

التشخيص العضوي

Organic Spectroscopy (Investigation)

مطياف الأشعة تحت الحمراء

Infrared Spectrophotometer (IR)

أ.د. مهند موسى كريم الحجامي
تشخيص عضوي
المرحلة الرابعة - قسم الكيمياء
كلية العلوم - جامعة بابل



تطبيقات التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء

من أمثلة المجاميع التي لا يتغير امتصاصها من مركب لآخر ما يلي:

مجموعة الكربونيل C=O , مجموعة السلفاهيدريل SH- , مجموعة NH- , مجموعة الهيدروكسيل OH- , مجموعة الميثيلين CH2- , مجموعة الميثيل CH3- ونظرا لثبات امتصاص هذه المجموعات فانها تعتبر مفيدة بدرجة كبيرة للتعرف على الجزيئات.

2

نوع الرابطة	مواقع الامتصاص عدد موجي cm^{-1}	C - O كحولات ، اثيرات استرات ، احماض كربوكسيلية وانهيدريدات	1300 - 1000
C - H الكانات ألكينات (شد) المركبات الأروماتية (شد) ألكينات	2850 - 3000 3000 - 3100 3050 - 3150 3300	O - H كحولات . فنيولات حرة مرتبط برابطة هيدروجينية أحماض كربوكسيلية	3600 - 3650 3200 - 3500 2400 - 3400
الدهيد	{ 2800 - 2900 2700 - 2800 }	N - H الامينات الأولية والثانوية والاميدات	300 - 3500
C = C الكينات	1600 - 1680	C - N امينات	1000 - 350
مركبات أروماتية	1475 و 1600	C = N اكزيمات إمينات	1640 - 1690
C ≡ C الكينات	2100 - 2250	C ≡ N نتريلات	2240 - 2260
C = O الدهيد كيتون احماض كربوكسيلية استر أميد انهيدريد كلوريد الحمض	1720 - 1740 1705 - 1725 1700 - 1725 1730 - 1750 1640 - 1670 1670 و 1810 1800	N = O نايترو	1350 - 1550
		C - X فلوريد = كلوريد = بروميد ويوديد =	1000 - 1400 600 - 800 أقل من 667

4000 (cm-1)	2500	2000	1800	1650	1550	650
O - H C - H N - H	C ≡ C C ≡ N X = C = Y (C, O, N, S)	روابط قليلة جداً	C = O	C = N C = C N = O	C - Cl C - O C - N C - C N = O	

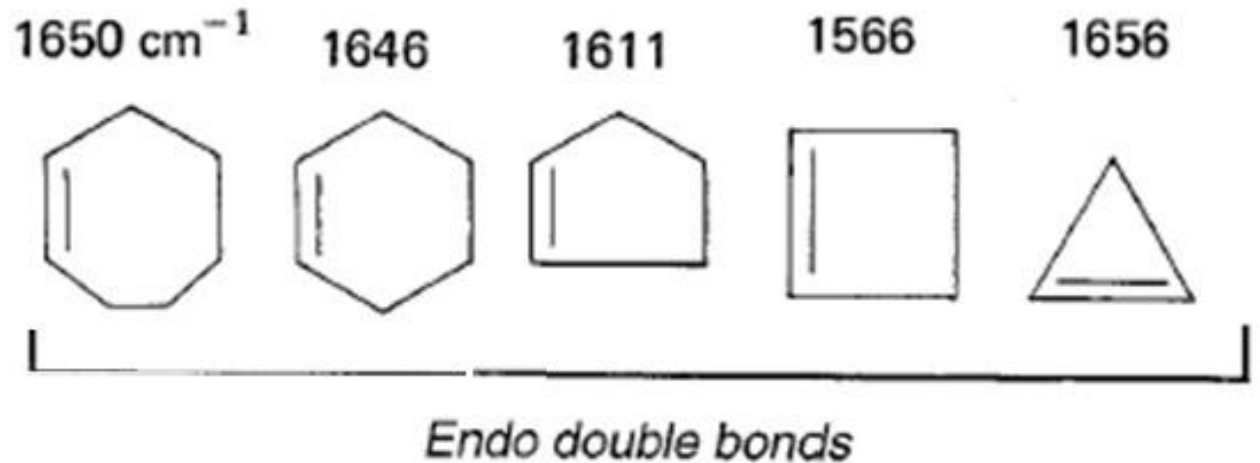
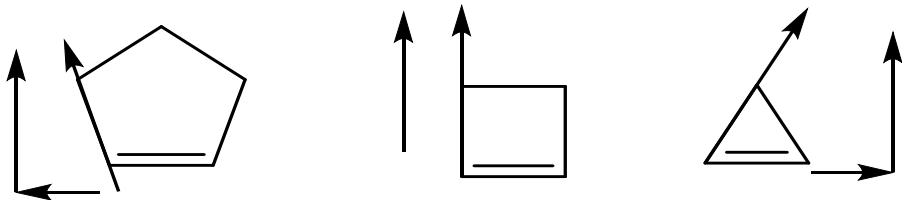
مناطق اهتزازات المط للأصرة المزدوجة C=C Stretching vibration

3

ان الالكيل البسيط المعوض بالالكين تظهر عادة الاصرة المزدوجة لالكين غير الحلقى بين 1670 and 1640 cm^{-1} (1 إذا لم يكن تبادل في الاصرة (uncojugated) وعند وجود التبادل تقل قيمة الامتصاص حتى تصل لحدود 1600 cm^{-1}) ال C=C الاروماتية .

