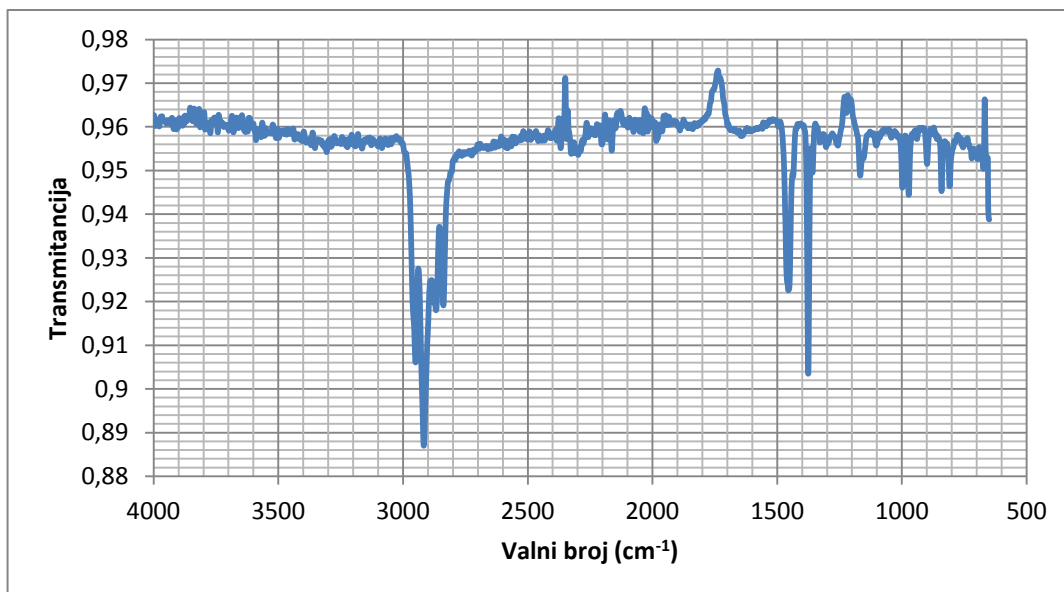
Tablica 37. Vrpce pleksiglasa.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2951                           | 0,8111         |
| 1723                           | 0,2014         |
| 1480                           | 0,7792         |
| 1191                           | 0,4476         |
| 1143                           | 0,2197         |
| 1064                           | 0,7498         |
| 987                            | 0,6731         |
| 966                            | 0,7025         |



Slika 81. Ponavljajući dio strukture poli(metil-metakrilata).

U ovom primjeru dobiven je spektar (slika 80., tablica 37.) pleksiglasa ili poli(metil-metakrilata) (PMMA) (slika 81.). ATR-FTIR metodom dobiven spektar ima izražene vrpce na: 2951 cm<sup>-1</sup> gdje je C-H istežanje, pri 1723 cm<sup>-1</sup> je C=O istežanje, pri 1480 cm<sup>-1</sup> je CH<sub>3</sub> istežanje, pri 1191 cm<sup>-1</sup> je -OCH<sub>3</sub> istežanje, pri 1064 cm<sup>-1</sup> je C-O-C istežanje, pri 966 cm<sup>-1</sup> je C-O-C deformacija [30].



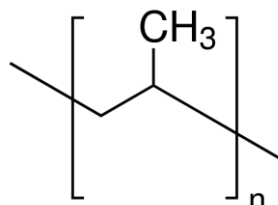
Slika 82. ATR-FTIR spektar božićne vrećice.



Tablica 38. Vrpce za božićnu vrećicu.

| valni broj $\text{cm}^{-1}$ | transmitancija |
|-----------------------------|----------------|
| 2950                        | 0,9061         |
| 2917                        | 0,8870         |
| 2868                        | 0,9180         |
| 2838                        | 0,9191         |
| 1455                        | 0,9226         |
| 1376                        | 0,9035         |
| 998                         | 0,9461         |
| 973                         | 0,9444         |

Slika 83. Božićna vrećica.

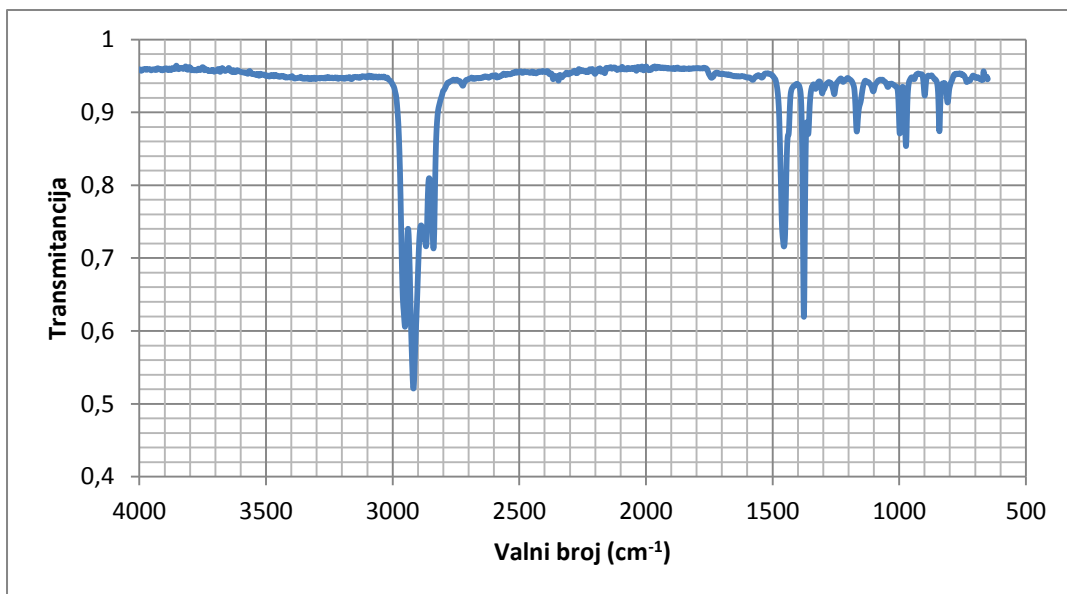


Slika 84. Ponavljajući dio strukture polipropilena.

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 82. Tablica 38.) za uzorak božićna vrećica (slika 83.), apsorbira vrpce pri  $2950 \text{ cm}^{-1}$  i  $2917 \text{ cm}^{-1}$  što odgovara  $\text{CH}_3$  asimetričnom istežanju i  $\text{CH}_3$  simetričnom istežanju, pri  $2868 \text{ cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  asimetrično istežanje, pri  $2838 \text{ cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  simetrično istežanje, na  $1455 \text{ cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  asimetrično uvijanje, dok je na  $1376 \text{ cm}^{-1}$   $\text{CH}_3$  simetrično uvijanje [31].

Usporedbom ovog spektra s već poznatim spektrima može se zaključiti da je riječ o polipropilenu (PP). Na slici 84. nalazi se ponavljajući dio strukture polipropilena.



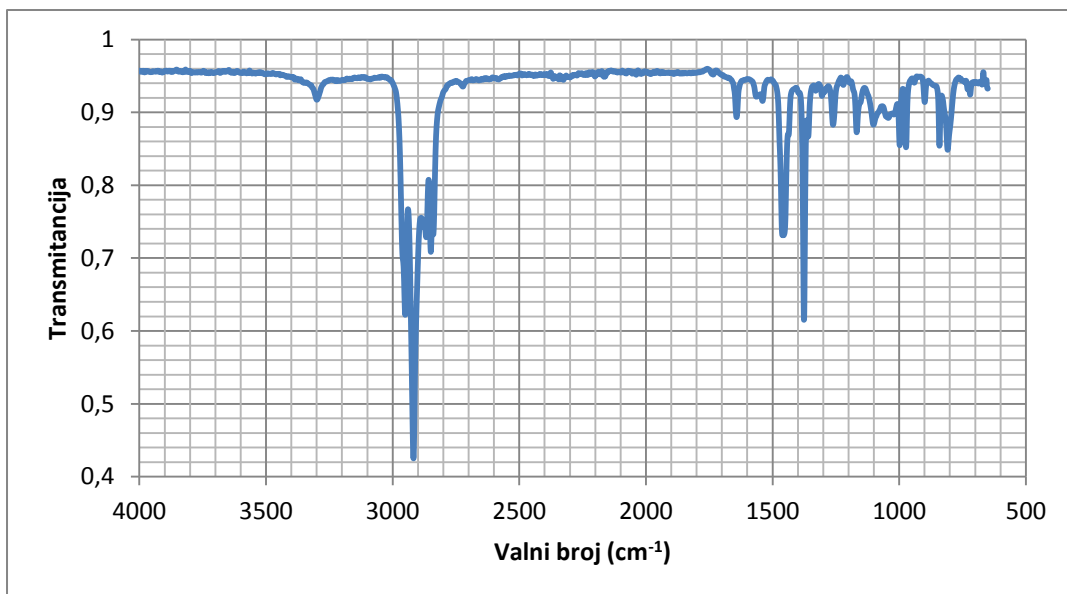


Slika 85. ATR–FTIR spektar mekane CD kutije.

Tablica 39. Vrpce mekane CD kutije.

| valna duljina( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|-----------------------------------|----------------|
| 2951                              | 0,6058         |
| 2917                              | 0,5212         |
| 2868                              | 0,7162         |
| 2838                              | 0,7133         |
| 1455                              | 0,7160         |
| 1376                              | 0,6194         |
| 1167                              | 0,8737         |
| 998                               | 0,8710         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 85. Tablica 39.) za uzorak mekana CD kutija, apsorbira vrpce pri  $2951 \text{ cm}^{-1}$  i  $2917 \text{ cm}^{-1}$  što odgovara  $\text{CH}_3$  asimetričnom istežanju i  $\text{CH}_3$  simetričnom istežanju, pri  $2868 \text{ cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  asimetrično istežanje, pri  $2838 \text{ cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  simetrično istežanje, na  $1455 \text{ cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  asimetrično uvijanje, dok je na  $1376 \text{ cm}^{-1}$   $\text{CH}_3$  simetrično uvijanje [31]. Usporedbom ovog spektra s već poznatim spektrima može se zaključiti da je riječ o polipropilenu (PP).



Slika 86. ATR–FTIR spektar kutije od jagoda.

