الباب العاشر

مسائل للتفسير

لطيف الأشعة تحت الحمراء

Problems in the interpretation of infrared spectra

في هذا الباب سنتعرض لعده مركبات عضوية ممثله في الصيغة الجزيئية وشكل الطيف لها والمطلوب هو التعرف علي المركب والمجموعات الدالة في المركب .

مثال (1)

عينه لفيلم المركب (A) له الطيف في الشكل (1-10) وتبين من التحليل العنصري أن الكربون بنسبة 89.94% والأيدروجين 10.06% ومن هذه البيانات يتبين كيف يمكن اقتراح المركب.

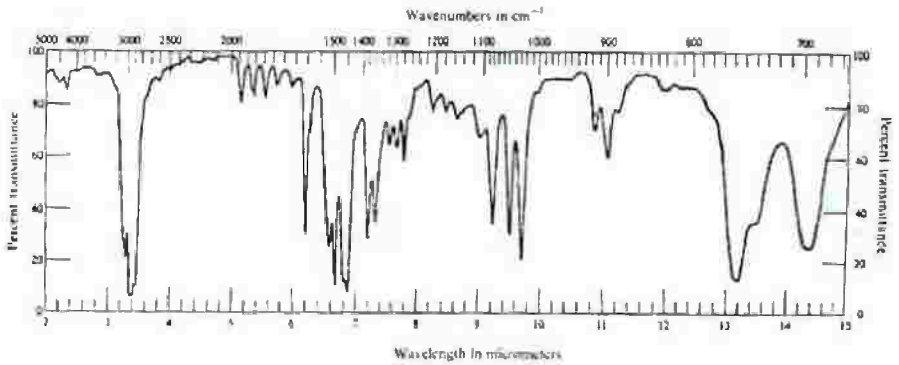


Fig. 10.1 Thin liquid film.

مثال (2)

مركب (B) وجدت له الصيغة التجريبية C_8H_{14} ووزن الجزيئي 110.2 انظر الشكل (2-10) يبين كيف يمكن اشتقاق المركب (B)

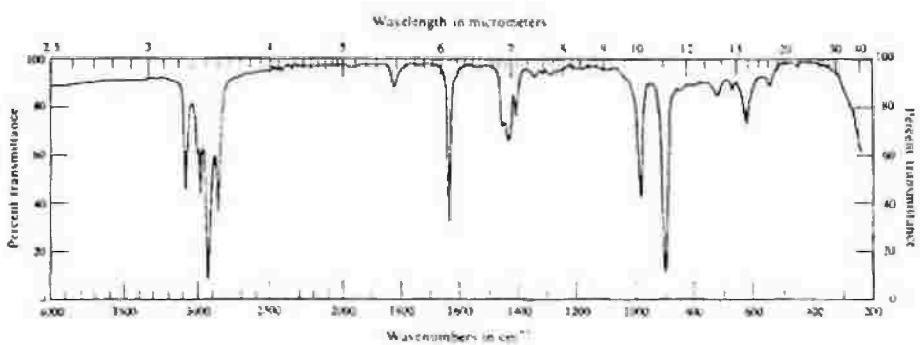


Fig. 10.2 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (3)

مركبان لهما الوزن الجزيئي 180.25 (C.D). والشكل (10.3A) طفيف للمركب (C) والذي له درجة غليان °145 -144 بينما الشكل (10.3B) للعينة (D) بدرجة انصهار °125 -124 في فرص بروميد بوتاسيوم- من الشكلين (A, B) كيف يمكن اقتراح المركبين (C, D) وبإجراء عملية هيدرجه لها (C_1D) مبدئيا امتصا واحد مكافئ إيدروجين ليكون المركب (E) له وزن جزيئي 182.27 بتركيبه بنائيه $C_{14}H_{14}$ ودرجة انصهار 51-50 وكان طيف المركب (E) في الشكل (10.3E) بين كيف اشتقاق (E).

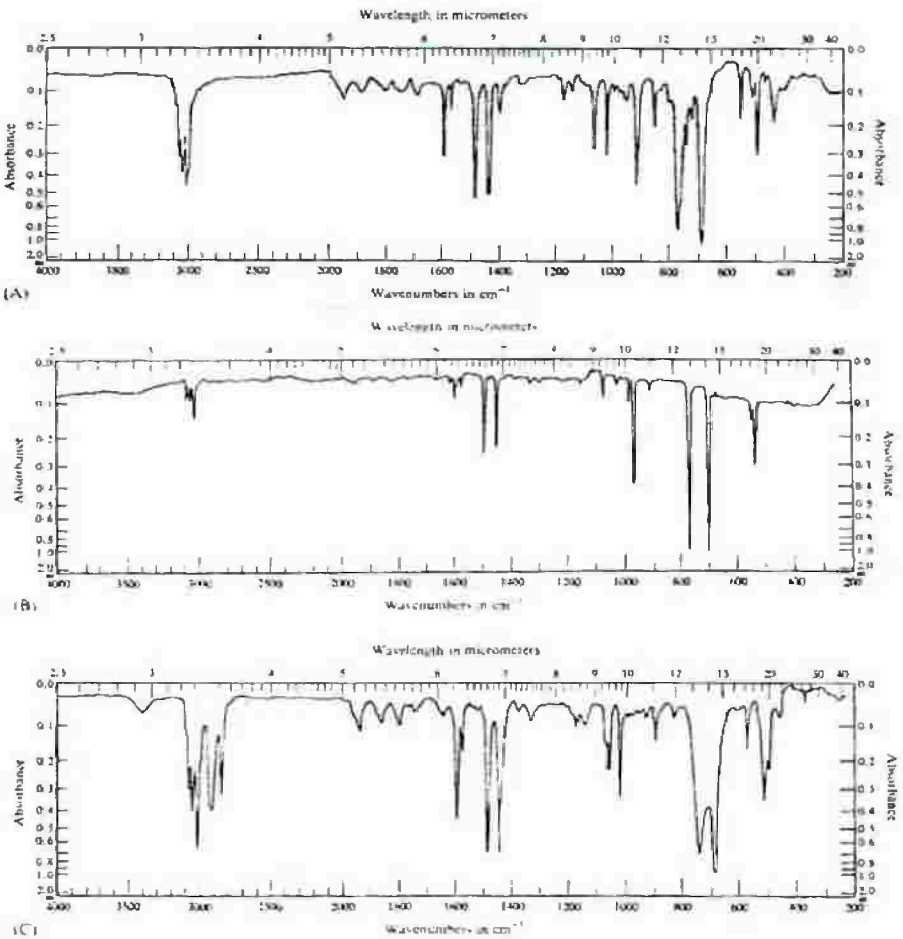
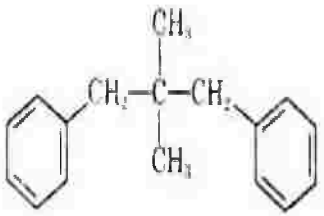


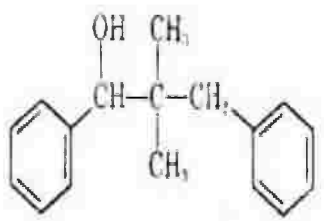
Fig. 10.3 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (4)

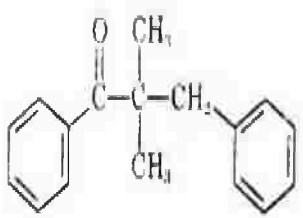
هـذه المركبـات الآتيـة نـواتج مجهـود لتفاعـل في معملـك بنـاءا علـي الشكل بين أيهما المركب المحتمل لناتج التفاعل .



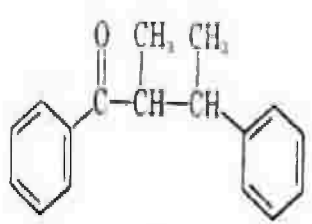
H



I



J



K

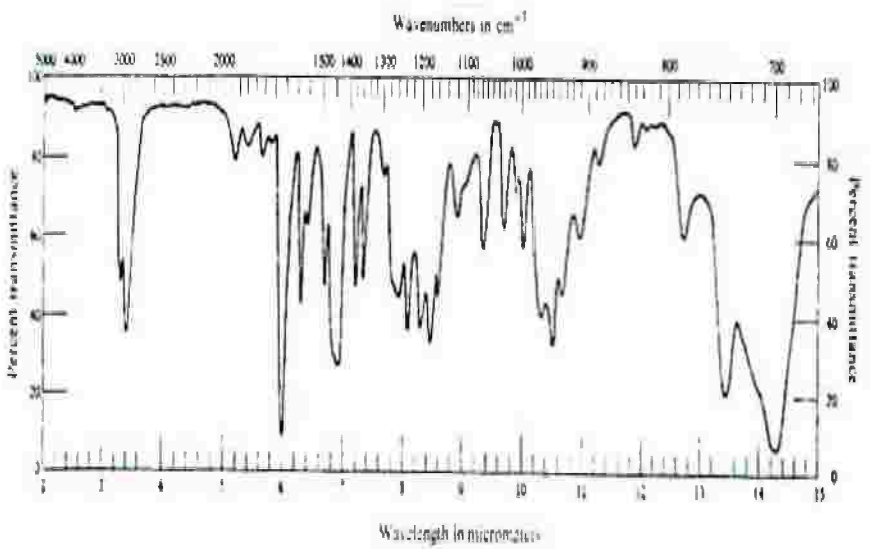


Fig. 10.4 Thin liquid film.

مثال (5)

شكل (5.A) يبين طيف المركب F– وزن جزيئي 106.17 (صيغه بنائية C_8H_{10}) انظر الشكل 5B ماذا يكون التركيب المحتمل للمركبات F أو G؟

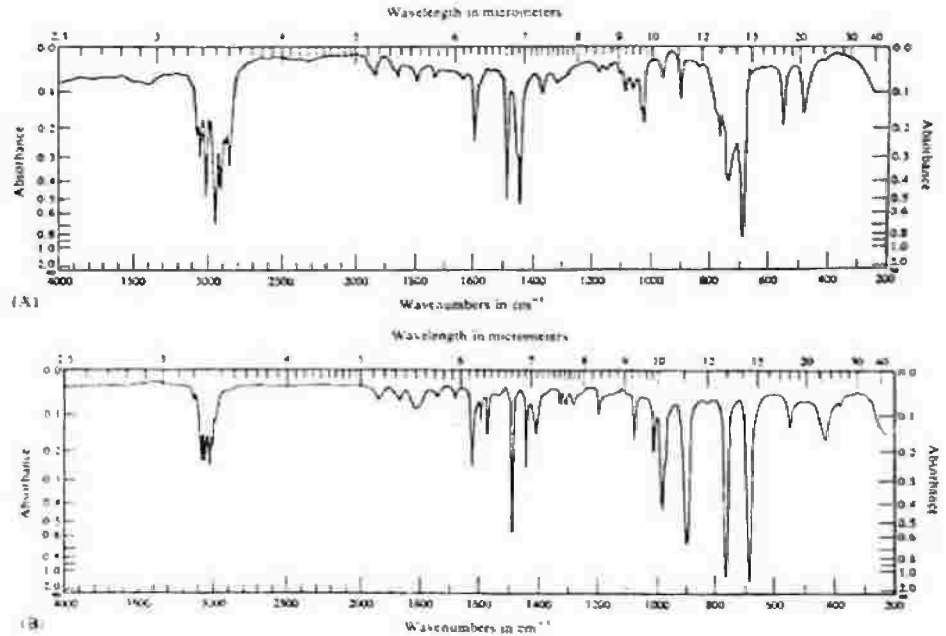


Fig. 10.5. (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (6)

مركب (L) له الصيغة البنائية $C_{12}H_8N_2O_4$ صلب – له درجة انصهار (°35 -°234) وجد له الشكل (6) – الطيفي. يبين اقتراحك لهذا المركب.

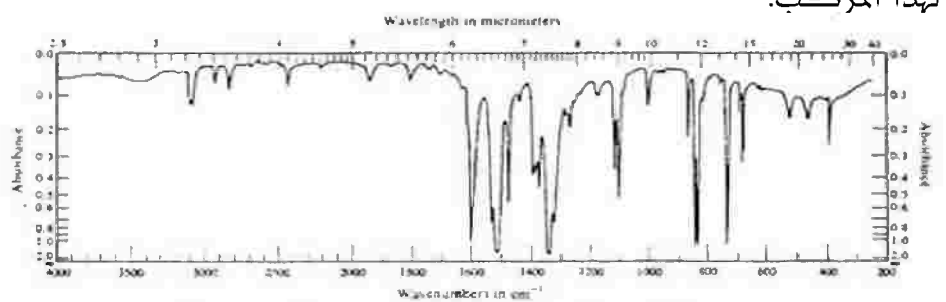


Fig. 10.6 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (7)

مركب (M) له الشكل الطيفي (7) – وزنه الجزيئي (108) – صيغه بنائية C_7H_8O – بناءا علي تلك المعلومات ما هو تركيب هذا المركب؟

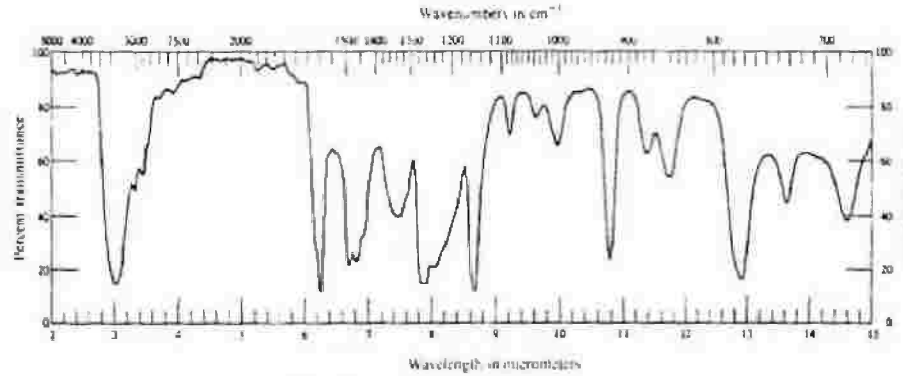


Fig. 10.7 Thin liquid film.

