

بنام هسته بخش

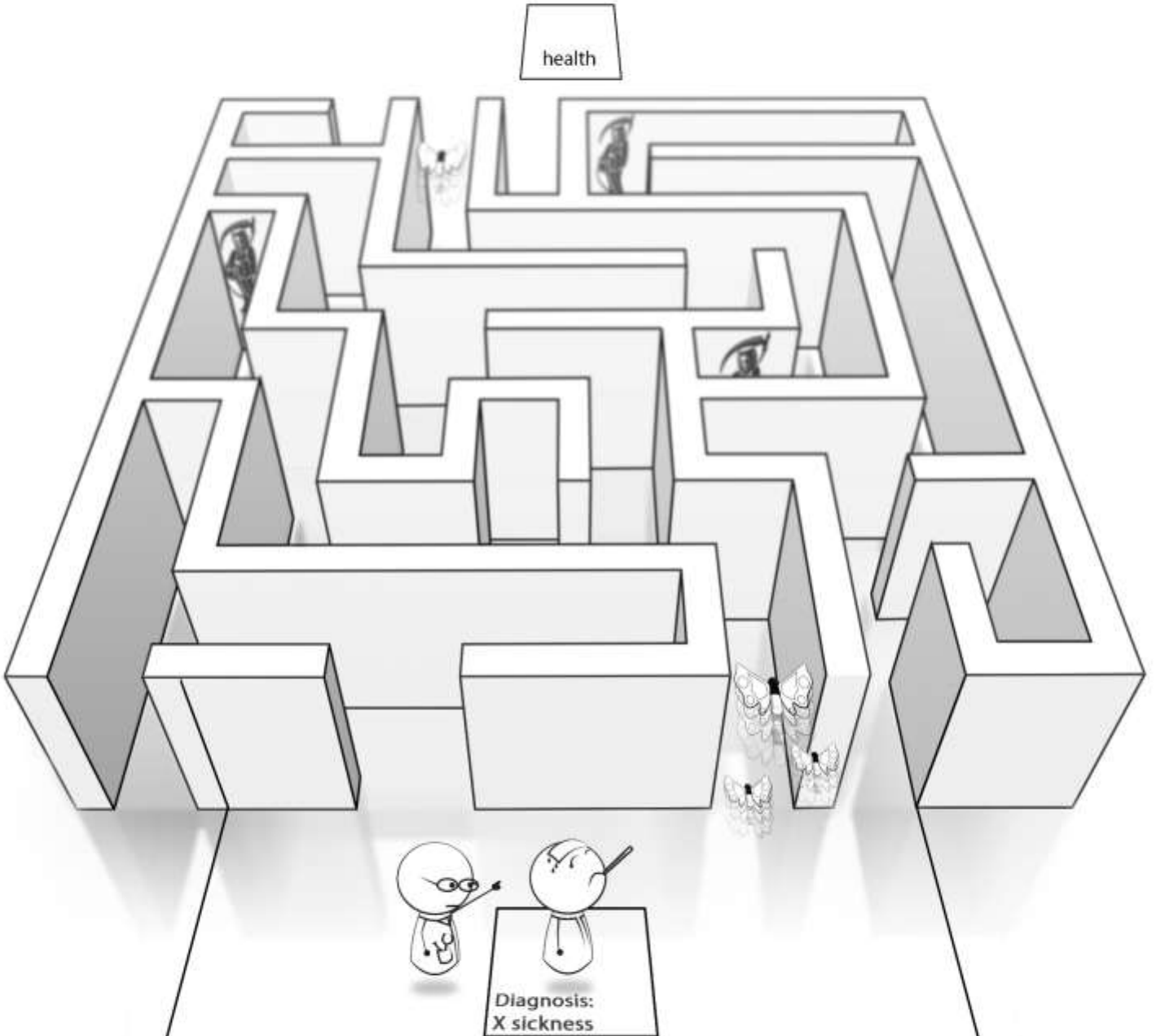


Semester 8
Class of 90

تهیه کنندگان:

پیاده سازی: شکوفه شریفی

تایپ: آناهید نوریان - سعیده غفاری



(۰۱)

مقدمات - دکتر امینی

جوزوه

Don't look for the happiness in the same place you lost it...

رفرنس درس: کروماتوگرافی و طیف سنجی (دکتر شفيعی) و نگرشی بر طیف سنجی (پاویا)

درس روش‌های دستگاهی ۲ بخش دارد:

بخش ۱: در میان ترم واحد دستگاهی ۱ تمام می‌شود.