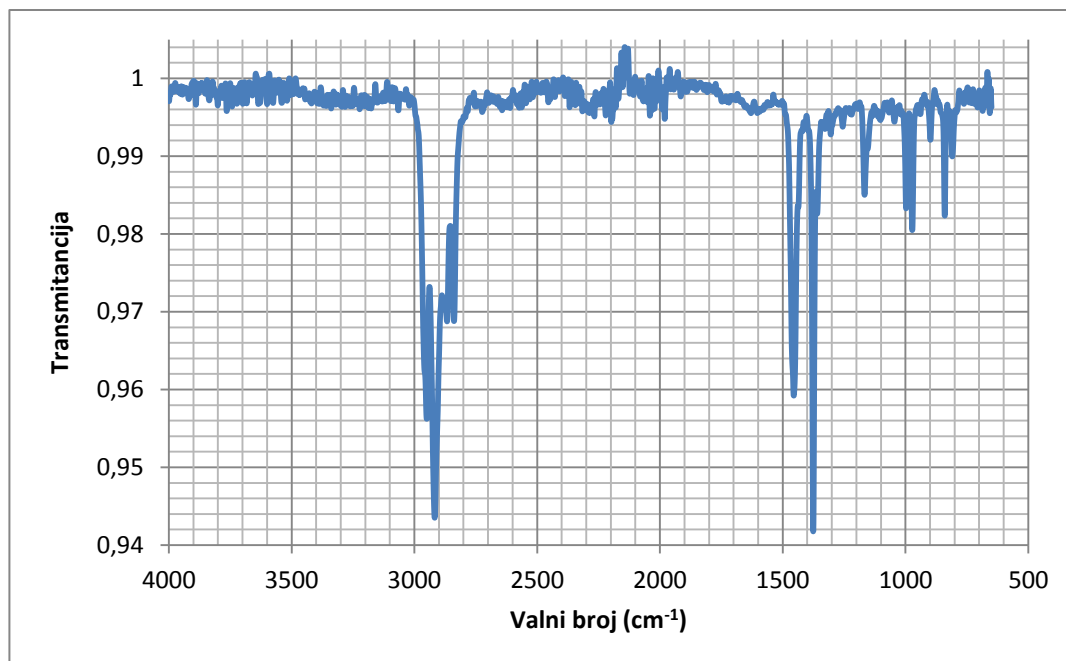
Tablica 40. Vrpce za kutiju od jagoda.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2950                           | 0,6222         |
| 2917                           | 0,4253         |
| 2867                           | 0,7286         |
| 2849                           | 0,7085         |
| 1456                           | 0,7314         |
| 1376                           | 0,6153         |
| 1261                           | 0,8829         |
| 998                            | 0,8548         |
| 973                            | 0,8520         |
| 899                            | 0,9140         |



Slika 87. Kutija od jagoda.

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 86. Tablica 40.) za uzorak kutija od jagoda (slika 87.), apsorbira vrpce pri 2950 cm<sup>-1</sup> i 2917 cm<sup>-1</sup> što odgovara CH<sub>3</sub> asimetričnom istezanju i CH<sub>3</sub> simetričnom istezanju, pri 2867 cm<sup>-1</sup> je CH<sub>2</sub> asimetrično istezanje, pri 2849 cm<sup>-1</sup> je CH<sub>2</sub> simetrično istezanje, na 1456 cm<sup>-1</sup> je CH<sub>2</sub> asimetrično uvijanje, dok je na 1376 cm<sup>-1</sup> CH<sub>3</sub> simetrično uvijanje [31].

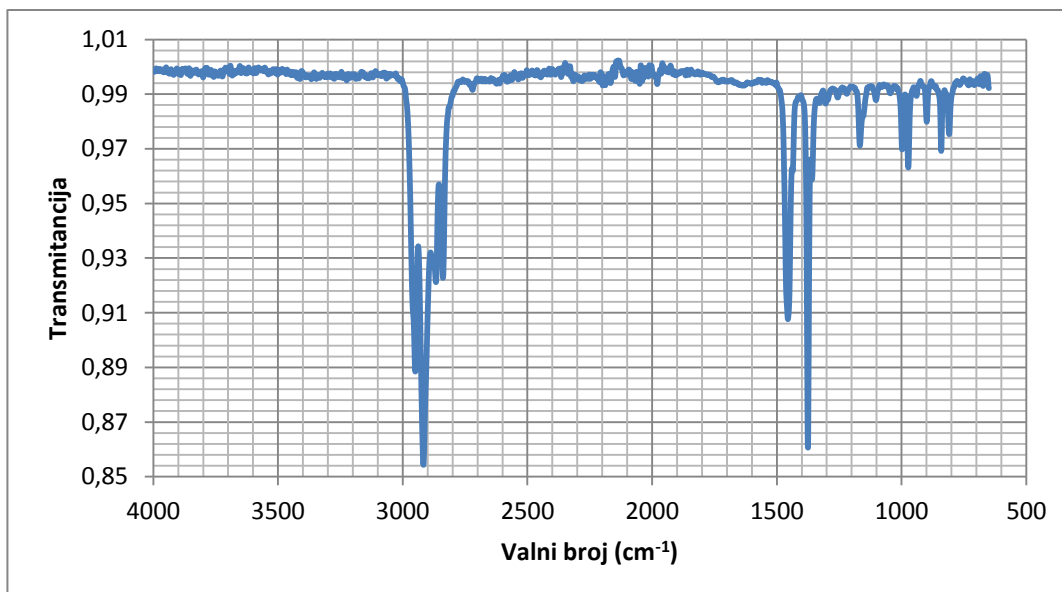


Slika 88. ATR-FTIR spektar PP folije debljine 20  $\mu\text{m}$ .

Tablica 41. Vrpce PP folije debljine 20  $\mu\text{m}$ .

| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 2950                            | 0,9562         |
| 2918                            | 0,9435         |
| 2867                            | 0,9687         |
| 2839                            | 0,9688         |
| 1455                            | 0,9592         |
| 1376                            | 0,9418         |
| 1167                            | 0,9850         |
| 973                             | 0,9805         |
| 899                             | 0,9921         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 88. Tablica 41.) za uzorak PP folija debljine 20  $\mu\text{m}$ , apsorbira vrpce pri 2950  $\text{cm}^{-1}$  i 2918  $\text{cm}^{-1}$  što odgovara  $\text{CH}_3$  asimetričnom istezanju i  $\text{CH}_3$  simetričnom istezanju, pri 2867  $\text{cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  asimetrično istezanje, pri 2839  $\text{cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  simetrično istezanje, na 1455  $\text{cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  asimetrično uvijanje, dok je na 1376  $\text{cm}^{-1}$   $\text{CH}_3$  simetrično uvijanje [31].

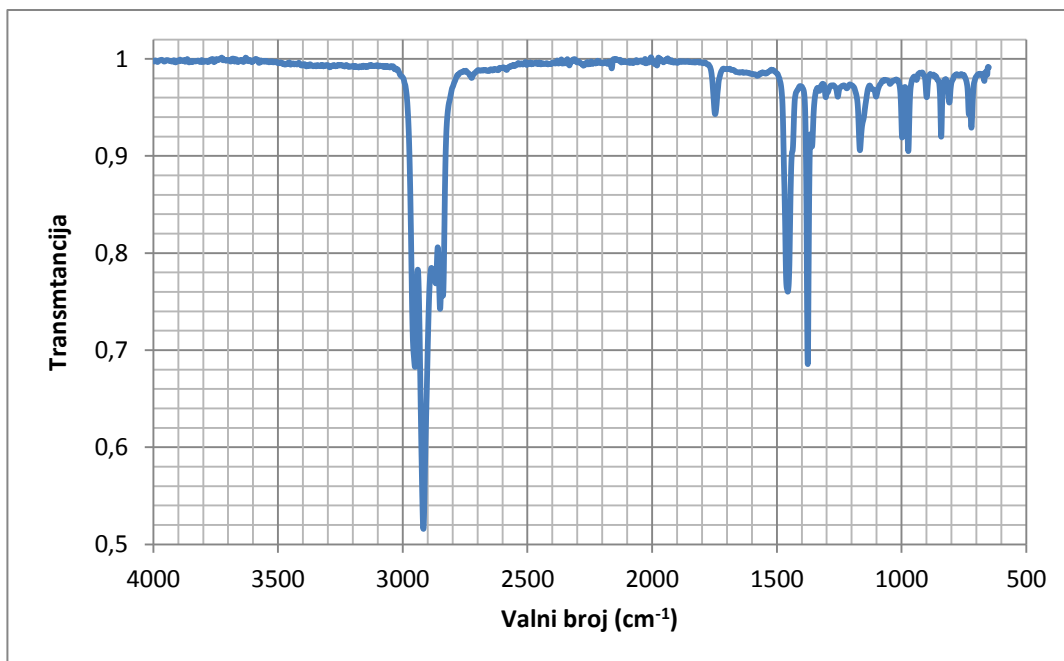


Slika 89. ATR-FTIR spektar PP folije debljine 30  $\mu\text{m}$ .

Tablica 42. Vrpce PP folije debljine 30  $\mu\text{m}$ .

| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 2950                            | 0,8884         |
| 2917                            | 0,8543         |
| 2867                            | 0,9211         |
| 2839                            | 0,9227         |
| 1456                            | 0,9076         |
| 1375                            | 0,8606         |
| 1167                            | 0,9711         |
| 973                             | 0,9631         |
| 841                             | 0,9692         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 89. Tablica 42.) za uzorak PP folija debljine 30  $\mu\text{m}$ , apsorbira vrpce pri 2950  $\text{cm}^{-1}$  i 2917  $\text{cm}^{-1}$  što odgovara  $\text{CH}_3$  asimetričnom istezanju i  $\text{CH}_3$  simetričnom istezanju, pri 2867  $\text{cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  asimetrično istezanje, pri 2839  $\text{cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  simetrično istezanje, na 1456  $\text{cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  asimetrično uvijanje, dok je na 1375  $\text{cm}^{-1}$   $\text{CH}_3$  simetrično uvijanje [31].

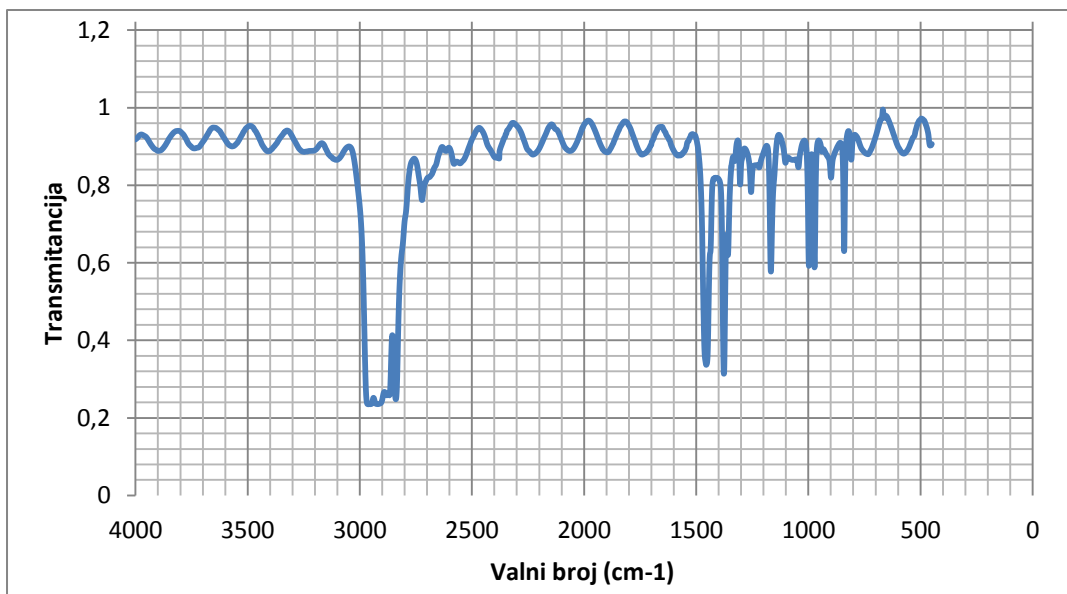


Slika 90. ATR-FTIR spektar PP folije debljine 500  $\mu\text{m}$ .