مثال (8)

مركبان لهما الوزن الجزيئي علي التوالي 162 ,111 (N, O) مركب (N) يحتوي علي ست ذرات كربون واحدة أكسوجين، بينما المركب (O) يحتوي نفس عدد ذرات الكربون وواحدة ذرة بروم. بين المركبين من الشكلين (8B, 8A)

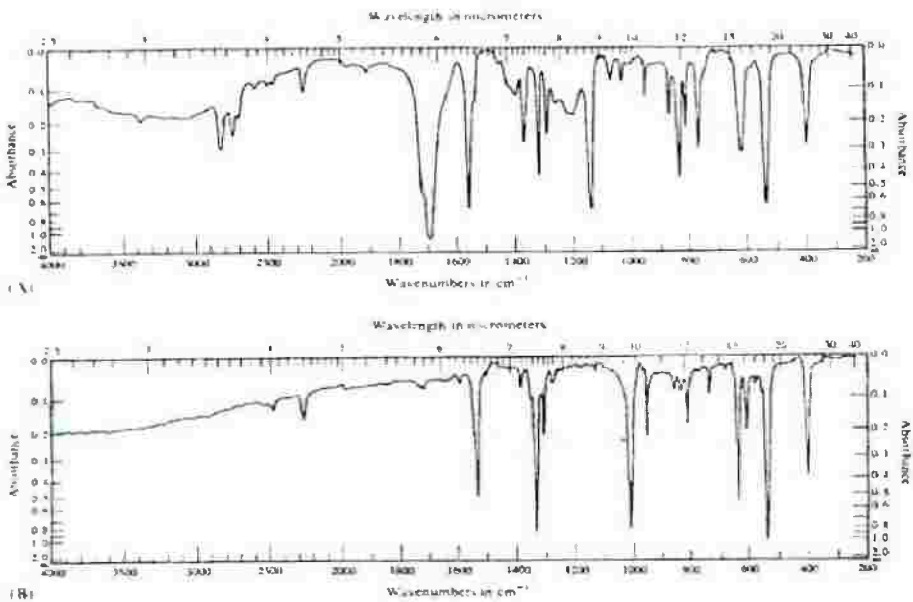


Fig. 10.8 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories)

مثال (9)

شكل (9) يبين طيف لناتج تفاعل خام أدي لمخلوط من هذا التفاعل والتحليل للناتج تبين وجود مركبين تقريبا لها كمية متساوية. ووجد أن الصيغة للمركب $C_8H_{12}O$-P معطيا حزمة امتصاص قوية عند الموضع $1704Cm^{-1}$ بينما المركب $C_8H_{14}O_2$-Q – حزمة طيف $1757Cm^{-1}$.

اقترح هذين المركبين من تلك البيانات.

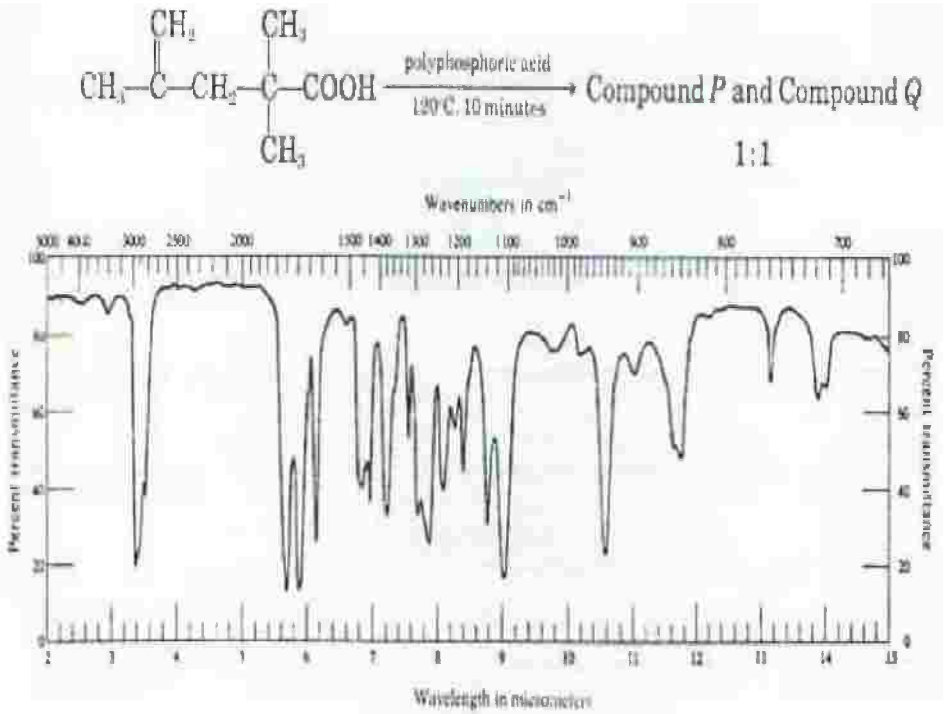
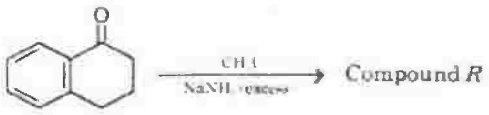


Fig. 10.9 Thin liquid film.

مثال (10)

محاولة بإضافة الكله مرتين dialkylation بواسطة CH_3I في زيادة من اميد الصوديوم أعطت مركب صلب المركب $C_{12}H_{17}NO$- R وبتوقيع الطيف علي هذا المركب في وجود بروميد البوتاسيوم أعطت الشكل (10.A) وفي وجود محلول أعطت الشكل (10.B) بناءا علي هذين الشكلين ما هو ناتج هذا التفاعل؟



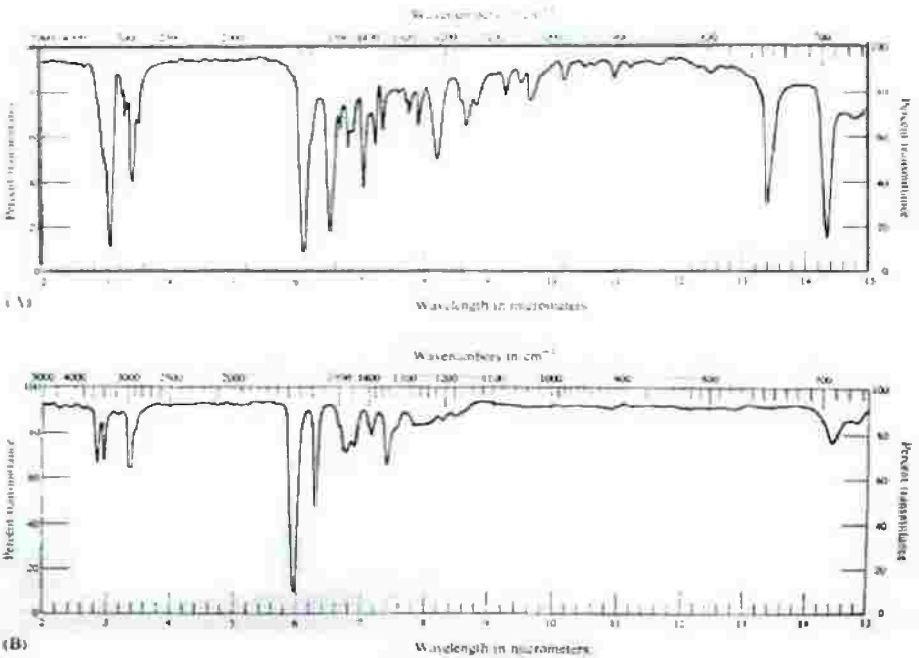


Fig. 10.10 (A) KBr pellet. (B) $CHCl_3$ solution (0.1-mm cell).

مثال (11)

شكل (11) بناءا علي الطيف: اقترح تركيبه هذا المركب لمادة غير مؤيده أو غير مقيده علي سطح من كلوريد الصوديوم. وهذه المادة لا تذوب في كلا مخلوط التفاعل ومذيب استخلاص خلال احد المحاولات لعمليات التحضير.

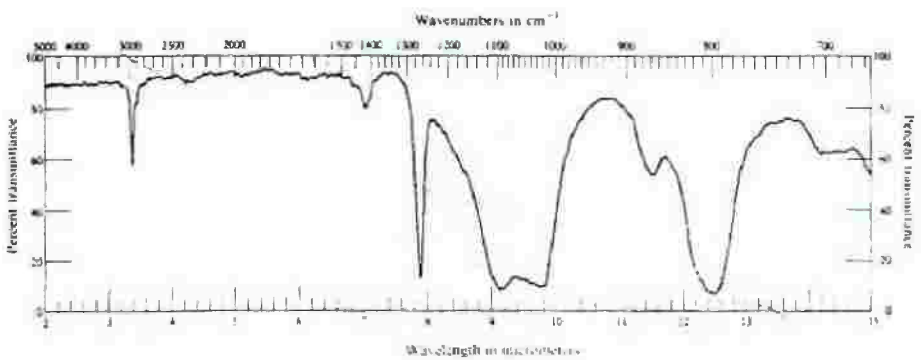
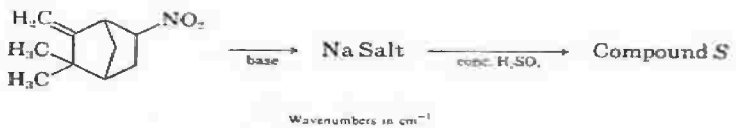


Fig. 10.11 Thin liquid film.

مثال (12)

شكل (12) يعطي طيف لمركب (S) فصل كناتج نهائي لتفاعل من خطوتين لمادة ابتدائية 6- نيتروكامفين 6-nitrocamphene ما ناتج المركب النهائى ؟



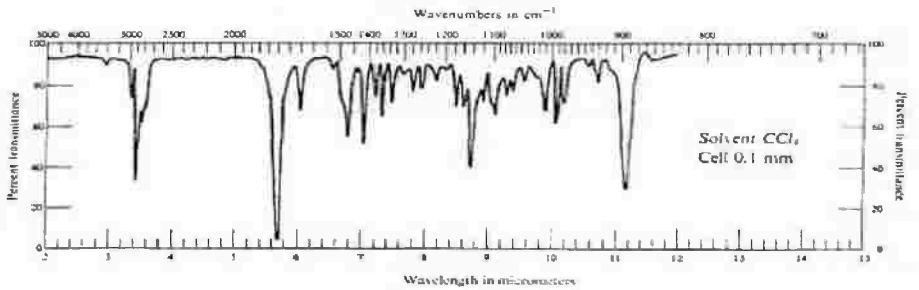


Fig. 10.12 CCl_4 solution (0.1-mm cell).

مثال (13)

مركبان (T)، (V) لهما الصيغة $C_8H_{12}O$، C_5H_8O علي الترتيب. شكل (13A) –T، شكل (13B)- V. كلا المركبين حضرا بنفس الطريقة واحدة ولهما نفس التركيبة الوظيفة. اقترح ما هذين المركبين؟

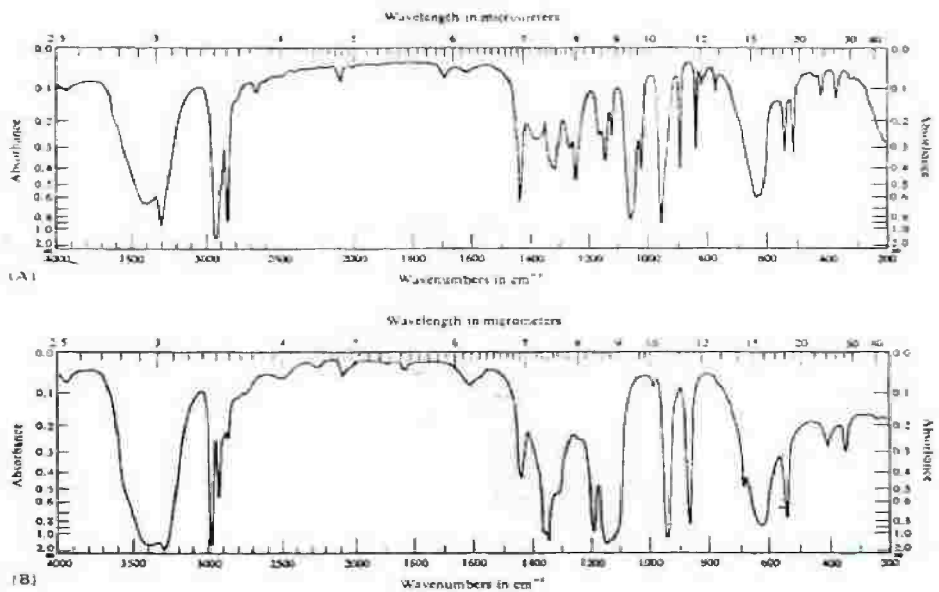


Fig. 10.13 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (14)

مركبان (V, W) متماثلان المواد لها الصيغة $C_6H_{14}O$. شكل (14.A) يوضح المركب (V)، والشكل (14.B) يوضح المركب (W) الطيفي لها كلا المركبين فحصا باستخدام خلية شعرية اشتق طبيعة المجاميع الدالة في المركبين V ، W من الحزم العامة في الشكل (14) واقترح التركيبة لهما.