بخش ۲: $Mass$ و NMR را در انتها یاد می‌گیریم که چطور بر اساس روش‌هایی که در قسمت‌های ۱ و ۲ یاد گرفتیم، ساختار ترکیبات را تعیین کنیم.

کلیات درس

تجزیه دستگاهی: (۱) کیفی: تعیین ساختار مولکولی (۲) کمی: تعیین مقدار ماده

ساختار مولکول‌های ساده با روش‌های اولیه قابل تشخیص می‌باشد و هرچه ساختار پیچیده‌تر و پیشرفته‌تر می‌شود نیاز به روش‌های دقیق‌تر مثل NMR و $MASS$ است. لازمه تعیین مقدار کمی یک ترکیب این است که قبلاً شناسایی شده باشد سپس بر اساس استاندارد غلظت اندازه‌گیری می‌شود. بنابراین کار کمی از کار کیفی جلوتر است.

هر جا از اسپکتروفتومتری بحث می‌شود؛ نور در آن دخالت دارد و منظور از نور، امواج الکترومغناطیس می‌باشد که ممکن است در ناحیه مرئی یا نامرئی باشد. با توجه به این که تقریباً اساس کار ۹۰ درصد از دستگاه‌ها، $interaction$ بین نور و ماده است و تنها در روش $Mass$ spectroscopy (طیف سنجی جرمی) از نور استفاده نمی‌شود؛ راجع به $interaction$ مولکول‌ها و امواج الکترومغناطیس بحث خواهیم کرد.

$Spectroscopy$ (اسپکتروسکوپی): ثبت طیف یا طیف سنجی

$Spectrophotometry$ (اسپکتروفوتومتری): طیف سنجی بر اساس برهمکنش نور با ماده. مثل روش‌های IR ، UV و فلوئورسانس.

انواع روش‌ها

روش UV : امواج در ناحیه موج UV به مولکول برخورد می‌کند.

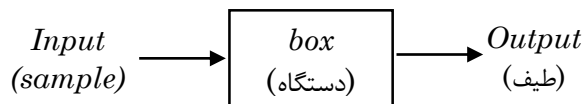
روش IR : امواج مادون قرمز استفاده می‌شود.

فلوئورسانس: نوعی طیف سنجی نشری است. نور به مولکول تابانیده می‌شود و مولکول فلوئورسانس تشعشعی را ایجاد می‌کند. طیف سنجی جرمی ($Mass$ Spectroscopy): همان‌طور که قبلاً اشاره شد، در این روش نور دخالت ندارد. مولکول در دستگاه جرمی به اجزاء با جرم‌های مختلف شکسته می‌شود که بر اساس جرم این گروه‌ها، ساختار مولکول را تشخیص می‌دهیم. پلاریمتری: با این روش می‌توان در مورد ORD ، تشخیص انانتیوم‌ترها و استرئوشیمی ترکیبات اظهار نظر کرد.

$Nuclear$ Magnetic Resonance (NMR): همان‌طور که از نامش پیداست، رزونانس مغناطیسی هسته‌ها در آن بررسی می‌شود. بسته به عنصری که هسته آن مطالعه می‌شود، نام NMR متفاوت است. مثلاً اگر هسته هیدروژن بررسی شود، $HNMR$ گفته می‌شود. در NMR ، $interaction$ امواج رادیویی در حضور میدان مغناطیسی هسته اتم، پاسخی ایجاد می‌کند که طیف NMR ترکیب است.

X -Ray: روشی مستقیم است که در ادامه توضیح داده خواهد شد.

همان‌طور که گفتیم، در قسمت دوم درس روش‌های دستگاهی به بررسی روش‌های NMR و $Mass$ می‌پردازیم. در آخر ترم، با استفاده از روش‌های گفته شده (IR ، UV ، $Mass$...) باید بتوانید ساختار یک ترکیب را تعیین کنید. واضح است که ساختاری صحیح است که داده‌های تمام طیف‌ها آن را تأیید کند. برخی مواقع با یک نوع طیف سنجی نمی‌توان اطلاعات کامل از ساختمان یک ترکیب به دست آورد و باید اطلاعات حاصل از چند روش طیف سنجی را در کنار هم قرار دهیم تا به ساختار نهایی برسیم.