Tablica 43. Vrpce PP folije debljine 500  $\mu\text{m}$ .

| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 2951                            | 0,6827         |
| 2917                            | 0,5159         |
| 2868                            | 0,7688         |
| 2850                            | 0,7425         |
| 1748                            | 0,9432         |
| 1456                            | 0,7602         |
| 1376                            | 0,6856         |
| 1167                            | 0,9059         |
| 973                             | 0,9050         |
| 841                             | 0,9199         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 90. Tablica 43.) za uzorak PP folija debljine 500  $\mu\text{m}$ , apsorbira vrpce pri 2951  $\text{cm}^{-1}$  i 2917  $\text{cm}^{-1}$  što odgovara  $\text{CH}_3$  asimetričnom istezanju i  $\text{CH}_3$  simetričnom istezanju, pri 2868  $\text{cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  asimetrično istezanje, pri 2850  $\text{cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  simetrično istezanje, na 1456  $\text{cm}^{-1}$  je  $\text{CH}_2$  asimetrično uvijanje, dok je na 1376  $\text{cm}^{-1}$   $\text{CH}_3$  simetrično uvijanje [31].



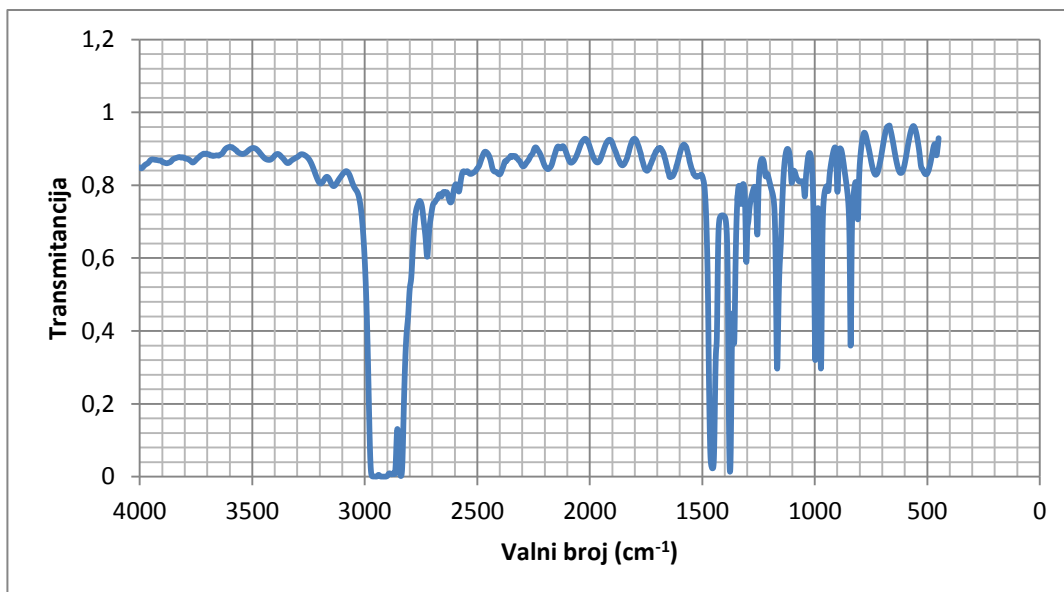
Slika 91. Transmisijski spektar PP folije debljine 20 µm.

Tablica 44. Vrpce PP folije debljine 20 µm.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2950                           | 0,9562         |
| 2918                           | 0,9435         |
| 2867                           | 0,9687         |
| 2839                           | 0,9688         |
| 1455                           | 0,9592         |
| 1376                           | 0,9418         |
| 1167                           | 0,9850         |
| 998                            | 0,9833         |
| 973                            | 0,9805         |
| 899                            | 0,9921         |
| 840                            | 0,9823         |

Transmisijski spektar PP folije debljine 20 µm (slika 91., tablica 44.) razlikuje se od spektara dobivenih ATR metodom. Neke apsorbirane vrpce su velikog inenziteta i širine pa se vrijednosti ne mogu precizno očitati. To se događa jer je uzorak predebeo.

Kada je IR svjetlost propuštena kroz uzorak dolazi do refleksije jednog dijela zraka koje mogu interferirati s drugim, upadnim zrakama, te se na spektru pojavljuje sinusoidalna promjena [32]. Na spektru se to može uočiti na području između 2500 cm<sup>-1</sup> i 1400 cm<sup>-1</sup>.

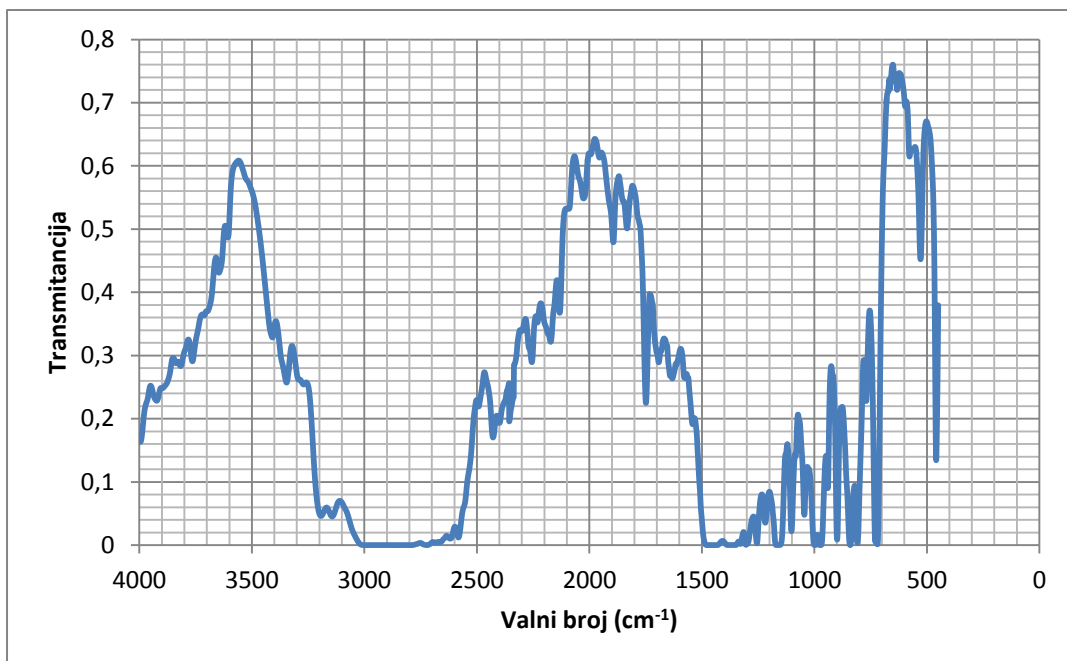


Slika 92. Transmisijski spektar PP folije debljine 30  $\mu\text{m}$ .

Tablica 45. Vrpce PP folije debljine 30  $\mu\text{m}$ .

| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 2949                            | 0,0002         |
| 2914                            | 0,0001         |
| 2880                            | 0,0065         |
| 2839                            | 0,0017         |
| 2722                            | 0,6040         |
| 1455                            | 0,0229         |
| 1377                            | 0,0135         |
| 1304                            | 0,5894         |
| 1167                            | 0,2966         |
| 998                             | 0,3201         |
| 973                             | 0,2968         |
| 841                             | 0,3598         |

Transmisijski spektar PP folije debljine 30  $\mu\text{m}$  (slika 92., tablica 45.) razlikuje se od spektara dobivenih ATR metodom. Neke apsorbirane vrpce su velikog inenziteta i širine pa se vrijednosti ne mogu precizno očitati. To se događa jer je uzorak predebeo [32].



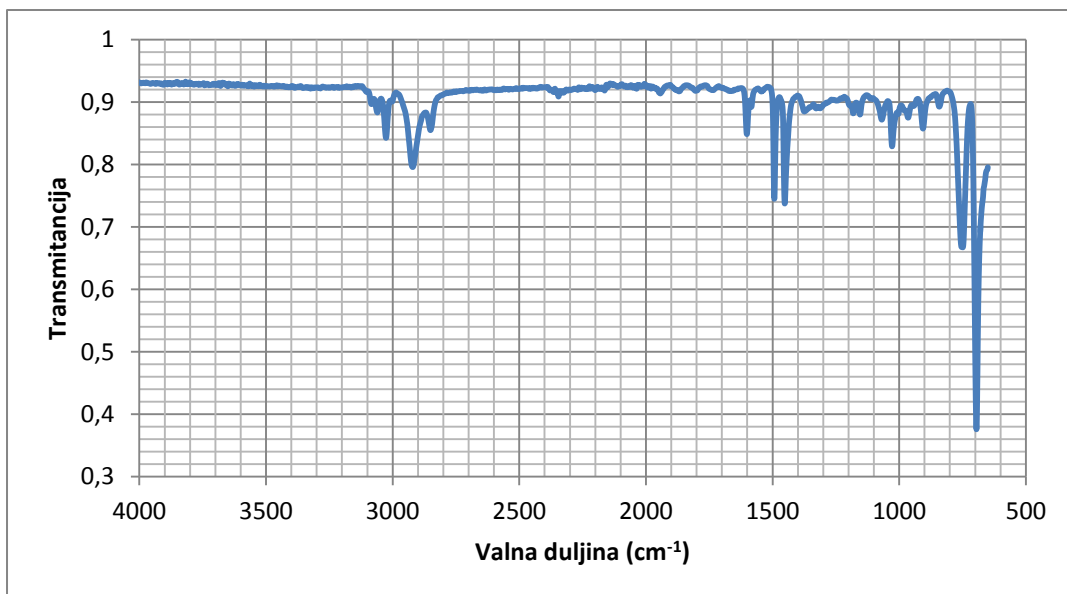
Slika 93. Transmisijski spektar PP folije debljine 500  $\mu\text{m}$ .

Tablica 46. Vrpce za PP folije debljine 500  $\mu\text{m}$ .

| valni broj ( $\text{cm}^{-1}$ ) | transmitancija |
|---------------------------------|----------------|
| 3836                            | 0,2876         |
| 3345                            | 0,2571         |
| 2987                            | 0,0000         |
| 2795                            | 0,0000         |
| 2428                            | 0,1702         |
| 1833                            | 0,5010         |
| 459                             | 0,1342         |

Transmisijski spektar PP folije debljine 500  $\mu\text{m}$  (slika 93., tablica 46.) razlikuje se od spektara dobivenih ATR metodom. Apsorbirane vrpce su velikog inenziteta i širine pa se vrijednosti ne mogu precizno očitati. To se događa jer je uzorak predebeo [32].





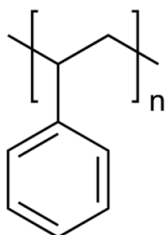
Slika 94. ATR-FTIR spektar CD kutije, crni dio.