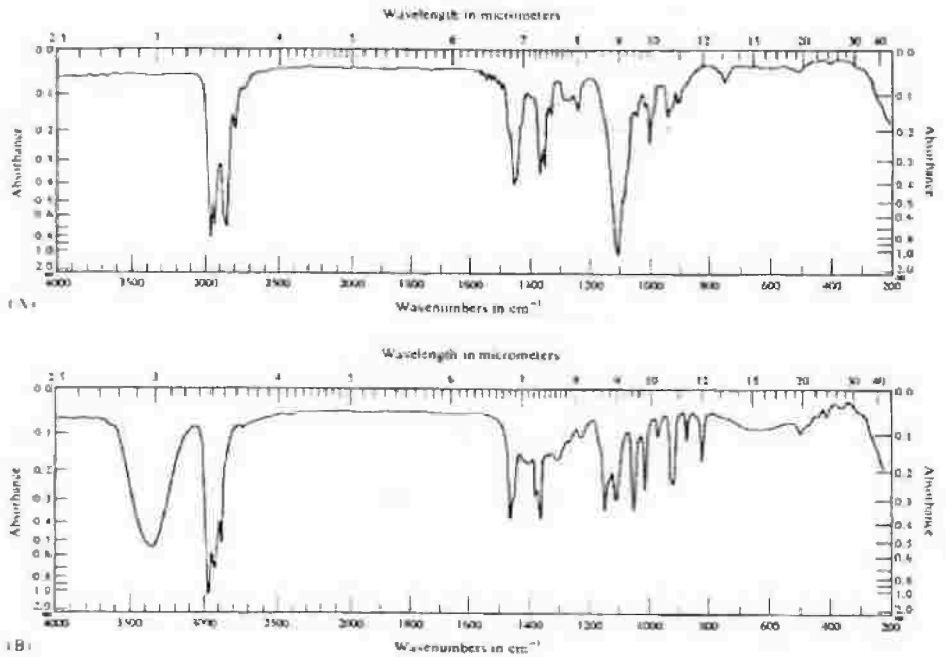


Fig. 10.14 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (15)

حضر مركب (X) – C_8H_7N من مادة مفصولة كناتج تفاعل في المعمل بمعالجة للمادة C_8H_9NO بخامس كلوريد الفوسفور في البنزين. المركب (X) له درجة غليان (°35 -233) وأعطي الشكل الطيفي (15A) اقترح المركب (X)- التركيب والمواد التي حضرت منه.

والشكل (15B) حصل عليه بالمثل من المركب C_8H_6ClN بين المكان للهالوجين بالمقارنة مع الدالة الاخري في المركب X؟

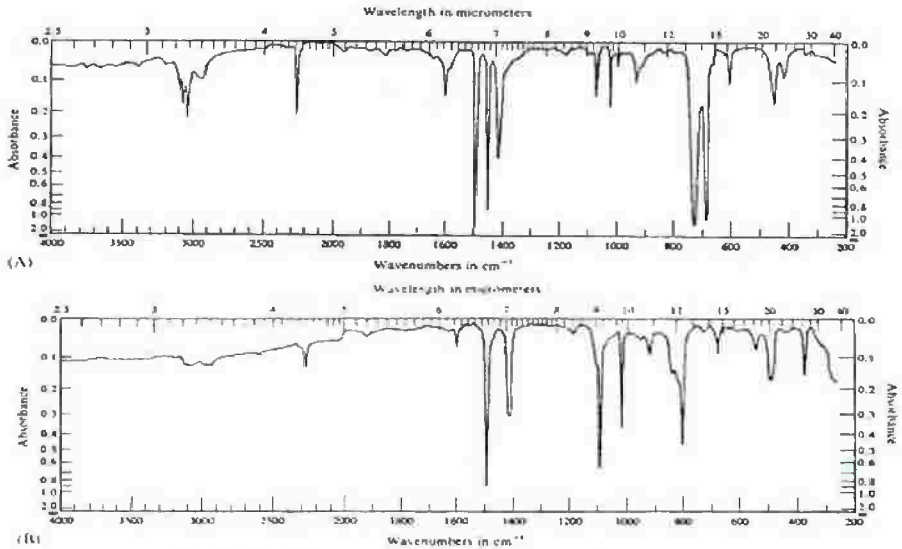


Fig. 10.15 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (16)

سائل نقي لمركب (Z) له صيغه C_7H_8O متجازئي مع مركب (M)

مسألة رقم (7) اقترح المركب (Z) بناءا علي طيف الشكل (16)

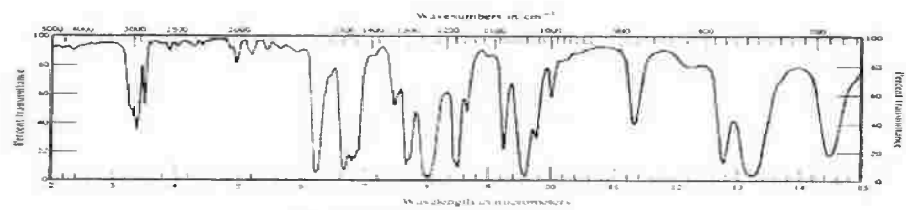


Fig. 10.16 Thin liquid film

مثال (17)

شكل (17) يبين المركب (AA)- له الصيغة $C_{11}H_{13}OC1$.

اقترح تركيبه هذا المركب من بيانات الشكل.

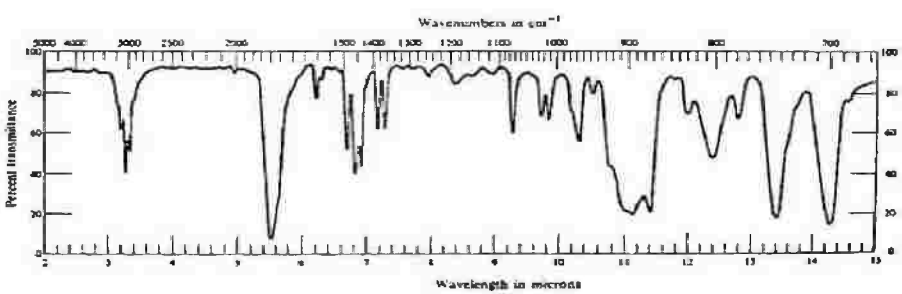


Fig. 10.17 Thin liquid film.

مثال (18)

مركب له الصيغة (C_8H_6) وكان الطيف في الشكل (18A) عولج بمركب كبريتات الزئبقيك في حمض الكبريتيك ليعطي المركب (C_8H_8O) شكل (18B) ما هو الشكل التركيبى للمركب B, A؟

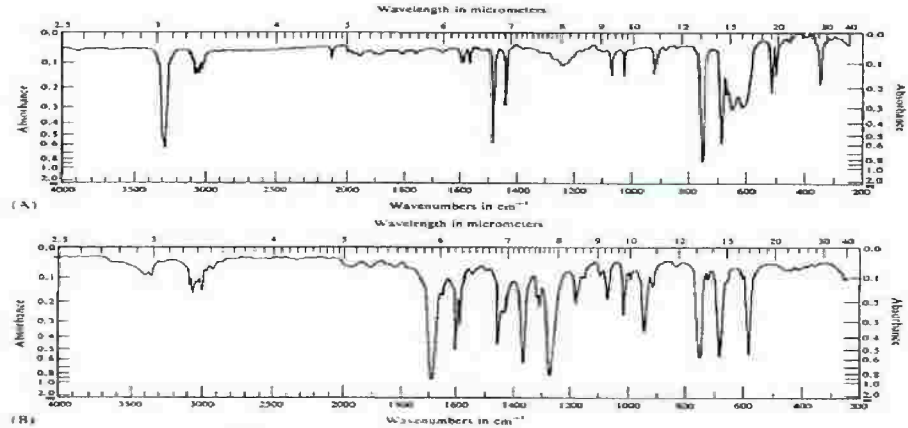


Fig. 10.18 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (19)

مركب (A) له الصيغة $C_{13}H_{16}O_2$ تفاعل مع فينيل كلوريد المغنسيوم في ايثير لا مائي، ليكون المركب B– بالصيغة $C_{19}H_{16}O$ والمركب A سجل باستخدام فيلم – والأخر B في KBr أعطيا الطيف للشكل A، والشكل B علي التوالي. ماذا تقول حول طيف والدالة للمركب B, A .

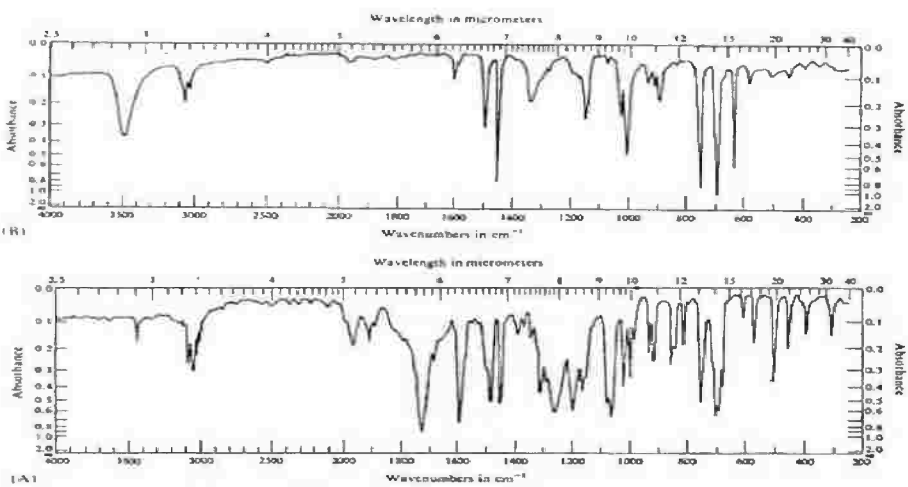


Fig. 10.19 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (20)

مركب (A) له وزن جزيئي 162 هذا المركب تفاعل في وسط قلوي ساخن ليعطي مركب صلب $C_8H_8O_2$ وكحول ميثيلي. والمركب وجد له درجة انصهار منخفضة. انظر الشكل (20). ما هو تركيبه هذا المركب؟

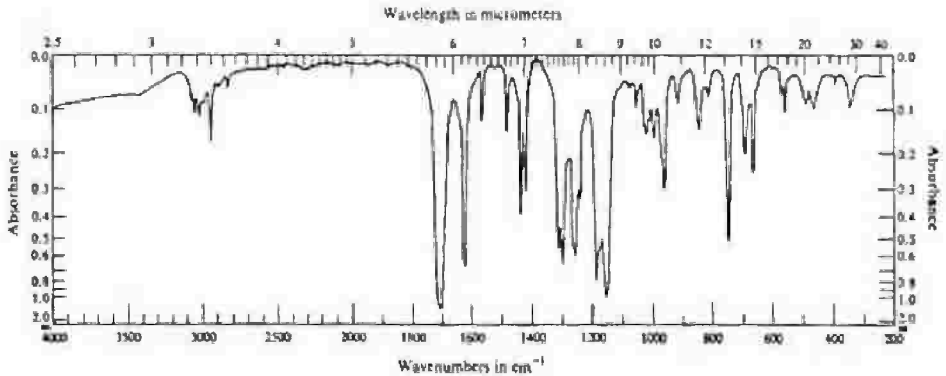


Fig. 10.20 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (21)

مركب للمركب (19) – عولج مع ثنائي فينيل كادميوم ليعطي المركب B– البنية $C_{13}H_{10}O$ – وعندما عولج المركب (B) مع فينيل مغنسيوم بروميد أعطي مركب (C) ليعطي الشكل الطيفي (19B) وطيف المركب (B) (21) يبين كيف نستطيع تركيب (B)

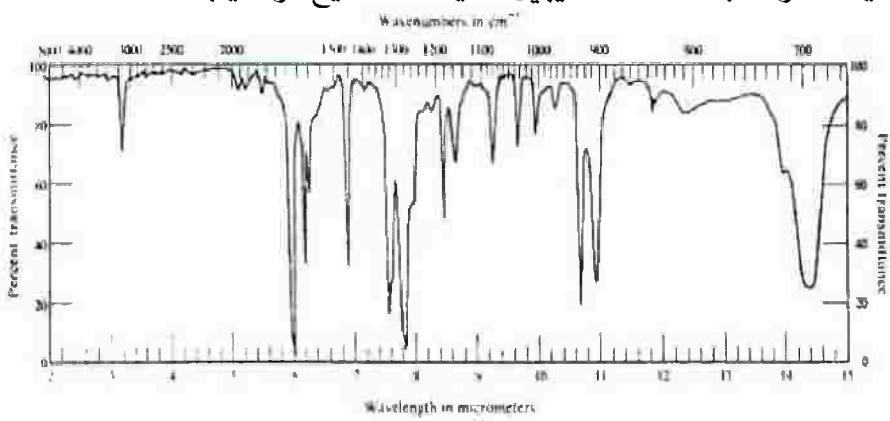


Fig. 10.21 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (22)

مركب (A)- علي هيئة مادة صلبة- درجة انصهار 23 -25°C ومركب (B) – سائل أعطي الطيف في الشكل (22) وبتحليل المركب (A) وجد انه يأخذ الشكل البنائي $C_8H_{10}O_2$ والمركب (A) وجد انه لا يذوب في القواعد. فما هو شكل التركيب للمركب (A)

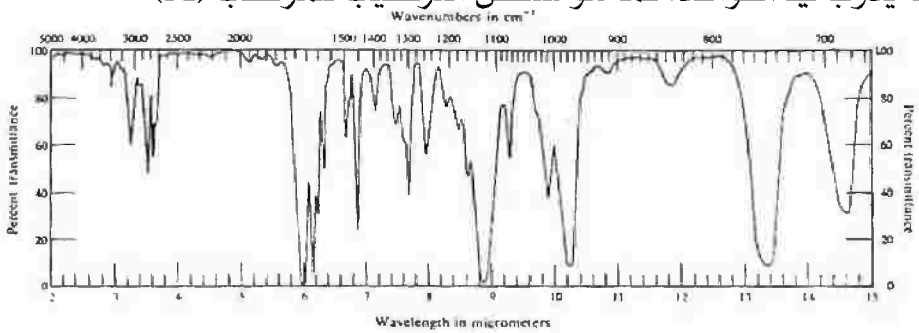


Fig. 10.25 Thin liquid film.