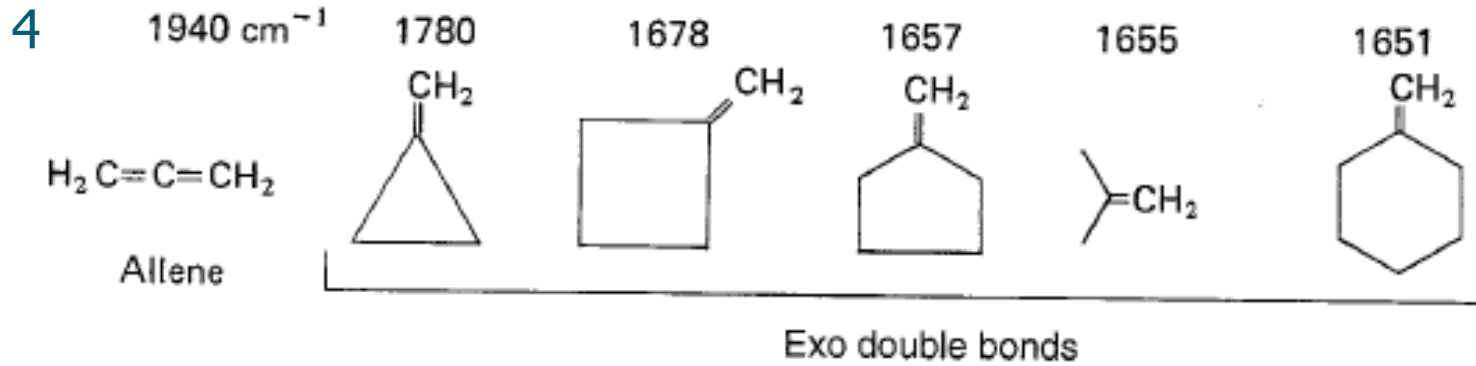
اما في الاوليفينات الحلقية ان امتصاص الاصرة المزدوجة الداخلية في نظام الهكسين الحلقى غير المتوتر هو من حيث الاساس نفس امتصاص السيز-ايزومر في المنظومة غير الحلقية يزدوج اهتزاز مط C=C مع مط C-C للاواصر المتجاورة . وكلما اصبحت الزاوية C-C=C اصغر يصبح التداخل اقل حتى تصل قيمة ادنى في 90 في البيوتين الحلقى (1566 cm^{-1}) والتراكيب التالية توضح ذلك بتأثير حجم الحلقة

قد يؤدي وجود رابطة ثنائية حلقية داخلية أو خارجية إلى حلقة إلى إزاحة في الحزمة.
الاصرة الداخلية تخفض تردد الحزمة ماعدا السايكلوبروبين.