Tablica 47. Vrpce CD kutije, crni dio.

| valni broj $\text{cm}^{-1}$ | transmitancija |
|-----------------------------|----------------|
| 3026                        | 0,8423         |
| 2850                        | 0,8547         |
| 1601                        | 0,8483         |
| 1493                        | 0,7448         |
| 1450                        | 0,8889         |
| 749                         | 0,6670         |
| 692                         | 0,7474         |



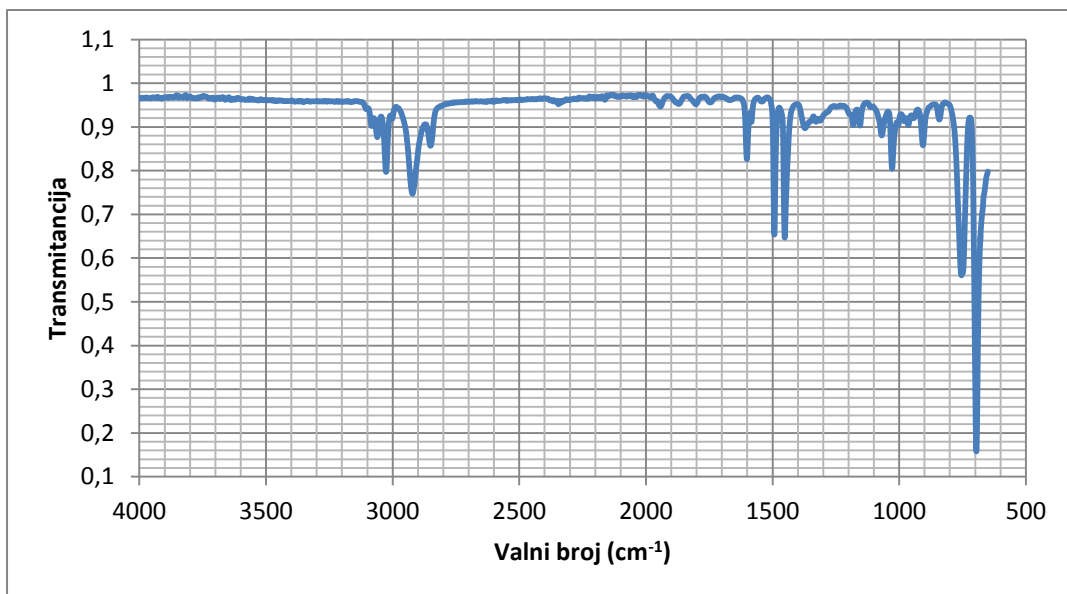
Slika 95. CD kutija.



Slika 96. Struktura polistirena.

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 94., tablica 47.) crnog dijela CD kutije (slika 95.) pokazuje apsorpciju vrpce pri  $3026 \text{ cm}^{-1}$  i  $2850 \text{ cm}^{-1}$  gdje se javlja aromatsko C-H istežanje; pri  $1601 \text{ cm}^{-1}$  i  $1493 \text{ cm}^{-1}$  je aromatsko C=C istežanje; te na  $749 \text{ cm}^{-1}$  i  $692 \text{ cm}^{-1}$  javlja se deformacijsko vibriranje benzenskog prstena [33]. Ovi rezultati upućuju na to da je crni dio kutije CD-a izrađen od polistirena.

Polistiren (PS) je polimer koji se sastoji od  $-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{C}_6\text{H}_5)-$  ponavljajućih jedinica (slika 96.). Na centralni atom ugljika vezana je fenilna grupa (aromatski prsten benzena).



Slika 97. ATR–FTIR spektar CD kutije, prozirni dio.

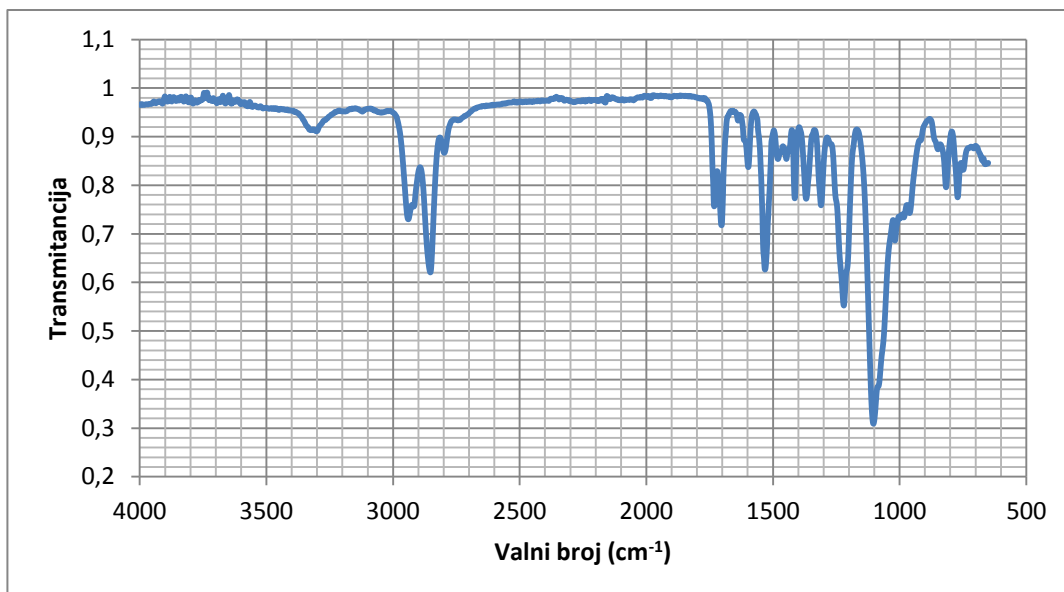
Tablica 48. Vrpce CD kutije, prozirni dio.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 3026                           | 0,7972         |
| 2921                           | 0,7473         |
| 2850                           | 0,8569         |
| 1601                           | 0,8262         |
| 1493                           | 0,6537         |
| 1450                           | 0,8889         |
| 754                            | 0,5606         |
| 692                            | 0,7474         |



Slika 98. CD kutija.

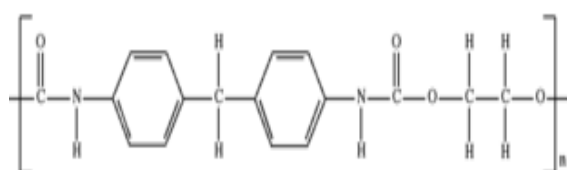
ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 97., tablica 48.) prozirnog dijela CD kutije (slika 98.) pokazuje apsorpciju vrpce pri 3026 cm<sup>-1</sup> i 2850 cm<sup>-1</sup> gdje se javlja aromatsko C-H istežanje; pri 1601 cm<sup>-1</sup> i 1493 cm<sup>-1</sup> je aromatsko C=C istežanje; te na 754 cm<sup>-1</sup> i 692 cm<sup>-1</sup> javlja se deformacijsko vibriranje benzenskog prstena [33]. Ovi rezultati upućuju na to da je prozirni dio CD kutije izrađen od polistirena.



Slika 99. ATR-FTIR spektar poliuretana (PUR).

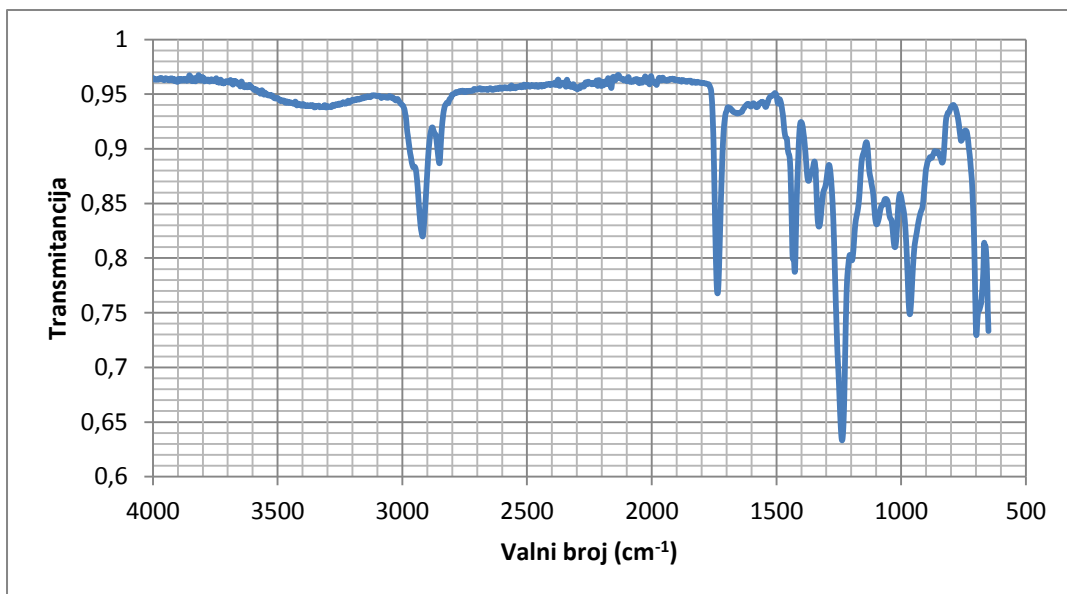
Tablica 49. Vrpce PUR.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 3324                           | 0,9131         |
| 2939                           | 0,7298         |
| 2797                           | 0,8665         |
| 1732                           | 0,7563         |
| 1703                           | 0,7174         |
| 1597                           | 0,8370         |
| 1531                           | 0,6263         |
| 1414                           | 0,7728         |
| 1369                           | 0,7719         |
| 1310                           | 0,7585         |
| 1220                           | 0,5521         |
| 1103                           | 0,3090         |
| 816                            | 0,7957         |
| 771                            | 0,7749         |



Slika 100. Ponavljajući dio strukture poliuretana.

ATR-FTIR spektar poliuretana (PUR) (slika 99., tablica 49.) ima izražene vrpce na 3324 cm<sup>-1</sup>, koja pripada N-H istezanju. Zatim na 2939 cm<sup>-1</sup> koja odgovara C-H istezanju na aromatskom prstenu, pri 1703 cm<sup>-1</sup> je C=O istezanje, pri 1597 cm<sup>-1</sup> je deformacija aromatskog prstena, na 1531 cm<sup>-1</sup> je N-H deformacija, na 1220 cm<sup>-1</sup> nalazi se C-N istezanje i na 1103 cm<sup>-1</sup> je C-O istezanje [34]. Usporedbom ovog spektra s već poznatim spektrima može se zaključiti da je riječ o poliuretanu. Na slici 100. nalazi se ponavljajući dio strukture poliuretana.



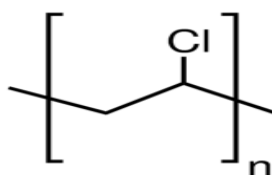
Slika 101. ATR–FTIR spektar folije s Ketchupa.

Tablica 50. Vrpce folije s Ketchupa.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2919                           | 0,8198         |
| 2852                           | 0,8868         |
| 1736                           | 0,7677         |
| 1427                           | 0,7873         |
| 1372                           | 0,8707         |
| 1330                           | 0,8288         |
| 1237                           | 0,6331         |
| 965                            | 0,7485         |
| 698                            | 0,7294         |



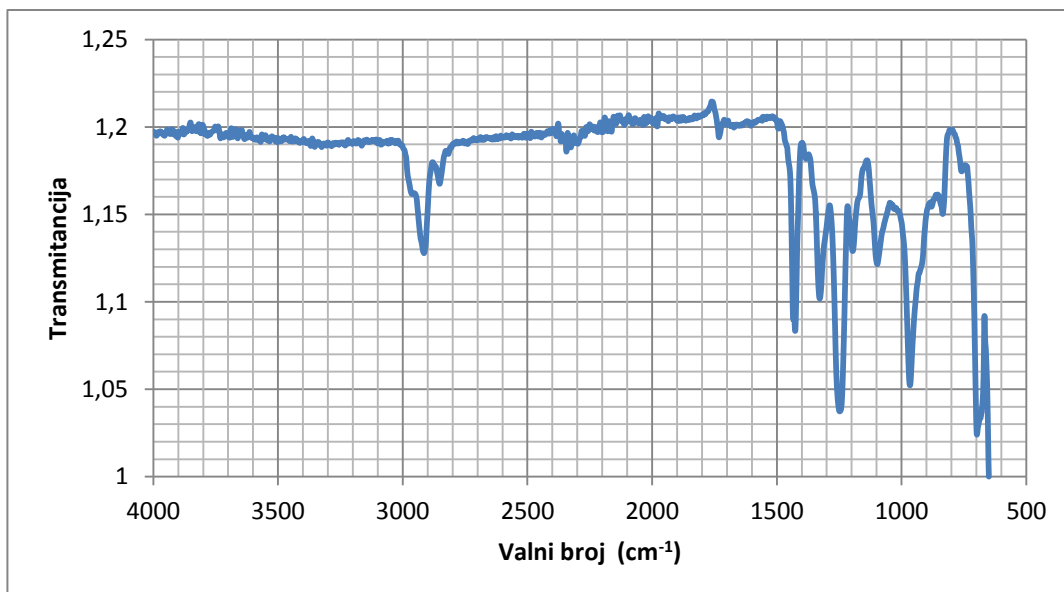
Slika 102. Folija s Ketchupa.



