



رفرنس ها:

- 1- کتاب کروماتوگرافی و طیف سنجی - دکتر عباس شفیعی
- 2- نگرش بر طیف سنجی - پاپویا (توصیه می شود)
- 3- شناسایی ترکیبات به روش طیف سنجی - سیلور اشتاین
- 4- روش های طیف سنجی در شیمی آلی- ویلیامز فلمینگ
- 5- طیف سنجی تشدید مغناطیس هسته ای 1 بعدی و 2 بعدی- دکتر عباس شفیعی

طیف سنجی IR (مادون قرمز): (هدف این است که طیف IR از یک ترکیب می بینیم را کاملا تفسیر کنیم)

طیف امواج الکترومغناطیس بر اساس طول موج

اشعه X	U/V	Visible	IR	Microwave	Radio
	200- 400nm	400- 800nm	2.5- 25 μ m		به متر می رسد

طول موج از چپ به راست زیاد می شود؛ پس انرژی کم می شود. پس اشعه X از همه پر انرژی تر است. برای همین اشعه X و UV بر ارگان های حیاتی اثرات مخرب دارد. برای مثال برای ضد عفونی کردن استفاده می شود.

ثابت پلانک \rightarrow انرژی موج $\rightarrow E = hV \rightarrow$ فرکانس

انرژی و طول موج رابطه عکس دارند

$$E = h \frac{c}{\lambda} \rightarrow E \sim \frac{1}{\lambda} \quad V = \frac{c}{\lambda}$$

IR یک طیفی دارد که این طیف بر مبنای واحدی به نام عدد موج تفسیر می شود. عدد موج را به صورت \bar{V} نشان می دهند و برابر $\frac{1}{\lambda}$ است و واحد آن $\frac{1}{cm}$ یا cm^{-1} است.

$$E = hc\bar{V}$$

چرا از \bar{V} استفاده می شود؟ چون ارتباط مستقیم با انرژی دارد و در تفسیر های ما راحت است و لازم نیست همه چیز را برعکس کنیم. مثلا وقتی می گوئیم V ارتعاش یک پیوند در \bar{V} بالاتر اتفاق افتاده است. یعنی ابتدا آن پیوند انرژی بیشتری نیاز داشته است. اگر می خواستیم از خود λ استفاده کنیم در محور X ها باید همه چیز را برعکس می کردیم؛ همان طور که در مبحث UV بر اساس λ کشیده می شود.

یکای V \leftarrow 1/cm

$$\bar{V} = \frac{1}{\lambda} \quad ; \quad \frac{1}{2.5 \times 10^{-4}} = 4000 \quad ; \quad \frac{1}{25 \times 10^{-4}} = 400 \quad \leftarrow \quad 2.5 \mu m < \lambda < 25 \mu m \quad : \quad \text{دلیل} \quad \leftarrow \quad 400 < \bar{V}_{IR} < 4000$$



نویسندگان:

درس:

جلسه:



تاریخ:

دارو سازی مهر 95

شماره صفحه:

چه اتفاقی می افتد که یک ترکیب در دستگاه به ما طیف IR می دهد و آن طیف چه اطلاعاتی را در اختیار ما می گذارد؟

مولکول ها مجموعه ای از اتم ها هستند، ساختار ساکن و بی حرکتی ندارند. انرژی های مختلفی می توانیم برای مولکول ها تصور کنیم. مثل انرژی (transition) جنبشی، انرژی اسپین (انرژی گردشی یا انرژی که سبب گردش حول محوری که از مرکز تقارن مولکول عبور می کند می شود)، انرژی الکترونی (انرژی e ها در ترازشان)، انرژی ارتعاشی (مولکول از اتم هایی تشکیل شده که با پیوند به هم متصل هستند. این پیوند ها ثابت نیستند و در یک محدوده باریکی حرکت می کنند و بزرگ و کوچک می شوند. 2 هسته نزدیک می شوند و دوباره همدیگر را دفع می کنند).

پس ارتعاش به این معناست که پیوند بین اتم ها در یک محدوده باریکی می تواند بزرگ و کوچک شود. به علاوه ارتعاش می تواند به نحو دیگری باشد؛ غیر از اندازه طول پیوند، زاویه پیوند هم مقداری تغییر می یابد. مثلا در مولکول آب هم پیوند $O - H$ می تواند کوتاه و بلند شود و هم زاویه در محدوده باریکی تغییر کند و اصطلاحا می گوئیم انرژی ارتعاشی دارد.

امواج الکترومغناطیسی نام برده شده در کدام بر مبنای انرژی ای که دارند وقتی به یک مولکول برخورد می کنند می توانند انرژی های بالا را تغییر دهند.

آیا هر موجی همه ی انرژی ها را تغییر می دهد؟ در حقیقت خیر، بستگی دارد که انرژی چه قدر قدرت داشته باشد و تغییر انرژی چقدر قدرت داشته باشد. مثلا برای تغییر انرژی الکترونی (انتقال الکترون از تراز اصلی و اوربیتال پیوندی به ضد پیوندی) انرژی زیادی احتیاج داریم. موج UV این کار را انجام می دهد. منظور از این که می گوئیم یک مولکول جذب UV دارد این است که برخورد آن باعث می شود ها از تراز اصلی و اوربیتال های پیوندی به اوربیتال های ضد پیوندی بروند.

IR می تواند الکترون ها را جا به جا کند؟ خیر، طول موج IR افزایش یافته پس انرژی کاهش یافته و نمی تواند جا به جا کند اما می تواند انرژی ارتعاشی را تامین کند. در واقع محدوده ای که طول پیوند و زاویه پیوند کم و زیاد می شود به وسیله برخورد IR، دامنه ارتعاشات افزایش می یابد.

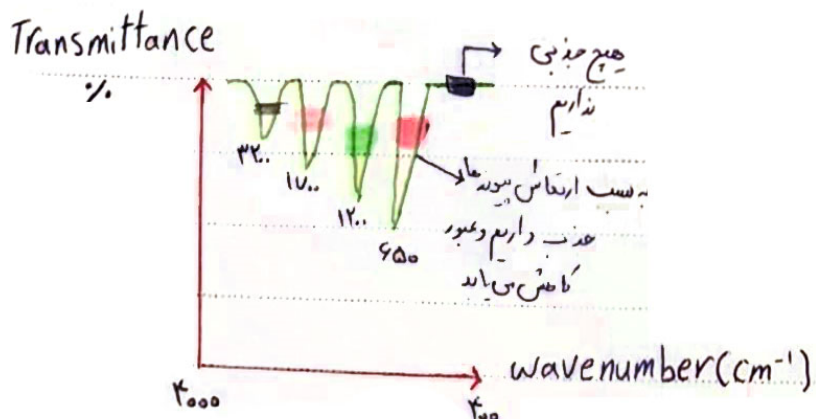
آیا تمامی پیوند ها جذب IR دارند؟ خیر، در شرایط بسیار خاصی ممکن است جذب IR نداشته باشیم. IR در واقع گشتاور دوقطبی (Dipole moment) یک پیوند را نشان می دهد. گشتاور دوقطبی بار جزئی + و - است که 2 اتم متصل به هم دارند.

اگر حول یک پیوند تقارن کامل وجود داشته باشد عملا ما همان 2 قطبی نداریم بنابراین تغییری در همان 2 قطبی توسط IR اتفاق نمی افتد. این پیوند خاص جذب ندارد.

این 2 ترکیب را در نظر بگیرید:

در ترکیب 1 تقارن کامل حول پیوند $C \equiv C$ وجود دارد. گشتاور 2 قطبی وجود ندارد که تحت تاثیر IR قرار گیرد پس پیوند $C \equiv C$ جذب IR ندارد. همچنین $C = C$ ترکیب دوم چون تمام پیوند ها یکسان هستند. اگر یکی از متیل ها تغییر کند مثلا اتیل شد دیگر تقارن حول $C = C$ وجود ندارد. گشتاور 2 قطبی وجود داشته و ترکیب جذب IR دارد.

سوال: آیا این 2 مولکول جذب IR ندارند؟ بله دارند. ما گروه CH_3 داریم که C-H و جذب IR دارند. یا کربن متیل با کربن پیوند دوگانه پس نمی گوئیم مولکول جذب IR ندارد. می گوئیم آن پیوند جذب ندارد پس ما انتظار نداریم جذب پیوند $C = C$ یا $C \equiv C$ را در این 2 مولکول در طیف IR مشاهده کنیم.



ممکن است IR را بر مبنای طول موج (2.5-25) به جای عدد موج بنویسند و در آن صورت γ ها نیز بر مبنای Absorbance است ولی عمدتاً به حالت بالا است. نمودار را گاهی به صورت مربع می کشند که 2 ضلع دیگر را طول موج و درصد جذب می نویسند.

Transmittance چیست؟

وقتی IR در محدوده خودش (2.5-25 یا 400-4000) تابانده شود آیا کل محدوده جذب می شود؟ خیر، بر مبنای ساختار ملوکول است که چه پیوندهایی دارد و این پیوندها چه قدر انرژی نیاز داشتند و جذب را نشان دهند

*هیج جذبی نداریم. *به سبب پیوندی که داریم تعدادی جذب شده و سبب ارتعاش شده است.

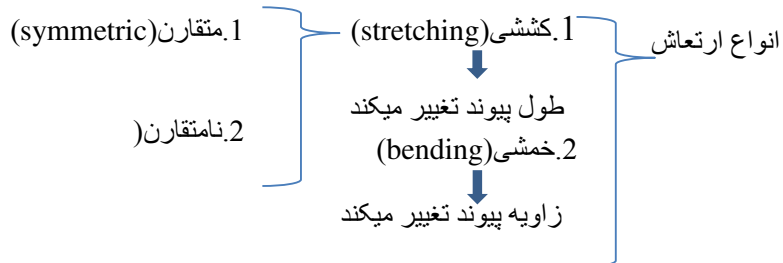
*در این شکل شما دره میبینید ولی در غلط مصطلح پیک نامیده می شود. چه فایده ای دارد؟

اگر بدانیم که برای مثال $C=C$ در 1650 جذب دارد یک ترکیب مجهول و یا معلوم را IR می گیریم و در 1650 پیک مشاهده می شود. پس ترکیب $C=C$

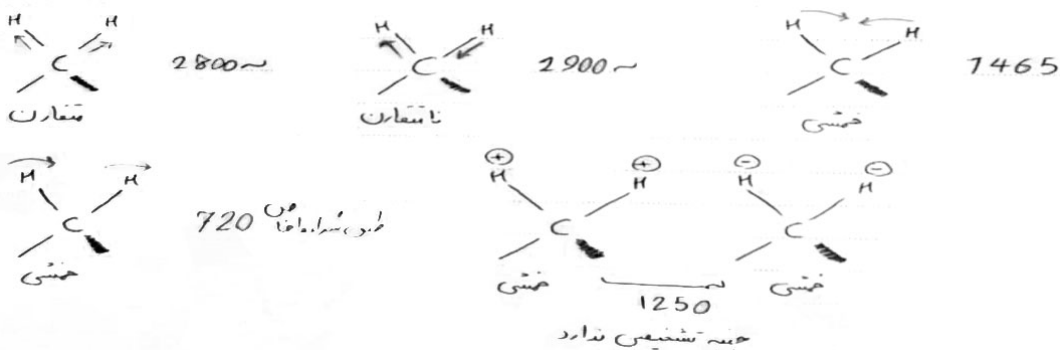
دارد و یا ترکیب معلوم است، می دانیم که باید پیک 1650 دیده شود پس من میتوانم اطلاعات ساختاری ترکیب را پیدا کنم. دقت داشته باشید به هیچ عنوان در یک کار تحقیقاتی نمی توانیم از طیف IR تنها استفاده کنیم. البته در مثال های آینده از فرمول بسته و طیف IR ساختار را پیدا می کنیم ولی در کار عملی نمی توان فقط با طیف IR به یک ساختار رسید. ما نیاز به مجموعه ی روش های تجزیه دستگاهی داریم (IR, NMR) پروتون و کربن، طیف سنجی جرمی) و از این مجموعه این ها برای مثال ساختار ترکیب استخراج شده از گیاه را پیدا می کنیم.