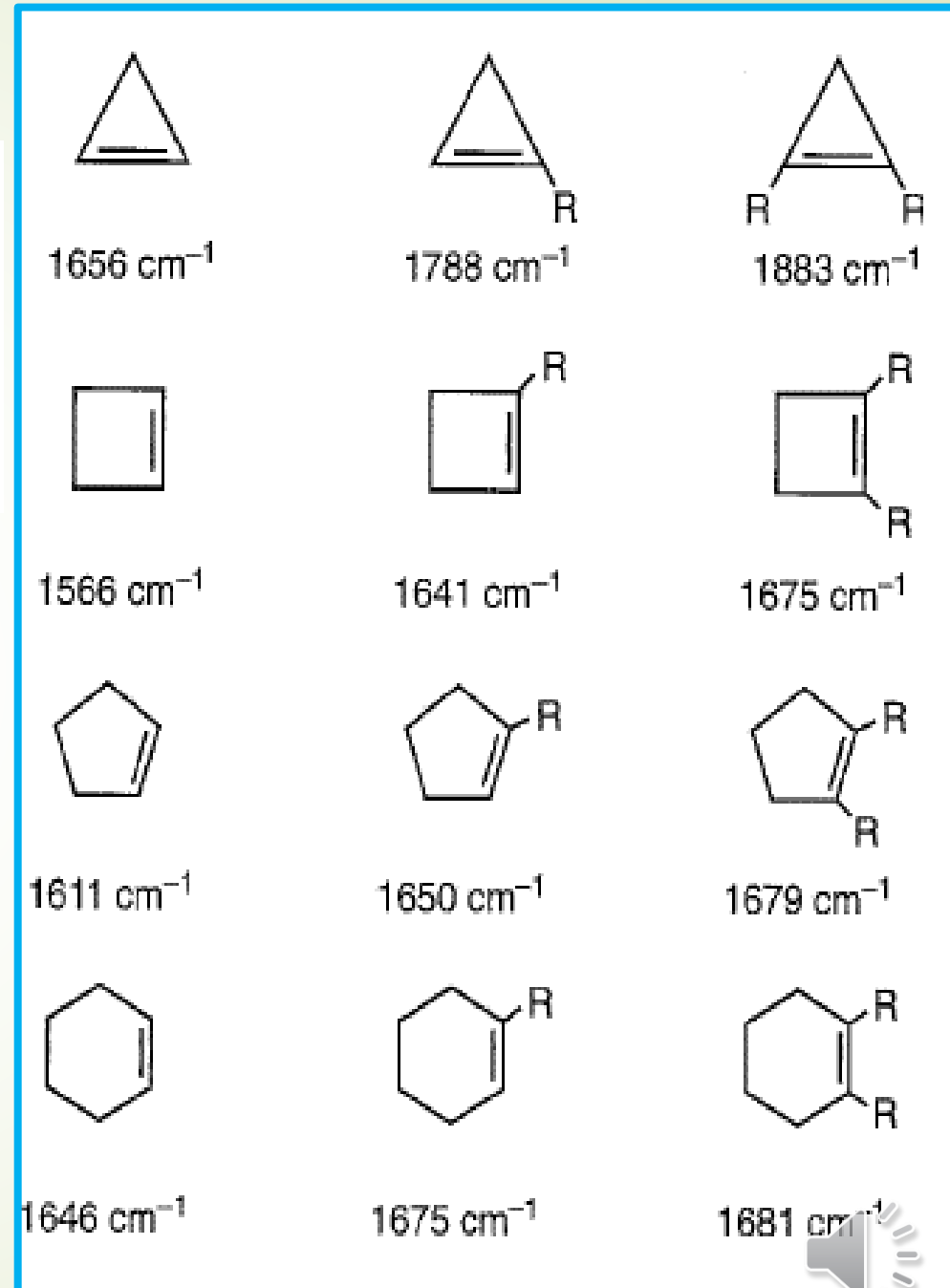
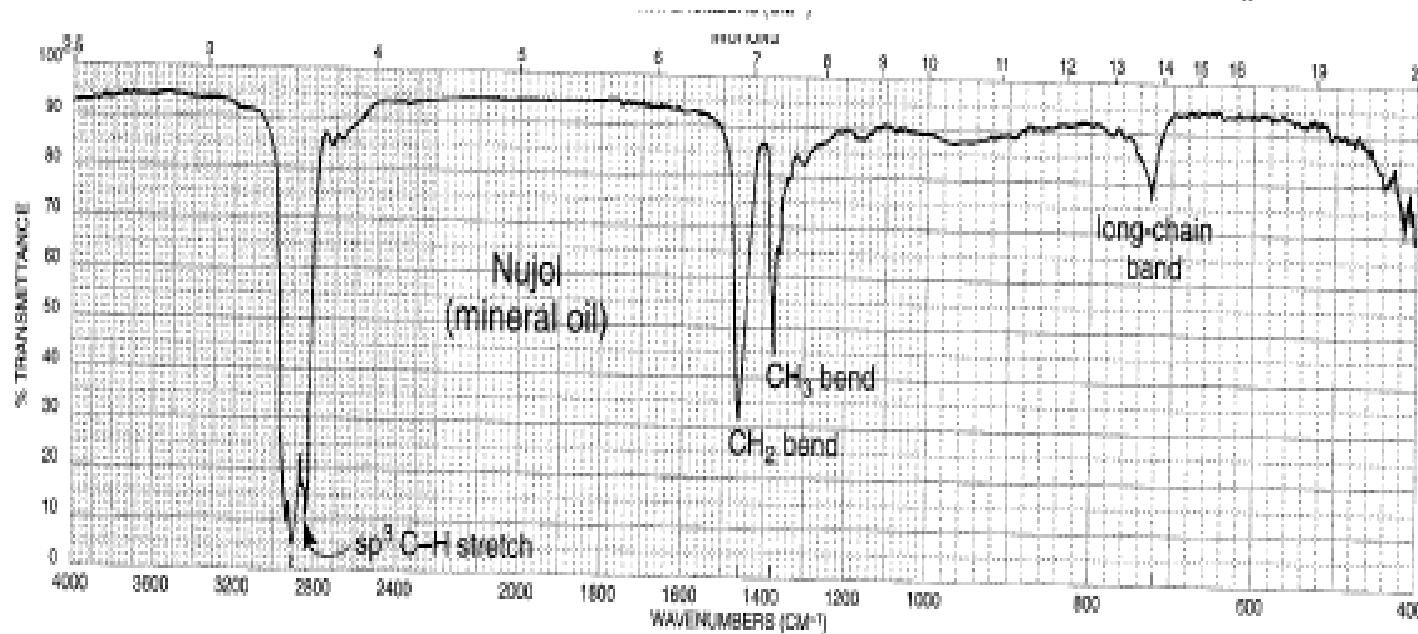