Slika 103. Struktura poli(vinil-klorida).

U slučaju folije s Ketchupa ATR–FTIR metodom pronađene su apsorpcijske vrpce (slika 101., tablica 50.) pri 2919 cm<sup>-1</sup> i 2852 cm<sup>-1</sup>, što odgovara simetričnom C-H istezanju, pri 1736 cm<sup>-1</sup> je C-H istezanje, pri 1427 cm<sup>-1</sup> nalazimo CH<sub>2</sub> uvijanje, pri 1330 cm<sup>-1</sup> je C-H deformacija izvan ravnine, pri 1237 cm<sup>-1</sup> je C-H deformacije u ravnini i pri 698 cm<sup>-1</sup> je istezanje C-Cl. Ovi rezultati ukazuju na to da je folija s Ketchupa (slika 102.) izrađena od PVC-a [35].

Poli(vinil-klorid) ili PVC je polimer koji u svojoj strukturi sadrži makromolekule s ponavljanjem jedinica –CH<sub>2</sub>-CHCl (slika 103.)



Slika 104. ATR-FTIR spektar uveza knjige.

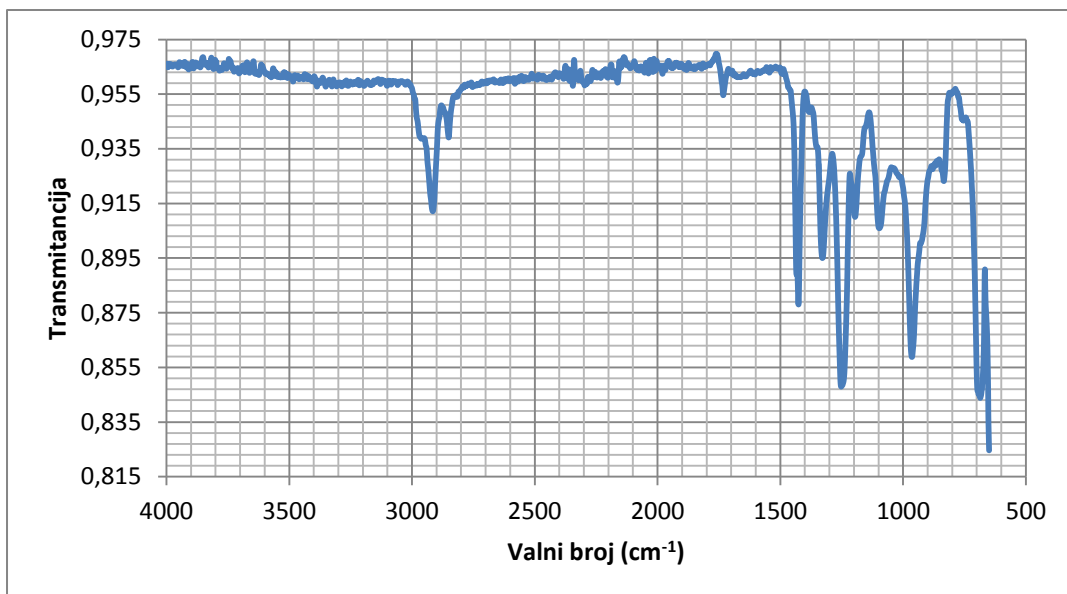
Tablica 51. Vrpce uveza knjige.

| valni broj $\text{cm}^{-1}$ | transmitancija |
|-----------------------------|----------------|
| 2963                        | 0,9263         |
| 2915                        | 0,8993         |
| 2852                        | 0,9310         |
| 1732                        | 0,9522         |
| 1427                        | 0,8638         |
| 1328                        | 0,8786         |
| 1248                        | 0,8271         |
| 966                         | 0,8390         |
| 698                         | 0,7294         |



Slika 105. Uvez knjige.

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 104., tablica 51.) za uvez knjige (slika 105.) ima vrpce pri  $2963 \text{ cm}^{-1}$ ,  $2915 \text{ cm}^{-1}$  i  $2852 \text{ cm}^{-1}$ , što odgovara simetričnom C-H istezanju, pri  $1732 \text{ cm}^{-1}$  je C-H istezanje, pri  $1427 \text{ cm}^{-1}$  nalazimo  $\text{CH}_2$  uvijanje, pri  $1328 \text{ cm}^{-1}$  je C-H deformacija izvan ravnine, pri  $1248 \text{ cm}^{-1}$  je C-H deformacija u ravnini i pri  $698 \text{ cm}^{-1}$  je istezanje C-Cl [35]. Ovi rezultati ukazuju na to da je uvez knjige izrađen od PVC-a.

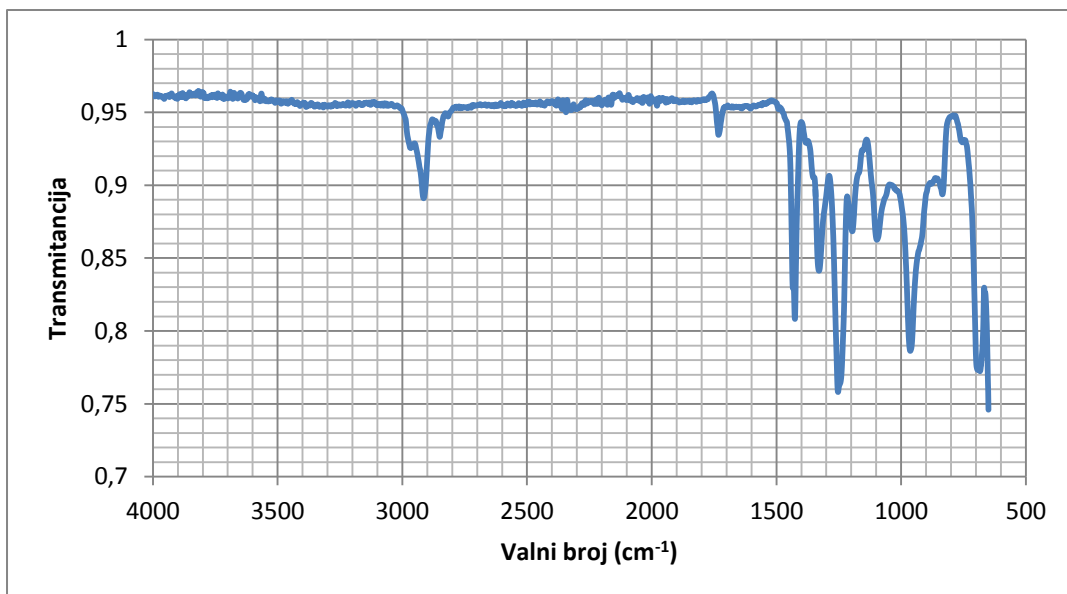


Slika 106. ATR-FTIR spektar prozirne folije s CD kutije.

Tablica 52. Vrpce prozirne folije s CD kutije.

| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2962                           | 0,9387         |
| 2951                           | 0,9122         |
| 1426                           | 0,8780         |
| 1329                           | 0,8950         |
| 1252                           | 0,8480         |
| 1196                           | 0,9101         |
| 1097                           | 0,9059         |
| 964                            | 0,8588         |
| 834                            | 0,9232         |
| 686                            | 0,8438         |

ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 106., tablica 52.) za foliju s CD kutije ima vrpce pri 2962 cm<sup>-1</sup> i 2915 cm<sup>-1</sup>, što odgovara simetričnom C-H istezanju, pri 1426 cm<sup>-1</sup> nalazimo CH<sub>2</sub> uvijanje, pri 1329 cm<sup>-1</sup> je C-H deformacija izvan ravnine, pri 1252 cm<sup>-1</sup> je C-H deformacija u ravnini, pri 1097 cm<sup>-1</sup> je okomito istezanje lanca [35]. Ovi rezultati ukazuju na to da je prozirna folija s CD kutije izrađena od PVC-a.



Slika 107. ATR-FTIR spektar krute ambalaže 4

Tablica 53. Vrpce krute ambalaže 4

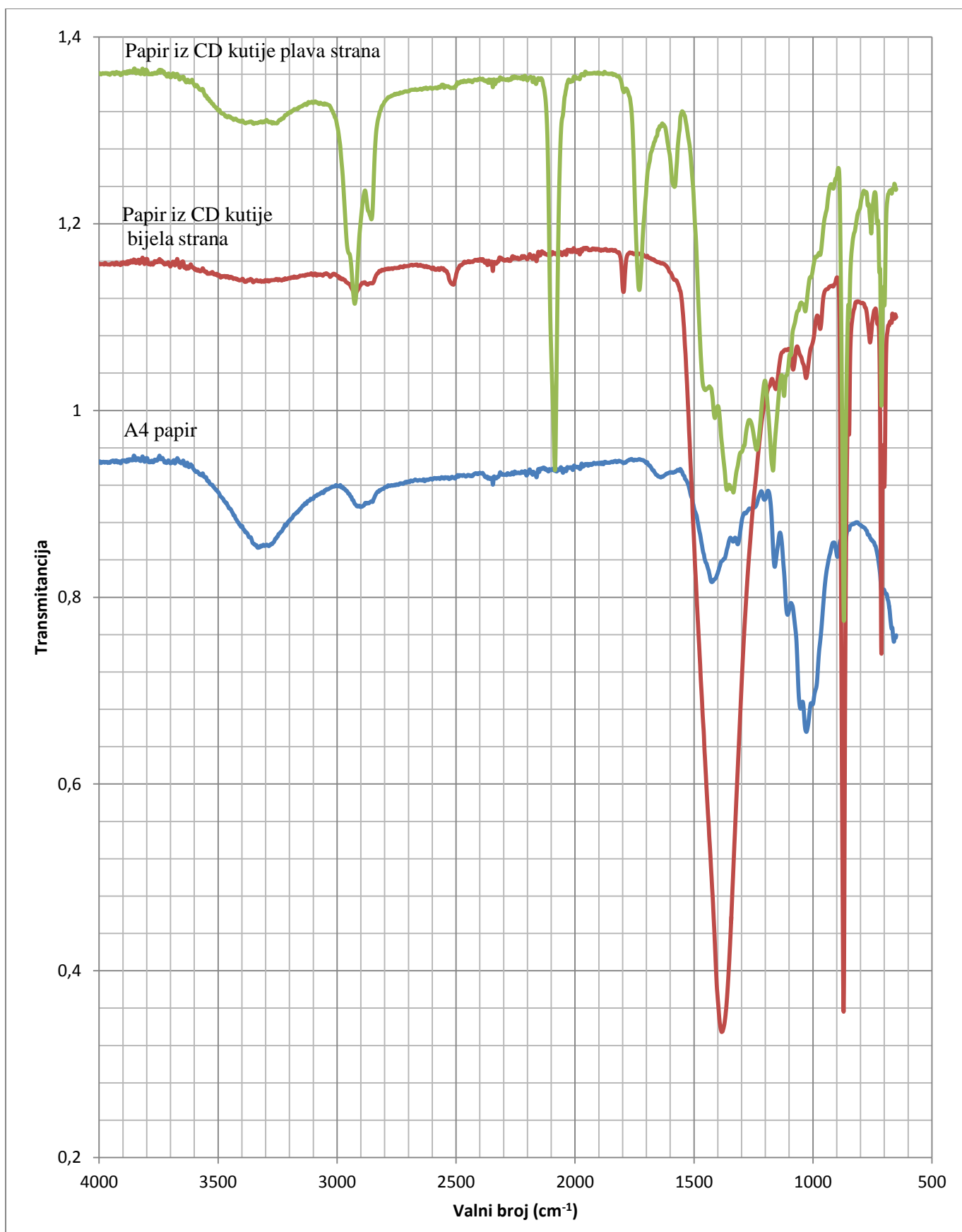
| valni broj (cm <sup>-1</sup> ) | transmitancija |
|--------------------------------|----------------|
| 2968                           | 0,9255         |
| 2915                           | 0,8910         |
| 2850                           | 0,9331         |
| 1732                           | 0,9345         |
| 1426                           | 0,8082         |
| 1253                           | 0,7582         |
| 1196                           | 0,8683         |
| 1097                           | 0,8626         |
| 964                            | 0,7864         |
| 684                            | 0,7724         |