مثال (23)

شكل (23A -23B) أعطيا طيف نموذجي لمركبين مماثلين وطيف المركب (C)- $C_4H_6O_2$ تبين في الشكل 23A والمركب (D) له التركيب $C_6H_{10}O_2$ للشكل 23B. ما هي الدالة لكلا المادتين وكيف يمكن التفريق بينهما في التركيب البنائي؟

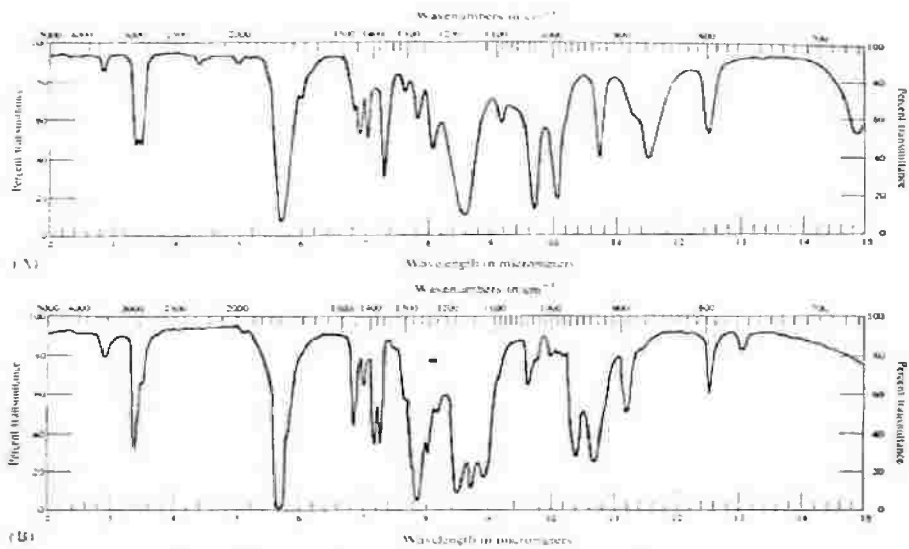


Fig. 10.23 (A) Thin liquid film. (B) Thin liquid film.

مثال (24)

مركب (A) – صلب – C_8H_5NO طحن لدرجة السحق ثم علي هيئة قرص مع بروميد البوتاسيوم. شكل (24) أعطي الشكل الطيفي. فما هو المركب (A) الموضوع علي أساسه التركيبة الطيفية.

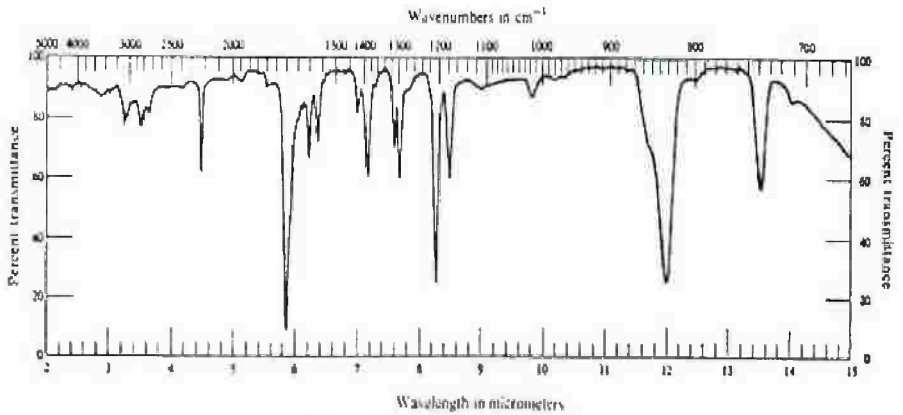


Fig. 10.24 KBr pellet.

مثال (25)

مركب C_9H_8O. فصل من السكر الطبيعي كناتج ثانوي كتركيب بسيط آخر. اجري تحضيره علي خطوة واحدة من مواد متاحة هذا المركب أرسل إليك لفحصه بجهاز IR هل يمكن تحقيق هذا المركب بناءا علي الشكل (25)

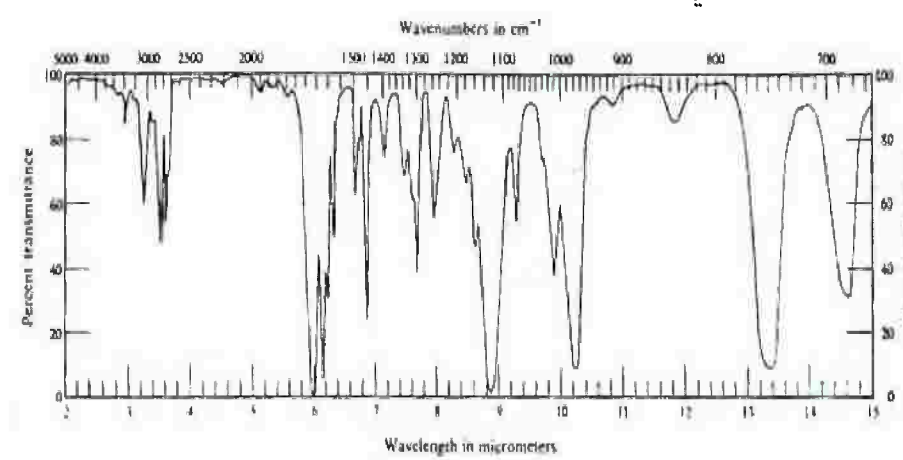


Fig. 10.25 Thin liquid film.

مثال (26)

مركب اروماتي (حلقي) عديد الجزئي غير متجانس الحلقة، ثابت فجأة الحرارة حتى 400° في جو لأكسجين نقي. ناتج فأكسد التكثيف ومنها كان المركب (A) المفصول. وجد أن هذا المركب له وزن جزيئي 147.1- ليعطي تركيبه بنائيه (صيغه) $C_8H_5NO_2$. أعطي الشكل (26) الطيفي. فما هو تركيبه هذا المركب؟

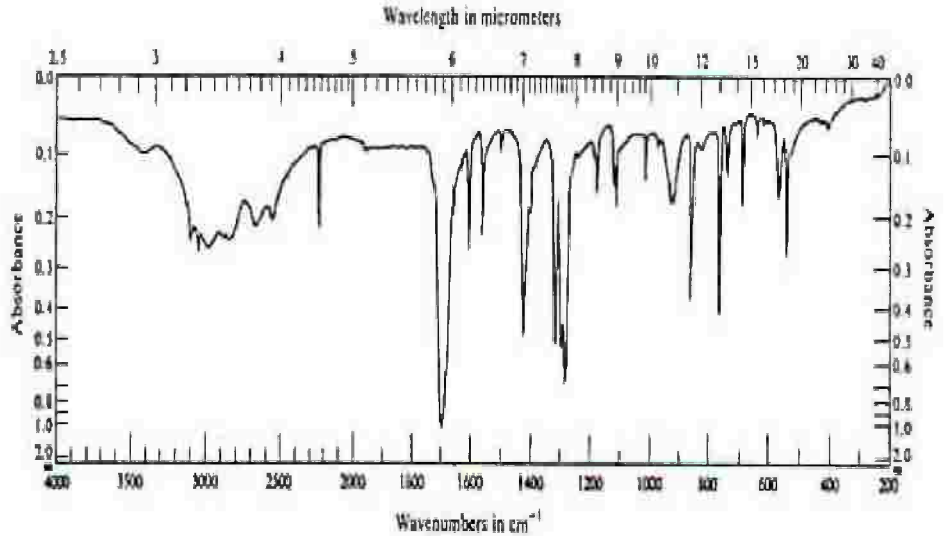


Fig. 10.26 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (27)

حمض كربوكسيلي انظر المعادلة. عولج مع حمض عديد الفوسفوريك وأزيد الصوديوم Sad. Azide فأعطي أمين علي كل. وليس هو ناتج التفاعل الأساسي. في الحقيقة المركب الأصلي أعطي طيف في الشكل (27) هو المركب المفصول كمركب قاعدي. حيث يحتوي المركب فقط علي كربون وهيدروجين ونتروجين- درجة غليان 198° ← 200° من هذا التحليل. ما هو المركب المقترح لهذا المركب؟

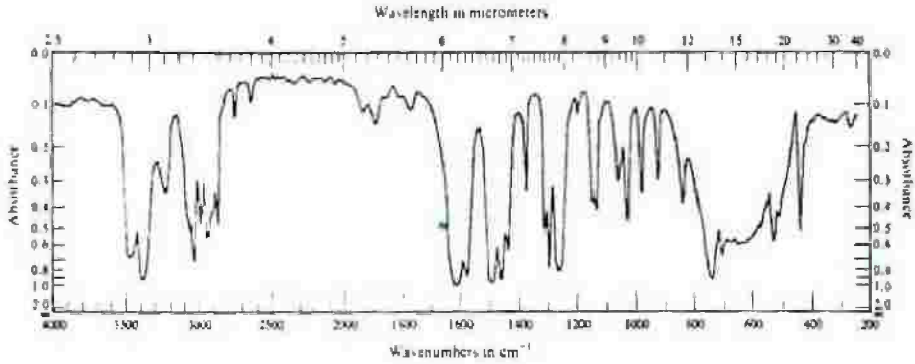
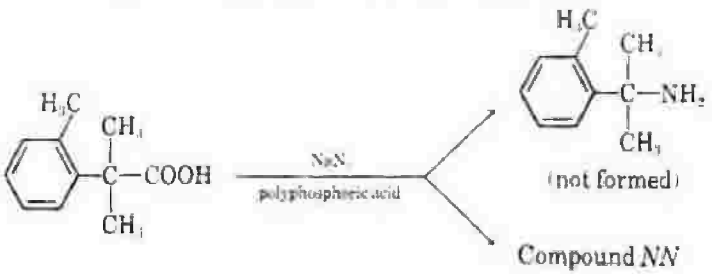


Fig. 10.27 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)



مثال (28)

أجريت عينه من عديد جزئ علي هيئة فيلم وجففت في الهواء. وبالتسخين حتى 125°. تم الحصول علي مادة طياره كانت غير متوقعة. جمع المركب (A) واخذ علي هيئة سائل- فيلم ثم درس طيفيا. أعطي الشكل (28) وبعد التحليل العنصر كان له وزن جزيئي 88 وكانت نسبة العناصر إلي بعضها (4 :2 :1) O:C:H علي الترتيب. فما هو شكل هذا المركب؟

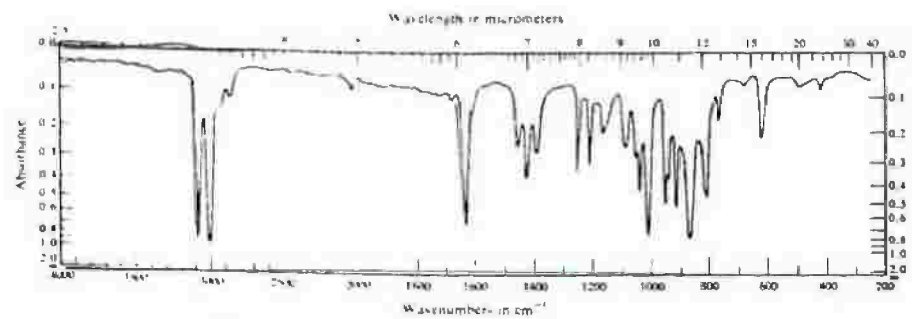


Fig. 10.30 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (29)

مركب في المعادلة التالية عولج بواسطة نحاس- ساخن علي هيئة بخار في مرور غاز خامل. تكون عدة مركبات ولكن المركب (PP) هو المتكور الأكثر وكان الصيغة البنائية $C_8H_{12}O_2$ – انظر الشكل (29) – فما هو تركيبه المركب (PP)

مثال (30)

استر في المعادلة الأخيرة التالية عوج مع حمض، ليعطي المركب QQ – وزن جزيئي 188 يحتوي علي كربون وهيدروجين. المركب QQ أيضا كون مع معالجة حمض ساخن للكيتوكزيم. من المركب QQ أعطي الشكل الطيفي (30). بين كيف يمكن تقييم تركيبه QQ؟

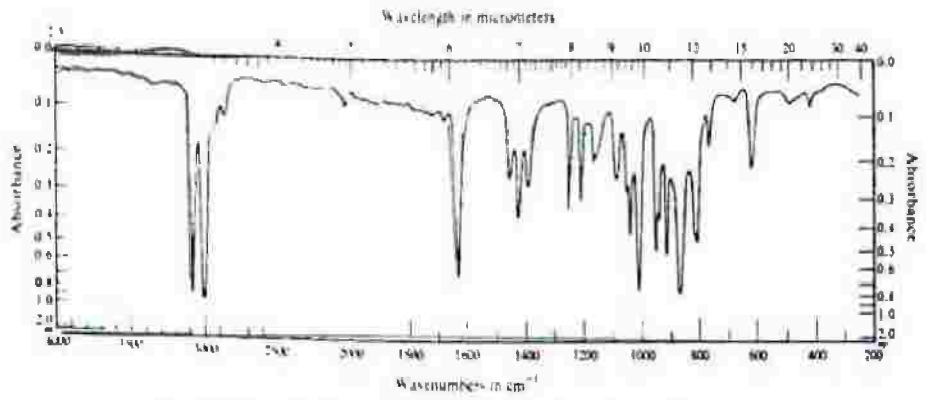


Fig. 10.30 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (31)

وصل إلي معملك عينه لمركب (A) مبدئيا أعطي النتائج التالية: وزن جزيئي 204.2، درجة انصهار 162.5 - 163°. صيغه بنائية $C_{12}H_{12}O_3$. أعطى الطيف في الشكل (31). فما هو تركيبه هذه العينة؟