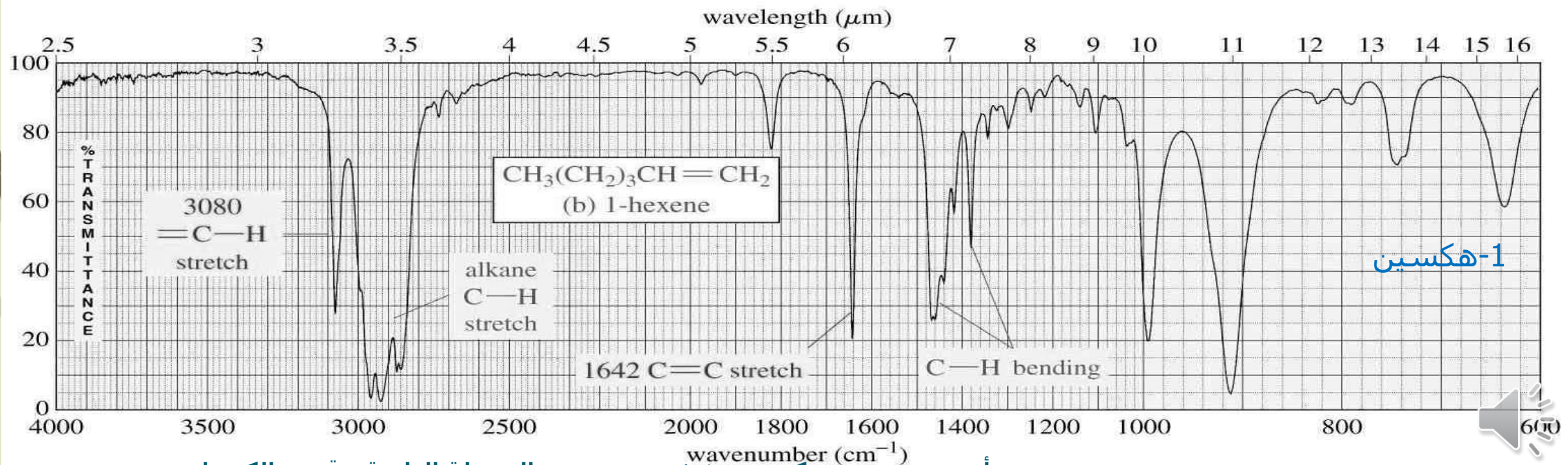
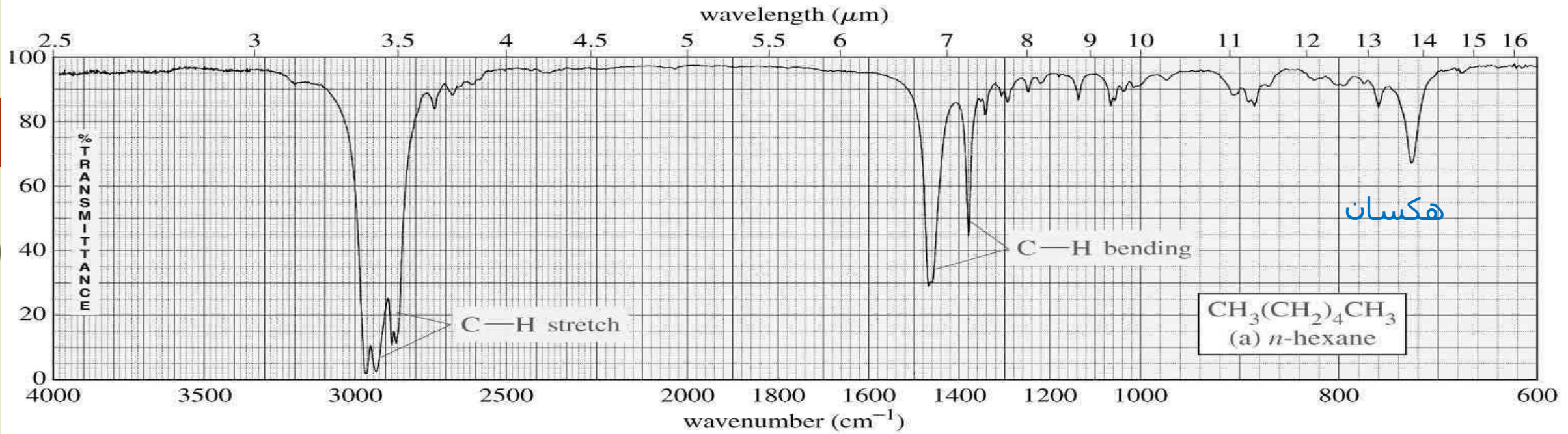
ان استبدال ذرة الهيدروجين الفا بمجاميع الكيل في الانظمة الحلقية المتوترة يعمل على زيادة تردد امتصاص C=C فالسيكلوبيوتين يمتص في 1566 cm^{-1} و 1- مثيل سايكلوبيوئين يمتص في (1641 cm^{-1}) كما هو موضح ادناه لبعض المركبات الحلقية الاوليفينية

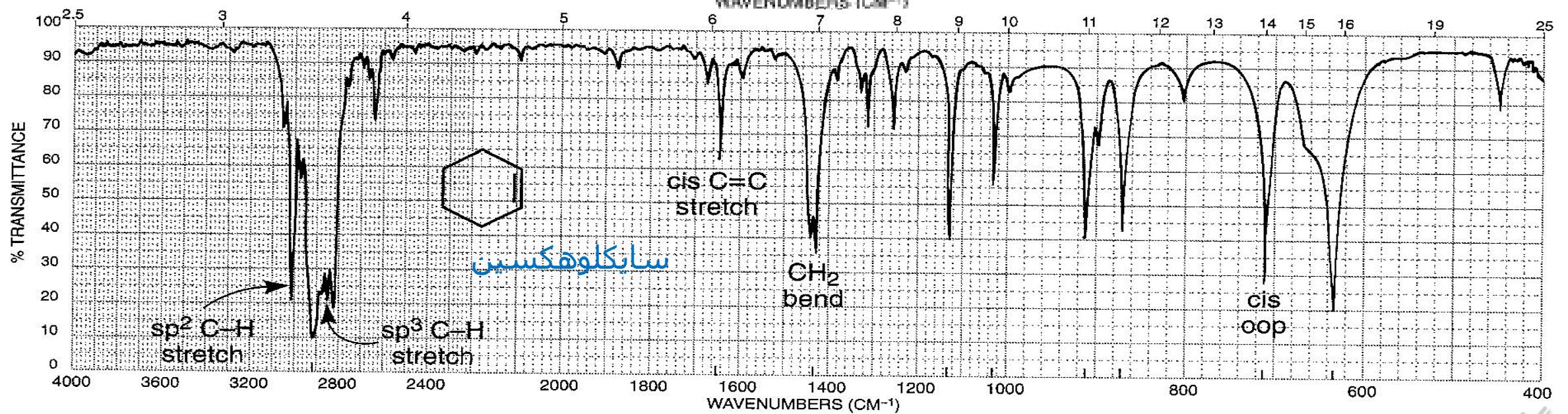
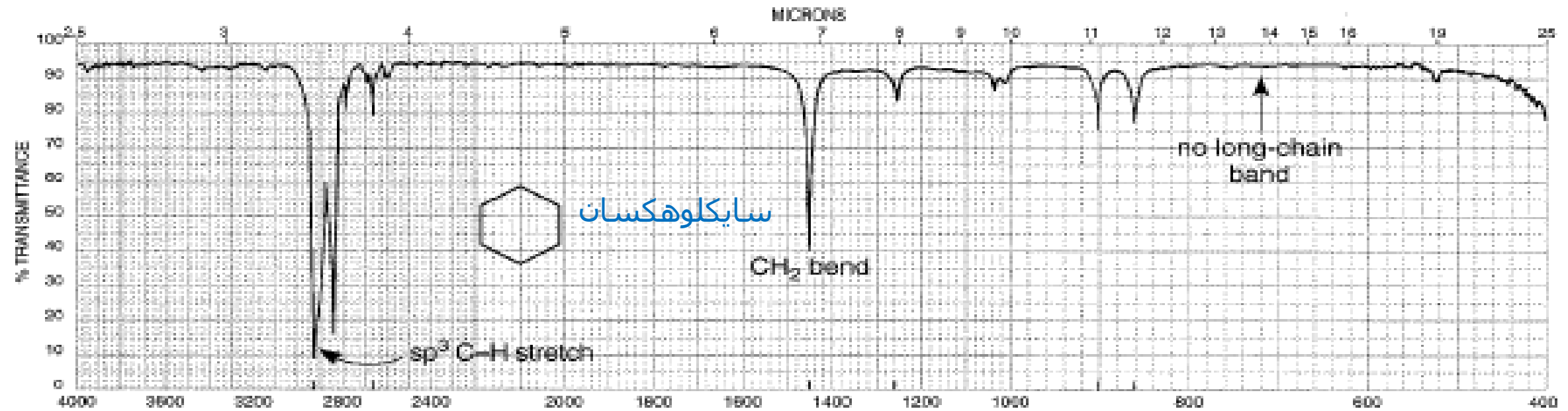
يزداد تردد امتصاص الاواصر الاوليفينية الخارجية بالنسبة لحجم الحلقة ,
حيث يزداد مع انخفاض حجم الحلقة وكما يلي :