هر دستگاه را می‌توان از ۳ موضع مورد بررسی قرار داد:

۱- تکنولوژی ساخت، سخت‌افزار و الکترونیک دستگاه:

بیشتر در رشته‌های فنی مهندسی مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۲- *interaction* نمونه‌ای که وارد دستگاه می‌شود: که مبتنی بر یک سری تئوری مثل تئوری‌های حاکم بر ساختار مولکولی، شیمی و فیزیک است. در رشته‌های علوم پایه بیش‌تر این جنبه مورد بررسی قرار می‌گیرد.

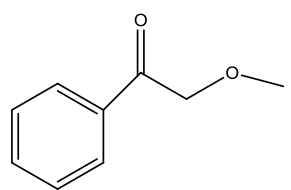
۳- *output* که دستگاه به ما می‌دهد طیف است و از این طیف در تعیین ساختار مولکولی استفاده می‌شود. در رشته ما این قسمت اهمیت دارد؛ یعنی با کمک طیف ساختار ترکیبات *organic* را تعیین کرده و سپس آنالیز کمی می‌کنیم.

* سختی کار با غلظت‌های پایین، آلودگی بیش‌تر است. امروزه دستگاه‌هایی از نوع *Mass* وجود دارد که با غلظت بسیار کم هم (در حد فمتوگرم [۱۰^{-۱۵}]) قابلیت تعیین مقدار دارد. بنابراین روش‌ها باید آنقدر *sensitive* باشد که آن مقدار ماده را هم تشخیص دهد.

X-Ray

در اکثر طیف سنجی‌ها به شکل غیرمستقیم *data* به دست می‌آوریم که در واقع اطلاعاتی در مورد ساختار شیمیایی ترکیب است که با تفسیر طیف حاصل از دستگاه به دست می‌آید. اما در نوعی از طیف سنجی به نام *X-Ray* مستقیماً ساختار مولکولی قابل مشاهده است. با توجه به وجود این روش ظاهراً استفاده از روش‌های دیگر و پیش‌رفت در آن‌ها خیلی عاقلانه نیست ولی در واقع سختی کار در تهیه نمونه *X-Ray* باعث می‌شود که استفاده از روش‌های دیگر نه تنها متوقف نشود، بلکه هر روز پیش‌رفت‌هایی نیز در آن حاصل شود.

در *X-Ray* مولکول را در معرض تابش اشعه *X* قرار داده و سپس تصویر (سایه) اتم‌ها را در صفحه حساسی که در قسمت انتهایی دستگاه قرار گرفته، مشاهده می‌شود. بافت‌ها و اجسام سخت، اشعه *X* را جذب کرده و آن قسمت‌ها در صفحه حساس سفید دیده می‌شود. اما قسمت‌هایی که اشعه *X* را جذب نکرده در تصویر سیاه دیده می‌شود. همین قضیه در مورد مولکول‌ها نیز صادق است. دانسیته هسته نسبت به الکترون بسیار زیاد است و اشعه *X* را جذب می‌کند بنابراین پس از برخورد اشعه *X* به مولکول، در قسمت‌هایی که هسته وجود دارد اشعه *X* جذب شده و در نتیجه نور به صفحه حساسی که پشت نمونه قرار گرفته نمی‌رسد و صفحه سفید باقی می‌ماند. قسمت‌هایی که الکترون‌ها پیوند تشکیل داده‌اند به علت دانسیته کم، اشعه جذب نمی‌شود و نور به صفحه حساس می‌رسد و تصویر را سیاه می‌کند. سایز هسته با توجه به سایز سایه



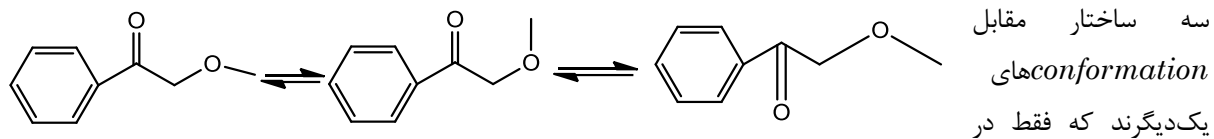
مشخص می‌شود و سبب تشخیص نوع اتم می‌شود. از فاصله بین هسته‌های کنار هم نوع پیوند (SP^3 , SP^2 , ...) مشخص می‌شود. مثلاً برای ماده مقابل آنچه در تصویر اشعه *X* دیده می‌شود به این صورت است:

* علت سختی در نمونه‌گیری برای اشعه *X* این است که نمونه باید به صورت کاملاً خالص و کریستال (به فرم کریستال *single*) باشد.