Slika 108. Kruta ambalaža 4

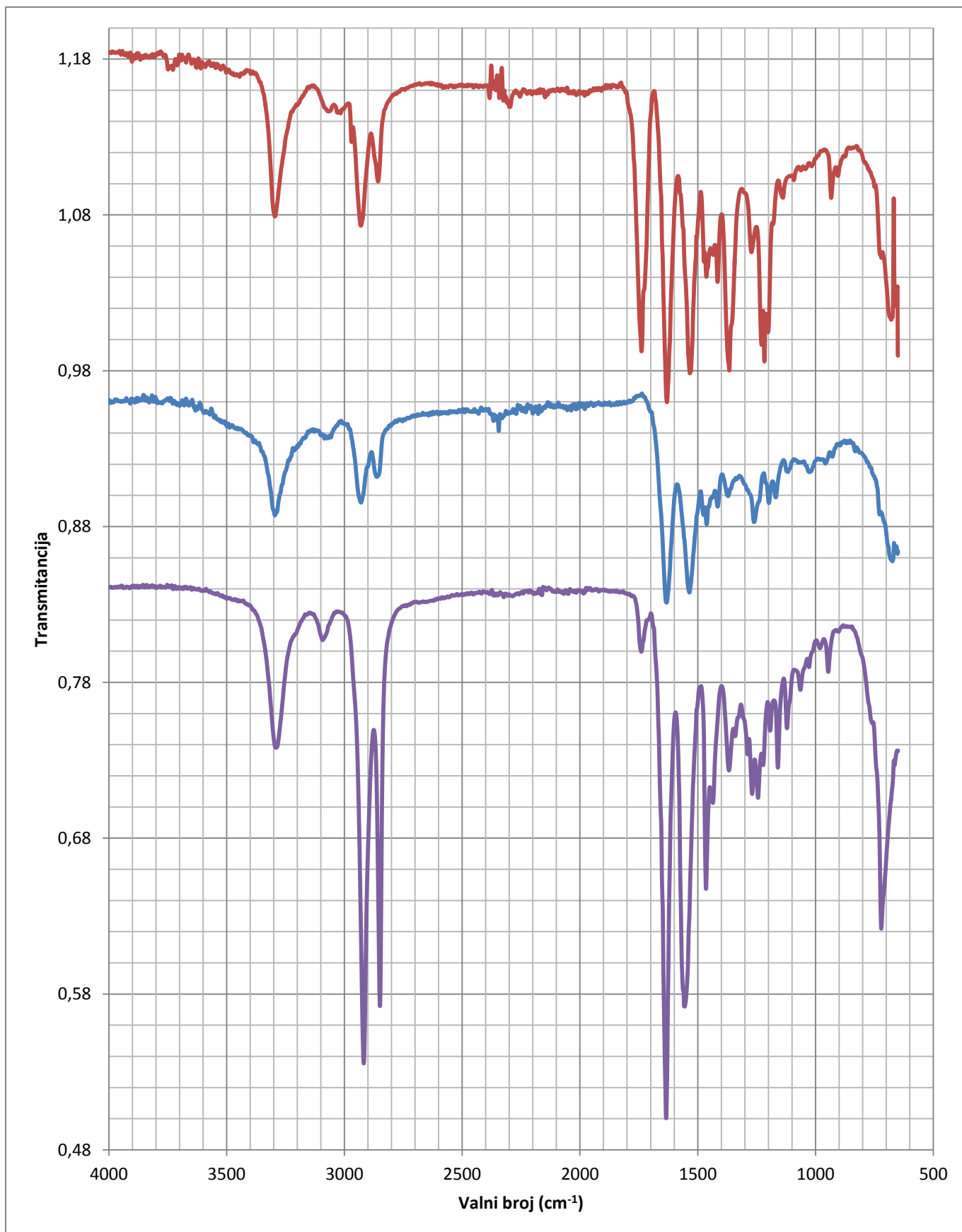
ATR-FTIR metodom dobiven spektar (slika 107., tablica 53.) krute ambalaže 4 (slika 108.) ima vrpce pri 2968 cm<sup>-1</sup>, 2915 cm<sup>-1</sup> i 2850 cm<sup>-1</sup>, što odgovara simetričnom C-H istezanju, pri 1732 cm<sup>-1</sup> je C-H istezanje, pri 1426 cm<sup>-1</sup> nalazimo CH<sub>2</sub> uvijanje, pri 1253 cm<sup>-1</sup> je C-H deformacija u ravnini, 1097 cm<sup>-1</sup> je okomito istezanje lanca i pri 684 cm<sup>-1</sup> je istezanje C-Cl [35].

Iz ovih podataka možemo zaključiti da se radi o PVC-u.

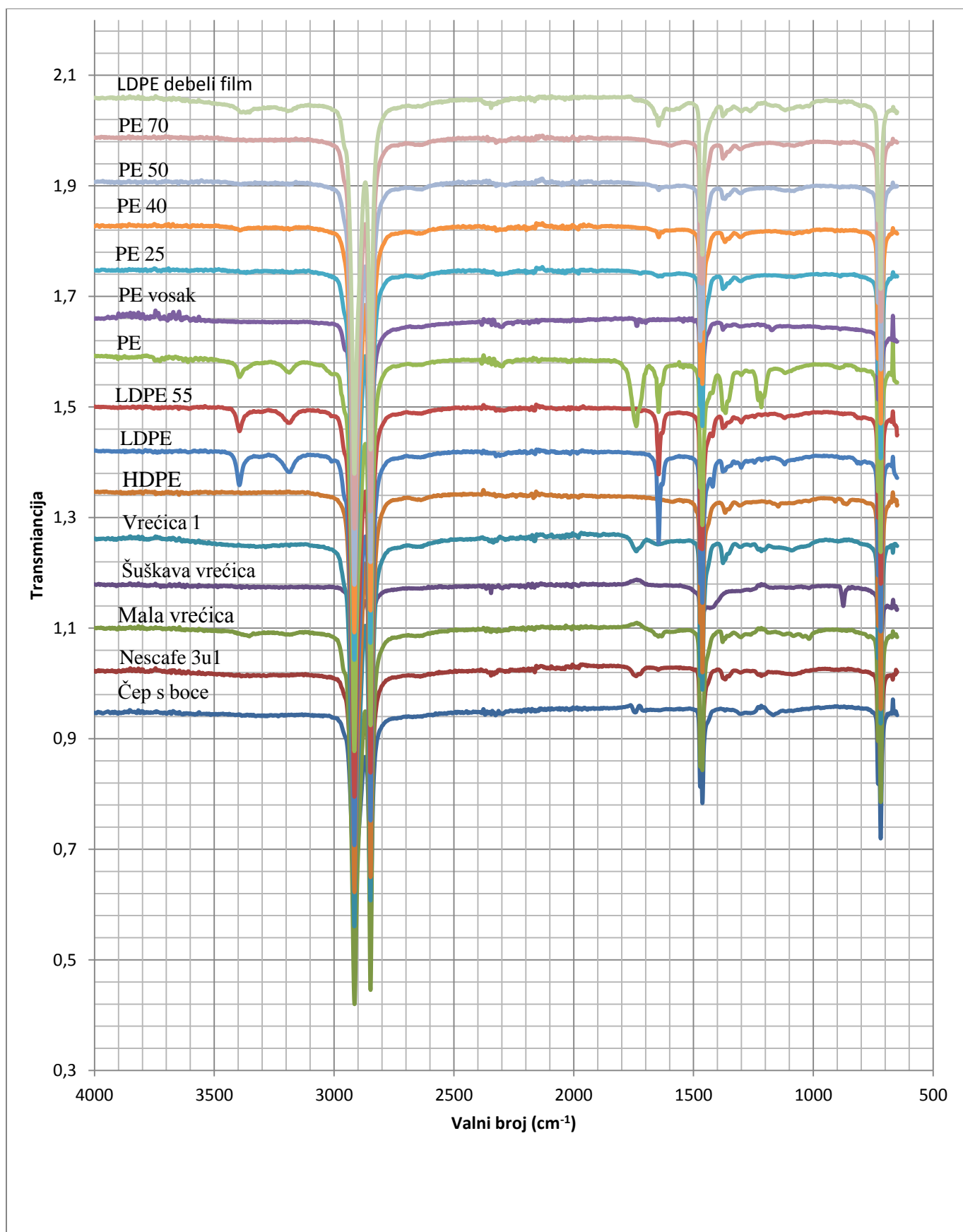


Slika 109. Spektri svih uzoraka papira dobiveni ATR-FTIR metodom.