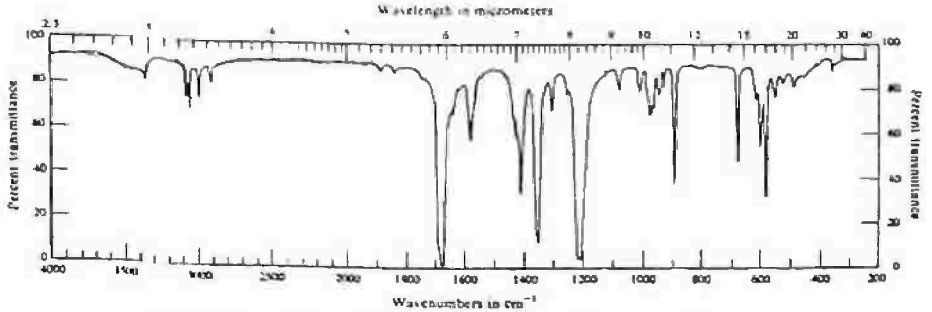
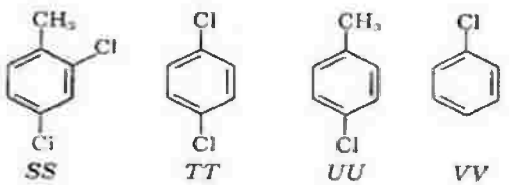


Fig. 10.31 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (32)

مركب أعطي الشكل للمركبات الآتية فيما بعد. وأعطي الشكل الطيفي (32) فما هو المركب المقترح من بين تلك المركبات؟



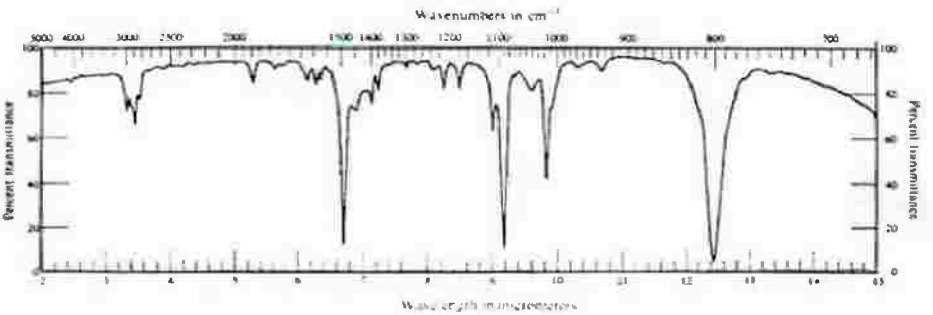


Fig. 10.32 Thin liquid film.

مثال (33)

عولج مركب (A)- 4, 2, 2 ثلاثي ميثيل -3- بنتينال. – 2, 2, 4 trimethyl-3- pentenal مع نترات فضة في قاعدة ثم تبعه تحميض

لمخلوط التفاعل أعطي المركب (B) ليعطي الصيغة $C_8H_{14}O_2$ – شكل (33A) و المركب (B) تفاعل أولا مع كلوريد اكاليل ثم تبعه مع الامونيا ليعطي الناتج (C) – صيغه بنائية ($C_8H_{15}NO$) – ثم فحص طيفيا في الكلوروفورم ليعطي الشكل (33B).

بمعالجة المركب (C) مع بارا تولوين سلفونيك كلوريد في البيريدين ليعطي المركب (D) للشكل الطيفي (33C) والمركب (D) أيضا حضر من المعالجة للاوكزيم (Oxime) للمركب (E) مع بارا –تولوين سلفونيك كلوريد في البيريدين. ومهما يكن، العناصر الثانية وجدت في مخلوط ناتج التفاعل الخام بواسطة الشكل الطيفي (33D)

1- فما هو التركيب الموجود للمركبات D, C, B ؟

2- ما هو تركيبه الشوائب في الشكل (33)؟

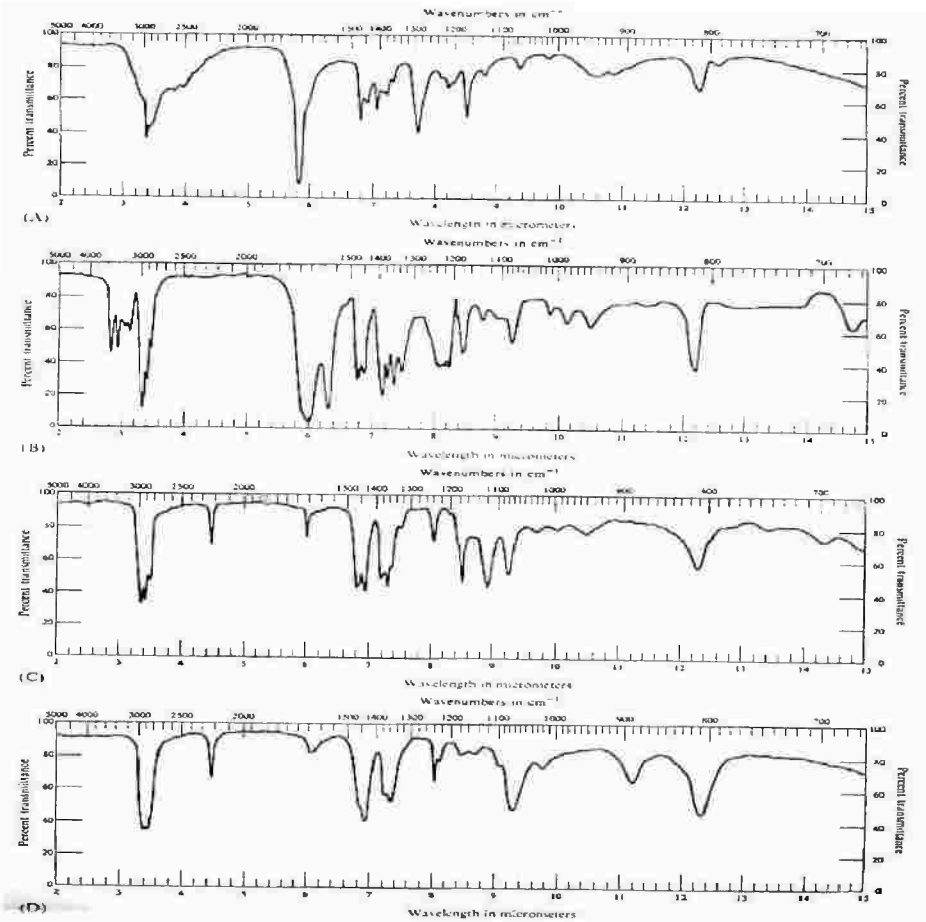


Fig. 10.33 (A) Thin liquid film. (B) $CHCl_3$ solution. (C) Thin liquid film. (D) Thin liquid film.

مثال (34)

مركب (A) عولج كمحلول بنزين مع كمية صغيرة ثنائي بنزويل فوق الأكسيد وبفصل الناتج. المادة B هي الناتج. اقترح تركيبه كلا من B ,A من الطيف 34, 34A.

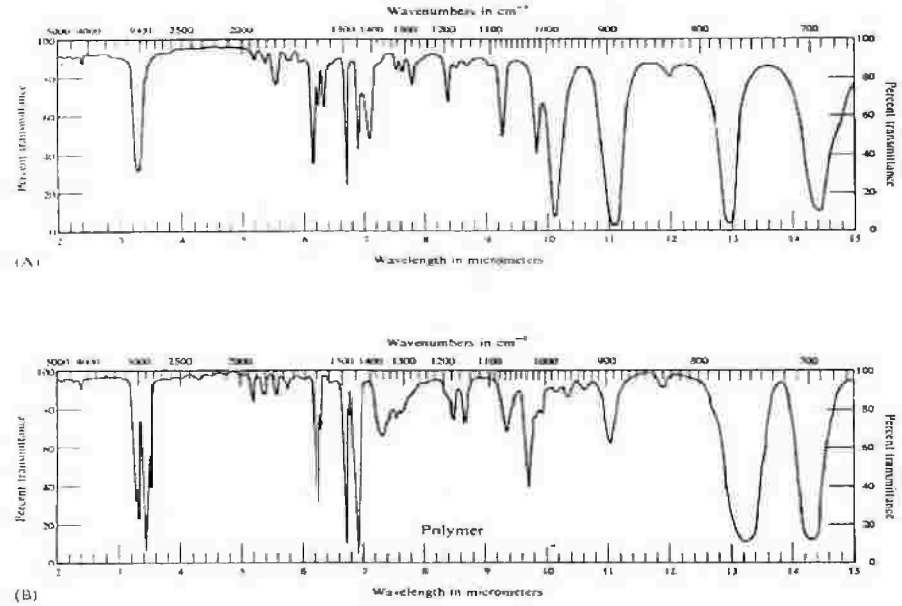


Fig. 10.34 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (35)

مركب (A) بالأكسدة القوية مع برمنجنات الساخنة أعطي حمض بنزويل المركب (A) أعطي صيغه $C_{11}H_{12}O$ له درجة غليان 114° إلي 118° وأعطي الشكل 35- الطيفي لعينه فيلم. فما هو تركيبه هذا المركب.

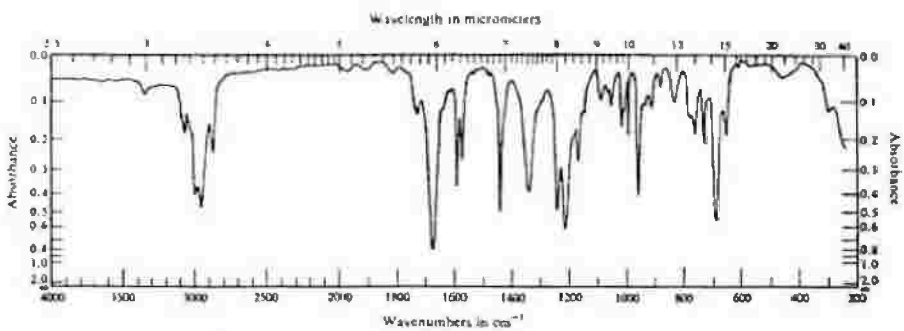
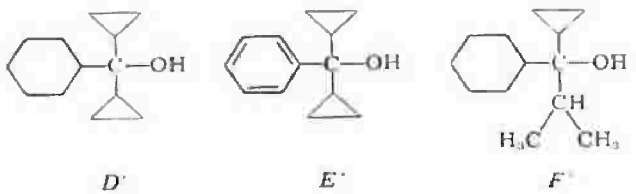


Fig. 10.35 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (36)

ماده لها احد المركبات الثلاثة الآتية D', E', F' . وكانت تلك المواد موضوعه في بوتقات ووقعت تلك الرموز عندما كنت تحاول الوصول عليها بالفحص. وبعد محاولات عده تمكنت الوصول إلي إجراء هذا الفحص الطيفي وأعطي الشكل (36). يبين كيف يمكن التحقيق للمركب وتركيبه من الشكل؟



D' E' F'

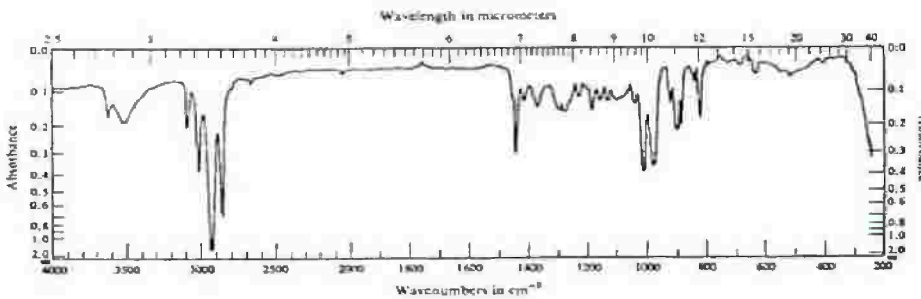


Fig. 10.36 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (37)

مركب (A)- له صيغه بنائيه $C_6H_{16}O$ وأجريت عليه عمليات الفحص الطيفي- فيلم ليعطي الشكل (37). يبين الدالة الوظيفية الموجودة في هذا المركب.

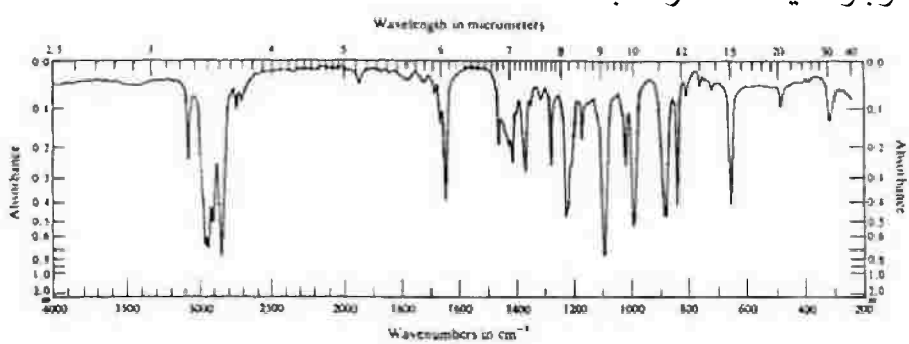


Fig. 10.37 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (38)

مادة (A) لها الشكل الطيفي (38). جمعت من تحليل الكروماتوجرافي الغازي لسلسلة مركبات عضوية ذات وزن جزيئي منخفض محتويه مجموعات نيترو فينوليك فقط هيدروكسيليه. اقترح تركيبه هذا المركب (A)

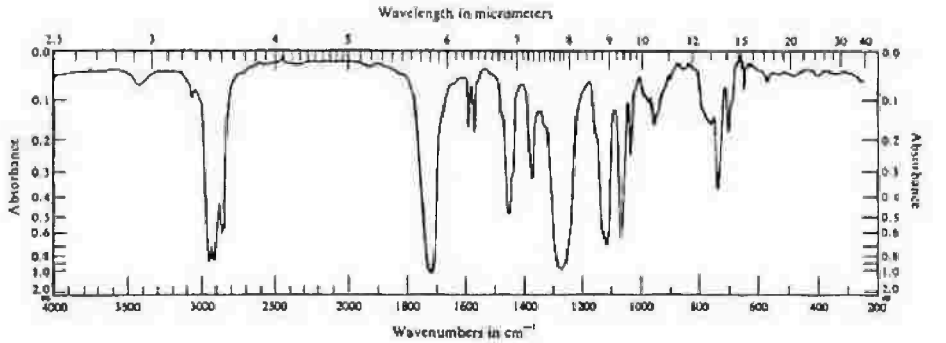
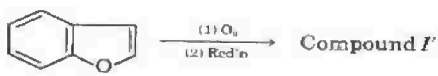