* *X-Ray* از لحاظ سرعت، تکنیک کندی است بنابراین باید نمونه‌ای که در مقابل آن قرار می‌گیرد بی‌حرکت باشد. پس *sampling* (آماده کردن نمونه برای آزمایش) در این روش بسیار مهم است.

* در *X-Ray* نمونه باید جامد باشد و حرکات مولکولی در آن رخ ندهد تا تصویر واضحی به دست آید بنابراین نمونه باید کریستال باشد.

* مولکول در حلال آزادانه حرکات داخل مولکولی (تغییر در کانفورماسیون) دارد. در نتیجه تصویر ناواضح است.



آرایش فضایی با یکدیگر متفاوتند. برای هر مولکول به دلیل توانایی چرخش حول پیوند سیگما می توان n کانفورمر متصور شد. در محلول این کانفورمرها دائماً در حال تبدیل شدن به یکدیگرند. انرژی لازم برای این تبدیلات از برهمکنش بین مولکولی تأمین می شود. بنابراین تمام کانفورمرها موجودند و فقط درصدشان با هم متفاوت است و قاعدتاً کانفورمر پایدارتر، جمعیت بیشتری دارد. مثلاً در ۳ ترکیب بالا ترکیبی که استخلافها در دورترین حالت نسبت به هم قرار دارند، پایدارتر است. اما در فرم کریستالی، حرکات *conformation* مولکولی کاملاً محدود شده مولکول می تواند در حالت های مولکولی متفاوت (کانفورمرهای متفاوت) به حالت کریستالی در بیاید و اگر مخلوط تمام کانفورمرها با هم کریستال شود جسم ما آمورف (بی شکل) خواهد بود. در *X-Ray* اصطلاحاً نمونه باید *single crystal* باشد یعنی تمام مولکولها در یک کانفورمر خاص کریستال شوند تا تصویر واضحی به دست آید.

* در مولکول های پیچیده نمی توان با *X-Ray* به تنهایی تشخیص داد بلکه از طیف های دیگر کمک گرفته می شود مثل *IR* - *UV*, *Mass* و...

* هنگام عکس برداری با اشعه X ، هرچه قدرت جذب اشعه توسط جسم سخت تر باشد، تفاوت رنگ سیاه و سفید بیشتر است. به عبارتی *contrast* تصویر بیشتر می شود.

* رادیوپاکها *contrast* تصویر را بالا می برند زیرا با تجمع در یک بافت باعث می شوند اشعه X در آن بافت بیشتر جذب شود و رنگ سفیدتری در تصویر ایجاد کند.

* اشعه X بُرد کندی دارد یعنی سرعت نفوذ به صفحه حساس و سرعت ثبت اطلاعات روی صفحه کم است. به طوری که برای عکس برداری باید حداقل ۱۰ ثانیه زمان بگذرد تا اشعه X به ماده برخورد کند.

احمد ظهیر در تکنیک *X-ray* ابداع شگفت آوری صورت داد. به این صورت که *X-ray* را روی لیزر (که یک موج کم انرژی و پرتوان و سریع است) سوار کرد. به عبارتی لیزر پرا انرژی تولید کرد. بدین ترتیب به دلیل سرعت بالای این موج جدید، زمان لازم برای ثبت تصویر به شدت کاهش پیدا می کند. پس دیگر وجود حرکات مولکولی اهمیت خود را از دست می دهد چون قبل از این که مولکول بخواهد از یک کانفورمر به کانفورمر دیگر تبدیل شود عکس گرفته می شود. در نتیجه دیگر لازم نیست مولکول کریستال باشد و می تواند محلول باشد. حتی گاهی می توان از برخی واکنش های شیمیایی فیلم برداری کرد! حال این تکنیک را در سیستم بیولوژیک در نظر بگیرید. فعالیت یک آنزیم، اتصال لیگاند به رسپتور و... به راحتی قابل مشاهده است. این امر در سال های آینده باعث کشف داروهای بسیار *selective* و دقیق خواهد شد.