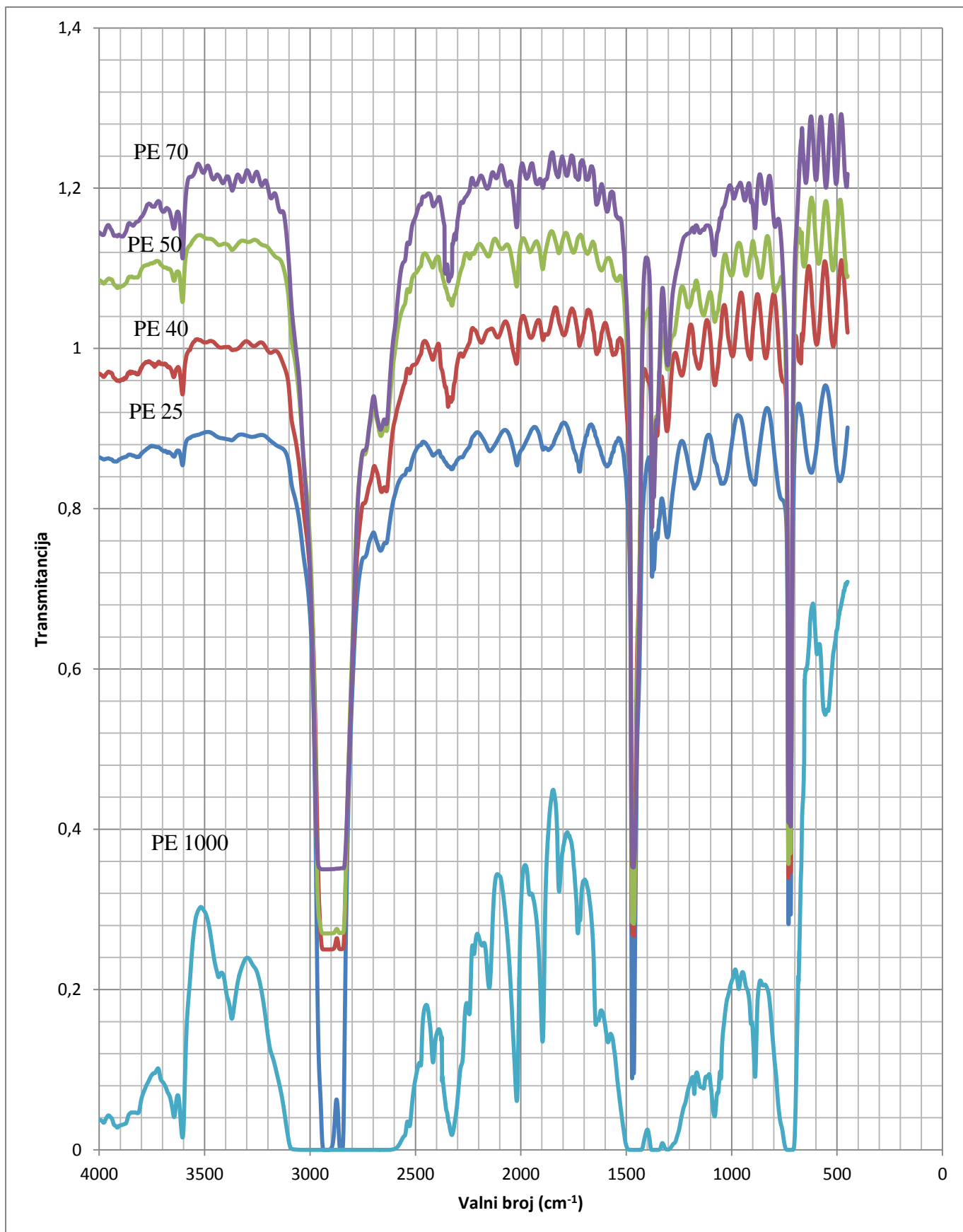




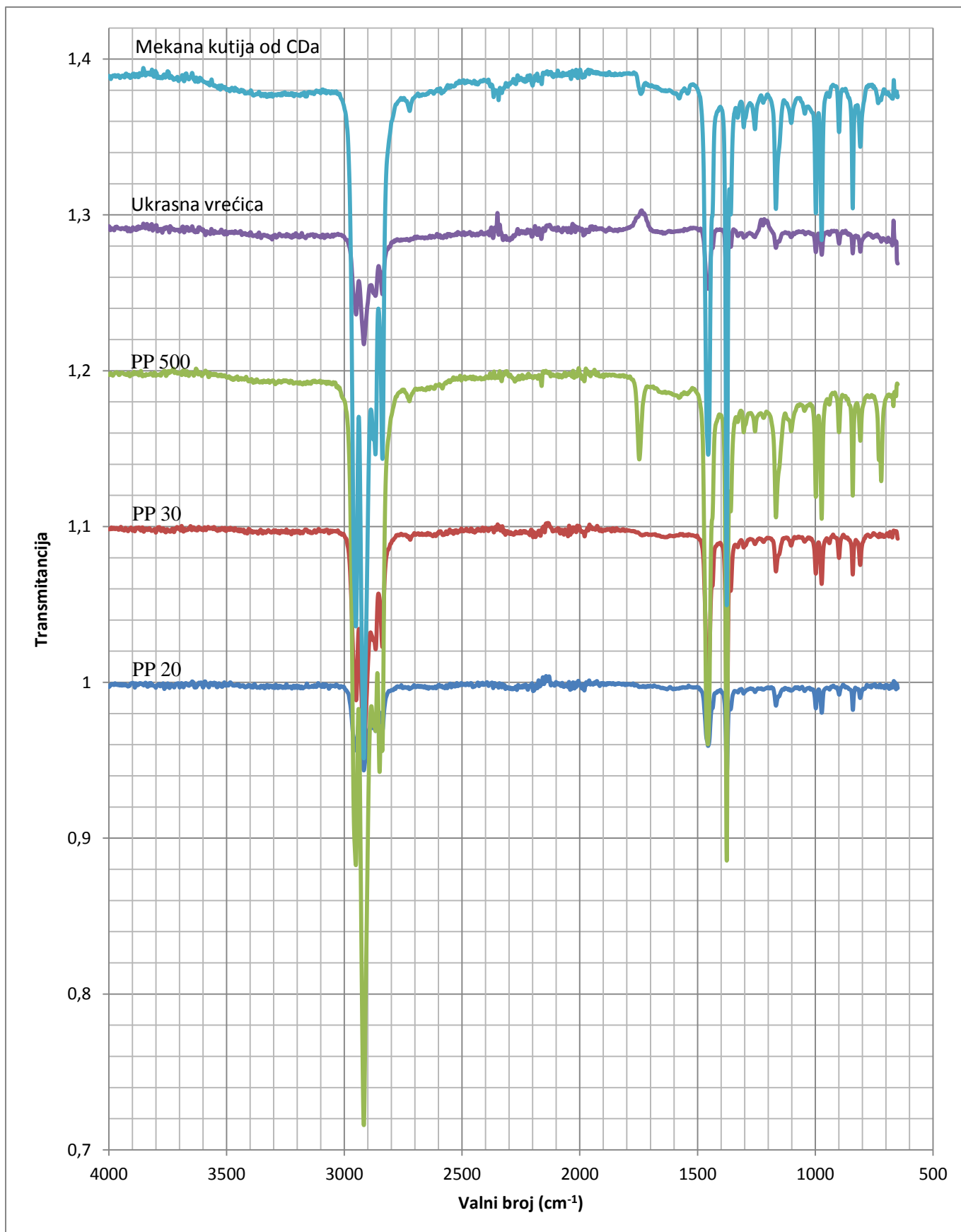
Slika 110. Spektri svih uzoraka PA dobiveni ATR-FTIR metodom.



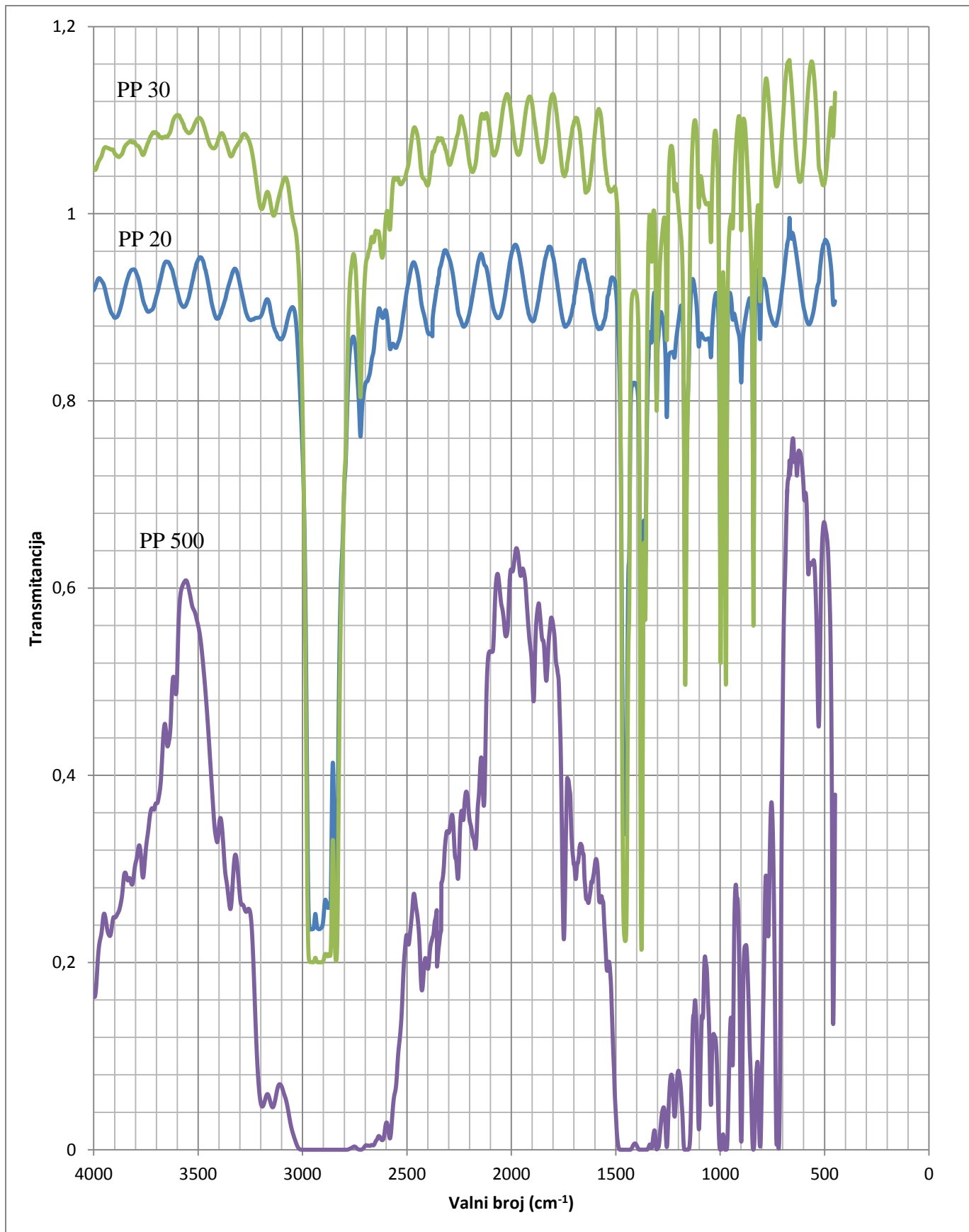
Slika 111. Spektri svih uzoraka PE dobiveni ART-FTIR metodom.