Fig. 10.38 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (39)

مركب (A). فصل من تحليل اوزوني Ozonolysis للمركب الآتي بيانه. ثم عمل لناتج التحليل الاوزوني في الشكل المعتاد أعطي المركب (A) فما هو تركيبه هذا المركب الموجود بالشكل (39)- الطيفي



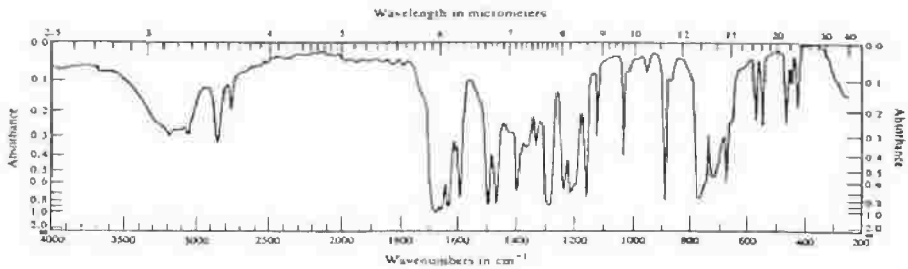


Fig. 10.39 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (40)

أكسده عالية أجريت علي اسيتافيثالين ليعطي المركب (A) – صيغه C12H6O. هذا المركب يتحكم عند 275°. وفي بروميد البوتاسيوم تم فحصه طيفيا ليعطي الشكل (40)

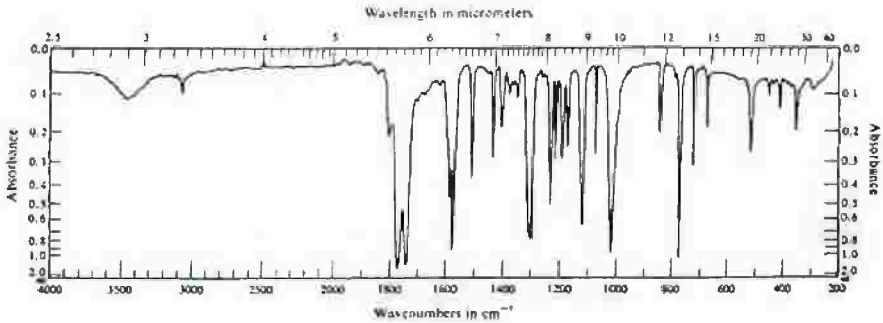
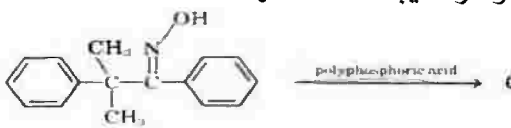


Fig. 10.40 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (41)

مركبان L, K فصلا من تفاعل لاكزيم انظر التفاعل مع حمض عديد فوسفوريك مركب (K) أعطي طيف في الشكل 41A (L) في الشكل 41B. فما هو تركيبه كلا منهما.



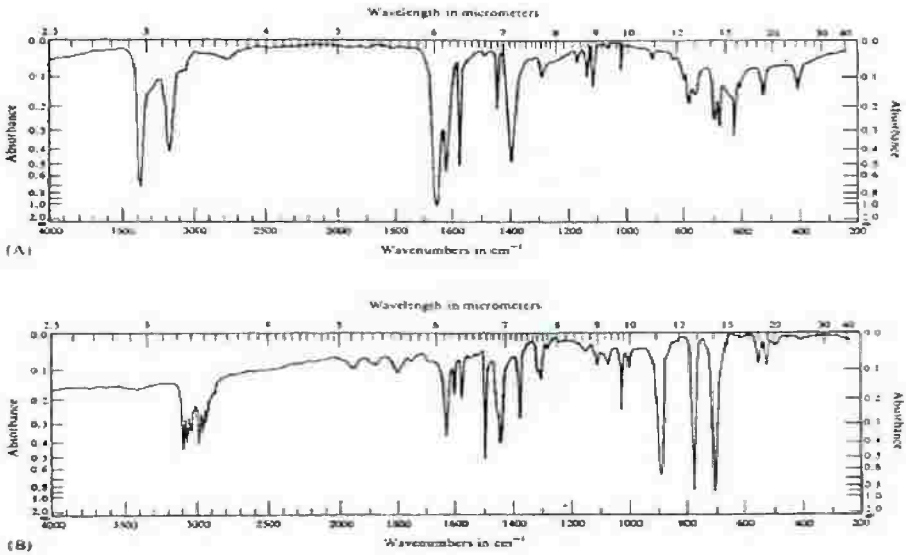


Fig. 10.41 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (42)

مركبان A ,B متجازآن لهما وزن جزيئي 137 كلاهما سوائل ولها الطيف في الشكل (42)- (A ,B) يبين كيف يمكن اقتراح الشكلين.

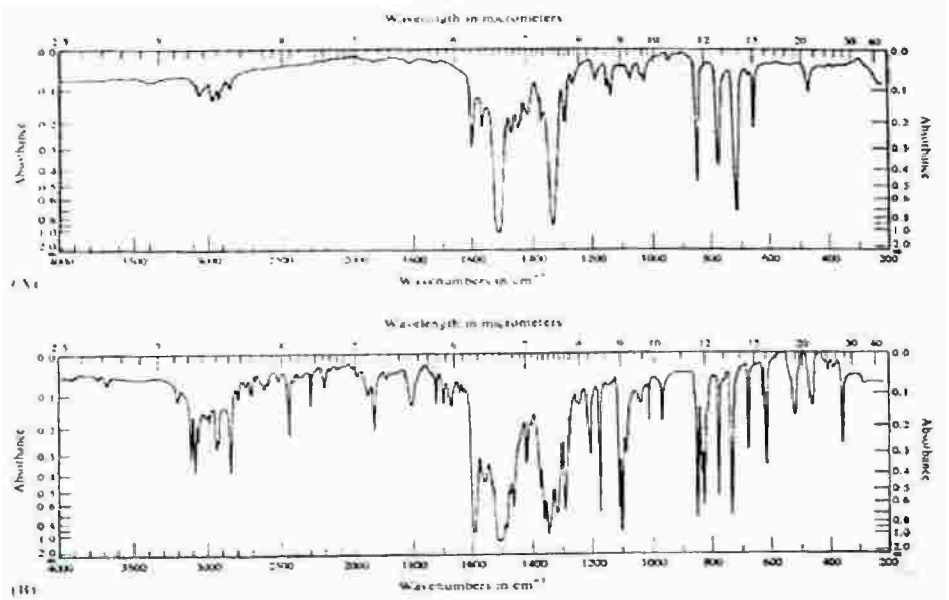


Fig. 10.42 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (43)

مركب (A)- له صيغه بنائية C_8H_7ClO. له الشكل الطيفي (43) من خليه – فيلم سائل. ما تركيبه هذا المركب؟

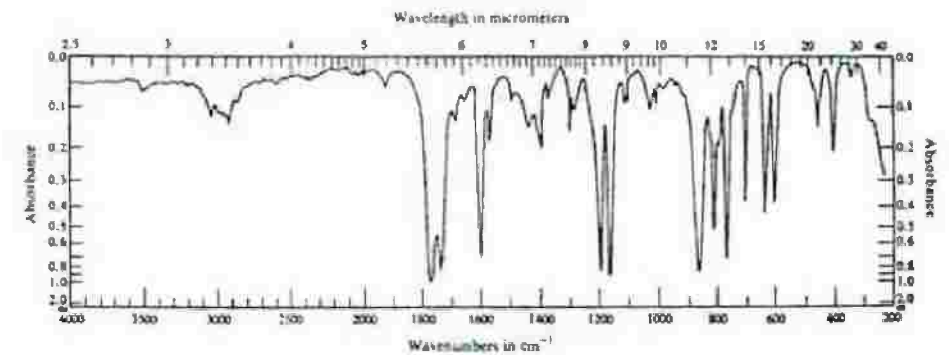
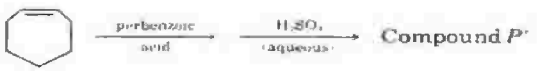


Fig. 10.43 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (44)

فصل مركب (A) علي خطوتين كما هو مبين بالمعادلة الآتية. شكل (44) يعطي الشكل الطيفي له، مركب صلب- له درجة انصهار 57° ←— 58° يبين كيف يمكن تعيين تركيب هذا المركب؟



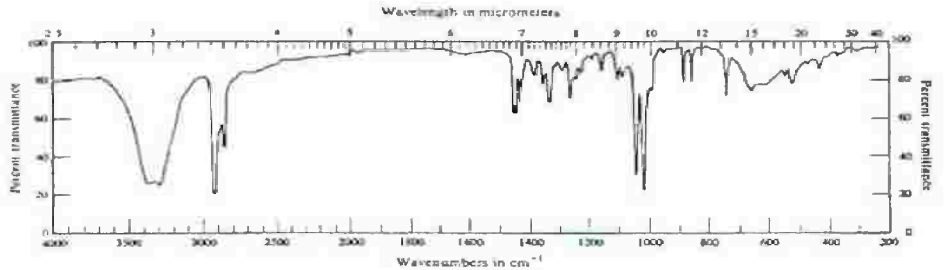


Fig. 10.44 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (45)

مركبان (A, B) يحتويان علي ثلاثة عشرة ذرة كربون، وواحدة نتروجين وواحدة أكسجين. ولكن مختلفان فقط في عدد ذرات الكربون المركب (A) له وزن جزيئي 197.2 بينما (B) له وزن جزيئي 203.3 لها الشكل الطيفي (A, B) يبين كيف يمكن تعيين التركيب لكل منها؟

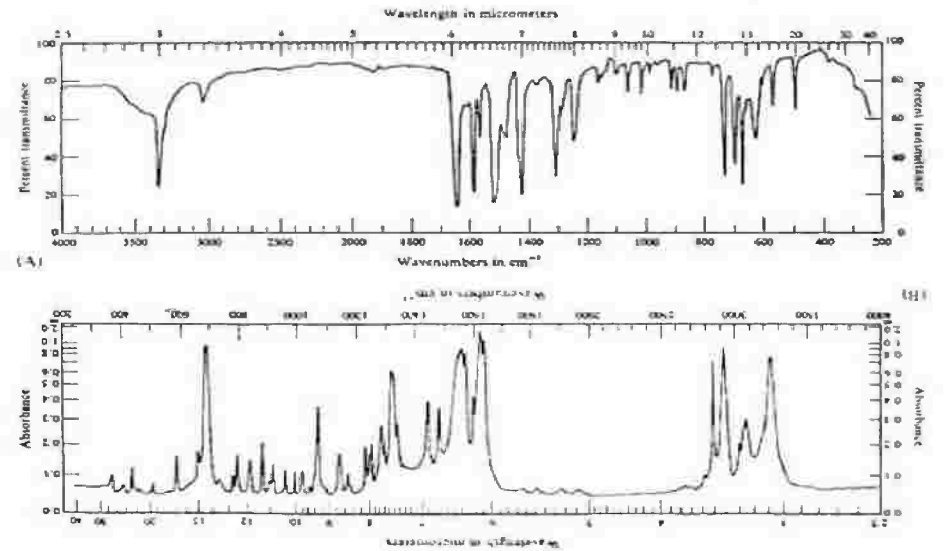


Fig. 10.45 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (46)

مركب (A) له الصيغة البنائية $C_8H_{14}O_3$ والشكل (46) – IR يتكسر إلي سائل متطاير. فما هو تركيبه هذا المركب؟

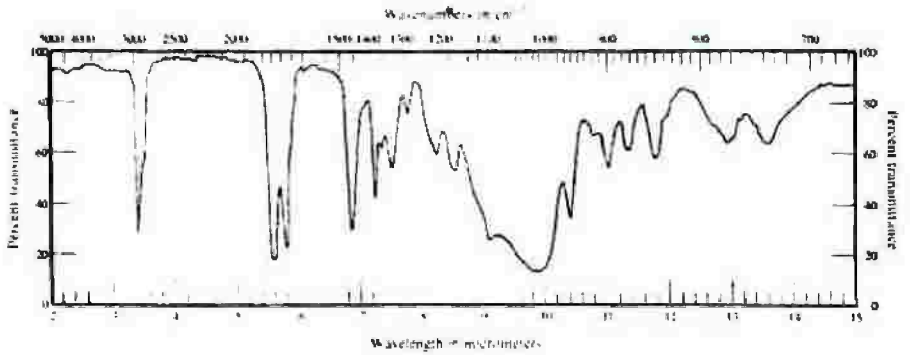


Fig. 10.46 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (47)

مادة عديدة الجزئي فحصت كفيلم علي سطح كلوريد الفضة أعطت الشكل (47) للطيف.بين اقتراحك لتركيبه هذا المركب.

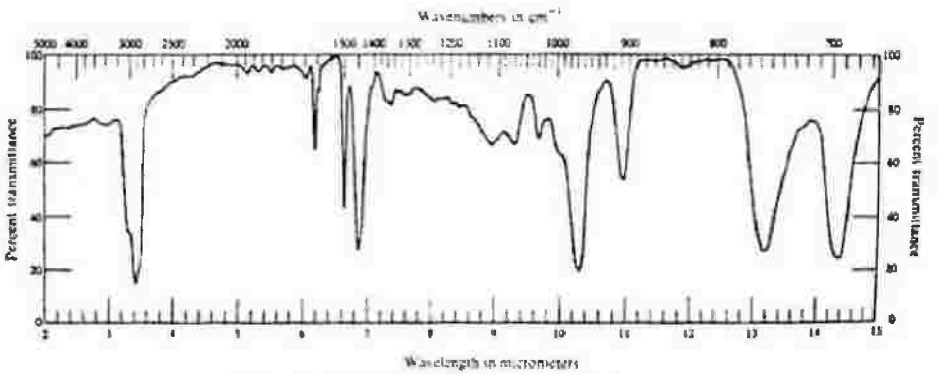
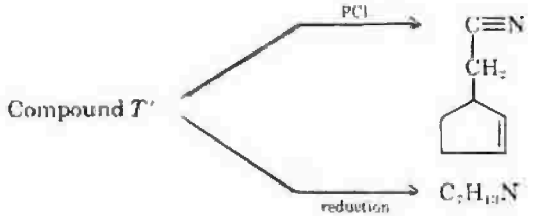


Fig. 10.47 Film deposited from solution.

