الطيف الكهرومغناطيسي The Electromagnetic Spectrum

الأشـــعة الكهرومغناطيسية مثل الضوء المرئي، الأشعة فوق البنفسجية والأشعة تحت الحمراء، وأشعة X ، والراديو والرادار وهذه لها أطوال موجية تتراوح بين جزء من الانكســتروم Angstrom الى موجات الراديو بالأمتار وحتى الكيلومتر كلها لها نفس السرعة $3X10^{10}$ CM/sec وهي سرعة الضوء وترددها (هيرتز)

هيرتز Frequence in cycle/ sec

$$\upsilon_{Hz} = \frac{C\ (cm\ /\ \sec)}{\lambda\ (cm\ )}$$

λ = wave length in CM, C = velocity , $3x10^{10}$ CM/sec سرعة الضوء

التردد يتناسب عكسيا مع طول الموجة

عــندما يمــر الشعاع خلال المادة فاما يمتص من قبلها او ينفذ وهذا يعتمد اما على تركيــب المــادة او على التردد ، وان هذا الاشعاع عبارة عن طاقة فالجزيئة عندما تمــتص هــذا الشعاع فانها تمتص طاقة والطاقة الممتصة تتناسب طرديا مع التردد وعكسيا مع طول الموجة

$\Delta E = h\upsilon$
Where ΔE = gain in energy, in ergs
h = Planck's constant , 6.5×10^{-27} erg – sec
υ = frequency, in cycles/ sec (Hz)

ان الطاقة الممتصة تؤدي الى زيادة الحركة الاهتزازية او الدورانية للذرات او تؤدي الى زيادة طاقة الالكترونات الى مدارات اعلى . ان رسم الطيف يوضح كمية الشعاع الممتص او النافذ لكل تردد مسلط وهو ميزة مهمة للمادة العضوية.

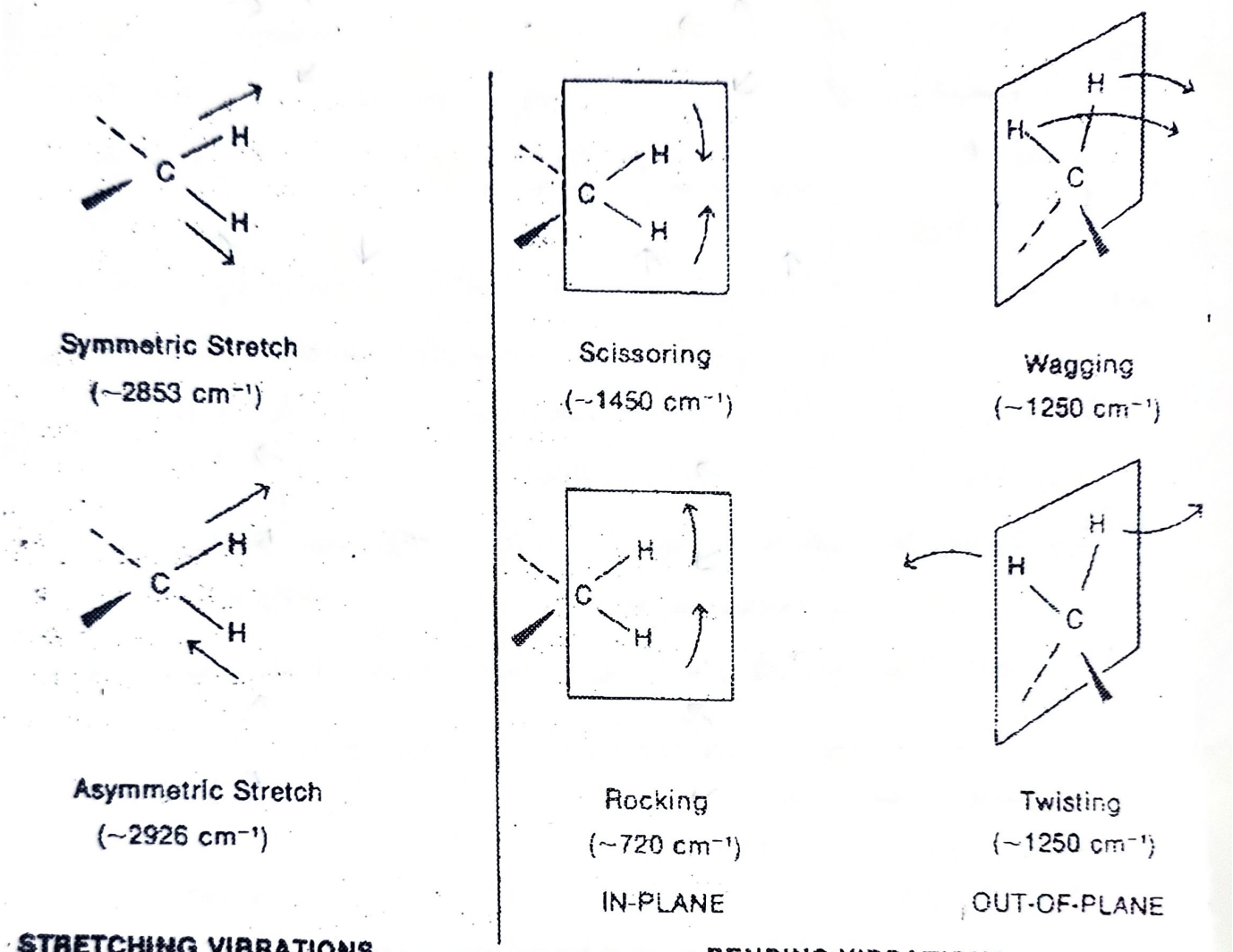
طيف الاشعة تحت الحمراء The Infrared Spectrum

