

تقنيات التحليل الطيفي الاهتزازي

Techniques of Vibrational Spectroscopy

يتطلب التحليل التام للطيف الاهتزازي لجزيء تطبيق تقنيتين - مطيافية الأشعة تحت الحمراء ومطيافية رامان. سوف يستعرض هذا الفصل باختصار خلفية هاتين التقنيتين ويركز بشكل خاص على علاقتها بتحليل الحركة الذرية باستخدام نظرية الزمر. لن يقدم الفصل معالجة مفصلة للخلفية ولا للطرق العملية التي تحيط بهاتين الطريقتين من التحليل الطيفي، حيث نجدها متوفرة في النصوص المتخصصة^(١).

(١، ٤) نظرة عامة

يمكن تمثيل اهتزاز رابطة بين ذرتين بنموذج من كرتين لهما الكتل m_1 و m_2 مرتبطتين بزنبك تُقاس قوته بثابت قوة، k ؛ كلما ازداد الزنبك صلابة (أي كلما ازدادت قوة الرابطة بين الذرتين) ازدادت قيمة k . نجد أنه عند قياس طيف اهتزازي، تمتص الرابطة الطاقة وتزداد حركتها الاهتزازية، أو أكثر دقة ينتقل الجزيء من مستوى طاقة

(١) مثلاً:

C N Banwell and E M McCash, *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, McGraw Hill, 4th Edition, 1994.

اهتزازي إلى آخر، عادة من الحالة الاهتزازية المستقرة إلى أول حالة مثارة. الطاقة اللازمة لهذا الانتقال يتم التعبير عنها بـ:

$$E = h\nu \quad \text{حيث} \quad \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \text{المعادلة رقم (٤, ١)}$$

تسمى μ الكتلة المختزلة وتساوي $\frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)}$.

إن طاقة الأشعة اللازمة لانتقال الجزيئات بين مستويات الطاقة الاهتزازية هي في حدود 10^{-20} J، والذي يكفي التردد الاهتزازي (تردد تذبذب الزنبرك) وهو في حدود 10^{13} ثانية⁻¹ (10^{13} هرتز). أي أن:

$$\nu = E/h = 10^{-20} \text{ J} / 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js} \approx 10^{13} \text{ s}^{-1}$$

تقع هذه الطاقة في منطقة الأشعة تحت الحمراء من الطيف الكهرومغناطيسي. ويُعبر عن الطاقة في الأطياف الاهتزازية عادة بالعدد الموجي ($1/\lambda$) وحداته سم⁻¹ (cm⁻¹).

$$c = \nu\lambda \quad \text{ومنه} \quad 1/\lambda = \nu/c$$

يتم تسجيل الطيف الاهتزازي لجزيء عادة بين 4000 و 200 سم⁻¹. مثلاً،

$$\text{يكافئ التردد } 10^{13} \text{ s}^{-1} \text{ ما يساوي } \frac{10^{13}}{3 \times 10^{10}} = 333 \text{ سم}^{-1}.$$

لا بد من ملاحظة النقاط الأساسية التالية من المعادلة رقم (٤, ١):

- تمتص الروابط القوية (ذات k عالي) الطاقة عند أعداد موجية أعلى من الروابط الضعيفة (قيمة k منخفض).

تظهر الاهتزازات التي تعود لذرات ثقيلة الكتل (m_1 أو m_2 أحدهما أو كلاهما

كبيرة) عند أعداد موجية أقل من تلك التي تعود لذرات خفيفة.

كل من هاتين الملاحظتين العامتين ممثلة في الجدول رقم (٤.١). كلما نقصت قوة الرابطة C-C من رتبة الرابطة الثلاثية إلى الرتبة الأحادية تنزاح الطاقة الاهتزازية من 2000 سم^{-1} إلى ما يقارب 1200 سم^{-1}. أما المثال "غير العضوي" لهذه الظاهرة ذاتها هو طاقة الشد المنخفضة لأول أكسيد الكربون المرتبط بمعادن. لدى مجموعات CO الطرفية أقوى رابطة C-O التي تتطلب أعلى طاقة شد. أما مجموعات CO الجسرية حيث تضعف الرابطة C-O بالمنح المرجح للكثافة الإلكترونية من أكثر من معدن إلى مدار π^* على CO فإنها تؤدي إلى حزم اهتزازية عند طاقة منخفضة؛ تأتي C=O في الألدهيدات والكيتونات البسيطة عند طاقة أكثر من ذلك انخفاضاً.

