جامعة تكريت

كلية التربية للبنات

قسم الكيمياء

# التشخيص العضوي العملي

## تحليل طيف الاشعة تحت الحمراء

لطلبة المرحلة الرابعة

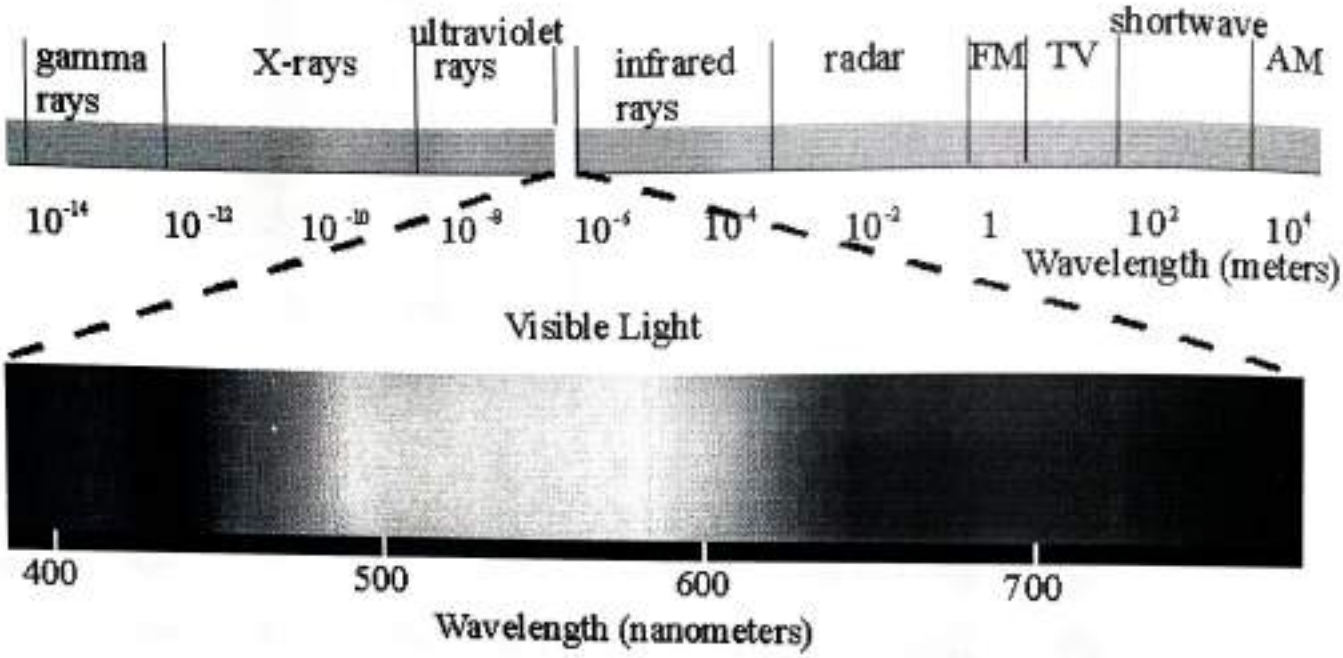
المحاضرة التاسعة

**المدرس المساعد**

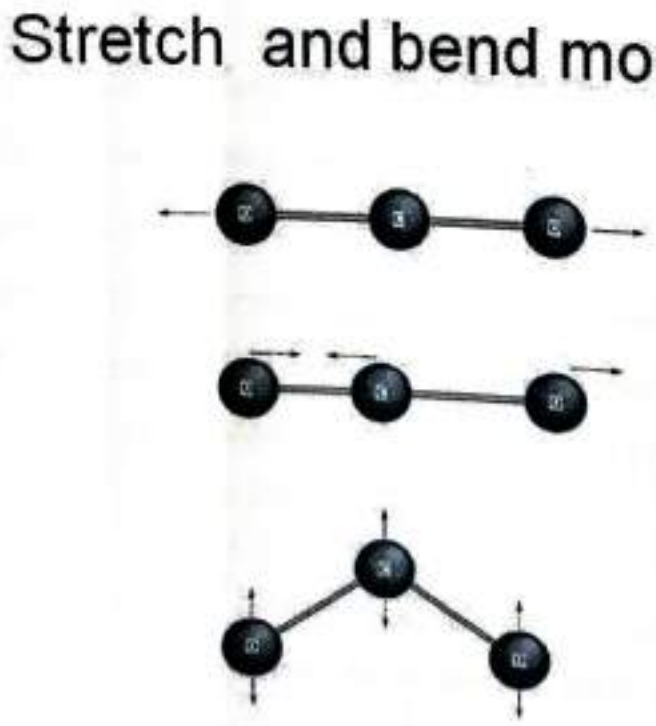
**احمد حاجم سلطان**

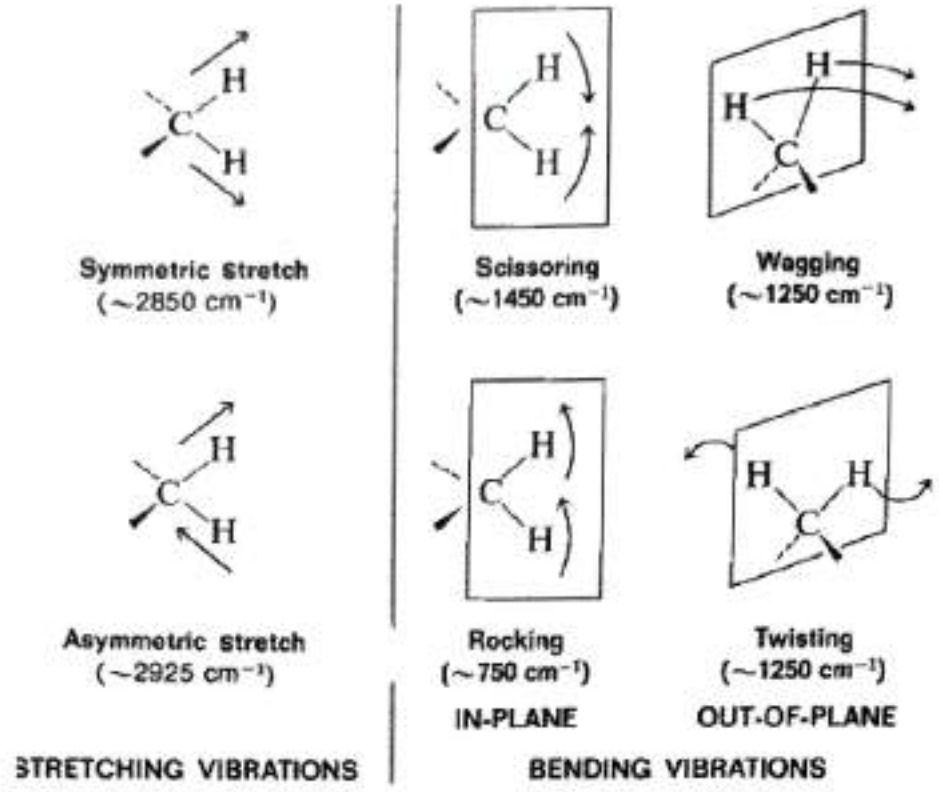
**aSultan@tu.edu.iq**

تقريبا معظم المركبات الكيميائية التي تمتلك اصرة تساهمية سواء كانت مركبات عضوية او لا عضوية ، يمكن لها ان تمتص ترددات معينة من الاشعة الكهرومغناطيسية من المنطقة ما تحت الحمراء من الطيف الضوئي. المنطقة ما تحت الحمراء من الطيف تقع على تردد ذو طول موجي اعلى من تلك التي ترتبط بالضوء المرئي من الطيف، والتي تمتلك طول موجي من 400 الى 800 نانومتر ، ( 1 نانو = $10^{-9}$ سم ) .




عندما تمتص جزيئة اشعة ما تحت الحمراء فانها سوف تثار الى مستويات طاقة اعلى . هذا الامتصاص يكون وفق عملية كوانتية ، بمعنى انها تمتص ترددات معينة فقط من مجموع الترددات الكلية . اثناء عملية الامتصاص، ترددات الاشعة ما تحت الحمراء التي تتطابق مع ترددات الاهتزازات الطبيعية للجزيئة سوف تمتص، والطاقة الممتصة سوف تزيد من حركة الاهتزاز للاواصر داخل الجزيئة.