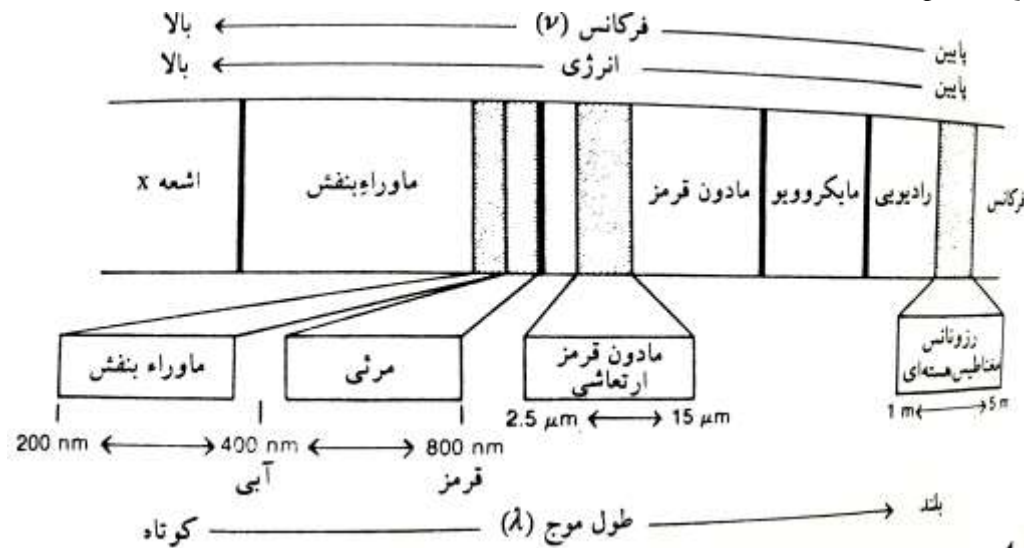
معادله موج

$$E = hv = hc/\lambda = hc\bar{\nu} \quad h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ (ثابت پلانک)} \quad C = 3 \times 10^8 \text{ m/s (سرعت نور)}$$

$$\bar{\nu} = \text{عکس طول موج (عدد موج)} \quad \lambda = \text{طول موج} = \text{فرکانس} = \nu$$

* هرچه طول موج بیشتر باشد؛ دامنه، قدرت نفوذ و شدت بیشتر است و انرژی کم تر می شود.

امواج الکترومغناطیس:



* در این درس سمت چپ همه طیف‌ها، قسمت پراثری طیف است.

نور مرئی مخلوط طول موج‌های ۴۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر است که رنگ سفید را می‌سازد. اگر یکی از این طول موج‌ها حذف شود، رنگی که حاصل تداخل سایر امواج است، دیده می‌شود. دیدن رنگ، حاصل از انرژی‌ها و طول موج‌های باقی‌مانده است. امواج با طول موج بین ۸۰۰ تا ۲۵۰۰ نانومتر ارزش ندارند زیرا هیچ دستگاهی نداریم که طیف سنجی را در این بازه از امواج انجام دهد. طیف ۲۵۰۰ تا ۱۵۰۰۰ نانومتر مربوط به مادون قرمز (*infrared*) است. برخورد امواج این ناحیه به مولکول، *IR* می‌دهد.

* نحوه برخورد و پاسخی که می‌گیریم (*Spect*) اطلاعاتی می‌دهد که می‌توان گروه‌های شیمیایی مولکول را تشخیص داد. مثلاً ترکیب حاوی کربوکسیلیک اسید، استر، آلدئید، کتون، متیل و غیره هست یا نه. این موارد همگی جزء اطلاعاتی است که از طیف *IR* قابل استنتاج است.

امواج بالاتر از ۱۵ میکرومتر شامل امواج رادیویی یا *Radio Frequency* است که طیف *NMR* می‌دهد.

سوال: علت *interaction* بین مولکول‌های ترکیب با امواج چیست؟

در پاسخ به این سوال دو نظریه وجود دارد:

(۱) نظریه پیوند شیمیایی (*valence bond*): لایه ظرفیت اتم‌ها الکترون‌هایش را به اشتراک می‌گذارد تا پیوند شکل بگیرد. این نظریه الکترون را به عنوان ذره‌ای در نظر می‌گیرد که جرم دارد. روابط فیزیکی حاکم بر این مدل روابط فیزیک کلاسیک است.

$$E=mc^2$$

(۲) فرضیه اوربیتال مولکولی: این فرضیه بر مبنای موجی بودن الکترون می‌باشد. پس از پیشرفت در زمینه اسپکتروسکوپی، ثابت شد که الکترون می‌تواند به صورت موج عمل کند.