مهــم جــدا في اعطاء فكرة عن تركيب المادة. حيث تكون الجزئية في حالة اهتزاز Vibrating والاواصــر تمــتط وتتقلص وتنحني بالنسبة الى بعضها وعندما تمتص الاشعة ما تحت الحمراء فان الاهتزاز يحدث تغير نتيجة لامتصاص الاشعة التي تكون تحت الضوء الاحمر. يعبر عن الطيف اما بطول الموجة او بالتردد حيث طول الموجة يعبر عنه بالمايكرون microns $\mu = 10^{-4}$ CM or 10^{4} A

TABLE 2-3 A Simplified Correlation Chart

	Type of Vibration		Frequency (cm^{-1})	Wavelength (μ)	Intensity
C–H	Alkanes	(stretch)	3000–2850	3.33–3.51	s
	$-CH_3$	(bend)	1450 and 1375	6.90 and 7.27	m
	$-CH_2-$	(bend)	1465	6.83	m
	Alkenes	(stretch)	3100–3000	3.23–3.33	m
		(out-of-plane bend)	1000–650	10.0–15.3	s
	Aromatics	(stretch)	3150–3050	3.17–3.28	s
		(out-of-plane bend)	900–690	11.1–14.5	s
	Alkyne	(stretch)	ca. 3300	ca. 3.03	s
	Aldehyde		2900–2800	3.45–3.57	w
			2800–2700	3.57–3.70	w
C–C	Alkane	not interpretatively useful			
C=C	Alkene		1680–1600	5.95–6.25	m–w
	Aromatic		1600 and 1475	6.25 and 6.78	m–w
C≡C	Alkyne		2250–2100	4.44–4.76	m–w
C=O	Aldehyde		1740–1720	5.75–5.81	s
	Ketone		1725–1705	5.80–5.87	s
	Carboxylic Acid		1725–1700	5.80–5.88	s
	Ester		1750–1730	5.71–5.78	s
	Amide		1670–1640	6.00–6.10	s
	Anhydride		1810 and 1760	5.52 and 5.68	s
	Acid Chloride		1800	5.56	s
C–O	Alcohols, Ethers, Esters, Carboxylic Acids, Anhydrides		1300–1000	7.69–10.0	s
O–H	Alcohols, Phenols				
	Free		3650–3600	2.74–2.78	m
	H–Bonded		3500–3200	2.86–3.13	m
	Carboxylic Acids		3400–2400	2.94–4.17	m
N–H	Primary and Secondary Amines and Amides	(stretch)	3500–3100	2.86–3.23	m
		(bend)	1640–1550	6.10–6.45	m–s
C–N	Amines		1350–1000	7.4–10.0	m–s
C=N	Imines and Oximes		1690–1640	5.92–6.10	w–s
C≡N	Nitriles		2260–2240	4.42–4.46	m
X=C=Y	Allenes, Ketenes, Isocyanates, Isothiocyanates		2270–1950	4.40–5.13	m–s
N=O	Nitro ($R-NO_2$)		1550 and 1350	6.45 and 7.40	s
S–H	Mercaptans		2550	3.92	w
S=O	Sulfoxides		1050	9.52	s
	Sulfones, Sulfonyl Chlorides, Sulfates, Sulfonamides		1375–1300 and 1200–1140	7.27–7.69 and 8.33–8.77	s s
C–X	Fluoride		1400–1000	7.14–10.0	s
	Chloride		800–600	12.5–16.7	s
	Bromide, Iodide		<667	>15.0	s

ولناخذ مثال مجموعة المثيلين methylene وانواع اهتزازات هذه المجموعة حيث نلاحظ ان اهتزاز المط الغير المتناظر asymmetric stretching vibrations يظهر



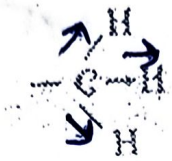
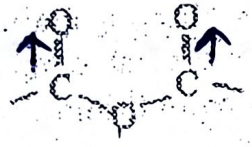
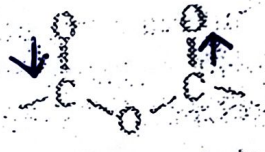
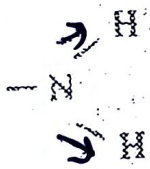
فـــي تـــردد عالـــي (طاقة عالية وطول موجي قصير) اعلى من اهتزاز المط المتناظر symmetric Stretching واعلى من اهتزاز الانحناء bending vibrations

ان قمـــم الامتصاص لا تبدو حادة Sharp ولكن a band is broad عريضة بعض الشئ والسبب يعود الى تداخل ترددات الدوران Rotational frequency او اتحادها مع ترددات المط والانحناء

ان مواقع الحزم التقريبي يمكن الحصول عليه حسابياً من المعادلة التالية المشتقة من قانون هوك وهي

$$\upsilon^{-}(cm^{-1}) = 4.12\sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$\mu = \frac{M_1 M_{21}}{M_1 + M_2}, M_1, M_2 = atomicweight$ الاوزان الذرية

	SYMMETRIC STRETCH	ASYMMETRIC STRETCH
Methyl	 ~2872 cm^{-1}	~2962 cm^{-1}
Anhydride	 ~1760 cm^{-1}	 ~1800 cm^{-1}
Amino	 ~3300 cm^{-1}	~3400 cm^{-1}
Nitro	~1350 cm^{-1}	~1550 cm^{-1}

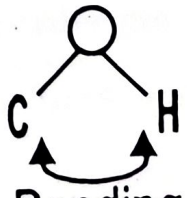
The modes of vibration and bending انواع الاهتزاز والانحناء

ابسط انواع الحركة الاهتزازية للجزيئة والتي تعطي طيف IR هما المط والانحناء

Stretching and bending

Stretching

مط



Bending

انحناء