در ضمن این طور نیست که از 400 تا 4000 تک تک پیک ها را بررسی کنیم همه ی این پیک ها قابل تفسیر نیستند. جاهایی وجود دارد که تعدادی پیک هستند که قابل شناسایی نیستند.

در IR صحبت از یک سری اعداد کردیم. ماهیت این اعداد چیست؟ عدد موج هستند یعنی جاهایی که ارتعاش در یک پیوند خاص ایجاد میشود و به وسیله آن میتوان به وجود پیوند پی برد. واحدشان $1/cm$ است و مفهوم آن طول موجی را نشان می دهد که در آن یک پیوند اتفاق می افتد.



از نظر انرژی مورد نیاز ارتعاشات کششی انرژی بیشتری می خواهند یعنی ما انتظار داریم این ارتعاشات را روی طیف به سمت چپ ببینیم ولی خمشی ها را به سمت راست میبینیم. پس ارتعاشات کششی از خمشی انرژی بیشتری می خواهند و بین کششی متقارن و کششی نامتقارن، کششی نامتقارن انرژی بیشتری می خواهد.



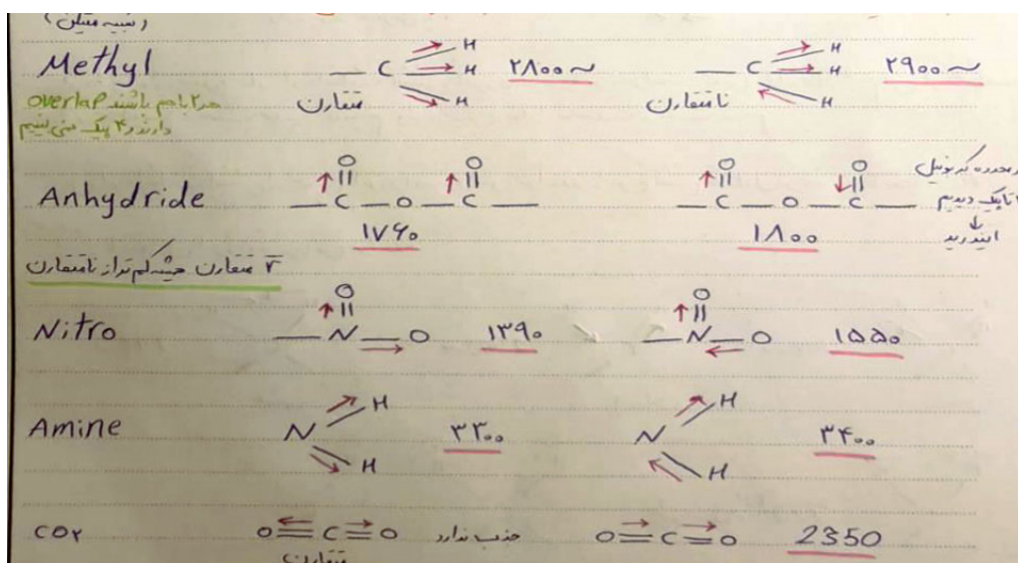
**آلکان ها:

C-H های کششی: 2900-2800 (نرسیده به 3000)

C-H های خمشی: 1465 (جلوتر توضیح داده شده)

واحد این اعداد 1/cm است. وقتی می گوئیم در 1465 جذب دادیم یعنی در آن عدد موج C-H های گروه CH₂ ارتعاش خمشی پیدا میکنند.

بررسی یک سری ارتعاشات متقارن و نامتقارن در برخی گروه های عاملی:





گاه گذاری طیف می گیریم می بینیم در 2350 یگ پیک وجود دارد که حالت شکستگی دارد. این CO2 هوا است و خطای اپراتور است.

غیر از ارتعاشات اصلی کششی و خمشی که گفته شد یکسری ارتعاشات دیگری وجود دارد که ماهیت و اینکه از کجا پیدا میشوند، خیلی مشخص نیست. در همین حد که میگویند برهم کنش ارتعاشات اصلی کنار هم، شاید باعث بروز اینها میشود که سه دسته اصلی بوده و مورد 4 هم یک حالت خاص است که گفته خواهد شد.

1. ارتعاشات overtone:

ارتعاشاتی هستند که ضریب عدد صحیحی از ارتعاشات اصلی هستند. مثلا پیوندی داریم که در 700 جذب دارد، در 1400 و 2100 هم پیک مشاهده میشود. این ارتعاشات overtone هستند.

ارتعاشات 1 و 2 و 3 (که در ذیل خواهند آمد) معمولا نسبت به ارتعاشات اصلی کوتاه تر هستند به طوری که ارتفاع ارتعاشات اصلی معمولا خیلی بلندتر است!

Overtone ها به طور معمول باعث پیچیده تر شدن طیف میشوند، یعنی یکسری پیک های زائدی هستند که اضافه میشوند در پیک ما و باعث شلوغ شدن آن میشوند. در موارد خاصی که در آینده به آنها خواهیم رسید، ممکن است به صورت استثنا جنبه ی تشخیصی داشته باشند ولی به صورت عمده باعث پیچیده تر شدن طیف میشوند. این پیک ها معمولا بسیار ضعیف بوده و اگر نمونه را با دقت بگیریم ممکن است مشاهده نشوند، فقط باید در گوشه ذهنمان داشته باشیم این پیک ها وجود دارند تا زمانی که در حال تفسیر طیفی هستیم و پیکی را که نباید، میبینیم دچار تشویش ذهنی نشویم. شاید overtone بوده که بایک بررسی دقیق تر روی طیف میتوان فهمید که آیا میتواند ضریب عدد صحیح یکی از پیک ها هست یا نه!

← برهم کنش ارتعاشات جنبشی و کششی در کنار هم ممکن است باعث ایجاد این ارتعاشات شود که منشأش هم خیلی مشخص نیست.

2. پیک های combination:

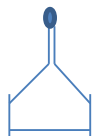
مجموع پیک های اصلی را گاهی در پیک ها میبینیم.
 $v_1 + v_2 : 600 + 1400 = 2000$

3. پیک های difference:

حاصل تفریق دوتا پیک اصلی را گاهی در پیک ها میبینیم.
 $v_1 - v_2 : 1500 - 500 = 1000$

4. Fermi Resonance | ارزونانس فرمی:

گاهی برخی پیک ها ظاهر دوشاخه پیدا میکنند. در مورد گروه عاملی کربونیل خیلی شایع است. رزونانس فرمی در اثر Interaction متقابل بین ارتعاشات فرعی (overtone, combination, Difference) به وجود می آید، هر چند ماهیتا و ذاتا خیلی مشخص نیست که چی هستند و یا چه جور ارتعاشی هستند ولی به طور کلی برهم کنش بین ارتعاشات اصلی و سه ارتعاش گفته شده باعث آن میشود.





در این مورد اگر حواسمان به رزونانس فرمی نباشد دچار اشتباه میشویم چون ناحیه کربونیل یونیک بوده و معمولا در این ناحیه پیک دیگری نداریم و ممکن است شک کنیم که نکند دوتا گروه کربونیل هست ، دوتا نزدیک بوده و باهم overlap کردند و یا ...

ولی این به دلیل رزونانس فرمی است در واقع به این صورت توجیه میشود که ارتعاش کششی اصلی کربونیل دارد با نوارهای overtone , combination , Difference و... اینتر اکشن میدهد و باعث شده است پیک تک شاخی که بوده ، دوشاخه شود!

آیا تعداد پیک هایی که میبینیم ، تعداد گروه های عاملی رابه ما نشان میدهند؟
خیر.

یک رابطه ای وجود دارد به صورت تئوری برای اینکه یک مولکول چندتا پیک IR محتمل دارد:

در مورد مولکول های حلقوی: $3n-6$ ← n: تعداد اتم ها

در مورد مولکول های خطی: $3n-5$ ← n: تعداد اتم ها

مثال:

$$\text{بنزن (C}_6\text{H}_6) : (3 \cdot 12) - 6 = 30$$

این عدد محتمل است اما واقعا همین تعداد را میبینیم؟

ممکن است ببینیم ولی همیشه اینطور نیست. اغلب کمتر: چون خیلی از گروه های عاملی و خیلی از پیوندها انرژی نزدیک بهم دارند بنابراین Overlap شده و به جای اینکه دوتا پیک کنار هم ببینیم یک پیک پهن تر میبینیم] یا ممکن است بیشتر: اگر جسم ناخالص باشد محتمل است ناخالصی هم پیک اضافه بدهد ولی اگر خالص باشد و باتوجه به دو فرمول گفته شده در مورد ارتعاشات اصلی و اینکه ما در کنار آنها یکسری ارتعاشات فرعی هم داریم، اینها به طیف اضافه شده، طیف IR را شلوغ میکنند و بنابراین تعداد پیک ها بیشتر میشود. [ولی پایه همون دو فرمول است!

رابطه ای از قانون هوک در فیزیک استخراج شده است که ارتباط میان V را نشان میدهد. عواملی که روی آن موثر هستند، چه عواملی V یک پیوند را بیشتر یا کمتر میکنند و...

$$\frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{K}{\mu}} = \square$$

K: نیروی پیوند

C: سرعت نور

μ : حاصل ضرب جرم دو اتم متصل بهم تقسیم بر حاصل جمع جرم دو اتم متصل بهم

یعنی هر قدر نیروی پیوند بیشتر باشد ← V بیشتر است

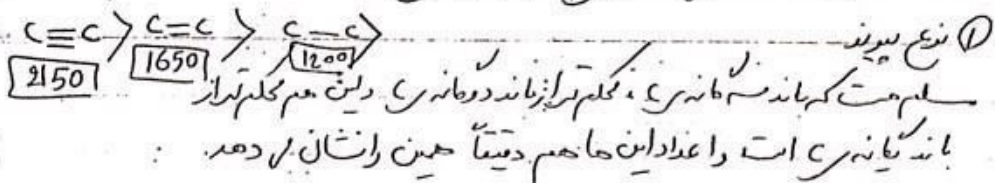
پیوند محکمتر است و ما نیاز داریم انرژی بیشتری بدهیم تا ارتعاش کند.