* عملکرد بسیاری از دستگاه‌های اسپکتروسکوپی مثل *UV*، ثابت کننده رفتار موجی الکترون است. ولی انواع دیگری از طیف سنجی مثل *Mass Spectroscopy* نشان‌دهنده رفتار ذره‌ای الکترون است. بنابراین ظاهراً *output* این دو دستگاه از نظر ماهیت وجودی الکترون در تناقض است. در نتیجه برای الکترون از عبارت مطلق که تعیین کند الکترون موج است یا ذره، استفاده نمی‌شود. بلکه گفته می‌شود: «الکترون رفتار دوگانه دارد، ذره‌ای است با خاصیت موجی»

$$mc^2 = h^c/\lambda \rightarrow \lambda = \frac{h}{mc}$$

تناقض موجود با معادله دوپروی برطرف می‌شود: معادله دوپروی پیوندی بین رفتار موجی و ذره‌ای ایجاد می‌کند. این معادله بیان می‌کند: «هر جسم متحرکی با سرعتی معادل c حرکت کند، موج هم هست و طول موج دارد». از نظر ریاضی با توجه به این معادله می‌توان برای هر جسم متحرک یک

طول موج به دست آورد. اما از نظر فیزیکی ارزش این موضوع وقتی است که بتوان طول موج را با استفاده از ابزارهای فیزیکی در اختیار دید. با توجه به مقدار فوق العاده کم ثابت پلانک (10^{-34})، طول موج از نظر فیزیکی وقتی معنا پیدا می کند که جرم نیز فوق العاده کم باشد تا طول موج قابل ثبتي به دست آید. الکترون بر حسب گرم، جرم بسیار کمی (10^{-28}) دارد و طول موج قابل توجهی که قابل ثبت است برای آن به دست می آید. بنابراین ذره کوچکی مثل الکترون تا وقتی در حال حرکت است موج است و به محض این که بایستد ذره است.

بدین ترتیب خاصیت موجی الکترون به اثبات رسید. با توجه به آنچه گفتیم، پیوند شیمیایی حاصل تداخل دو موج هم فاز الکترومغناطیس است. در صورتی که تداخل دو موج ناهم فاز صورت گیرد توان ماکسیمم نمی دهد و اگر کاملاً ناهم فاز باشند برآیندشان صفر می شود.

* تداخل هم فاز دو الکترون، یک اوربیتال پیوندی می سازد.

پایدارترین نوع اوربیتالی که از تداخل دو الکترون ایجاد می شود، اوربیتال سیگما (σ) است که ناشی از تداخل هم فاز الکترون های اتم ها در حالتی است که هیبریداسیون sp^3 باشد. دو الکترون در اوربیتال پیوندی با اسپین های مخالف هم می چرخند. یکی در جهت عقربه ساعت (cw) و دیگری در خلاف جهت عقربه ساعت (ccw). این دو الکترون جفت شده به صورت $\uparrow\downarrow$ نشان داده می شود.



* در اوربیتال های پیوندی، سطح انرژی کاهش می یابد در حالی که دامنه افزایش می یابد. تداخل ناهم فاز دو الکترون، اوربیتال ضد پیوندی را می سازد. در اوربیتال ضد پیوندی الکترون وجود ندارد. در واقع فرض می کنیم دو الکترون با هم تداخل ناهم فاز دارند و سطح انرژی این اوربیتال قابل محاسبه است.

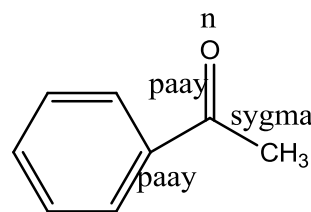
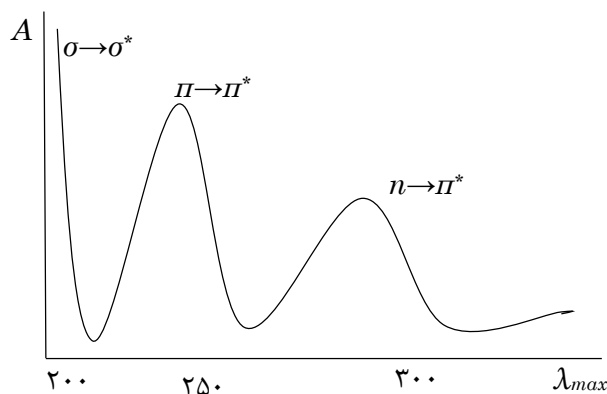
همان طور که می بینید، ۲ الکترون موجود در اوربیتال پیوندی، دارای سطح انرژی پایین و پایدار است. بنابراین برای شکست این پیوند و انتقال به لایه های بالاتر باید به اندازه اختلاف دو سطح، انرژی بدهیم. این انرژی با UV تأمین می شود. بنابراین اگر ماده را در دستگاه اسپکتروفتومتر قرار دهیم، دقیقاً همان طول موجی را جذب می کند که برای برانگیختن مولکول از اوربیتال پایه به ضد پیوندی لازم است.