الجدول (٤،١) نموذج لطاقات الشد (سم^{-1}) لأنواع مختلفة من الروابط.

الرابطة	الطاقة النموذجية	الرابطة	الطاقة النموذجية
C≡C	2220	C-F	1050
C=C	1650	C-Cl	725
C-C	1200	C-Br	650
CO طرفية	2000	C-I	550
CO جسرية	1800		
C=O	1700		

يتم تسجيل أطيف الجزيئات العضوية، أي المركبات ذات الذرات الخفيفة فقط C، H، O، N،... إلخ، عادة بين 4000 و 600 سم^{-1} ، في حين تأتي الاهتزازات الناتجة عن العناصر الثقيلة، مثل المعادن، في المنطقة 400 - 200 سم^{-1} . من النادر تسجيل أطيف تحت 200 سم^{-1} ، لأنه إلى جانب تكلفة الأجهزة، الأشكال الاهتزازية التي عادة توجد في هذه المنطقة هي الاهتزازات الشبكية lattice modes، أي اهتزازات الجزيئات المتقاربة ضمن شبكة الحالة الصلبة.

تبقى ملاحظة عامة واحدة تتعلق بأشكال الشد والثني :

- يتطلب الشد طاقة أكبر من الثني.

يتطلب الشد إما إطالة وإما انضغاط الرابطة ، وهو ما تحكمه الكثافة الإلكترونية الواقعة على امتدادها. بالمقابل ، يشوّ الثني زاوية الربط ، أي المسافة بين الروابط حيث الكثافة الإلكترونية منخفضة نسبياً.

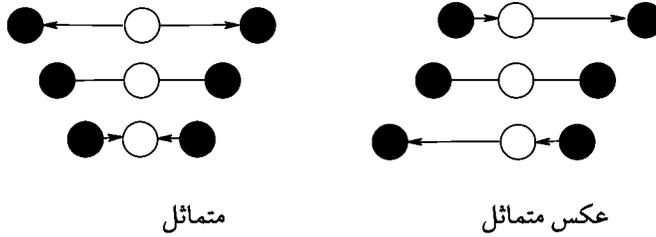
(٤,٢) مطيافية تحت الحمراء

هي الطريقة الأكثر شيوعاً لتسجيل طيف تحت الحمراء بالإثارة المباشرة للأشكال الاهتزازية باستخدام مصدر للأشعة يناسب تماماً فجوات الطاقة بين مستويات الطاقة الاهتزازية. تقع هذه الأشعة في منطقة تحت الحمراء من الطيف الكهرومغناطيسي لذا سميت التقنية بمطيافية تحت الحمراء. يتم مسح العينة في تجربة أشعة تحت الحمراء المشتتة التقليدية تدريجياً بواسطة الأشعة تحت الحمراء عبر مدى من الترددات ، ويُسجّل طيف تلك الانتقالات التي تؤدي إلى إثارة أشكال اهتزازية بالتتابع. في الوقت الحاضر ، تم استبدال هذا النوع من الأجهزة الطيفية بأخرى تعرّض العينة للأشعة تحت الحمراء ذات مدى ترددات واسع في وقت واحد. يتم بعد ذلك فكّ خليط الأشعة النافذة بالتتالي باستخدام تقنيات التحويل بطريقة تحويل الفورير Fourier transform لتحديد الترددات الممتصة.