## ما الذي نبحث عنه عند قراءة مخطط الطيف؟

يعطي جارت ال(IR) معلومات قيمة عن المركب وعن العناصر والمجاميع الفعالة المكونة له . هنا يجب التركيز على ثلاثة اشياء مهمة . الاول موقع الامتصاص . لكل مجموعة فعالة هناك امتصاص بتردد معين يميزه عن غيره . فالموقع مهم جدا في تحديد طبيعة هذه المجموعة . الثاني هو شدة الامتصاص . في بعض الاحيان هناك امتصاصات تكون شديدة وواضحة بينما امتصاصات اخرى تكون ضعيفة جدا . شدة الامتصاص ترمز بالعادة الى تكرر الاصرة او المجموعة الفعالة في المركب والى موقعها ضمن الجزيئة . لكن ليس دائما هذا الامر صحيح . هناك بعض المجاميع تمتص بشدة عالية مثل مجموعة الكاربونيل، لذا يعتبر هذا الامتصاص مميز لها . النقطة المهمة الاخرى التي يجب اخذها بنظر الاعتبار هي شكل الامتصاص . لكل مجموعة فعالة هناك حزمة امتصاص بشكل مميز . يتكرر باستمرار باختلاف المركبات الكيميائية . والتي ممكن الاستدلال بها خصوصا عند تقارب حزم الامتصاص.

في العادة الامتصاص الشديد في منتصف الطيف يدل على وجود مجموعة كاربونيل (C=O) . اذا ان هذه المجموعة تعطي شدة امتصاص عالية . بالاضافة الى ميزة موقع الامتصاص في تحديد المجموعة الفعالة . فان مجموعة الكاربونيل تمتلك شكل مميز وشدة امتصاص مميزة عن غيرها . وبالطبع فان هذا ينطبق على كل المجاميع الفعالة الاخرى . شكل الامتصاص وشدته مهم في الكشف عن وجود المجاميع الفعالة وتشخيص نوعية الاواصر الموجودة وارتباطاتها في اغلب المركبات الاخرى. في بعض الاحيان يتم اللجوء الى شكل وشدة الحزم للتمييز بين بعض انواع المجاميع الفعالة. فعلى سبيل المثال. مجموعتي NH و OH تمتص في نفس المنطقة من الطيف تقريبا .

$$OH = 3650 - 3200\ cm^{-1}$$
$$NH = 3500 - 3300\ cm^{-1}$$

الا ان مجموعة ال NH تعطي امتصاص حاد وضيق . بينما مجموعة ال OH تعطي امتصاص عريض ومدبب . الامينات الاولية تعطي حزمتين في هذه المنطقة بينما الكحولات تعطي حزمة واحدة. لذلك يتوجب عليك حين دراسة جارت الاي ار الانتباه الى شكل الحزمة وشدتها وموقعها.

## تحليل بيانات مخطط الطيف

عند تحليل جارت طيف ال(IR) لاي مركب مجهول ، في البداية يكون التركيز على وجود بعض المجاميع الفعالة ، وهي مجاميع مميزة ومهمة في التشخيص وهي C=O ، O-H ، N-H ، C-O ، C=C ، alkye ، CN ، $NO_2$ اذا تواجدت هذه المجاميع فممكن بشكل مباشر الاستدلال على بعض الصفات التركيبية للمركب . تجنب محاولة تحليل بعض التفاصيل مثل حزمة امتصاص CH قرب $3000\ cm^{-1}$ ، لان اغلب المركبات تمتلك هذه الامتصاصات.

| الحزمة | نوع الحزمة | التردد | الشدة |
|---|---|---|---|
| C-H Alkanes (stretch) | stretch | 3000 – 2850 | s |
| $-CH_3$ | Bend | 1450 - 1375 | m |
| $-CH_2-$ | Bend | 1465 | m |
| Alkenes | Stretch | 3100 - 3000 | m |
| | bend | 1000-1700 | s |
| Aromatics | Stretch | 3150-3050 | S |
| | Out of plane bend | 1000-700 | S |
| Alkyne | Stretch | 3300 | s |
| Aldehyde | | 2900 – 2800<br>2800 - 2700 | W<br>w |
| C=C Alkene | | 1600-1680 | |
| C=C Aromatic | | 1400 – 1600 | |
| CC Alkyne | | 2100- 2250 | |
| C=O Aldehyde | | 1740 - 1720 | |
| C=O Ketone | | 1725 - 1705 | |
| C=O Carboxylic acid | | 1725 - 1700 | |
| C=O Ester | | 1750 – 1730 | |
| C=O Amide | | 1700 - 1640 | |
| C=O Anhydride | | 1810<br>1760 | |
| C-O Alcohols, ethers, esters, Carboxylic acid | | 1300 – 1000 | |
| O-H alcohols, Phenols | | | |
| Free | | 3650-3600 | |
| H-Bonded | | 3400 - 3200 | |
| Carboxylic acid | | 3300- 2500 | |
| N-H primary and secondary amines | | 3500 | |
| CN Nitriles | | 2260- 2240 | |
| N=O Nitro | | 1600-1500<br>1400 – 1300 | |
| C-X Floride | | 1400 - 1000 | |
| Chloride | | 800 - 600 | |
| Bromide , Iodide | | <600 | |

1- مجموعة الكاربونيل C=O

مجموعة الكاربونيل C=O تعطي امتصاص قوي جدا في المنطقة 1820 – 1600 سم $^{-1}$ ، في العادة يكون شكل الحزمة الاقوى بين كل الامتصاصات الاخرى ( يمكن تمييزه بسهولة ) .