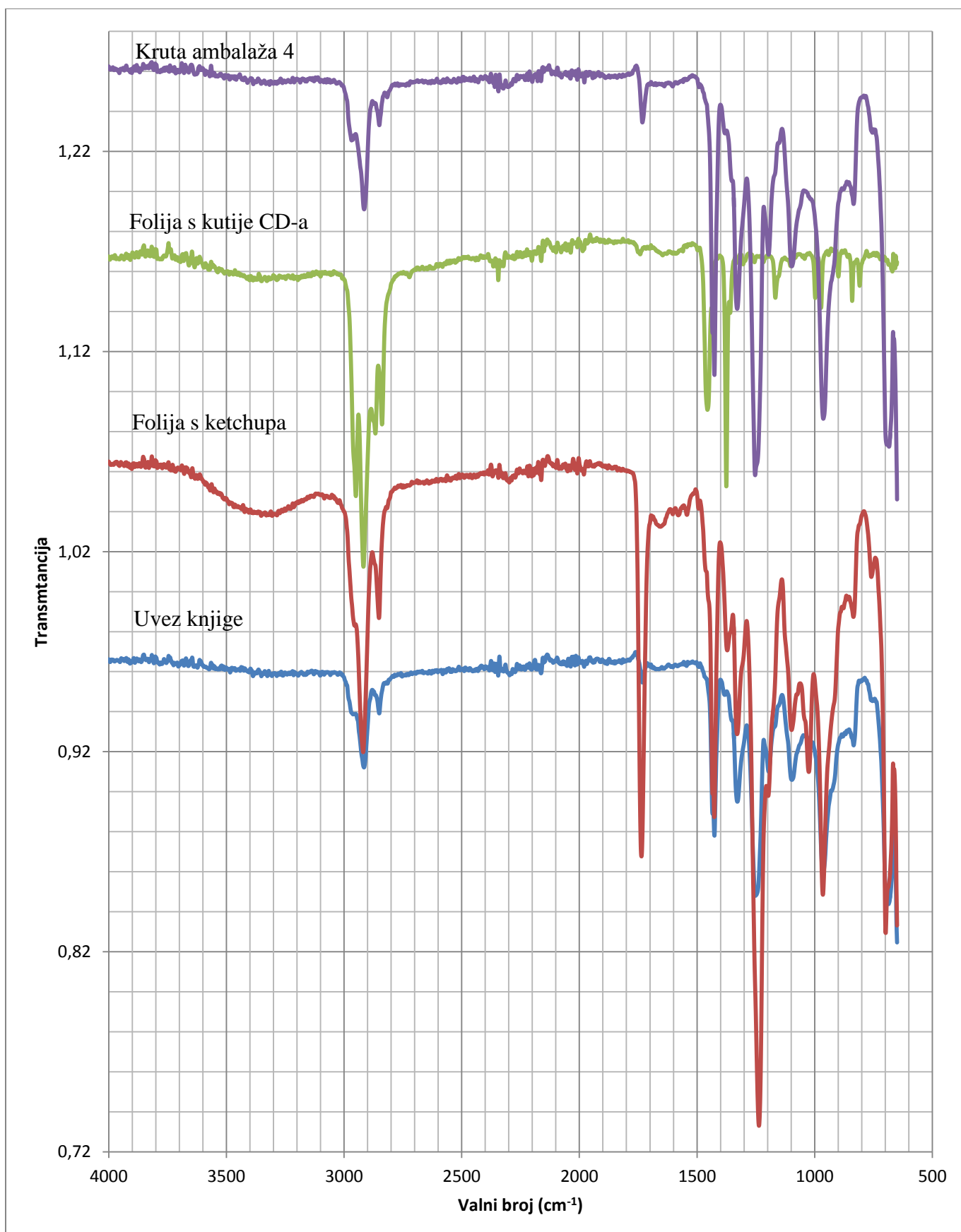
Slika 112. Spektri svih uzoraka PE dobiveni transmisijskom metodom.



Slika 113. Spektri svih uzoraka PP dobiveni ATR-FTIR metodom.



Slika 114. Spektri svih uzoraka PP dobiveni transmisijskom metodom.



Slika115. Spektri svih uzoraka PVC-a dobiveni ATR-FTIR metodom.

## 5. Zaključak

ATR i transmisijskom metodom snimljeni su spektri različitih ambalažnih materijala. U spektru svakog od njih bilo je moguće odrediti karakteristične skupine koje se nalaze u strukturi materijala usporedbom s već postojećim spektrima ili iz tablica za određivanje strukture organskih spojeva spektroskopskom metodom. Iako je bio uključen veliki broj uzoraka, materijali od kojih je izrađeno najviše plastične ambalaže su: PE, PP i PVC.

## Popis simbola

$\nu$  - frekvencija (HZ)

$c$  – brzina svjetlosti, iznosi 299,8 (m/s)

$E$  - energija (J)

$\lambda$  - valna duljina (nm)

$F$  – sila (N)

$h$  – Planckova konstanta (J\*s)

$B(\tilde{\nu})$  – Fourierova transformacija

$\nu$  – vibracijski kvantni broj,  $\nu=0,1,2,3\dots$

$\Theta$  – slučajni kut

$\phi$  – refrakcijski kut

$n_1$  – refrakcijski indeks medija 1

$n_2$  – refrakcijski indeks medija 2

$n_p$  – refrakcijski indeks kristala

$n_{sp}$  – omjer između refrakcijskog indeksa kristala i uzorka

$N$  – broj refleksija

$l$  – duljina kristala

$n(\nu)$  – indeks loma



## 6. Literatura

1. Gunzler, H., Gremlich, H.U., Uvod u infracrvenu spektroskopiju, Školska knjiga, Zagreb (2006) 14-15
2. Gunzler, H., Gremlich, H.U., Uvod u infracrvenu spektroskopiju, Školska knjiga, Zagreb (2006) 13
3. F. Vatansever, M.R. Hamblin, Far infrared radiation (FIR): its biological effects and medical application, Photonic Laser Med. 4 (2012), 255-266
4. Gunzler, H., Gremlich, H.U., Uvod u infracrvenu spektroskopiju, Školska knjiga, Zagreb (2006) 15-39
5. R.Silverstein, Spectroscopy-Chemistry NMR FTIR MS, 25-31, 72-79
6. Gunzler, H., Gremlich, H.U., Uvod u infracrvenu spektroskopiju, Školska knjiga, Zagreb (2006) 53-59
7. Gunzler, H., Gremlich, H.U., Uvod u infracrvenu spektroskopiju, Školska knjiga, Zagreb (2006) 130-135
8. B. Stuart, Infrared spectroscopy: fundamentals and applications, Wiley (2004) 18-24
9. Gunzler, H., Gremlich, H.U., Uvod u infracrvenu spektroskopiju, Školska knjiga, Zagreb (2006) 101-107
10. <http://www.shimadzu.com/an/ftir/support/faq/5.html> (pristup 5.7.2015.)
11. D.Ciolacu, F.Ciolacu, V.I.Popa: Amorphous cellulose-structure and characterization, Cellulose Chem Technology, 45 (2011) 13-21
12. D.Romanzini, H.L.Ornaghi, S.C.Amico, A.J.Zattera, Preparation and Characterization of ramine-glass fiber reinforced polymer matrix hybrid composites, Materials Research 15 (2012) 415-420
13. S.Abdolmhammadi, S.Siyamak, N.A.Ibrahim, W.M.Z.W.Yunus, M.Z.A.Rahman, S.Azizi, A.Fatehi, Enhancement of Mechanical and Thermal Properties of Polycaprolactone/Chitosan Blend of Calcium Carbonate Nanoparticles, International Journal of Molecular Science, 13 (2012) 4508-4522
14. [http://chemwiki.ucdavis.edu/Physical\\_Chemistry/Spectroscopy/Vibrational\\_Spectroscopy/Infrared\\_Spectroscopy/Infrared%3A\\_Interpretation](http://chemwiki.ucdavis.edu/Physical_Chemistry/Spectroscopy/Vibrational_Spectroscopy/Infrared_Spectroscopy/Infrared%3A_Interpretation) (pristup 12.7.2015.)
15. <http://www.nanoscalereslett.com/content/7/1/182> (pristup 4.7.2015.)
16. [ftp://prelog.chem.pmf.hr/pub/POAK/Praktikum%20anorganske%20k%20i%2020202/IR\\_skripta.pdf](ftp://prelog.chem.pmf.hr/pub/POAK/Praktikum%20anorganske%20k%20i%20202/IR_skripta.pdf) (pristp 4.7.2015)
17. J.Han, Z.Cao, W.Gao, Remarkable sorption properties of polyamide 12 microscopes form a broad-spectrum antibacterial (triclosan) in water, Journal of Materials Chemistry, 5 (2013) 1-14
18. [http://www.shimadzu.com/an/spectro/ftir/irtracer/irtracer\\_5.html](http://www.shimadzu.com/an/spectro/ftir/irtracer/irtracer_5.html)
19. S.Krimm, C.Y.Liang, G.B.B.M. Sutherland, Infrared spectra od high polymers.II. Polyethylene, The journal of chemical physic, 25 (1956) 549-555
20. H.Wang, S.J.Chen, J.Zhang, Surface treatment of LLDPE and LDPE blends by nitric acid, sulfuric acid and chromatic acid etching, Colloid Polym Sci 287 (2009) 541-548
21. <http://be.convdocs.org/docs/index-92696.html?page=3> (pristup 4.7.2015.)

22. A.Sadighzdh, P.A.Asiabi, A.Ramazani, M.Ghoranneviss, A.S.Elahi, Characterization of Gamma Irradiated Low and High Density Polyethylene Using the FTIR and DSC Technique, *Polymer International*, 49 (2000) 1555-1560
23. P.C.S. Simon, Tablice za određivanje strukture organskih spojeva spektroskopskom metodom, SKTH/Kemija u industriji, Zagreb (1982) 5-15
24. Gunzler, H., Gremlich, H.U., Uvod u infracrvenu spektroskopiju, Školska knjiga, Zagreb, (2006) 215-218
25. Z. Chen, J.N. Hay, M.J. Jenkins, FTIR spectroscopic analysis of poly(ethylene terephthalate) on crystallization, *European Polymer Journal*, 48, (2012) 1586-1610.
26. A.M Parshini, V.A.Gunyakov, V.Y.Zyryanov, V.F.Shabanov, Domain Structures in Nematic Liquid Crystals on a Polycarbonate Surface, *International Journal of Molecular Science*. 14 (2013) 16303-16320
27. T. Elzein, M. Nasser-Eddine, C. Delaite, S.Bistac, P. Dumas, FTIR study of polycaprolactone chain organization at interfaces, *Journal of Colloid and Interface Science*, 237(2004) 381-387
28. R.A.Auras, L-T.Lim, S.E.M.Selke, H.Tsuji, *Poly(lactic-acid): Synthesis, Structure, Properties, Processing and Application*, Wiley (2011) 101-103
29. H.Kaczmarek, I.V.Kwiatkowska, Preparation and characterization of interpreting network based on polyacrylates and poly(lactic-acid), *eXpress Polymer Letters*, 6 (2012) 78-94
30. F. James Boerio and S. Wirasate, Measurements of the Chemical Characteristics of Polymers and Rubbers by Vibrational Spectroscopy, *Handbook of vibrational spectroscopy*, Volume 3, Wiley (2010), 10
31. L.Barbes, C.Radulescu, C.Stihi, ATR-FTIR spectrometry characterization of polymeric materials, *Romanian Reports in Physics*, 66 (2014) 765-777
32. <http://cvilaseroptics.com/support/Technical-Library/Optical-Coatings> (pristup 14.7.2015).
33. K. Kanippan, S. Latha, Certain Investigations of the Formulation and Characterization of Polystyrene/ Poly(methyl methacrylate) Blends, *International Journal of ChemTech Research*, 3 (2011) 708-717.
34. S.M. Clift, J.Grimminger, K. Muha, New Polyisocyanurate Catalysts for Rigid Polyurethane Foams, *Air Products and Chemicals*, 112 (1994) 10-15
35. R.R. Stromberg, S. Straus, B.G. Achhammer, Infrared Spectra of Thermally Degraded Poly(Vinyl Chloride), *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 60 (1958) 149-152.

## Životopis

Ime i Prezime Anita Perešin  
Rođena 18. svibnja 1992. u Zagrebu, Hrvatska  
Obrazovanje 2008. – 2011. Opća gimnazija Novska  
2011. – Preddiplomski sveučilišni studij  
Ekoinženjerstvo Fakulteta kemijskog  
inženjerstva i tehnologije  
Jezici engleski, njemački