يتوقف امتصاص طاقة الأشعة تحت الحمراء على أي حال على حدوث تغير في العزم ثنائي القطب عندما يُثار الجزيء بين مستويات الطاقة الاهتزازية. ما لم يوجد مثل هذا التغير ، لا يتم امتصاص للأشعة ويُطلَق على الشكل الاهتزازي غير نشط في تحت الحمراء. قاعدة الانتقاء التالية لا بد أن تنطبق :

- الشكل الاهتزازي يكون نشطاً في تحت الحمراء إذا أدى إلى تغيير في العزم ثنائي القطب عند الإثارة.

مثلاً، لا يتضمن الشد المتماثل لجزيء CO_2 الخطي ($D_{\infty h}$) تغيير في العزم ثنائي القطب إذ تنتظم ذرتي الأكسجين تماثلياً حول ذرة الكربون المركزية في كل من الحالة المستقرة والمثارة؛ يحتفظ الجزيء بمركز التماثل خلال عملية الإثارة. على الجانب الآخر، يتسبب الشد عكس المتماثل بفقد الجزيء لمركز تماثله عند الإثارة وهناك تغيير واضح في العزم ثنائي القطب حيث تنزاح إحدى ذرتي الأكسجين بعيداً عن الكربون في حين تقترب الأخرى الشكل رقم (٤.١). بناء على ذلك نجد أن الشد المتماثل غير نشط في طيف تحت الحمراء والشد عكس المتماثل نشط ويظهر في الأشعة تحت الحمراء.



الشكل رقم (٤.١). الشكل المتماثل وعكس المتماثل لـ CO_2 .

من السهل التعرف على CO_2 في الشكل رقم (٤.١) عندما يتغير العزم ثنائي القطب وعندما لا يتغير، إلا أنه ليست كل الحالات مباشرة بهذا الشكل. وعوضاً عن الدخول في مناقشة نظرية مفصلة، سوف نعرض ببساطة، كيف تجربنا نظرية الزمر متى يكون الشكل الاهتزازي نشطاً:

- يكون الشكل الاهتزازي نشطاً في الأشعة تحت الحمراء إذا كان له تماثل أحد المتجهات الانتقالية (T_x ، T_y أو T_z) وتُقرأ من جدول الصفات.

سؤال تقييم ذاتي ٤,١ : الطيف الاهتزازي لجزيء $[PtCl_4]^{2-}$ (المربع المستوي، D_{4h})

$$\Gamma_{\text{اهتزاز}} = A_{1g} + B_{1g} + B_{2g} + A_{2u} + B_{2u} + 2E_u$$

أي من هذه الأشكال نشط في تحت الحمراء؟ انظر جدول صفات D_{4h} في الملحق ٥.

إجابات جميع أسئلة التقييم الذاتي في الملحق ٣.

(٤,٣) مطيافية الرامان

مطيافية الرامان تقنية غير مباشرة، بخلاف مطيافية تحت الحمراء. وتقتضي تسليط أشعة قوية على العينة من مصدر ليزر ثم قياس أثر تفاعل العينة مع هذه الأشعة وذلك عند زاوية قائمة مع مصدر الأشعة. عادة، تثير فوتونات الأشعة الجزيء فقط في حال كانت مطابقة لمقدار فرق الطاقة بين زوج من مستويات الطاقة، كما في مطيافية تحت الحمراء. إذا لم يتم مثل هذا التطابق، تتفاعل العين مع الأشعة بشكل مرن ولا تنتقل أي طاقة. ولكن التفاعل يكون غير مرن في عدد قليل جداً من الحالات (ما يقارب 10^7 في 10^7)، فتنتقل الطاقة بين الفوتونات والعينة. لقياس هذه النتائج النادرة لا بد أن تكون الأشعة الساقطة قوية وهو معيار يمكن تطبيقه باستخدام الليزر. كما أنه من الصعب قياس هذه النتائج في وجود خلفية تغلب عليها التصادمات المرنة، لذا تقاس الأشعة المشتتة عند زاوية قائمة بالنسبة للأشعة الساقطة، أي بالنسبة لخلفية خالية.