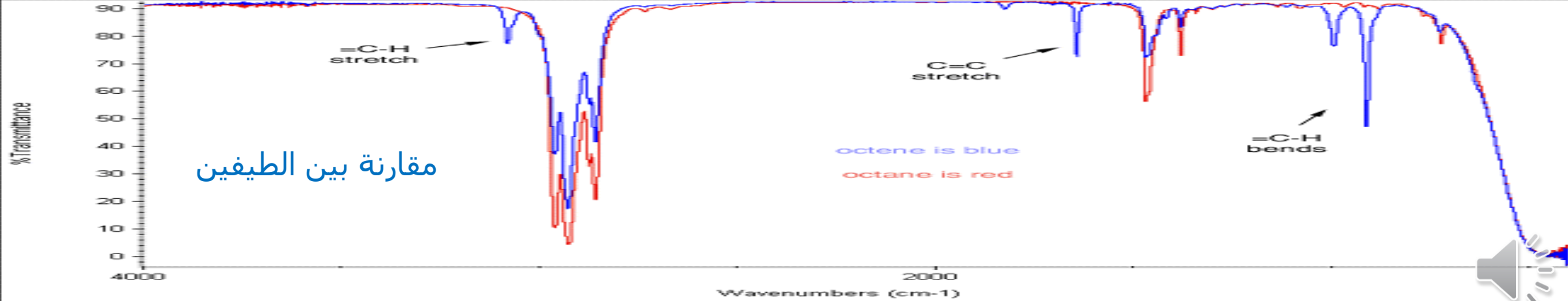
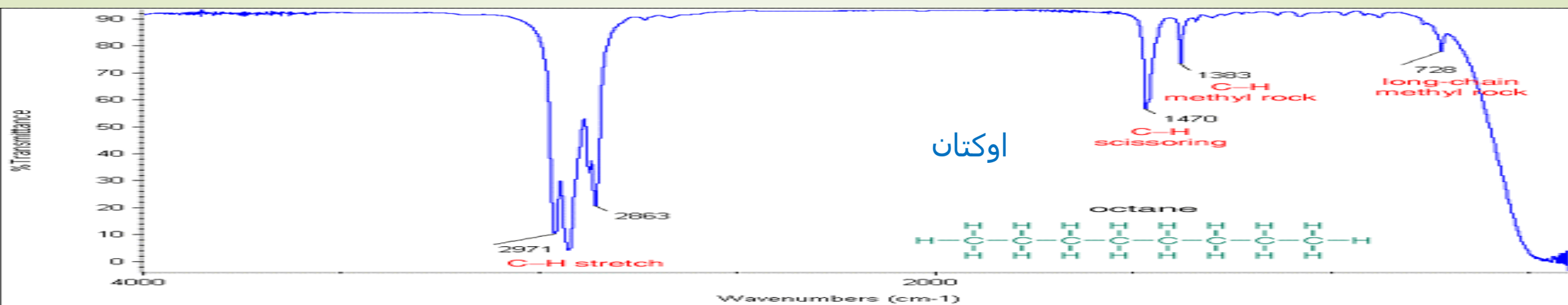