* هنگامی که موج حذف می شود سپس دوباره تابانیده می شود؛ سبب برانگیختگی دوباره مولکول می شود در نتیجه نشان می دهد که این جذب و انتقالات موقتی و تکرار پذیر است.

* برداشت اولیه موجی بودن الکترون از مشاهدات اسپکتروفتومتری بوده است.

* مثلاً اگر امواج UV را به ترکیب زیر بتابانیم، طیفی

مثل طیف مقابل حاصل می شود:



* چه اتفاقی باعث حذف یک طول موج توسط مولکول می شود؟ مقادیر انرژی در اتم ها کوانتومی است. یعنی انتقال الکترون بین لایه های مختلف انرژی، تقریباً با مقدار خاصی انرژی اتفاق می افتد (نه کم تر از آن و نه بیش تر). مقدار انرژی لازم برای انتقال کاملاً قابل محاسبه است. در طیف ها نیز دقیقاً طول موجی که مقدار انرژی محاسبه شده را ایجاد می کند، جذب می شود. پس

نتیجه می‌گیریم که با تابانیدن UV به مولکول، الکترون با جذب طول موجی خاص انرژی لازم برای انتقال از یک اوربیتال پیوندی به ضد پیوندی مثلاً از σ به σ^* را به دست می‌آورد و منتقل می‌شود.

* انتقال σ به σ^* مشکل‌ترین انتقال است زیرا بیش‌ترین اختلاف انرژی بین دو سطح وجود دارد و در نتیجه کم‌ترین طول موج برای این انتقال نیاز است. در تمام طیف سنجی‌ها، سمت چپ هر طیف سمت پراثری آن است. پس همان‌طور که در شکل نیز مشاهده کردید، جذبی که در سمت چپ طیف رخ داده با توجه به پراثری بودن آن مربوط به انتقال σ به σ^* است.

* راحت‌ترین انتقال n به π^* است.

حال اگر جسم علاوه بر اوربیتال سیگما، اوربیتال π نیز داشته باشد، می‌تواند انتقال دیگری هم صورت بگیرد ($\pi \rightarrow \pi^*$). منظور از اوربیتال π ، همان پیوند دوگانه یا حلقوی آروماتیک است. طول موجی که الکترون را از $\pi \rightarrow \pi^*$ می‌فرستد تفاوت کم‌تری نسبت به انتقال σ به σ^* دارد. پس طول موج‌های بالاتر برای انتقال $\pi \rightarrow \pi^*$ لازم است.

* هرچه به سمت راست طیف می‌رویم، انتقالات راحت‌تر و با انرژی مورد نیاز کم‌تر رخ می‌دهد (طول موج زیاد می‌شود) ولی این که انتقال دیده شود به شدت انتقال بستگی دارد که در جلسات آینده توضیح بیش‌تری داده خواهد شد.

* راحت‌ترین استفاده از طیف UV ، پی بردن به نوع پیوندهای موجود در ترکیب با توجه به طول موج جذب شده است.

* همه انتقالات $\sigma \rightarrow \sigma^*$ یا $\pi \rightarrow \pi^*$ یا... در یک نقطه رخ نمی‌دهد چون شرایط قرارگیری اتم‌ها در مولکول متفاوت است.

* تمامی انتقالات دیگر هم محتمل است یعنی ممکن است $\sigma \rightarrow \pi^*$ نیز رخ دهد.

* طول موجی را که یک مولکول جذب می‌نماید λ_{max} می‌نامند. مثلاً در مثال بالا با توجه به طیف، λ_{max} وجود دارد.