اذا ظهرت مجموعة الكاربونيل ، عليك البحث عن الحزم التالية :

أ- مجموعة الهيدروكسيل O-H ( الاحماض الكاربوكسيلية)

امتصاص عريض جدا من المنطقة $cm^{-1}$ 3300 – 2500 ( بالعادة تتداخل مع امتصاص C-H قرب المنطقة $cm^{-1}$ 3000 )

- اذا ظهرت هاتين الحزمتين ( C=O ، O-H ) فالمركب يحتوي على مجموعة كاربوكسيل.

ب- مجموعة N-H ( الاميدات )

حزمة متوسطة الشدة تظهر في المنطقة القريبة من $cm^{-1}$ 3500 ، في بعض الاحيان تظهر بشكر امتصاص مزدوج على حسب ذرات الهيدروجين المتصلة بالنيتروجين.

- اذا ظهرت هاتين الحزمتين ( C=O ، N-H ) فالمركب يحتوي على مجموعة امايد.

ت - مجموعة C-O ( الاسترات)

امتصاص متوسط الشدة في المنطقة من $cm^{-1}$ 1300 -1000 .

ث - مجموعتي كاربونيل C=O (الانهدريدات)

ظهور حزمتي امتصاص بحدود $cm^{-1}$ 1810 و $cm^{-1}$ 1760 .

ح - مجموعة C-H الالديهايدية ( الالديهايدات)

ظهور حزمتي امتصاص قرب المنطقة $cm^{-1}$ 2850 و $cm^{-1}$ 1760

خ- عدم وجود اي مجموعة اخرى ( الكيتونات) .

2- في حال عدم وجود مجموعة الكاربونيل نبحث عن وجود المجاميع التالية :

أ- مجموعة الهيدروكسيل O-H ( الكحولات او الفينولات)

امتصاص عريض قرب المنطقة $cm^{-1}$ 3300 – 3600 ، يمكنك تاكيد وجود هذه المجموعة بالبحث عن حزمة C-O قرب المنطقة ( $cm^{-1}$ 1000 -1300).

ب- مجموعة N-H ( الامينات)

امتصاص متوسط الشدة قرب المنطقة $cm^{-1}$ 3500 .

ت- مجموعة C-O في غياب مجموعة الهيدروكسيل ( الايثرات)

حزمة شديدة الامتصاص في المنطقة $cm^{-1}$ 1000 -1300 .

3- الاصرة المزدوجة او الحلقة الاروماتية او كلاهما

مجموعة C=C تعطي امتصاص ضعيف قرب المنطقة $1650\ cm^{-1}$ ، في حال وجود حلقة اروماتية سوف تظهر حزمتين في المنطقة من $1650 - 1450\ cm^{-1}$ ، يتم تاكيد وجود الحلقة الاروماتية بالرجوع الى حزمة امتصاص C-H= والتي تقع بعد المنطقة $3000\ cm^{-1}$ .

4- الاصرة الثلاثية

مجموعة النتريلات CN تعطي امتصاص حاد قرب المنطقة $2250\ cm^{-1}$

مجموعة الالكاين CC تعطي امتصاص ضعيف في المنطقة $2150\ cm^{-1}$ ، يمكن تاكيد وجود مجموعة الالكاين بالرجوع الى امتصاص حزمة C-H في الالكاينات الطرفية حيث تعطي حزمة امتصاص شديدة وحادة في المنطقة $3300\ cm^{-1}$ .

5- مجموعة النايترو $NO_2$

تعطي حزمتي امتصاص قرب المنطقة $1600 - 1500\ cm^{-1}$ و $1390 - 1300\ cm^{-1}$ .

6- الهيدروكاربونات الاليفاتية

عدم وجود اي حزمة امتصاص من الحزم المذكورة اعلاه . الحزمة الرئيسية هي حزمة C-H الاليفاتية التي تظهر قرب منطقة $3000\ cm^{-1}$ . الاحزمة الاخرى هي حزمة انحناء $CH_2$ التي تظهر على شكل حزمتين في المنطقة $1450\ cm^{-1}$ و $1375\ cm^{-1}$ .