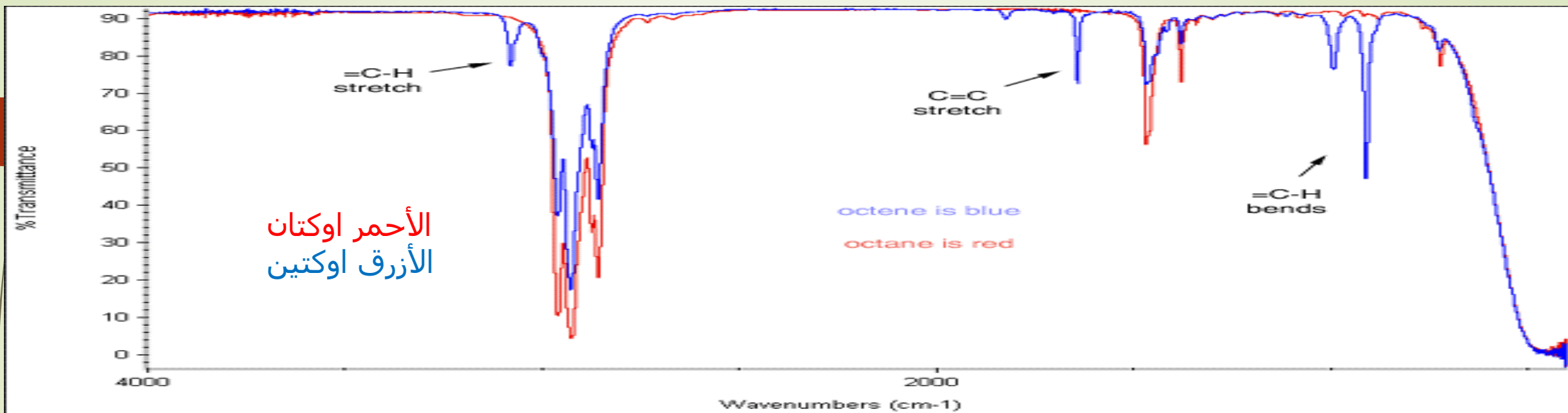
فيما يلي بعض الاطياف النموذجية للالكانات والالكينات والالكينات
وكما يلي :