* طول موج جذب شده به حالت ماده (گاز یا محلول) نیز بستگی دارد و اگر ترکیب در حالت محلول است، نوع حلال نیز در طیف تأثیرگذار است. مثلاً دیده شده اتیلن در حالت بخار، طول ۱۷۸ را جذب می‌کند که با توجه به این که زیر ۲۰۰ است، خیلی اهمیت ندارد.

* وقتی پیوند دوگانه مزدوج می‌شود، مثلاً در بوتادی‌ان، محل جذب $\pi \rightarrow \pi^*$ به ۲۱۴ نانومتر می‌رسد. اگر تعداد پیوندهای دوگانه به ۳ برسد، به طول موج جذبی، ۳۰ نانومتر دیگر هم اضافه شده و به ۲۴۴ نانومتر می‌رسد. در نهایت می‌توان این گونه نتیجه گرفت که به ازای هر پیوند دوگانه که اضافه می‌شود، طول موج جذب شده حدود ۳۰ نانومتر افزایش پیدا می‌کند. می‌توان با افزایش تعداد پیوندهای دوگانه ترکیب، رفته رفته طول موج جذب شده توسط جسم را افزایش داد، به ناحیه مرئی برسایم و سبب رنگی شدن ترکیب شویم.

* حساسیت متد: اگر ترکیبی بتواند غلظت‌های پایین‌تر را اندازه‌گیری کند *sensitive* تر است. حساسیت UV برای مولکول‌های آلی در حد میکروگرم است. بنابراین غلظت حلال بسیار بیش‌تر است که سبب بی‌نهایت بودن ابتدای طیف می‌شود.

* حساسیت IR در حد ۱ میلی‌گرم است. در *mass* حساسیت به پیکوگرم و فمتوگرم می‌رسد.

* اگر ترکیبی در ناحیه ۲۸۰ نانومتر جذب داشته باشد، می‌توان نتیجه گرفت ترکیب دارای گروهی است که انتقال n انجام داده، یعنی احتمال وجود عناصری با زوج الکترون ناپیوندی مثل N و O و... وجود دارد.

* ویژگی حلال‌های UV : (۱) خودش در ناحیه طیف سنجی جذبی انجام ندهد.

(۲) جسم را کاملاً در خود حل کند.

(۳) تغییری در ساختار جسم ایجاد نکند و فقط باعث انحلال شود.

(۴) نقطه جوش پایین داشته باشد تا جسم به راحتی جدا شود.

* بهترین حلال هگزان و سپس آب است.

* محدودیت برای انتخاب حلال *overlap* طیف حلال با جسم است (جلسه بعد توضیح داده خواهد شد).

* گروهی که در مولکول باعث جذب در طول موج خاصی است کروموفور نامیده می‌شود. مثال: پیوند دوگانه مزدوج

* برای تشخیص کروموفور به λ_{max} توجه می‌کنیم. λ_{max} طول موجی است که بیش‌ترین جذب در آن اتفاق افتاده و قله نمودار است. در خواندن طیف اهمیت دارد.

* انرژی کمیتی کوانتایی است و برای فرستادن الکترون از $\pi \rightarrow \pi^*$ مقدار ثابتی انرژی نیاز است. اگر کم‌تر باشد انتقال صورت نمی‌گیرد و اگر بیش‌تر باشد هم فقط همان انتقال صورت می‌گیرد. حال در صورت قبول کردن این مطلب طیف UV باید نوارهای بسیار $sharp$ داشته باشد و در واقع فقط باید خطی وجود داشته باشد در راستای عمودی و منحنی نباید حالت زنگوله‌ای داشته باشد. اما در واقع تفاوت به دلیل یکسان نبودن همه پیوندها است که به علت وجود کانفورمیشن‌های متفاوت مولکولی اتفاق می‌افتد. به همین دلیل طیف پیوسته‌ای داریم که تعدادی از حالت‌های مختلف π است که هر کدام به صورت مجزا کوانتایی هستند. برای از بین بردن حالت زنگوله‌ای دما را پایین آورده تا مولکول‌ها ثابت شوند یا حلال که پایدارکننده این حالات است را حذف کرده و طیف را در حالت بخار می‌گیریم. در نتیجه طیف کاملاً $sharp$ می‌شود.

* اگر طول موج وارد شده به جسم جذب شده باشد، پشت جسم تاریکی داریم. در واقع دستگاه $intensity$ (شدت موج) را قبل و بعد از ورود نمونه با هم مقایسه می‌کند.