يمثل مقدار الأشعة المنتقلة ($\Delta E = hv'$) جزءاً من طاقة الفوتون الكلية (hv_1) ويكافيء مقدار إثارة الشكل الاهتزازي. تنخفض طاقة الفوتون المشتت وتقع عند تردد جديد، ν_2 . هناك احتمال لنتيجة أخرى ممكنة، وإن كان أقل شيوعاً، هو تفاعل

الفوتون مع جزيء في حالة مثارة. يفقد الجزيء هنا طاقته عن طريق العودة إلى الحالة المستقرة ويزداد تردد (طاقة) الفوتون المشتت إلى v_1+v_2 .

يقيس طيف رامان التغير في تردد الطاقة، (v_1-v_2) أو (v_1+v_2) ، وهو يكافئ تردد (طاقة) فجوة الطاقة بين الأشكال الاهتزازية، v . وبعكس مطيافية الأشعة تحت الحمراء، فالأشعة الساقطة أحادية التردد (أشعة موحدة طول الموجة) ويقاس الطيف الاهتزازي بطريقة غير مباشرة.

قاعدة الانتقاء لمطيافية رامان هي:

- يكون الشكل الاهتزازي نشطاً في رامان فقط إذا أدى إلى تغير في استقطاب الجزيء.

تصف الاستقطابية سهولة أو صعوبة تشوه السحابة الإلكترونية. وفي حالة الشد المتماثل في CO_2 ، يتغير الاستقطاب كلما قصرت أو استطالت كلا الرابطين في وقت واحد (الشكل رقم ٤.١)، ففي حين أن هذا الشكل غير نشط في تحت الحمراء فإنه نشط في الرامان.

- يكون الشكل الاهتزازي نشطاً في رامان إذا كان لديه تماثل أحد الحدود الثنائية (xy, xz, x^2-y^2, \dots) ، وتقرأ من جدول الصفات.

سؤال تقييم ذاتي ٤.٢: الطيف الاهتزازي لجزيء $[PtCl_4]^{2-}$ (المربع المستوي، D_{4h})

يمثل بـ:

$$\Gamma_{vib} = A_{1g} + B_{1g} + B_{2g} + A_{2u} + B_{2u} + 2E_u$$

أي من هذه الأشكال نشط في الرامان؟

(٤,٤) قاعدة الاستبعاد المتبادل

في حالة SO_2 (C_{2v})، حيث يظهر طيفه الاهتزازي في الفصل ٣ والذي يتكون من الأشكال $2A_1$ و B_2 ، ولوحظت الحزم الثلاث في كل من تجارب تحت الحمراء والرامان (A_1 : تماثل T_z ، x^2 ، y^2 ، z^2 ؛ B_2 : T_y ، yz). لذا فالطيف الاهتزازي الكامل يحتوي على تطابق، فالحزم النشطة في تحت الحمراء والرامان لها نفس الطاقة بالضرورة.

الجدول (٤,٢) الطيف الاهتزازي لجزيء SO_2 .

الرامان (سائل سم ⁻¹)	تحت الحمراء (بخار سم ⁻¹)
1336 (غير مستقطب)	1362
1145 (مستقطب)	1151
524 (مستقطب)	518

تنشأ الاختلافات التي قد تظهر في هذه البيانات بسبب كل من الخطأ البسيط المرافق لأي تجربة (حوالي ± 2 سم⁻¹)، وكما هو مبين في الجدول فإن الفروق أكبر لأن العينة قد تم قياسها في حالتين مختلفتين في كل تقنية، مثلاً بخار وسائل. عموماً، إذا كانت حالة العينة هي نفسها في التقنيتين فالفرق بين البيانات المتطابقة لن تتعدى قيمته عدداً ضئيلاً من الأعداد الموجبة.

إن نشاط أشكال $[PtCl_4]^{2-}$ الاهتزازية في تحت الحمراء والرامان (سؤال تقييم ذاتي ٤,١)، (سؤال تقييم ذاتي ٤,٢) يختلف عن تلك لـ SO_2 ويوضح نقطة مهمة. هنا الشكل إما نشط في تحت الحمراء وإما نشط في الرامان ولكن ليس في كليهما؛ لا يوجد أي تطابق بين الطيفين. A_{2u} (T_z) و $2E_u$ (T_x ، T_y) نشطين في تحت الحمراء، في حين A_{1g} (x^2 ، x^2+y^2)، B_{1g} (x^2-y^2) و B_{2g} (xy) فجميعها نشطة في الرامان. لاحظ انخفاض طاقة الاهتزاز بسبب ثقل كتل كل من البلاتين والكلور الجدول رقم (٤,٣).

الجدول رقم (٤,٣) طيف $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ الاهتزازي.

الرامان (سائل سم ⁻¹) 332 (مستقطب)	تحت الحمراء (سائل سم ⁻¹)
	320
314 (غير مستقطب)	
	183
170 (غير مستقطب)	93

هذا مثال لظاهرة عامة تُعرف بقاعدة الاستبعاد المتبادل :

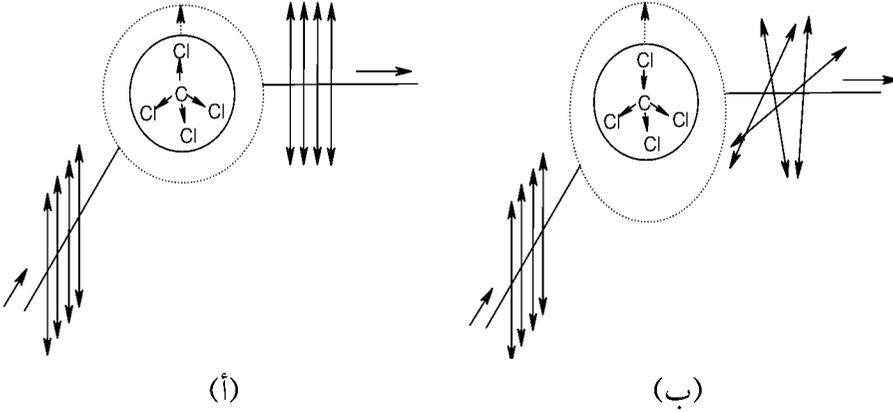
- أي جزيء يملك مركز انقلاب كعنصر تماثل لا يُظهر أي تطابق بين أطراف تحت الحمراء والرامان.

سؤال تقييم ذاتي ٤,٣ : تجد أدناه طيف ثنائي فلور الديازين $\text{FN}=\text{NF}$ الاهتزازي. أي مماكب هندسي هو؟

الرامان (غاز سم ⁻¹)	الأشعة تحت الحمراء (غاز سم ⁻¹)
1636 (مستقطب)	
1010 (مستقطب)	
	989
592 (مستقطب)	
	412
	360

أخيراً، لا بد من بضع كلمات لتفسير المصطلحين "مستقطب" و "غير مستقطب" ضمن بيانات الرامان في الجدول رقمي (٤,٢) و(٤,٣) وسؤال تقييم ذاتي ٤.٣. إن للموجات الكهرومغناطيسية اتجاهًا في الفضاء، إذا حُدّد الشعاع الساقط وفي تجربة الرامان بمستوى واحد فقط ("مستقطب المستوى") وذلك باستخدام شق slit وليس باتجاه عشوائي، فإن تفاعله يختلف عن الجزئي قيد الدراسة من اهتزاز جزئي للآخر. فإذا تأملنا الشد المتماثل لجزئي متماثل كروياً مثل CCl_4 ، نلاحظ أن استقطاب الجزئي سوف يتغير عندما تستطيل الروابط أو تنكمش في وقت واحد. وبما أن هذه الاستطالة أو الانكماش تامة التماثل، ورغم أن استقطابه اختلف فإنه يبقى هو نفسه في جميع الاتجاهات. لا يهم ما هو الاتجاه الذي يتخذه جزئي CCl_4 في الفضاء، فإن ما يجده الشعاع الساقط المستقطب في المستوى يبقى كما هو دائماً. المحصلة النهائية هي أن التفاعل مع صنف تحت تأثير شد تماثلي، يبقى الأشعة المستقطبة في المستوى بعد تشتيتها بسبب العينة، مستقطبة (الشكل رقم ٤.٢ أ).

على الجانب الآخر نجد أن الشكل الاهتزازي غير المتماثل، مثلاً الذي تستطيل فيه إحدى الروابط وتنكمش الأخرى، سوف يقود إلى تغير في كل من الاستقطاب وكذلك التماثل الكروي. سيجد الضوء المستقطب في المستوى درجة مختلفة من الاستقطاب حسب توجه جزئي CCl_4 نحو الأشعة الساقطة، فتصبح الموجة غير مستقطبة بعد التشتيت بواسطة الشكل الاهتزازي غير المتماثل (الشكل رقم ٤.٢ ب).



الشكل رقم (٤، ٢). (أ) تبقى الأشعة المستقطبة في المستوى كما هي بعد تفاعلها مع الشكل الاهتزازي التام التماثل، و(ب) تصبح غير مستقطبة بعد التفاعل مع الشكل غير التماثل.

يقودنا ذلك إلى الملاحظات العامة التالية :

- يكون الاهتزاز مستقطباً في الرامان إذا كان تام التماثل.
- يقابل الشكل المستقطب في الرامان 1 في جدول الصفات كل عمليات التماثل ويكافئ دائماً أول تمثيل غير قابل للاختزال في القائمة.

تأمل الطيف الاهتزازي لـ SO_2 (الجدول رقم ٤.٢) كمثال. جميع الأشكال الثلاث $2A_1$ و B_2 نشطة في تحت الحمراء والرامان، ولكن كيف يمكن إسنادها؟ يؤدي اثنان إلى ظهور حزم مستقطبة وبالتالي يجب أن يعود إلى الاهتزازات A_1 ، أي اهتزازات الشد التماثل والثني (الجزء ٣،٣). أما الاهتزاز المتبقي B_2 فيؤدي إلى حزمة رامان غير مستقطبة. يمكن تمييز اهتزازي A_1 بأن نتذكر بأن حزم الشد تأتي عند طاقة أعلى من اهتزازات الثني، فيكون التحليل الطيفي الكامل هو :

الإسناد	الرامان (سائل سم ⁻¹)	تحت الحمراء (بخار سم ⁻¹)
B ₂ شد عكس تماثل	1336 (غير مستقطب)	1362
A ₁ شد تماثل	1145 (مستقطب)	1151
A ₁ ثني	524 (مستقطب)	518

(٤,٥) الخلاصة

- يتطلب الطيف الاهتزازي الكامل قياس أطيف كل من تحت الحمراء (IR) والرامان (R).
- يتم تسجيل طيف الأشعة تحت الحمراء بتعرض العينة للأشعة تحت الحمراء التي تؤدي إلى انتقال من مستوى طاقة اهتزازي إلى الآخر.
- يكون الشكل الاهتزازي نشطاً في تحت الحمراء إذا أدت الإثارة بين مستويات الطاقة الاهتزازية إلى تغيير في العزم ثنائي القطب.
- يكون الشكل الاهتزازي نشطاً في تحت الحمراء إذا كان يملك تماثل أحد المتجهات الانتقالية T_x ، T_y أو T_z .
- يتم تسجيل طيف الرامان بملاحظة تغير التردد عند تفاعل أشعة الليزر غير المرن مع جزيئات العينة.
- يكون الشكل الاهتزازي نشطاً في الرامان إذا أدت الإثارة بين مستويات الطاقة الاهتزازية إلى تغيير في الاستقطاب.
- يكون الاهتزاز نشطاً في الرامان إذا كان لديه تماثل أي من الاتحادات الثنائية x^2-y^2 ، zx ، yx ،... الخ.

- تظهر حزم الرامان المستقطبة للاهتزازات المتماثلة والتي تقابل أول تمثيل غير قابل للاختزال مدرج في جدول الصفات.
- تنص قاعدة الاستبعاد المتبادل على أن أي صنف يملك مركز انقلاب كعنصر تماثل سوف يُظهر تطابقاً بين أطيف تحت الحمراء والرامان.

مسائل

جميع إجابات المسائل التي تحمل العلامة * في الملحق ٤.

انظر الملحق ٥ لجميع جداول الصفات ذات الصلة.

١ - * أمامك طيف $[\text{ClO}_4]^-$ الاهتزازي:

$$\Gamma_{\text{اهتزاز}} = A_1 + E + 2T_2$$

وضح نشاط تحت الحمراء والرامان وبيانات استقطاب الرامان لكل من هذه الاهتزازات.

٢ - * أمامك الأطياف الاهتزازية للأيونات $[\text{BrF}_2]^-$ و $[\text{BrF}_2]^+$. أسند الأطياف A

و B للأيون المناسب مع بيان السبب.

A	B
(IR) 596	715 (IR ، R مستقطب)
442 (R مستقطب)	706 (IR ، R غير مستقطب)
(IR) 198	366 (IR ، R مستقطب)

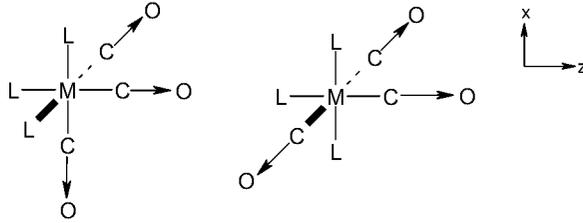
٣ - يحتوي طيف N_2 الاهتزازي حزمة رامان فقط عند 2331 سم⁻¹. ولدى

$[\text{Ru}(\text{NH}_3)_5(\text{N}_2)]^{2+}$ حزمة شد لها تردد 2105 سم⁻¹ نشطة في كل من طيف تحت الحمراء

والرامان في حين $[Ru_2(NH_3)_{10}(N_2)]^{4+}$ له حزمة رامان فقط نشطة عند 2100 سم⁻¹. علق على هذه النتائج.

٤- استنتج اهتزاز Γ ثم تنبأ بنشاط تحت الحمراء والرامان (بما في ذلك بيانات الاستقطاب) لـ $[FeCl_6]^{3-}$.

٥- باستخدام الأسهم أحادية الرأس على امتداد كل رابطة C-O، تنبأ بعدد ونشاط IR/R لاهتزازات شد كل من التماكين السطحي والمتعامد لـ $L_3M(CO)_3$ (L = متصلة).

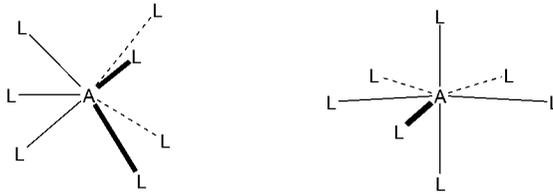


إذا كان للمركب $Mo(CO)_3(PPh_2Me)_3$ حزماً عند 1959، 1853 و 1845 سم⁻¹ في

طيف تحت الحمراء له. أي مماكب هو؟

٦- يتخذ صنف سباعي التناسق الشكل الهندسي منشور ثلاثي الأوجه مغطى

(C_{2v}) أو ثنائي الهرم خماسي الأوجه (D_{5h}) .



تمت دراسة الصنف $K_4[Mo(CN)_7]$ بمطيافية تحت الحمراء في كل من الحالة الصلبة

والسائلة. البيانات (سم⁻¹) في منطقة من الطيف تعود لاهتزازات شد $C \equiv N$ هي:

الصلب: 2059، 2074، 2080، 2090، 2115، 2119.

السائل: 2040، 2080.

استنتج اهتزاز Γ باستخدام سبع متجهات شد $C \rightarrow N$ كقاعدة للتمثيل ومن ثم النشاط في تحت الحمراء لاهتزازات $\nu(C \equiv N)$ لكل من الشكلين الهندسيين. وعليه أوجد تفسيراً لهذه البيانات. (أسند الاتجاه Z للمحور الرئيسي).

٧- لدى $Fe(CO)_4Cl_2$ حزم تحت الحمراء عند 2167، 2126 و 2082 سم⁻¹ تعود

لشد مجموعات الكربونيل. كيف تفسر هذه البيانات؟