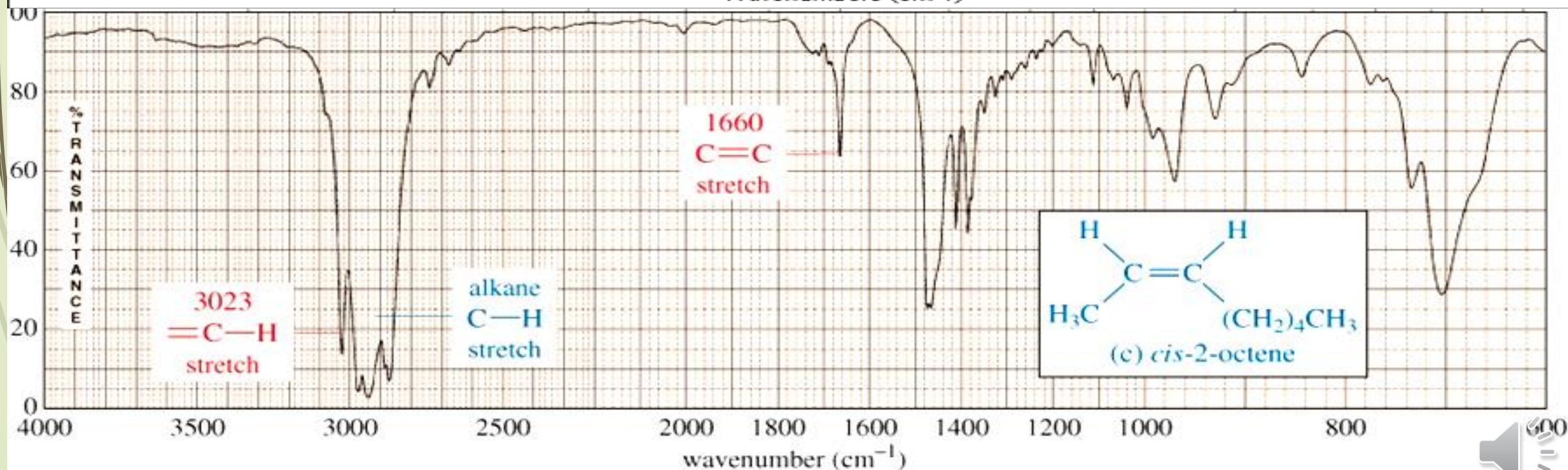


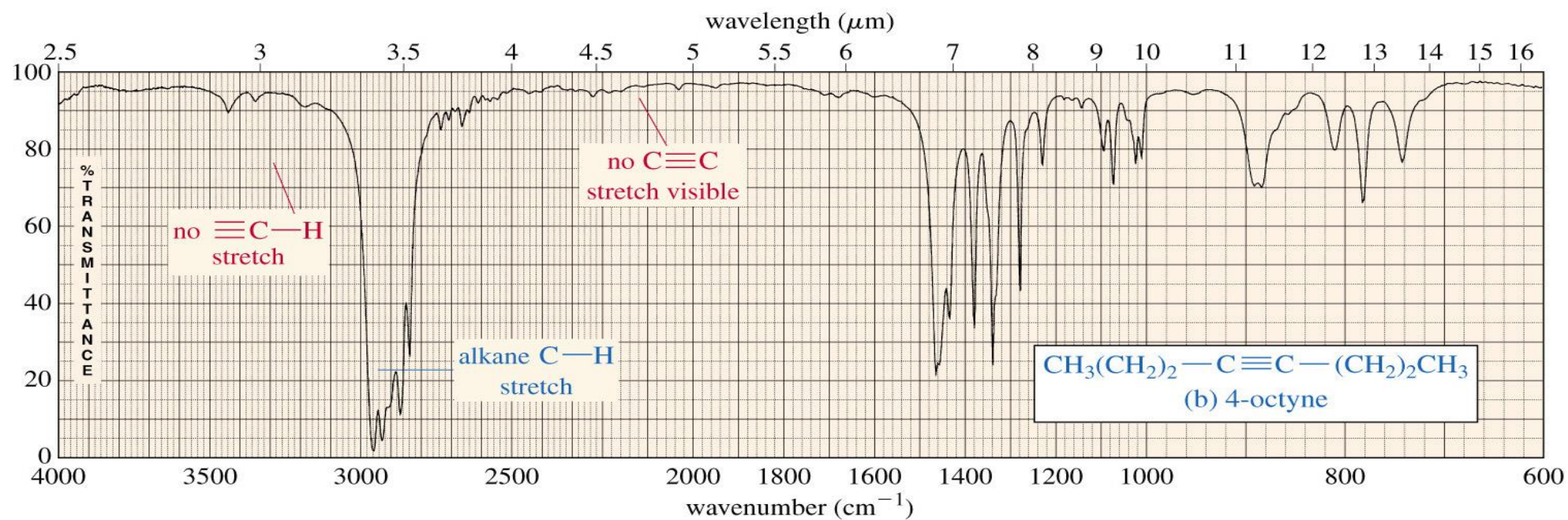
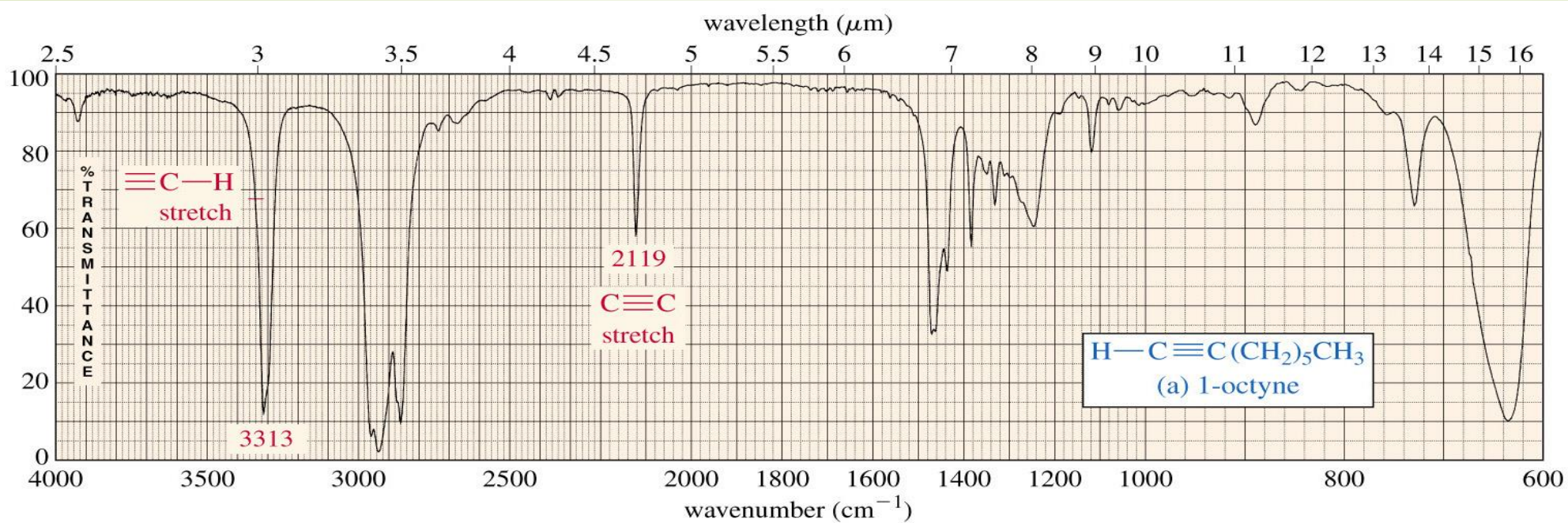






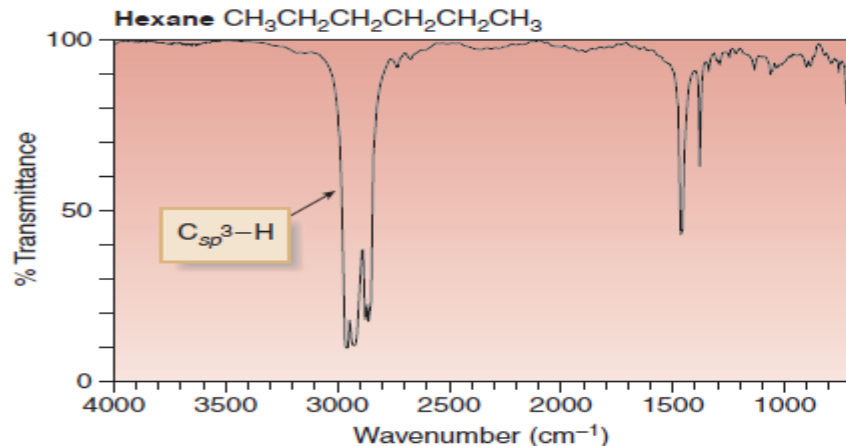
الأحمر اوكتان
الأزرق اوكتين



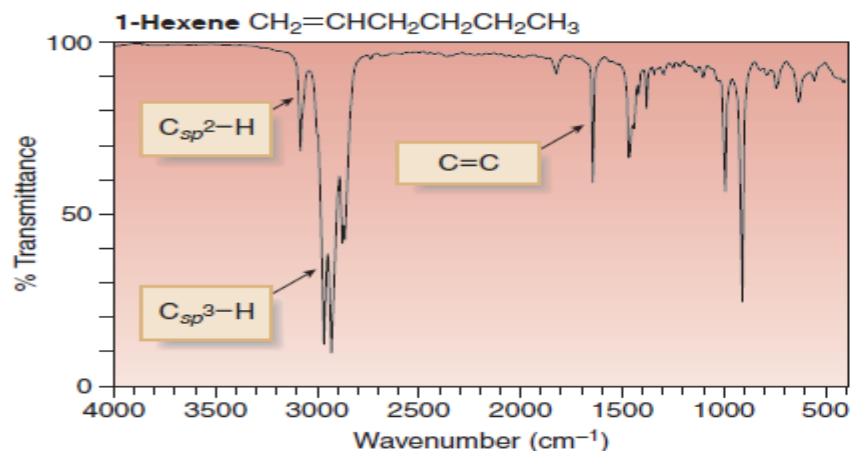


تتميز الألكاينات الطرفية بامتداد C-H (alkynyl) المميز عند حوالي 3300 سم⁻¹ وتمتد الرابطة الثلاثية C-C عند حوالي 2100-2200 سم⁻¹ لا يمكن للألكاينات الداخلية أن تظهر امتداد الأسيتيلين C-H لأن العزم ثنائي القطب صغير جدًا للرابطة الثلاثية ثنائية الاستبدال فيحد من التمديد وتجعل الرابطة الثلاثية C-C غير مرئية.