هر قدر جرم دو اتم متصل بهم با پیوند بیشتر باشد ← V کمتر خواهد بود

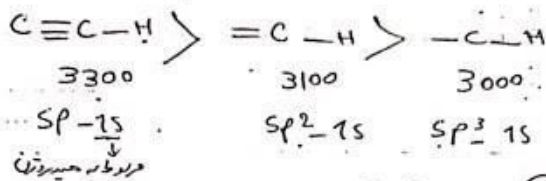
یعنی ارتعاش راحت تر خواهد شد.

بنابراین همه هم عدد بالاتر خواهد بود و با هم، نسبت یکسان دارد یعنی همه اتم‌ها را به هم متصل شده اثر می‌دهد، که کمتر از یک برابر ارتعاش، لازم داریم.

حالا عواملی که در حالت فرکانس در K (ثابت پیوند) پیوند:

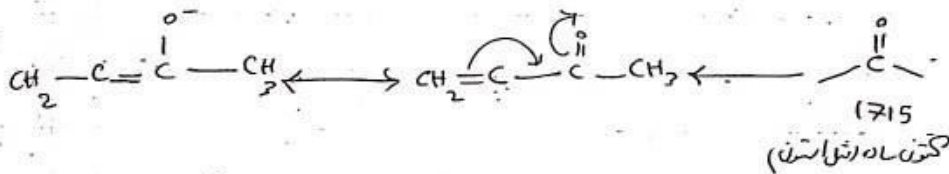


② پیوند هیدروکربن



در این سهم P اثر می‌دهد و پیوند کمتری در واقع، در واقع، در sp^2 است، ارتعاش، راحت‌تر می‌شود که در 3100 و با هم در sp^3 اثر می‌دهد و کمتری در sp^2 است، ارتعاش را زیر 3000 داریم (در مثال و میل گفتیم که در ارتعاش متوازن و نامتوازن داریم در پیوند 2800 و 2900 می‌باشد).

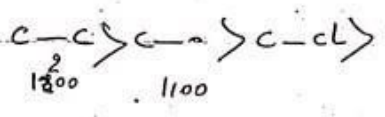
③ رزونانس



در این در مورد ارتعاش که برین، صحبت می‌کنیم، الان فکر کنید با این وضعیت که وجود دارد یعنی که برین بین دو حالت در نوسان است، که چه اتفاق برایش می‌افتد، نسبت به عدد 1715؟ 1715 کاهش پیدا می‌کند، و علتش این است که به خاطر این رزونانس که پیش می‌آید، عملاً $\text{C}=\text{C}$ یک پیوند میان دو کربن خواهد بود (کربان می‌شود دوباره در میان می‌شود، پیوند وجود دارد) (در این)

به خاطر همین، بستن اثر شود درست تر شده، باعث شود که آن کم شود و ارتعاش هم راحت تر شود بین زیرباند هم به این ترتیب، باعث راحت تر شدن ارتعاش می شود.

3 عامل اصلی در K اینها بودند.



در مورد M هم چه این طور شده؟
به خاطر اثر دور M ، دایره m زیاد شد که
آن باعث بیایر کند. بنابراین کمتر که باید

دقت کنید که بکریل - هیدروژن ساده به 2900 و 2800 در آنان تقسیم، اگر به جای $C-H$ $F-H$ داشته باشیم، آن چه تغییر می کند؟ بالا برود یا پایین؟

چونش رفته بالا $C-H$ $F-H$ بنابراین آن باید کم شد اما این طوری

نیست، عدد خیلی می رود بالا، یعنی از عدد در IR یعنی 4000 هم می رود اونور!
بنویسید، خیلی قوی و گنگ هست یعنی کامراوقات، نباید یک فاکتور را تنها نگاه کنید
این جا، بیوند $F-H$ این قدر قدر هست که اثر زیاد در K دارد یعنی K ، انقدر
زیاد شده است که تأثیر M را بپوشاند. خیلی اوقات یک $balance$ بین این دریا
حست در قور تغییر جایمان باید حواسمان باشد که در جا را بشناسیم، قور بودن پیوند،
باعث شده که آن برود بالا، درسته که جرم مولکول $F-H$ بیشتره و آن باید کم بخورد اما
 K آن انقدر رفته بالا که اثر M را از بین برده (در محل ارتعاشی که برش داده شده)
باید حواسمان باشد که فقط یک فاکتور را در نظر بگیریم مثلاً ممکنه، یک عنصر الکتروناقص
باشه که K بالا بر آن سبب شده که اثر M پوشانده شود (این مورد را گتوز باید در نظرمان باشه)

کاربرد های IR:

- ① شناسایی ساختار
- ② تعیین خلوص (یعنی اگر طیف استاندارد یک ماده را داشته باشیم و بعد طیف نمونه ما را
و داشتیم، می توانیم ببینیم خالص هست یا نه، IR، $Peak$ ها را مقایسه کنیم
می بینیم یا این که مثلاً $Peak$ ها را قبل از آن حالت $sharp$ خارج شده است.
عناصر اوقات، $Peak$ ها را خالص و با آن جل می کند یا $Peak$ ها را اصلها را ادانه

یعنی لزوماً چهار چهار نیست و ممکنه نزدیک هم باشند و یا هم overlap و گنجه و peak ،
یعنی شود و تشخیص از بین مره یعنی resolution ما پایین می آید و در توانیم تشخیص

دقیق که ما ظاهر داریم

③ بلر این که اشکال کنیم دو ترکیب ، یک یک هست که هر دو از IR استفاده کرد

نمونه اثر درصیت IR ، حتی که پیش گفته شد ، نمایی fingerprint که بین
800 تا 1400 قرار دارد . هیچ خود ترکیب (نه استناد اما نتایجها) را نمی بیند

BP ، حتی که این ت IR حتی چون به حال ، مثلاً ما در اولیای را خریداری
می کنیم و فقط یک کارخانه از finish product می دهیم و مواد اولیه را خریداری می کند ، موظف
است که نت ما را در مواد اولیه انجام دهد که در آن جا به فرقی IR حتی که
می کشید و با آنکه استاندارد است ما می کشیم این نمایی fingerprint را

در خود ما را گویند BP ، این نمایی fingerprint را بلر دارها ، عکسش را اندازه رطوبت را
که راه را با اون یکسان نبود ، مثلاً reject می کنند . (ما هم می گوییم به این کرده بود در
روغن ها در 700-1350 بیند اما این نمایی 800-1400 را یادمان)

در تعیین مقدار هم می توان از IR استفاده کرد به حال ، IR می از انواع الکترونیک تعیین

④ حتی که تا این تیر لاغرت ؟ در مورد IR هم صادق است . دستگاه در به چهار
transmittance ، باید در absorbance ، برد که بلر تعیین مقدار
استفاده شد که زیاد کاربرد ندارد اما ما در کارها کویتا استفاده شد ، مثلاً ترکیب
بوده که عدد ۷۵ نداشته و اوردیم از IR استفاده کردیم بلر تعیین مقدارش

تعیین کیفیت و اشکال

⑤ از این نمایی که داشته ما تا که در توانیم موادمان را بر داریم ؟ در ماده اولیای ما ،
که می شود ۱۷۱۵ در ترکیب نمایی ، ۱۸۰۰ تا ۱۶۵۰ یک peak داریم حالا همین گون باشد
تولید ۵۱۱ و از بین رقیب که بوییل را ، ۵۱۱ یک peak بین بالا ۳۰۰۰ دارد اولیای

گروه بنیل، 1742 است هر دو بان رسیده به آنجا که peak گروه بنیل نبود و OH بود، هر دو بنیل واکنش نمانده، ممکنه وسط واکنش هست و ما نمونه برداری می کنیم و می بینیم که هنوز گروه بنیل هست در OH هم داریم می بینیم که هر دو بنیل هنوز نمانده، محصول دارد ایجاد می شود به سر می کنیم تا واکنش انجام شود. انقدر در فواصل زمانی مختلف باید نمونه برداریم و IR بگیریم تا این که گروه بنیل ناپدید نشود و OH ظاهر شود که این روش کاربرد بسیار بیشتریست واکنش.

دستگاه IR قدیمها اصطلاحاً بهتره گفته میشه Dispersive و دستگاه مدرن جدید اینش FT-IR (Fourier transform) هست که ما وقت مطالعه می کنیم و طیفش را می بینیم باید بعضی چیزها را از کتاب دستگاه استفاده کردیم. دستگاه IR قدیم، Detector نور توانش کم بود 400-4000 و از واقع آنالیز کند و اموال باید تک تک به چشم تاباندن می شد Detector، هر چه با عدم جذب را بررسی می کرد.

FT-IR ها از یک نور عبور می کنند به یک انتقال Fourier یا تبدیل Fourier استفاده شده که باعث شده که این Detector ما در آن راجه، 400-4000 را نشان می دهد که با ما خوب دارد و گاهی ندارد و مزیتش را برابر اینها ایجاد کرده در واقع اگر فایز FT-IR را بخوانیم بلوسیم:

- ① سرعت عمل: اولین مزیت FT-IR، سرعت عمل آن هست که افزایش پیدا کرده
- ② رزولوشن: رزولوشن یعنی قدرت تفکیک resolution بالا رفته یعنی شاخص بهتر دارند، Peak در FT-IR نسبت به IR
- ③ چون به کامپیوتر وصل هستند خیلی می توانند فریت ایجاد کنند کامپیوترها library دارند معمولاً یعنی دستگاه، خودش library دارد عملاً یا library اش را می توانیم، هر دو بعضی مشکلاتی که unknown داریم، با FT-IR می بینیم و می بینیم که library این که خودش می نویسد که این ماده، احتمالاً با در صد های (مثلاً 95 درصد اینه 85 درصد اینه و...) صادر این مواد هست.

(4) ما در توانیم این دستگاه را مستقیماً وصل کنیم به GC، یعنی GC-FT-IR، ما مستقیماً می‌توانیم (مثلاً GC-mass) است که دگرترقی می‌توانیم در حدی که GC مستقیماً با GC-mass متصل باشد. Fragment ما عبارت است از GC و در GC-mass هم همین‌طور گفته می‌شود (GC-IR، این ترتیب است که شما نمونه را وارد دستگاه می‌کنید و آن‌ها در آن فرکانس می‌گیرند متوسط می‌کنند مثلاً یک نمونه را این‌طور داریم که در وقتاً صاف می‌کشیم که این اجزاء، با ستون از هم جدا می‌شوند و بعد در هر دو دستگاه IR، IR شکل گرفته می‌شود، IR در حال آنکه بتواند عوارض را از هم جدا کند و هر دو طرف الی و طرفی، 5 تا 10 درصد بیشتر رسیده (چون صد درصد FT-IR چون سریع‌تر عمل می‌کند، دستگاه GC-FT-IR وجود دارد که GC تیزتر می‌شود و اجزاء هم جدا می‌شوند و یک‌بار می‌تواند در هر دو طرف IR، IR نشان گرفته می‌شود که هم زمان هم تولید می‌کند که هم در هم طرف IR نشان را می‌گیریم. عوارض تیزتر و دقیق‌تر برابر FT-IR است.

* اگر بخواهیم طرفین از IR، ما از سل حاصل می‌شود از پلاستیک، نمی‌توانیم استفاده کنیم چون جذب دارند و دستگاه IR (خبر ورود ۳۳۰۰) چه طور بود؟ در آنجا وجود دارد، غیر شد از پلاستیک دستگاه استفاده کرد اما بزرگ visible (رشد) برابر IR هم همین‌طور است که از پلاستیک، نمی‌شود استفاده کرد؛ از سل حاصل KBr و NaCl می‌توان استفاده کرد.

KBr، در محدوده 400-4000 جذب ندارد
NaCl، در محدوده 650-4000 جذب ندارد

AgCl کم‌تر از بقیه استفاده می‌شود، فقط در یک مورد هست که ما مجبوریم استفاده کنیم و آن زمانی است که نمونه ما، مانع باشد، اگر گفته می‌شود که در آنجا سل KBr یا NaCl استفاده کردیم چون حلالش می‌کنند و حلال هم همان هستند و اگر حلال نباشد و در حلال حلال نباشد، موقع مست و شکر این سل‌ها و ما هم زیاده، حل می‌شود و همه‌اش می‌رود. بین AgCl زمانه که نمونه ما، مانع است استفاده می‌شود و البته که از KBr، NaCl استفاده می‌شود. KBr ارزان‌تر است، بیشتر استفاده می‌شود فقط یک‌بار دارد که طریقت گیر شد و هست که البته

KBr دقت آب ببرد، چون در ساختار آب، ۵۱٪ طایفه می تواند حرارت IR، برآیند ایجاد کند.
بنابراین باید حواسمان باشد که در "دستگاه تور" نکته دایر شود، (طاهنا) و دستگاه تور هم ممکنه
طوری باشه)

* نمونه آبی ما را بشود که هم تر بر ضرورت کنیم، سل خار خاص ضرورت برادار در همه جا هم واقعاً
ندارند این سل ها را.

* نمونه آبی ما باشد، بر تان به ضرورت حاله، این تابع را لغت را عملاً در مدل آبیستال KBr هست
که هم تواند گرد باشد و یا شکل خودش منقطع نداشته باشد (که می آید یک قطعه از نمونه را قرار
می دهند بعد سل ها را روی هم قرار دهند و بعد از آن اصطلاحاً گفته می شود که به صورت
"Neat" گرفته شده یعنی ممکنه در کتاب IR هم ببینید که نوشته Neat یعنی
نمونه را به صورت تابع حاله گرفته (Neat یا تان باشد که یکی از آنها هست، خلاص هست)
که در اکثر کتاب ها نوشته IR به صورت neat گرفته شده.

۴ بلور جامد، ماسک 3 وضعیت مختلف داشته باشیم:

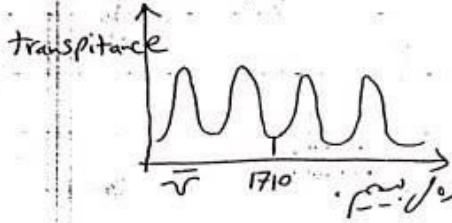
① جامد را در یک حلال، حل کنیم و بعد از آن یک با 2 قطعه از آن را در آبیستال
قرار می دهیم، صبر می کنیم تا یک لایه نازک روی سطح آبیستال سل ما ایجاد شود تا بعد
IR می کنیم. (حیدر زکریا حلال ما بود)

② راه دیگری که هست اصطلاحاً می گویند، تغییر غیر از $\nu_{\text{C-H}}$ با این اصطلاح را می نویسند.
 $\nu_{\text{C-H}}$ یک چیز مثل بالین هست حیدر زکریا هست که درست است اما ممکنه چند قطعه اسیدیم
آن افتاده گفته که تغییر می شود و بعد از این را می گذارند، در سل، شارش آورند و یک
لایه سطحی بین آبیستال سل ایجاد شود و بعد نمونه را می کنیم.

③ راه دیگری که خیلی شایع هست، تهیه Disc هست که مصطلح هست که می گویند "قرص" (Disc)
دستگاه IR، معمولاً به همراهش یک حاوی عینله که یک هست ۳ جره یک Press
که شما می بینید، بعد از KBr را می ریزید در داخل حاوی آن (یک مقدار چیزی در حد 3 تا 5 درصد
در حد نمونه) و با حاوی هم می ریزیم و بعد می نذاریم داخل پرس و دستگاه Press می کنیم البته

یک ^{Disc} پلاستیک صاف نازک را کادری شود که اصطلاحاً بیشتر از لوئیس و قوی در بیان داخل

دسته IR قرار دهیم و طیفش را می بینیم.
نکته ای که به آن دقت کنید، در دسته IR، که طیف ساده است را کشیم، می بینیم
حالتی است که مثلاً در ناحیه 1710 که



مال گشتی است، داریم Peak می بینیم، Peak
به معنای تله است که واقعاً دره می بینیم نه قله!
Peak که داریم آن گیم یک خط مستطیل است در زیر ما داریم، در آن بینیم

بررسی کنیم که در طیف IR باید دنبال چه چیزهایی باشیم دیدیم می کشیم:

ابتدا آلکان ها را بررسی می کنیم، همین ابتدا بدانید که **IR** برای آلکان ها **اطلاعات**
زیادتر به ما می دهد و آن عبارت از **آلکانها** می باشد. IR، یک **سری** تا سیر در موردش دانسته
باشیم، باید یک سری اطلاعات در موردش بدانیم در یک خط

و آلکان ها که درین - هیدروژن کشیده دارند، در کجاها بود؟ اینها تا یاد برسانید

C-H کشیده ← ^(نزدیک) 2900 و 2800

C-H کشیده ← 1465

CH **همیشه** **ببلر** **میل** ← 1380 (یا 1375)

اگر ما قیل داشته باشیم هم 1380 داریم و هم 1465

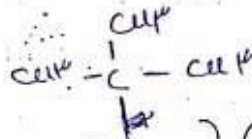
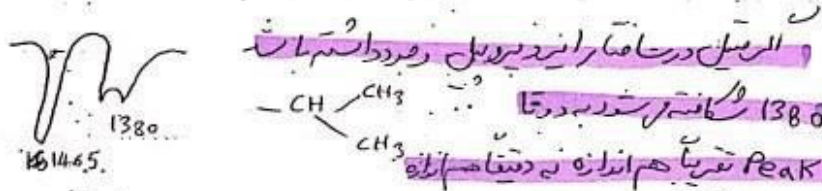
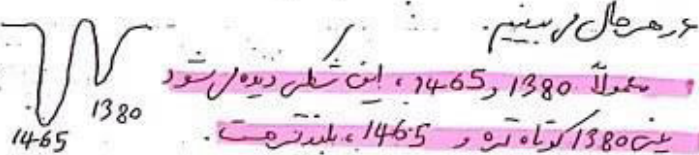
اما اگر فقط **میل** باشد، فقط 1465 داریم

1380 بلر میل، می توانیم بگویم این است که داشتن دانید یک است حرکت می کنند

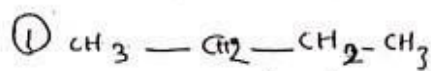
1465 مثلاً درایش یک است و کشش به است دیگر، حرکت می کنند این حالت نامستار دارد، نامستار
نیست آن نمیشود... غیر هم هست بلوسیم می توانست.

این و بعد 1380، نشان دهنده وجود قیل میل است

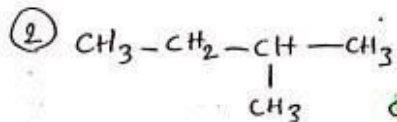
حقیقتش را بخوانید 1465 در قیل، 1450 هست و این عملاً وقت هم قیل و هم متیلین
 در یک سافت درایم، مثلاً پروپان، قیلین قیلین بعد از نظر آنکه شما در ناهم این بین
 1400 تا 1500 دوتا Peak همیشه بینید. یکی 1455. قیلین یا شد دیگر 1450 قیل
 بنابراین، این را اصلاً جدا نکنیم، این متیلر که همیشه فریبش، هم جزا را تقسیم همون دلر
 1465. عملاً در آکان جا هست، چه سافت قیل داشته باشد و چه سافت متیلین و این بود



الرتیل در سافت تر سکو پروپیل باشد یعنی یک کربن نه
 3 تا متیل بهتر وصل هست، باز هم 1380. کانتیر شده
 دوتا Peak که کاملاً اندازه هایشان با هم ستارده
 (یعنی کاملاً الگو با هم ستارده)



الرتیل سافت اینر جزایر را بینیم هر شماره 1



تمه توانیم بکنیم این دارم اما در شماره 2 هر توانیم بلوس

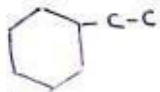
این دارم. اشاره که این شامر جانیه که در 2 وجود دارد

آورده و یک این مجزا بلر ما درست کرده، اگر هم همین حالت

را داریم، یک Peak برابر این که در ناهم 780 دیده شود

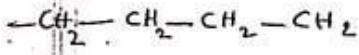
حالا در دل شکل 2، این پروپیل هم هست (الرتیل بهتر داشته

باشیم، Peak 780 را بلر این بینیم. الکترون داشته



این سیگنال، 4 تا به بالا در سافتلر رخ می‌دهد (5 تا 4 تا و 4 تا)، یک Peak هم

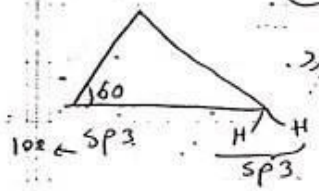
در ناحیه 720 داریم. این کدام است؟ البته بدیم که سیگنال برآورد از آن 1/3 هست یعنی مانند داشته باشه با شویا هم هست، داشته باشه که این، جدول هم هست متقا ضعیف هست



به شرطی بینیم که حداقل 4 تا سیگنال در سافتلر رخ می‌دهد. درسته با این که این طایفه هم حرکتشان جمع شده و با این سیگنال: از آن هم Peak 720 و هم 780 ضعیف هست و بقیه نداره و نکته بینیم یا بینیم

یک بقیه در لایه وجود دارد در سافتلر سیگنال برآورد که کربن - هیدروژن در سیگنال برآورد

در 3100 دیده می‌شود، فقط در این سیگنال آنگاه ما، بقیه کجا می‌آید؟ حدود 2900 و 2800 و این، بالا 3000، دارد ظاهر می‌شود که یک استناد هست. علتش این هست که به خاطر تشاری هست که در این حلقه وجود دارد.



زاویه درون این حلقه (زاویه بر سیدر) چند درجه هست؟ 60. هیدروکربون C-C در این حلقه، هیدروژن، زاویه بر

این هیدروژن، هیدروژن، زاویه بر هیدروژن، 109 هست و زاویه بر واقع حلقه، 60 هست بین بیار وقت فشارت و لایه، بقیه این که توصیف گشته که هر 3100

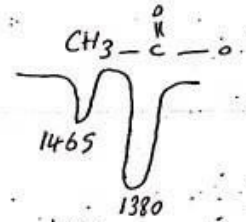
ظاهر شده، می‌گویند که این جا sp^3 با 154 داریم (یعنی C-H) گفتند شده بقیه این که این فشار زاویه بر تحمل شود، یک اتفاق افتاد؟ زاویه بر هیدروژن: $sp^3 \rightarrow 109$ $sp^2 \rightarrow 120$ $sp \rightarrow 180$ می‌بینید که هر چه مهم از آنجا می‌آید، زاویه بر دارد

کمتر شود. این جاسم دارد در لایه که زاویه بر C-H، که این از سهم او بر سیگنال خودش، کم می‌گذرد. هر چه در P حلقه، یعنی این از sp^3 بود بالاتر، به چه دلیل؟ چون هر چه سهم P هر چه بالا، زاویه بر، کم تر می‌شود تا حلقه برآورد این فشار زاویه بر را تحمل کند.

از طریق خودش، می‌شود بین sp^3 و sp^2 (یعنی از P خودش کم کرده)، هیدروژن sp^2 گنیم چند برده؟ گفتیم C-H در آنجا هر 3100 ظاهر می‌شود

الرتوایم قلاصه بلدیسه بی داخل این حلقه بر C-C، 60° حث، حیدرید ما sp^3 است ذراویه بر آن 109°
 حث بنا برین میاره حث فشار حث، از طرف دیگر در IR می بینیم که به چار 2800 و 2900
 دارد 3100 نشان در دهد که بجهت، این گونه توصیف کردند که از سهم P، هر سیوند C-H
 کم می شود یعنی sp^3 از سهم P کم می کند که هر شد بین sp^3 و sp^2 ، هر دو در حال دهد
 درون حلقه که sp^3 حث، یعنی انکار شد بین sp^3 و sp^2 ، هر چه سهم P هر رفت
 بالا، فلتر زاویه کم تر می شود؟ این در ضا صا میاید سهم P داخل حلقه را زیاد تر کند، بلکن این که
 زاویه هر حیدرید سین، از 109 میاید پایین تر، تا حلقه بتواند این فشار زاویه را تحمل کند
 خلاصه اونش با کاری نداریم، ما هر خواص IR اشتراک توصیف کنیم.

چون از سهم P در sp^3 کم شده، الان یک چیز بین sp^2 و sp^3 حث دیگر، حث
 sp^2 ارتباط C-H است حیدرید؟ 3100



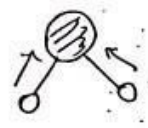
شکل 1380 و 1465 را در داند، به چه شکل حث دیگر
 1380 همیشه کوتاه تر و 1465 بلندتر

اگر مثل در افتار استوگسسه باشد، این آلوده میاید هر شود پس فقط
 در حالتی که مثل در افتار استوگسسه باشد 1380 بلند میاید شود و 1465 کوتاه میاید

توصیفان استلاید ما:



حرکت کشش نامتوازن (asymmetric stretching)
 که سیوند C-H در یک کوتاه و در دیگر بلندتر شد.



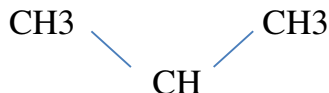
حرکت کشش متوازن (symmetric stretching)
 که سیوند C-H همزمان، کوتاه یا بلندتر شد.



ارتباطان خمسه (bending)
 (کدام یک اندر بیشتر می فرستند stretching یا bending؟)
 (Asymmetric, symmetric) که با یک اندر بیشتر می فرستند (asymmetric)

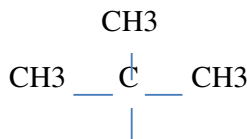
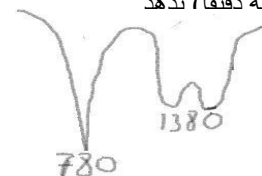


موارد استثنا در متیل:



CH₃ : در قالب ساختار ایزوپروپیل (به کربن ،دوتا متیل متصل باشد)

در این حالت 1380 به دو تا پیک تقریبا هم اندازه تقسیم میشود. علتش خیلی مشخص نیست در حدی که میگویند برهم کنش متیل های یکسانی که روی کربن قرار دارند و ارتعاشات متنوعی که دارند، برهم کنشی میدهد که باعث میشود خمشی 1380 دو تا پیک تقریبا هم اندازه (نه دقیقا) بدهد



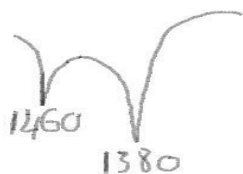
CH₃ : در ساختار ترشیو بوتیل (به کربن ،سه تا متیل وصل باشد)

دوباره 1380 به دو تا پیک تقسیم میشود ولی این بار دو تا پیک غیر هم اندازه بطور



CH₃ : در قالب ساختار استوکسی (CH₃COO⁻) باشد:

الگوی پیک ها برعکس میشود یعنی 1380 بلندتر میشود و 1460



CH₂ : اگر در ساختار زنجیری 4 عدد به بالا باشد.

یک پیک ضعیف 720 میبینیم.

کلا بگیر نگیر دارد

خودش ماهیتا ضعیف است ممکن است اگر نمونه رقیق باشد اصلا دیده نشود. در شناساییمان وقتی دیگر راهی نداشته باشیم سراغش میرویم.

اگر در ساختمانمان اتیل داشته باشیم:

یک پیک ضعیف در ناحیه 780 داریم در حالی ما اتیل داریم که توسط یک شاخه از زنجیره اصلی جدا شده باشد، مثلا:

1. CH₃-CH₂-CH₂-CH₂-CH₃
2. CH₃-CH₂-CH-CH₂-CH₃



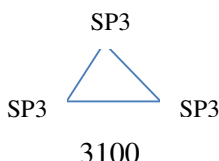
در حالت اول ما 780 اتیل را نمیبینیم ما زمانی اتیل را میبینیم که در مولکول مورد بررسی به گونه ای اتیل با یک شاخه جانبی از مولکول جدا شده باشد فقط در این حالت ما اتیل را میبینیم (مثل حالت 2) در این حالت اتیل 780 را میبینیم.



استثنا دیگر :

C-H های کششی الیفاتیکی در محدوده 2800 و... و 2900... میباید نزدیک 3000 ولی زیر 3000 در مورد سیکلوالکانها هم همین است و فرقی ندارد اما یک استثنا دارد: سیکلو پروپان

کربن هیدروژن کششی سیکلو پروپان در 3100 می آید یعنی تقریباً جاییکه الکانها می آمدند.



علت: هیبریداسیون کربنی که با هیدروژن پیوند دارد SP^3 است که با S هیدروژن همپوشانی دارد و C-C های داخل حلقه هم SP^3 هستند.

زاویه داخل این حلقه: 60

زاویه هیبرید SP^3 : 109.5

زاویه هیبرید SP^2 : 120

زاویه هیبرید SP : 180

زاویه هیبرید ما 109 است در حالیکه زاویه حلقه 60 است. بشدت تحت فشار است و ناپایدار.

توجیه مشاهده IR: در پیوند C-H خارج حلقه (C: SP^3 : H : S) بیاید، کربن SP^3 از سهم P اش کم میکند و به پیوند داخل حلقه میدهد.

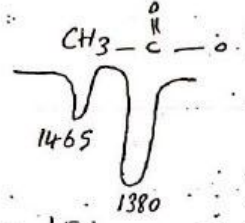
یعنی SP^3 به سمت SP^2 میرود. در خارج حلقه از P اش کم میکند و داخل حلقه دارد سهم P اش بیشتر میشود به این منظور که هرچه مقدار P زاید شود زاویه کم میشود. اینجا C-H خارج از حلقه از SP^3 از P اش کم میکند و میدهد به داخل حلقه که سهم P ان را تقویت کند برای اینکه زاویه هیبرید از 109 پایین بیاید و به 60 خودش را نزدیک کند و حلقه پایدارتر شود.

وقتی SP^3 از P خودش کم میکند به SP^2 نزدیک میشود که مال الکن هاست.

C-H الکن ها بالای 3000 (3100) میامد مثل اینجا پون هیبریدش دارد به SP^2 نزدیک میشود.

اگر بخواهیم علامه بدیم چه داخل این حلقه $C-C$ ، 60° هست . پس بدیم sp^3 است در زاویه 109° هست بنابراین بیاید تحت فشار تحت انحراف دایره در IR می بینیم که به جا می آید 2800 و 2900 دارد 3100 نشان می دهد که پیچیده ، این گونه بوده که از سهم P می پیوند $A-C$ کم می شود یعنی sp^3 از سهم P کم می کند که می شود بین sp^3 و sp^2 ، خودش را از دست درین حلقه که sp^3 هست ، یعنی آنرا می شود بین sp^3 و sp^4 ، هر چه سهم P می ریزد بالا یعنی بیشتر کم تر می شود P این در فضا می آید سهم P داخل حلقه را زیاد تر کند ، بلایز این که زاویه می پیوند 109° باید پایین تر ، تا حلقه بتواند این فشار زاویه را تحمل کند .

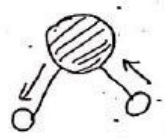
حالا به اونها با کاری نداریم ، ما در خواهم IR اشعه را توصیف کنیم .
 همین از سهم P در sp^3 کم شده ، الان کمترین بین sp^3 و sp^2 هست دلیل آن sp^2 ارتباط $C-H$ است می برد 3100



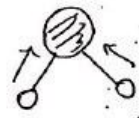
شکل 1380 و 1465 را در دید ، به چه شکل هست دلیل 1380 همیشه کوتاه تره و 1465 بلندتره

اگر شکل در ساختار استوکیستری باشد ، این الگو دقیقاً برعکس می شود پس فقط در حالتی که شکل در ساختار استوکیستری باشد 1380 بلندتر شود و 1465 کوتاه تر شود

توصیحات استوکیستری ما :



حرکت کشش نامتوازن (asymmetric stretching) که پیوند $O-H$ کوتاه و دراز می بلندتر شود



حرکت کشش متوازن (symmetric stretching) پیوند $O-H$ همزمان ، کوتاه یا بلندتر شود



ارتباطش خمشی (bending)

(کدام یک اندر بیشتر می فرستند ، stretching یا bending ؟ stretching) (بن asymmetric, symmetric) کدام یک اندر بیشتر می فرستند ؟ (asymmetric)

گفته شد که دو نوع ارتعاش خمشی و کششی داریم که به وسیله برخورد IR با انرژی خاصی که خودش دارد و طول موجش این ارتعاشات دامنه اش افزایش پیدا می کرد و در نهایت دستگاه طیفی را برای ما ترسیم می کرد بر اساس میزان جنب که صورت گرفته است ساختار نشان داده شده ملکول آب است نیمکره قرمز رنگ اکسیژن و دو نیمکره سفید هیدروژن ها هستند شکل ارتعاشات کششی متقارن را به ما نشان می دهد و هر دو تا پیوند $H-O$ همزمان با هم زیاد و کم می شوند .

در اسلاید بعد از دستاورد IR قدیمی (Pis Persive) از دست شده است که در نهایت هم
بیشتر هر سطحی داشته:

در اسلاید بعد از دستاورد FT-IR نشان داده شده که به کامپیوتر متصل حساب
یک محفقه از قرار دارد که نمونه را در آن قرار دهند.

اسلاید بعد از داخل دستاورد FT-IR نشان می دهد که در سمت بالا لایه IR هست که آلیاژ از
3 تا عنصره که تابانده می شود به آینه از و به دو تا اشعه تبدیل می شود که یکی بر خوردن گذر
یک آینه بر تابست و یکی به مستطک و دو تا از این لایه در جهت و تشکیل می شوند و دوباره
همین طور آینه مستطک از تابانده می شود که در آن بر خوردن گذر Sample و سپس
Detector و بعد از آن سایر ریزان انجام می شود.



در اسلاید بعد از IR اگر به نرم neat دارد در آن قرار می شود و نشان می دهد
neat یعنی یک لایه نازک خالص ماده در این جا که می بیند که این سیال KBr هست که
می بیند که این دو را هم قرار می دهند و پس در جایگاه خودشان قرار می دهند و IR را می گیرند.

اسلاید بعد از IR را کاملاً به صورت نازک خواصیم بگیریم، سل فحصول خودشان را هم دارد که
داخل سل، نمونه را می ریزیم و IR اش را می بینیم که fix می شود با این فلز (در اسلاید) و
سل KBr را هم می بیند !!

اسلاید بعد از همان Dis نشان می دهد که گفتیم به قویترین سلیت میتر معروف KBr حلیه
سببش بیشتر از غلظت حالت نسبت جسم به KBr، 3-5 درصد است
Pressure می کنند و قویتر ایجاد می شود



اسلاید بعد از ضیف IR نشان می دهد که نگاه کنید، محضه را می بینیم که

(شکل پایین صفحه ۸ خط ۱۳ صفحه دوم) این یک سل مخصوصی است که مایعات را نشان می دهد که در نرم بعد از آزمایشگاه
خواهیم دید می شود مایعات را تزریق کرد، آچاره است و می توان طیف IR گرفت.

در این مورد خود 1350 و 1550 cm^{-1} NO منظورش گروه NH هسته تقسیم، و با ارتعاش کشیده میماند زیرا ستارگان دارد، پس فرادسته نشان دهد

مخلافه این که آورده بخلافه امر از گروه NH را نشان داده و اگر در ضمن داشته باشد حلر فوری

بین 1550 تا 1650 cm^{-1} $\text{C}=\text{C}$ هست و هم چنین $\text{C}=\text{N}$ بین 1650 تا 1750 cm^{-1} تقسیم که $\text{C}=\text{O}$ می آید تا میسر 1800 تا 2000 cm^{-1} عمدتاً اهمیت ندارد. 2000 تا 2500 cm^{-1} $\text{C}\equiv\text{N}$ و $\text{C}\equiv\text{C}$ هست. زیر 3000 cm^{-1} $\text{C}-\text{H}$ در این ناحیه کار را می بیند. بالای 3000 cm^{-1} $\text{C}-\text{H}$ NH و OH هم بالای 3000 ظاهر می شود.

4000	3000	2500	2000	1800	1650	1550	1350	650
		$\text{C}\equiv\text{N}$ $\text{C}\equiv\text{C}$	Not important	$\text{C}=\text{O}$	$\text{C}=\text{C}$ $\text{N}=\text{C}$	$\text{C}-\text{H}$ Bending	$\text{C}-\text{Cl}$ $\text{C}-\text{O}$ $\text{C}-\text{N}$ $\text{C}-\text{C}$	
	$\text{C}-\text{H}$ NH OH	$\text{C}-\text{H}$						

کای اس، ارجانیل

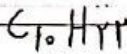
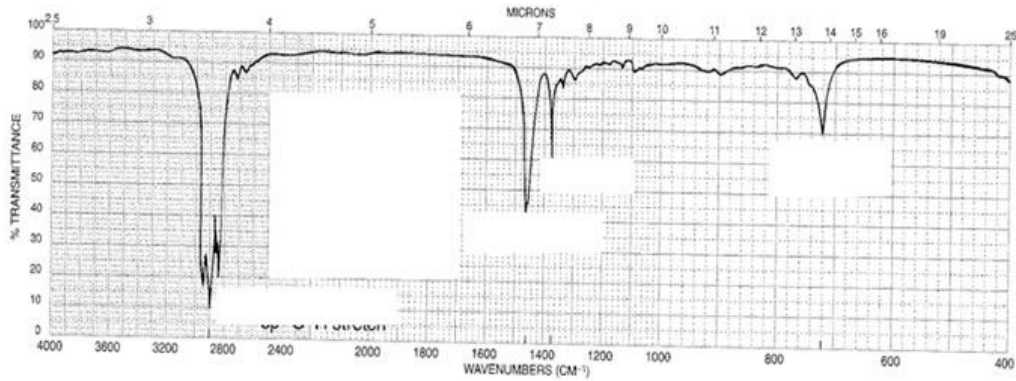
«حرکات ارتعاشی آنجا دیده را می بیند و اگر در آنجا دیده، همانها را» NH NO

۹۱

په نام خدا
دکتری محمد ای دانه سانی

تاریخ پاره: ۹۳، ۱۲، ۲۴
تعداد صفحات: ۲۴

موضوع: آنالیز و تشخیص
استاد: دکتر عباسی راد
په اسمت: معوم / روز
جهت گفته: نهادهای دولتی



تعدادی از ایزومرهای احتمالی برای این فرمول بسته را
می نویسیم و پس از طریق IR تشخیص می دهیم که این فرمول بسته
مربوط به چه ترکیبی است

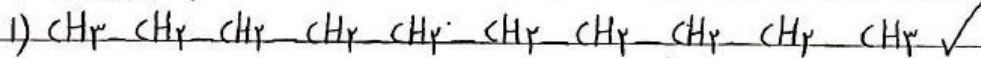
در ناحیه زیر ۳۰۰۰ (بین ۲۸۰۰، ۲۹۰۰) بیک های مربوط به ارتعاشات کششی آلفاتیگ گروه های
متیل و متیلن ظاهر شده است

بیک ۱۷۱۵ مربوط به ارتعاشات کششی متیل و متیلن است

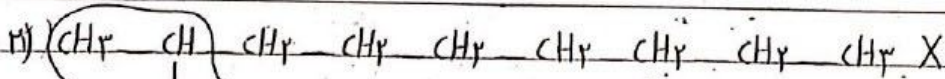
بیک ۱۳۸۰ مربوط به ارتعاش کششی متیل است

بیک ۷۲۰ مربوط به وجود حداقل $C-CH_2$ در ساختار فعلی است

نرمال دکان



این ترکیب می تواند با یک جدول تمام در پیوسته های بالا را دارد
در ساختارش متیل و متیلن دارد و حداقل $C-CH_2$ را دارد

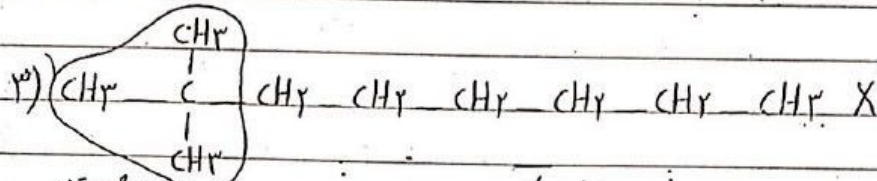


ایزوپنتیل

اگر متیل در انتهای زنجیر بود در آن نقطه باید یک ۱۳۸۰

به جای یک تقریباً هم اندازه شکافته می شود

در این حلیف وقتی به ۱۳۸۰ نگاه می کنیم فقط یک پیک دارد پس این ترکیب نمی تواند باشد

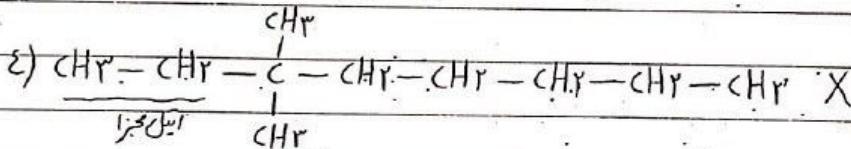


ترسیس بوتیل

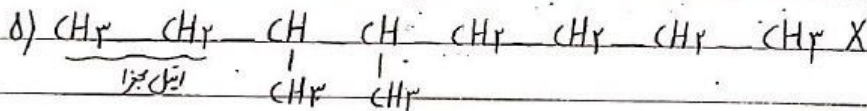
اگر متیل در انتهای زنجیر بود در آن نقطه باید یک ۱۳۸۰ به ۲

بیک شکافته می شود که کاملاً از نظر اندازه متفاوتند و نمی توانند در این حلیف ۱۳۸۰ فقط ۱ بیک دارد پس این

ترکیب نمی تواند باشد



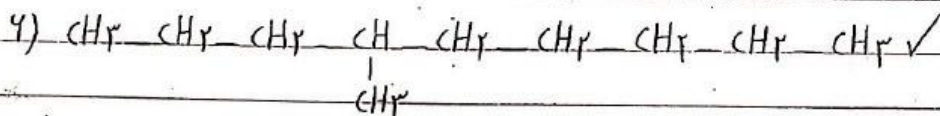
ایسل پنتا



ایسل پنتا

اگر در انتهای زنجیر بود در آن نقطه باید یک ۷۸۰ ظاهر می شود پس این بیک

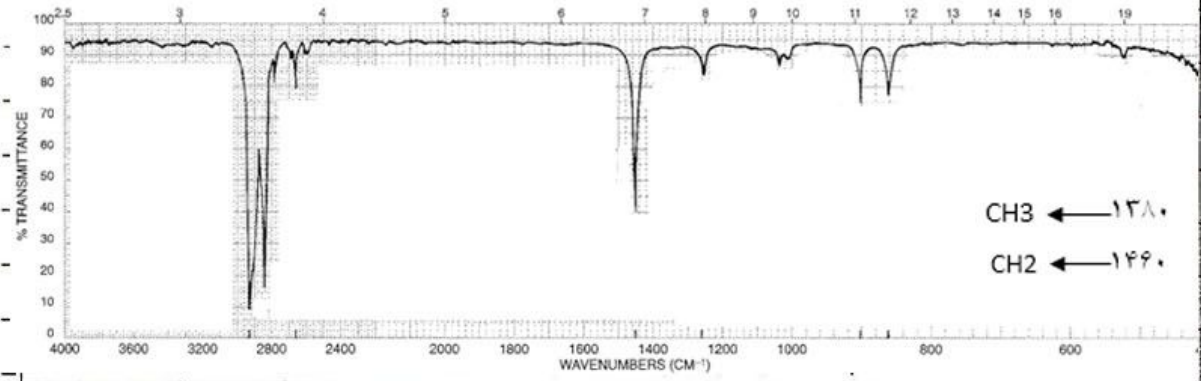
در این حلیف دیده نمی شود پس ترکیب نمی تواند باشد



این ترکیب می تواند باشد چون تمام ویژگی ها را دارد در انتهای زنجیر متیل در حلیف ۷۸۰ را

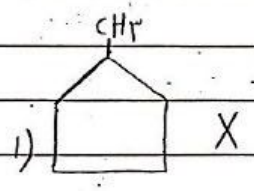
دارد

این هلیف IR می تواند مربوط به ترکیب های ادر ۶ باشد. ما نمی توانیم فقط با افتقارها با IR آنها
 به دست آوریم. هرگز این هلیف یعنی یک سری کمک های بلند در نهایت با افتقار به دست می آید
 (وقتی ترکیبی را در آزمایشگاه سنتزی کنید می خواهید آن را در یک محله علمی report کنید باید
 چندین درشت هلیف یعنی را با هم گزارش کنید و گرنه قبول نمی کنند)
 در اینجا IR می تواند به نشان دهد که این هلیف مربوط به ترکیب ۱ است یا ۴ را با این شباهتی
 به درشتی NMR میاز داریم.
 این هلیف در واقع مربوط به ترکیب ۱ است.

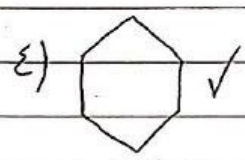
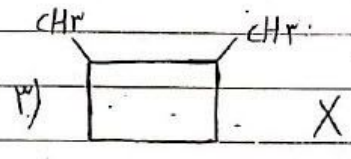
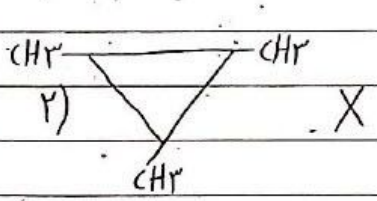


C_4H_{12} ۳۳

این فرمول بسته می تواند یک آلکن یا یک سیلو آلکان باشد.
 ارتعاش کششی $C=C$ در ۱۶۹۰-۱۹۰۰ ظاهر می شود. ارتعاش کششی $C-H$ آلکن ها در
 ۳۱۰۰ ظاهر می شود. اینجا در این هلیف دیده می شوند پس این هلیف می تواند مربوط به یک آلکن
 باشد.



بیک ۱۳۸۰ مربوط به ارتعاش همیشگی متیل است در واقع مشخص
 متیل است پس این هم هایی که CH_3 دارند حذف می شوند



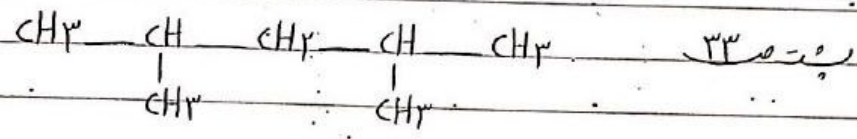
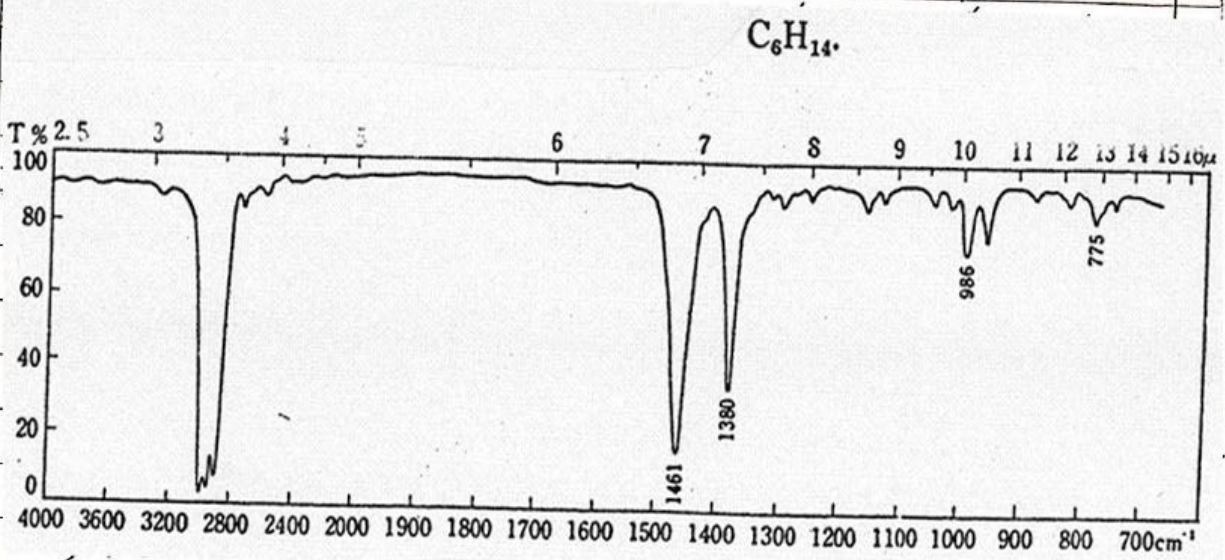
در نهایت زیر همه ۳ بیک های مربوط به ارتعاشات کششی آلفاتیک
 گروه های متیل و متیلین ظاهر شده است

بیک ۱۴۶۰ که مربوط به ارتعاشات همیشگی متیلین است ظاهر شده است و بیک ۱۳۸۰
 که مشخص متیل است در صورتی که این هلیف مربوط به ترکیب ۴ است.

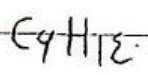
سیکلو هگزان حداقل C_6H_{12} دارد پس چرا پیک ۷۲۰ در این طیف دیده نمی شود؟
 پیک ۷۲۰ برای ساختارهای فعلی ظاهر می شود نه حلقوی

هنگام بررسی طیف ها از لایه سراسری پیک های قوی تر در افق تر مانند متیل بروید و فقط وقتی عبور
 کنید در راه دیگری نداشتید سراسری پیک های ضعیف تر مانند متیل را نیل بروید

یک علت دیگر برای حذف ترکیب ۲ غیر از وجود متیل در ساختار است این است که $C-H$ کششی
 سیکلو پروپان در ۳۱۰۰ ظاهر می شود در حالی که این پیک در طیف دیده نمی شود



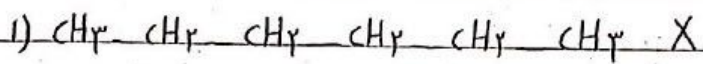
ناقصه زیر ۳۰۰۰ مربوط به $C-H$ کششی آلکانات است.
 زیر ۱۵۰۰ همان ۱۴۶۰ مربوط به $C-H$ کششی متیل و متیلن است.
 زیر ۱۰۰۰ همان ۱۳۸۰ دو پیک نزدیک به هم دیده می شود که تقریباً هم اندازه اند البته یکی کمی بلندتر است
 در مربوط به وجود این دو در پیک در ساختار است



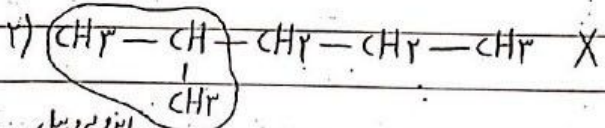
پیک های زیر ۳۰۰۰ (۲۹۰۰ و ۲۸۰۰) مربوط به $C-H$ کششی
 آلکانات است.

۱۴۶۱ مربوط به $C-H$ کششی متیل و متیلن است.
 ۱۳۸۰ مربوط به ارتعاش کششی متیل است.

۷۷۵ (همان ۷۸۰) مربوط به وجود اتیل مجزا در ساختار است پس باید این دو را را انتخاب کنیم
 که در آنها اتیل وجود داشته باشد.

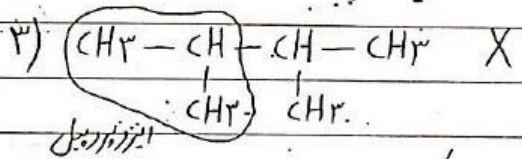


این ترکیب در ساختار ایتیل مجزا ندارد پس نمی تواند باشد (چون در حلیف بیک ۷۸۰ که مربوط به وجود ایتیل مجزا در ساختار است دیده می شود)



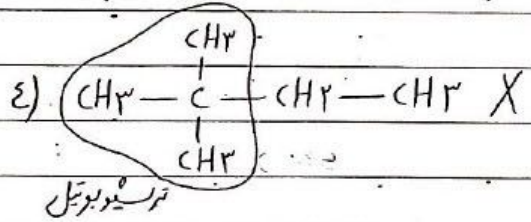
ایتیل مجزا

این ترکیب نمی تواند باشد چون
 ۱- در ساختار ایتیل مجزا وجود ندارد
 ۲- در ساختار ایتیل مجزا وجود ندارد پس باید بیک ۱۳۸۰ در آن اضافه باشد در صورتی که در حلیف به صورت تک اضافه است



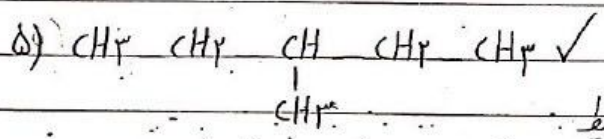
ایتیل مجزا

این ترکیب نمی تواند باشد به همان دلیلی که برای ترکیب ۲ ذکر شد



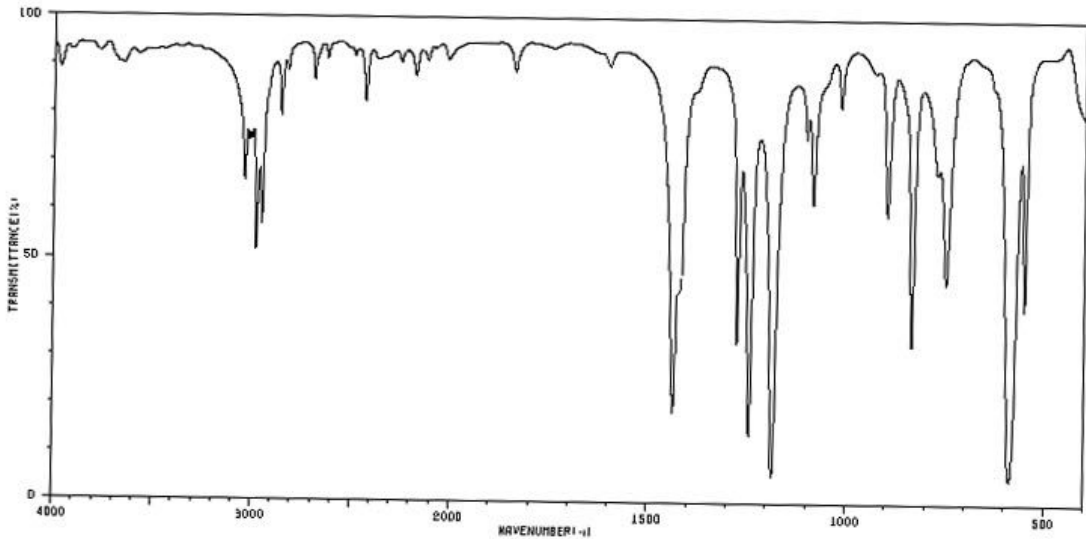
ترسیو بویل

این ترکیب نمی تواند باشد چون
 ۱- در ساختار ایتیل مجزا وجود ندارد
 ۲- در ساختار ترسیو بویل وجود دارد پس باید بیک ۱۳۸۰ در آن اضافه باشد در صورتی که در حلیف تک اضافه است

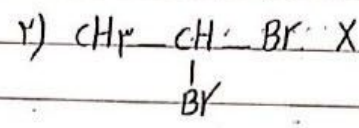
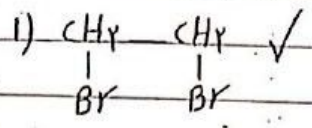


این ترکیب می تواند باشد چون تمامی شرایط را دارد. ایتیل مجزا ...

باید توجه کرد که ۷۲۰ و ۷۸۰ را مبنا قرار نداد و هر وقت هیچ راهی نبود به سراغ آنها می رویم.



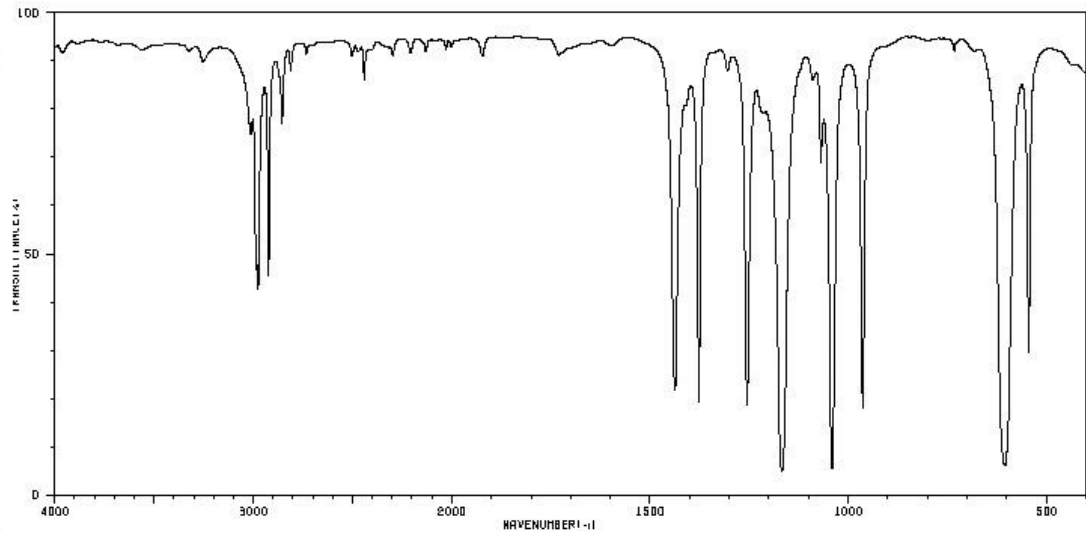
ریت ۳۵ - $(C_2H_4Br)_2$



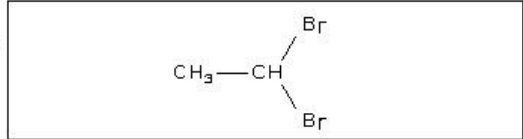
بانی ریت در این ۲ افتار متوجه می شویم که تفاوت آن در قیاس است پس باید بیک ۱۳۸۰ که افتقا من متیل است را ببینیم در صورتی که در طیف وجود ندارد

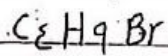
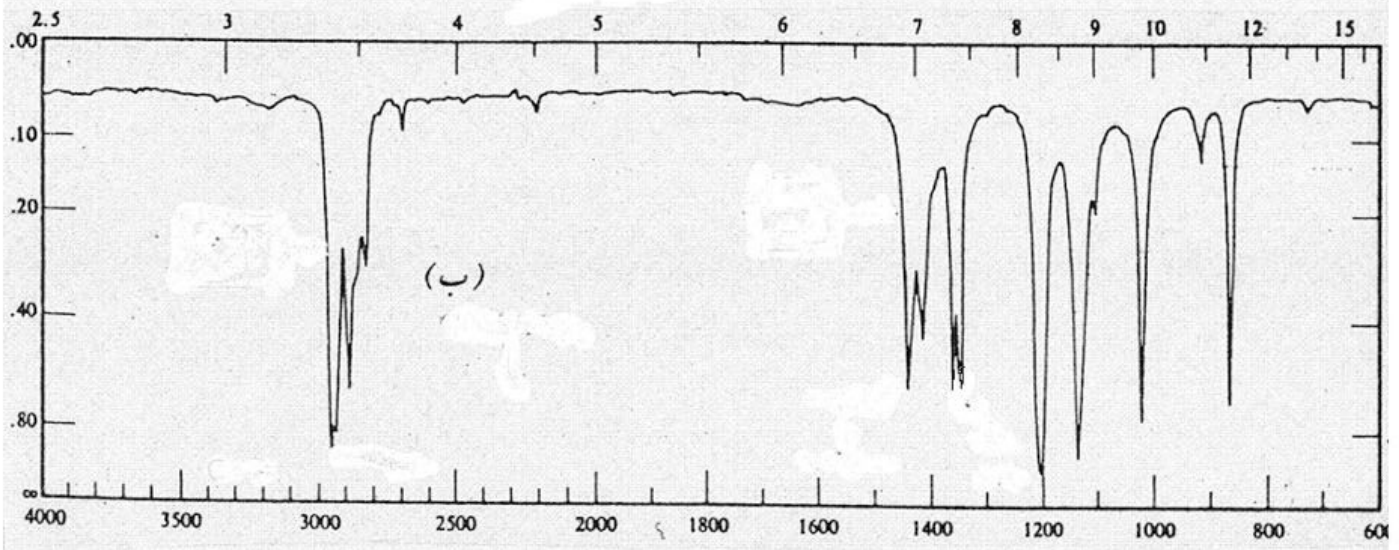
طیف ترکیب ۲ در صورت ۳۵ نشان داده شده است. در این طیف بیک ۱۳۸۰ دیده می شود

اگر دقت کنید و خط کش بگذارید یک بیک ۳۰۰۰ را هم رد کرده است. که این مربوط به کتشی های C-H می باشد علت آن اثر کتشی Br است. برخی که به کربن متصل می باشد، الکترون ها پیوندی خودش با کربن را می کشد. از طرفی کربن هم الکترون پیوندی اش H را می کشد در نتیجه پیوند محکم شده و ارتعاش سخت می شود در نتیجه یک بیک کوچک بعد از ۳۰۰۰ می دهد. یعنی اگر هالوژن وصل باشد به کربنی که همزمان H هم به آن متصل است، پیوند C-H محکم می شود به دلیل اثر کتشی-خمشی!



در این طیف در ۱۳۸۰ بیک ظاهر شده است (این ناحیه در قبلی خالی بود) که مربوط است به متیل.



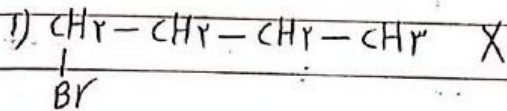


پیک‌های زیر ۳۰۰۰ برنوب به $C-H$ کششی آلیفاتیک است

۱۶۴۰ برنوب به $C=C$ کششی متیل و متیلین است

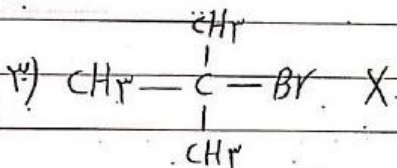
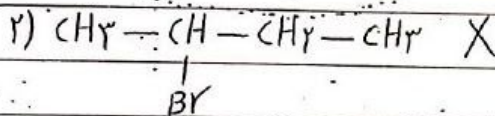
پیک ۱۳۸۰ به صورت ۱ پیک تقریباً هم اندازه دیده می‌شود و مربوط به متیلین است که در ساختار

ایزوپروپیل وجود دارد پس باید ایزوگری را انتخاب کنیم که ایزوپروپیل دارد



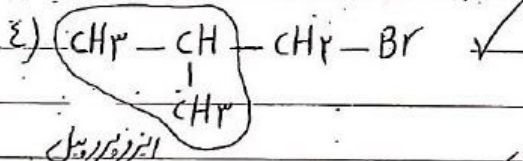
کربن کششی آلیفاتیک ۲۹۰۰-۲۸۰۰

کربن کششی متیل، متیلین ۱۵۶۰



۳ ترکیب بالا نمی‌توانند باشند چون در ساختارشان ایزوپروپیل ندارند

ترکیب ۴ ایزوپروپیل دارد و پیک ۱۳۸۰ آن به صورت ۱ پیک غیرهم اندازه ظاهر می‌شود



ایزوپروپیل

این ترکیب می‌تواند باشد چون در ساختارش

ایزوپروپیل دارد

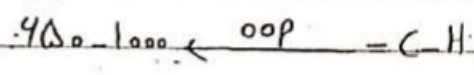
آلکین ها

۱) ارتعاش کششی $C=C$ بین ۱۶۰۰ تا ۱۴۶۰ ظاهر می شود

۲) ارتعاش کششی $C-H$ بالای ۳۰۰۰ و در ۳۱۰۰ ظاهر می شود

۳) ارتعاش منشی خارج صفحه ای $C-H$ بین ۹۵۰ تا ۱۰۰۰ ظاهر می شود

این ارتعاش با oop (مخفف $out\ of\ plane$) نمایش داده می شود



oop ها از نظر تفسیری بسیار اهمیت دارند و نشان می دهند پیوندها چگونه چند استخوانی

است: تک استخوانی است یا ۲ استخوانی یا ۳ استخوانی

اگر ۲ و ۳ استخوانی است اد ابر استخوانی است یا ۲ در استخوانی

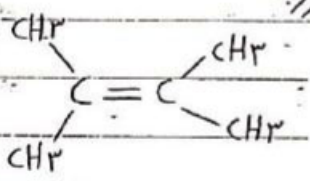
یعنی استخوان ها در یک کره در هم قرار دارند
یعنی استخوان ها در دو کره در هم قرار دارند

وضعیت نشان می دهد که از ۲ در استخوانی Cis است یا $Trans$

در شروع IR ترکیب زیر سوال زده شد و گفته شد که $C=C$ آن جذب ندارد و نباید انتظار

داشت که در طیف آن پیک ۱۶۶۰ دیده شود چون این پیوند به دلیل تقارنی که دارد همان در تقارنی

ندارد پس IR نمی تواند آن را صحت دهد و این پیوند جذب IR ندارد



گفته شد که در رابطه با آلکن ها $C-H$ کششی داریم نسبت به آلکن ها بالاتر می آید. عدد پایه = ۳۱۰۰

کربن آلکن کجا هیبریداسیون SP^2 دارد.

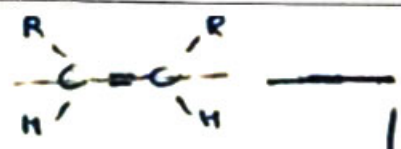
در مورد آلکن هایی که ایزومر Cis و $Trans$ دارند کدام ایزومر نسبت به محور ارتعاش

متقارن تر است؟ کدام ته بیشتری دارد؟

در مورد آلکن هایی که ایزومر Cis و $Trans$ دارند کدام ایزومر نسبت به محور ارتعاش

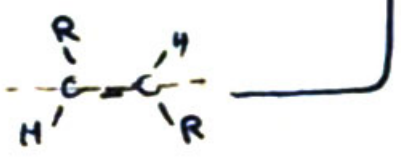
متقارن تر است؟ کدام ته بیشتری دارد؟

② → cis



$C=C$ ← ۱۶۴۰ - ۱۶۰۰ (۱۶۵۰)

③ → Trans



اعداد صدایی *