مثال (48)

مركب له الصيغة البنائية $C_7H_{11}NO$. وجد ليتفاعل مع حامض كلوريد الفوسفور في ايثير ليعطي اسيتو نيتريل خماسي الحلقي انظر التفاعل. اختزل للمركب (A) أعطي أمين بالصيغة $C_7H_{13}N$ وأعطي الشكل الطيفي (48) ما هو المحتمل للمركب والمركب $C_7H_{13}N$؟



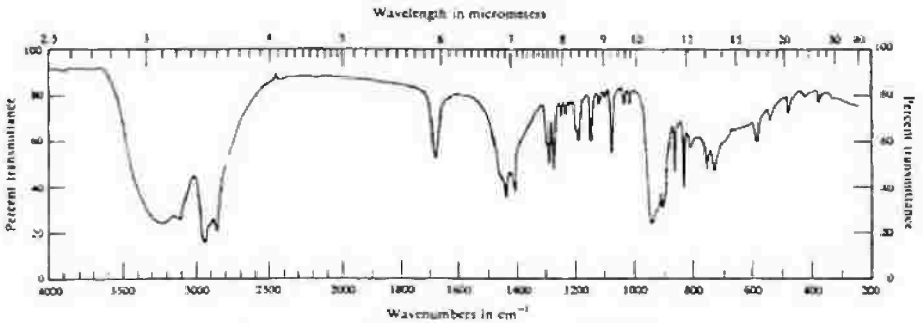


Fig. 10.48 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (49)

مركب (A) له الصيغة البنائية $C_9H_7NO_4$ هذا المركب اختزل حفزيا تحت ضغط ليمتص 5 مكافئ أيدروجين. ولقد اختزل في وجود حديد وحمض ليعطي الصيغة البنائية $C_9H_9NO_2$ وكان له الشكل الطيفي باستخدام بروميد البوتاسيوم (49) فما هو تركيبه هذا المركب بناءا علي تلك البيانات؟

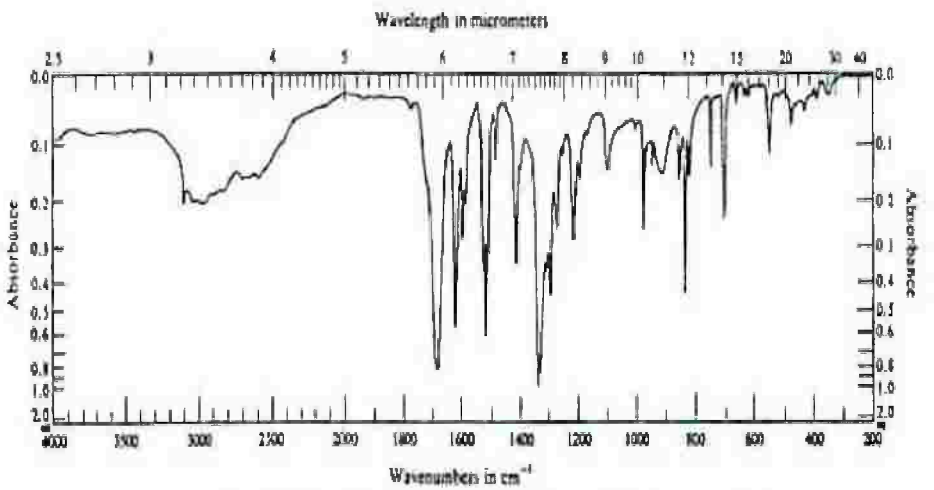


Fig. 10.49 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

مثال (50)

الشكل (50) تم الحصول عليه من المركبات المتوقعة لأي منهم (W, X, Y) والطيف الثاني في الشكل (50B) انظر التفاعل من هذه البيانات التي أعطيت، ما هو التركيب المتوقع للمركبات لها طيف موجود في الشكل (50A)، (B)؟

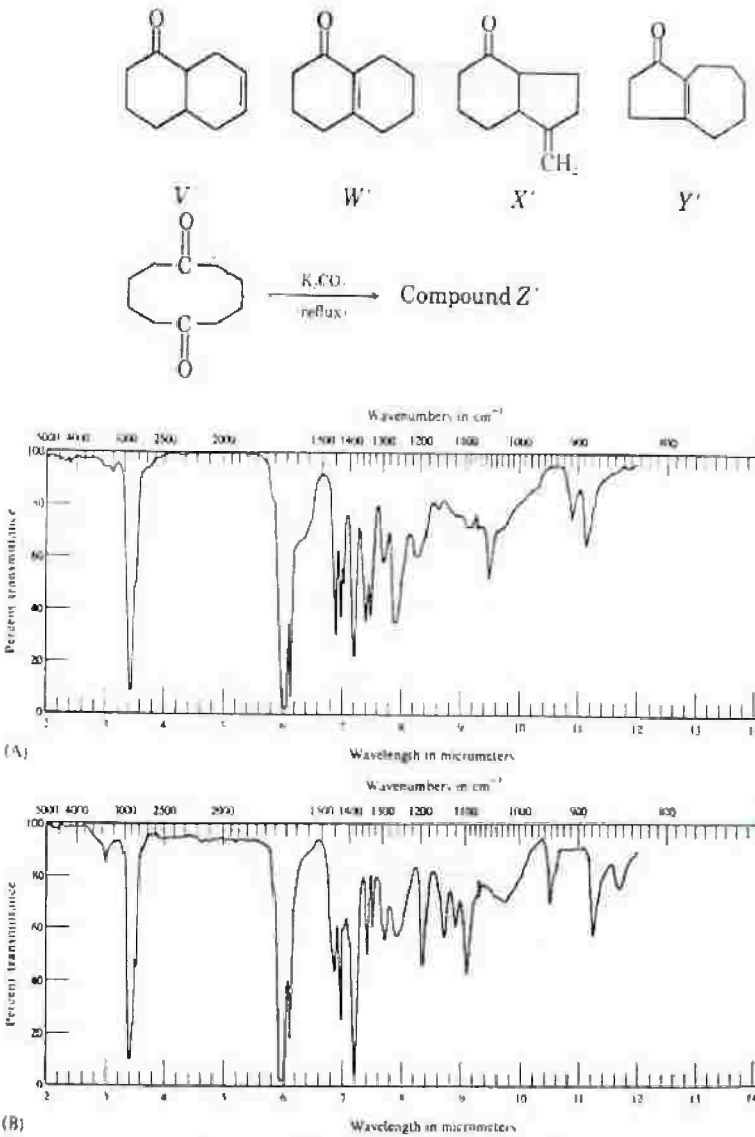


Fig. 10.50 (Courtesy of Sadtler Research Laboratories.)

تذييله 1 Appendix (1)

جداول التحويل الطول الموجي – العدد الموجي

العلاقة

$$\text{الطول الموجي} = \frac{1}{\text{العدد الموجي } (Cm^{-1})}$$

والجدول القادم يعطي مقلوب التركيبة للمراجع السهل من 2 وحتى 19.9um أو في 2um واكبر 19.9um ، القيمة يمكن الحصول عليه بالعلاقة البسيطة الآتية :

$$1.0um = 10.000Cm^{-1}$$

$$20.um = 500\ Cm^{-1}$$

وهذا يعني أن : $20.um = 10000 \times \frac{1}{500}$

Wavenumber (cm^{-1})

Wavelength (μm)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
2.0	5000	4975	4950	4926	4902	4878	4854	4831	4808	4785
2.1	4762	4739	4717	4695	4673	4651	4630	4608	4587	4566
2.2	4545	4525	4505	4484	4464	4444	4425	4405	4386	4367
2.3	4348	4329	4310	4292	4274	4255	4237	4219	4202	4184
2.4	4167	4149	4132	4115	4098	4082	4065	4049	4032	4016
2.5	4000	3984	3968	3953	3937	3922	3906	3891	3876	3861
2.6	3846	3831	3817	3802	3788	3774	3759	3745	3731	3717
2.7	3704	3690	3676	3663	3650	3636	3623	3610	3597	3584
2.8	3571	3559	3546	3534	3521	3509	3497	3484	3472	3460
2.9	3448	3436	3425	3413	3401	3390	3378	3367	3356	3344
3.0	3333	3322	3311	3300	3289	3279	3268	3257	3247	3236
3.1	3226	3215	3205	3195	3185	3175	3165	3155	3145	3135
3.2	3125	3115	3106	3096	3086	3077	3067	3058	3049	3040
3.3	3030	3021	3012	3003	2994	2985	2976	2967	2959	2950
3.4	2941	2933	2924	2915	2907	2899	2890	2882	2874	2865
3.5	2857	2849	2841	2833	2825	2817	2809	2801	2793	2786
3.6	2778	2770	2762	2755	2747	2740	2732	2725	2717	2710
3.7	2703	2695	2688	2681	2674	2667	2660	2653	2646	2639
3.8	2632	2625	2618	2611	2604	2597	2591	2584	2577	2571
3.9	2564	2558	2551	2545	2538	2532	2525	2519	2513	2506
4.0	2500	2494	2488	2481	2475	2469	2463	2457	2451	2445
4.1	2439	2433	2427	2421	2415	2410	2404	2398	2392	2387
4.2	2381	2375	2370	2364	2358	2353	2347	2342	2336	2331
4.3	2326	2320	2315	2309	2304	2299	2294	2288	2283	2278
4.4	2273	2268	2262	2257	2252	2247	2242	2237	2232	2227
4.5	2222	2217	2212	2208	2203	2198	2193	2188	2183	2179
4.6	2174	2169	2165	2160	2155	2151	2146	2141	2137	2132
4.7	2128	2123	2119	2114	2110	2105	2101	2096	2092	2088
4.8	2083	2079	2075	2070	2066	2062	2058	2053	2049	2045
4.9	2041	2037	2033	2028	2024	2020	2016	2012	2008	2004
5.0	2000	1996	1992	1988	1984	1980	1976	1972	1969	1965
5.1	1961	1957	1953	1949	1946	1942	1938	1934	1931	1927
5.2	1923	1919	1916	1912	1908	1905	1901	1898	1894	1890
5.3	1887	1883	1880	1876	1873	1869	1866	1862	1859	1855
5.4	1852	1848	1845	1842	1838	1835	1832	1828	1825	1821

Wavenumber (cm^{-1})

Wavelength (μm)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
5.5	1818	1815	1812	1808	1805	1802	1799	1795	1792	1789
5.6	1786	1783	1779	1776	1773	1770	1767	1764	1761	1757
5.7	1754	1751	1748	1745	1742	1739	1736	1733	1730	1727
5.8	1724	1721	1718	1715	1712	1709	1706	1704	1701	1698
5.9	1695	1692	1689	1686	1684	1681	1678	1675	1672	1669
6.0	1667	1664	1661	1658	1656	1653	1650	1647	1645	1642
6.1	1639	1637	1634	1631	1629	1626	1623	1621	1618	1616
6.2	1613	1610	1608	1605	1603	1600	1597	1595	1592	1590
6.3	1587	1585	1582	1580	1577	1575	1572	1570	1567	1565
6.4	1563	1560	1558	1555	1553	1550	1548	1546	1543	1541
6.5	1538	1536	1534	1531	1529	1527	1524	1522	1520	1517
6.6	1515	1513	1511	1508	1506	1504	1502	1499	1497	1495
6.7	1493	1490	1488	1486	1484	1481	1479	1477	1475	1473
6.8	1471	1468	1466	1464	1462	1460	1458	1456	1453	1451
6.9	1449	1447	1445	1443	1441	1439	1437	1435	1433	1431
7.0	1429	1427	1425	1422	1420	1418	1416	1414	1412	1410
7.1	1408	1406	1404	1403	1401	1399	1397	1395	1393	1391
7.2	1389	1387	1385	1383	1381	1379	1377	1376	1374	1372
7.3	1370	1368	1366	1364	1362	1361	1359	1357	1355	1353
7.4	1351	1350	1348	1346	1344	1342	1340	1339	1337	1335
7.5	1333	1332	1330	1328	1326	1325	1323	1321	1319	1318
7.6	1316	1314	1312	1311	1309	1307	1305	1304	1302	1300
7.7	1299	1297	1295	1294	1292	1290	1289	1287	1285	1284
7.8	1282	1280	1279	1277	1276	1274	1272	1271	1269	1267
7.9	1266	1264	1263	1261	1259	1258	1256	1255	1253	1252
8.0	1250	1248	1247	1245	1244	1242	1241	1239	1238	1236
8.1	1235	1233	1232	1230	1229	1227	1225	1224	1222	1221
8.2	1220	1218	1217	1215	1214	1212	1211	1209	1208	1206
8.3	1205	1203	1202	1200	1199	1198	1196	1195	1193	1192
8.4	1190	1189	1188	1186	1185	1183	1182	1181	1179	1178
8.5	1176	1175	1174	1172	1171	1170	1168	1167	1166	1164
8.6	1163	1161	1160	1159	1157	1156	1155	1153	1152	1151
8.7	1149	1148	1147	1145	1144	1143	1142	1140	1139	1138
8.8	1136	1135	1134	1133	1131	1130	1129	1127	1126	1125
8.9	1124	1122	1121	1120	1119	1117	1116	1115	1114	1112
9.0	1111	1110	1109	1107	1106	1105	1104	1103	1101	1100
9.1	1099	1098	1096	1095	1094	1093	1092	1091	1089	1088
9.2	1087	1086	1085	1083	1082	1081	1080	1079	1078	1076
9.3	1075	1074	1073	1072	1071	1070	1068	1067	1066	1065
9.4	1064	1063	1062	1060	1059	1058	1057	1056	1055	1054
9.5	1053	1052	1050	1049	1048	1047	1046	1045	1044	1043
9.6	1042	1041	1040	1038	1037	1036	1035	1034	1033	1032
9.7	1031	1030	1029	1028	1027	1026	1025	1024	1022	1021
9.8	1020	1019	1018	1017	1016	1015	1014	1013	1012	1011
9.9	1010	1009	1008	1007	1006	1005	1004	1003	1002	1001
10.0	1000.0	999.0	998.0	997.0	996.0	995.0	994.0	993.0	992.1	991.1
10.1	990.1	989.1	988.1	987.2	986.2	985.2	984.3	983.3	982.3	981.4
10.2	980.4	979.4	978.5	977.5	976.6	975.6	974.7	973.7	972.8	971.8
10.3	970.9	969.9	969.0	968.1	967.1	966.2	965.3	964.3	963.4	962.5
10.4	961.5	960.6	959.7	958.8	957.9	956.9	956.0	955.1	954.2	953.3

Wavenumber (cm^{-1})

Wavelength (μm)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
5.5	1818	1815	1812	1808	1805	1802	1799	1795	1792	1789
5.6	1786	1783	1779	1776	1773	1770	1767	1764	1761	1757
5.7	1754	1751	1748	1745	1742	1739	1736	1733	1730	1727
5.8	1724	1721	1718	1715	1712	1709	1706	1704	1701	1698
5.9	1695	1692	1689	1686	1684	1681	1678	1675	1672	1669
6.0	1667	1664	1661	1658	1656	1653	1650	1647	1645	1642
6.1	1639	1637	1634	1631	1629	1626	1623	1621	1618	1616
6.2	1613	1610	1608	1605	1603	1600	1597	1595	1592	1590
6.3	1587	1585	1582	1580	1577	1575	1572	1570	1567	1565
6.4	1563	1560	1558	1555	1553	1550	1548	1546	1543	1541
6.5	1538	1536	1534	1531	1529	1527	1524	1522	1520	1517
6.6	1515	1513	1511	1508	1506	1504	1502	1499	1497	1495
6.7	1493	1490	1488	1486	1484	1481	1479	1477	1475	1473
6.8	1471	1468	1466	1464	1462	1460	1458	1456	1453	1451
6.9	1449	1447	1445	1443	1441	1439	1437	1435	1433	1431
7.0	1429	1427	1425	1422	1420	1418	1416	1414	1412	1410
7.1	1408	1406	1404	1403	1401	1399	1397	1395	1393	1391
7.2	1389	1387	1385	1383	1381	1379	1377	1376	1374	1372
7.3	1370	1368	1366	1364	1362	1361	1359	1357	1355	1353
7.4	1351	1350	1348	1346	1344	1342	1340	1339	1337	1335
7.5	1333	1332	1330	1328	1326	1325	1323	1321	1319	1318
7.6	1316	1314	1312	1311	1309	1307	1305	1304	1302	1300
7.7	1299	1297	1295	1294	1292	1290	1289	1287	1285	1284
7.8	1282	1280	1279	1277	1276	1274	1272	1271	1269	1267
7.9	1266	1264	1263	1261	1259	1258	1256	1255	1253	1252
8.0	1250	1248	1247	1245	1244	1242	1241	1239	1238	1236
8.1	1235	1233	1232	1230	1229	1227	1225	1224	1222	1221
8.2	1220	1218	1217	1215	1214	1212	1211	1209	1208	1206
8.3	1205	1203	1202	1200	1199	1198	1196	1195	1193	1192
8.4	1190	1189	1188	1186	1185	1183	1182	1181	1179	1178
8.5	1176	1175	1174	1172	1171	1170	1168	1167	1166	1164
8.6	1163	1161	1160	1159	1157	1156	1155	1153	1152	1151
8.7	1149	1148	1147	1145	1144	1143	1142	1140	1139	1138
8.8	1136	1135	1134	1133	1131	1130	1129	1127	1126	1125
8.9	1124	1122	1121	1120	1119	1117	1116	1115	1114	1112
9.0	1111	1110	1109	1107	1106	1105	1104	1103	1101	1100
9.1	1099	1098	1096	1095	1094	1093	1092	1091	1089	1088
9.2	1087	1086	1085	1083	1082	1081	1080	1079	1078	1076
9.3	1075	1074	1073	1072	1071	1070	1068	1067	1066	1065
9.4	1064	1063	1062	1060	1059	1058	1057	1056	1055	1054
9.5	1053	1052	1050	1049	1048	1047	1046	1045	1044	1043
9.6	1042	1041	1040	1038	1037	1036	1035	1034	1033	1032
9.7	1031	1030	1029	1028	1027	1026	1025	1024	1022	1021
9.8	1020	1019	1018	1017	1016	1015	1014	1013	1012	1011
9.9	1010	1009	1008	1007	1006	1005	1004	1003	1002	1001
10.0	1000.0	999.0	998.0	997.0	996.0	995.0	994.0	993.0	992.1	991.1
10.1	990.1	989.1	988.1	987.2	986.2	985.2	984.3	983.3	982.3	981.4
10.2	980.4	979.4	978.5	977.5	976.6	975.6	974.7	973.7	972.8	971.8
10.3	970.9	969.9	969.0	968.1	967.1	966.2	965.3	964.3	963.4	962.5
10.4	961.5	960.6	959.7	958.8	957.9	956.9	956.0	955.1	954.2	953.3

Wavenumber (cm^{-1})

Wavelength (μm)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
16.0	625.0	624.6	624.2	623.8	623.4	623.1	622.7	622.3	621.9	621.5
16.1	621.1	620.7	620.3	620.0	619.6	619.2	618.8	618.4	618.0	617.7
16.2	617.3	616.9	616.5	616.1	615.8	615.4	615.0	614.6	614.3	613.9
16.3	613.5	613.1	612.7	612.4	612.0	611.6	611.2	610.9	610.5	610.1
16.4	609.8	609.4	609.0	608.6	608.3	607.9	607.5	607.2	606.8	606.4
16.5	606.1	605.7	605.3	605.0	604.6	604.2	603.9	603.5	603.1	602.8
16.6	602.4	602.0	601.7	601.3	601.0	600.6	600.2	599.9	599.5	599.2
16.7	598.8	598.4	598.1	597.7	597.4	597.0	596.7	596.3	595.9	595.6
16.8	595.2	594.9	594.5	594.2	593.8	593.5	593.1	592.8	592.4	592.1
16.9	591.7	591.4	591.0	590.7	590.3	590.0	589.6	589.3	588.9	588.6
17.0	588.2	587.9	587.5	587.2	586.9	586.5	586.2	585.8	585.5	585.1
17.1	584.8	584.5	584.1	583.8	583.4	583.1	582.8	582.4	582.1	581.7
17.2	581.4	581.1	580.7	580.4	580.0	579.7	579.4	579.0	578.7	578.4
17.3	578.0	577.7	577.4	577.0	576.7	576.4	576.0	575.7	575.4	575.0
17.4	574.7	574.4	574.1	573.7	573.4	573.1	572.7	572.4	572.1	571.8
17.5	571.4	571.1	570.8	570.5	570.1	569.8	569.5	569.2	568.8	568.5
17.6	568.2	567.9	567.5	567.2	566.9	566.6	566.3	565.9	565.6	565.3
17.7	565.0	564.7	564.3	564.0	563.7	563.4	563.1	562.7	562.4	562.1
17.8	561.8	561.5	561.2	560.9	560.5	560.2	559.9	559.6	559.3	559.0
17.9	558.7	558.3	558.0	557.7	557.4	557.1	556.8	556.5	556.2	555.9
18.0	555.6	555.2	554.9	554.6	554.3	554.0	553.7	553.4	553.1	552.8
18.1	552.5	552.2	551.9	551.6	551.3	551.0	550.7	550.4	550.1	549.8
18.2	549.5	549.1	548.8	548.5	548.2	547.9	547.6	547.3	547.0	546.7
18.3	546.4	546.1	545.9	545.6	545.3	545.0	544.7	544.4	544.1	543.8
18.4	543.5	543.2	542.9	542.6	542.3	542.0	541.7	541.4	541.1	540.8
18.5	540.5	540.2	540.0	539.7	539.4	539.1	538.8	538.5	538.2	537.9
18.6	537.6	537.3	537.1	536.8	536.5	536.2	535.9	535.6	535.3	535.0
18.7	534.8	534.5	534.2	533.9	533.6	533.3	533.0	532.8	532.5	532.2
18.8	531.9	531.6	531.3	531.1	530.8	530.5	530.2	529.9	529.7	529.4
18.9	529.1	528.8	528.5	528.3	528.0	527.7	527.4	527.1	526.9	526.6
19.0	526.3	526.0	525.8	525.5	525.2	524.9	524.7	524.4	524.1	523.8
19.1	523.6	523.3	523.0	522.7	522.5	522.2	521.9	521.6	521.4	521.1
19.2	520.8	520.6	520.3	520.0	519.8	519.5	519.2	518.9	518.7	518.4
19.3	518.1	517.9	517.6	517.3	517.1	516.8	516.5	516.3	516.0	515.7
19.4	515.5	515.2	514.9	514.7	514.4	514.1	513.9	513.6	513.3	513.1
19.5	512.8	512.6	512.3	512.0	511.8	511.5	511.2	511.0	510.7	510.5
19.6	510.2	509.9	509.7	509.4	509.2	508.9	508.6	508.4	508.1	507.9
19.7	507.6	507.4	507.1	506.8	506.6	506.3	506.1	505.8	505.6	505.3
19.8	505.1	504.8	504.5	504.3	504.0	503.8	503.5	503.3	503.0	502.8
19.9	502.5	502.3	502.0	501.8	501.5	501.3	501.0	500.8	500.5	500.3
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9

SUGGESTED READING

1- R. M. Badger, *J. Chem. Phys.*, 2(1934), 128.

2- W. Gordy, *J. Chem. Phys.*, 14 (1934), 305.

3- G. HERZBERG, *Spectra of diatomic Molecules.* D. van Nostrand Company. Inc., Princeton, N. J., 1950, PP. 455-459.

❖❖❖❖❖❖❖

طريقة بسيطة لحساب وضع الحزمة المتوترة المترددة بناءا علي قانون هوك

Simplified method of calculating bond position, for stretching frequencies, based on hooke's, law.

من المعادلة (9) في الباب الثاني تحور للتعبير عن ν التردد في العدد الموجي(Cm^{-1}) μ. كتلة مختزلة لزوج الذرات (المحسوبة من وزن جرام ذري)، K- ثابت القوي بالوحدات 10^{-3} داين/ سم، ويمكن إعادة كتابة المعادلة علي النحو :

$$\nu_{Cm^{-1}} = 1307\sqrt{\frac{k}{U}} \qquad - 1$$

وبأخذ المعادلة (1) يمكن لنا توقع الموضع للامتصاص لعديد المجموعات الدالة من هذه الحسابات يستطيع القارئ ملاحظة الكتل للنظام المحققة ولكن ثابت القوي المستخدم يشتق تجريبيا بنسبه صحيحة حتى ±5%

مثال (1)

احسب المواضع المتوقعة لرباط كلا من C-H ، C-D - في $CHCl_3$ ، $CDCl_3$ يمكن حساب كتلة C-H من المعادلة (5) في الباب الثاني :

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{12.00 \times 1.0}{12.00 + 1.0} = 0.923$$

بنفس الشكل لحساب (C-D)

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{12.00 \times 2.0}{12.00 + 2} = 1.71$$

ثابت القوي لمركب C-H للاهتزاز المتوتر حوالي 5×10^5 داين/سم بالاستبدال للقيمK , μ والتردد للرابطة C-H ، C-D يمكن تعيينها من المعادلة (1) فبالنسبة C-H .

$$\nu_{C-H} = 1307\sqrt{\frac{5}{0.923}} = 3042\,Cm^{-1}$$

وبالنسبة للرباط C-D

$$\nu_{C-D} = 1307\sqrt{\frac{5}{1.71}} = 2235\,Cm^{-1}$$

والأوضاع الملاحظة للامتصاص للتردد C-H في الكلوروفورم، C-D علي النحو $2915Cm^{-1}$ ، $2256\ Cm^{-1}$ علي الترتيب

مثال (2)

احسب مواضع الامتصاص C = O، P=S والكتل المختزلة لتلك الدوال علي الترتيب 6.86، 15.75 علما بان ثابت القوي للدالة C=O 12×10^5 داين/سم، P=S هي 5×10^5 داين/سم.

$$\nu_{C=D} = 1307\sqrt{\frac{12.0}{6.86}} = 1725\,Cm^{-1}$$

$$\nu_{P=S} = 1307\sqrt{\frac{5.0}{15.75}} = 750\,Cm^{-1}$$

عادة بالنسبة C= O الامتصاص وجد عند $1725Cm^{-1}$ وحتى $1680Cm^{-1}$ وبالنسبة P=S وجد الامتصاص $750Cm^{-1}$ وحتى $600Cm^{-1}$

مثال (3)

احسب موضع الامتصاص H-Cl مستخدما قاعدة Badger. علما بان ثابت القوي للمركب H-Cl (1-5) الكتلة المختزلة 0.073 باستخدام المعادلة (1)

$$\nu_{H=C} = 1307\sqrt{\frac{5.1}{0.973}} = 2993\,Cm^{-1}$$

ولوحظ من التحاليل IR. إنها تقع في المنطقة 2886Cm-1، وكما هو ملاحظ الاتفاق في النتائج الحسابية والعملية.

❖❖❖❖❖❖❖