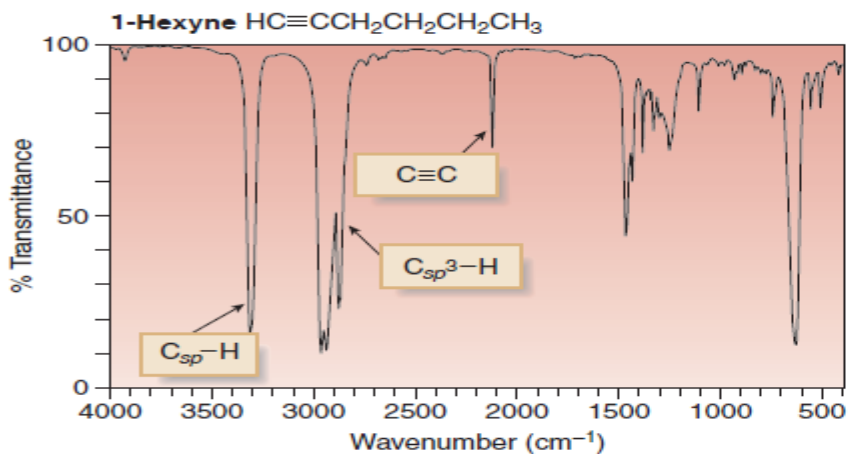




- The **alkane** $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ has only C-C single bonds and sp^3 hybridized C atoms. Therefore, it has only one major absorption above 1500 cm^{-1} , its $\text{C}_{sp^3}\text{-H}$ absorption at $3000\text{--}2850\text{ cm}^{-1}$.

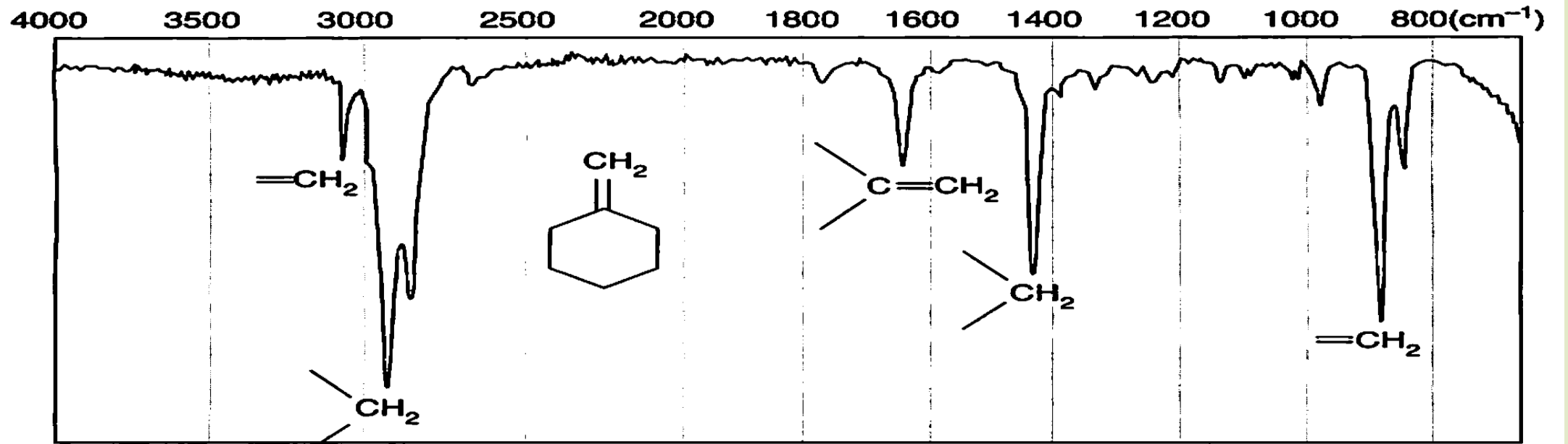


- The **alkene** $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ has a C=C and $\text{C}_{sp^2}\text{-H}$, in addition to its sp^3 hybridized C atoms. Therefore, there are three major absorptions above 1500 cm^{-1} :
 - $\text{C}_{sp^2}\text{-H}$ at $3150\text{--}3000\text{ cm}^{-1}$
 - $\text{C}_{sp^3}\text{-H}$ at $3000\text{--}2850\text{ cm}^{-1}$
 - C=C at 1650 cm^{-1}



- The **alkyne** $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ has a $\text{C}\equiv\text{C}$ and $\text{C}_{sp}\text{-H}$, in addition to its sp^3 hybridized C atoms. Therefore, there are three major absorptions:
 - $\text{C}_{sp}\text{-H}$ at 3300 cm^{-1}
 - $\text{C}_{sp^3}\text{-H}$ at $3000\text{--}2850\text{ cm}^{-1}$
 - $\text{C}\equiv\text{C}$ at $\sim 2250\text{ cm}^{-1}$





واجب: حدد الصيغة التركيبية للمركب في الشكل التالي:

