

* **Chapitre 4. Spectrométrie infrarouge :** Présentation du spectre du moyen infrarouge.

Origine des absorptions dans le moyen infrarouge. Bandes de vibration-rotation du moyen infrarouge. Modèle simplifié des interactions vibrationnelles. Bandes caractéristiques des composés organiques. Instrumentation. Comparaison des spectres.

* **Chapitre 5. Spectroscopie de Résonance Magnétique Nucléaire :** Généralités. Interaction spin/champ magnétique pour un noyau. Les noyaux qui peuvent être étudiés par RMN. Théorie de Bloch pour un noyau dont $I=1/2$. Le principe de l'obtention du spectre par R.M.N. La R.M.N. de l'hydrogène. Le déplacement chimique. Noyaux blindés et déblindés. Structure hyperfine.

Couplage spin-spin.

* **Chapitre 6. Spectrométrie de masse :**

Principe de la méthode. Déviation des ions – spectre de Bainbridge. Performance des spectromètres de masse. Les différents analyseurs

Quelques références bibliographiques :

- M. PINTA, Spectrométrie d'absorption atomique, Tomes I et II, Ed. Masson, (1979).
- R. DAVIS, M. FREARSON, Mass spectrometry, Ed. J. Wiley, (1992).
- B.C. SMITH, Fundamentals of Fourier Transformed Infrared, C.R.C Press Inc. (1996).
- E. CONSTANTIN, Spectrométrie de masse, principe et application, Ed. Tec-Doc, 2ème éd., Paris(1996).
- M. Mc MASTER, GC / MS Practical User's Guide, Ed. WILEY- VCH (1998).
- F. ROUESSAC, A. ROUESSAC, Analyse Chimique. Méthodes et Techniques instrumentales modernes. Cours et exercices résolus, 5^{ème} édition. Dunod, Paris, (2000).

Mode d'évaluation :

Epreuve écrite : durée 1h30 , coefficient 1/1 (1)

Crédits: 2

Coefficient:2

Semestre : 4

Unité d'enseignement : UET 22

Matière : Anglais 4

Crédits: 1

Coefficient:1

Contenu de la matière :

Cette unité est une continuité de l'unité : Expression orale et écrite, communication et méthodologie en langue anglaise du Semestre 3.

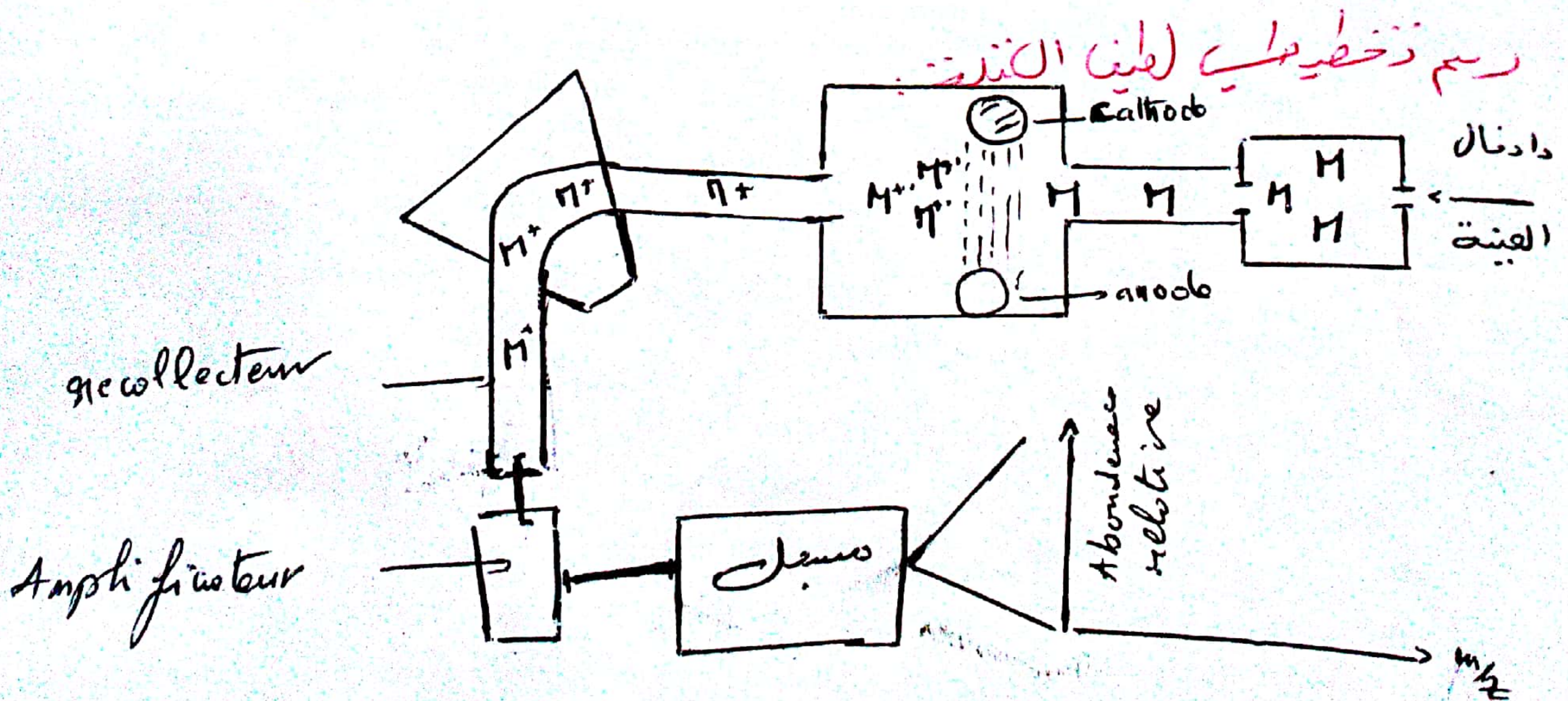
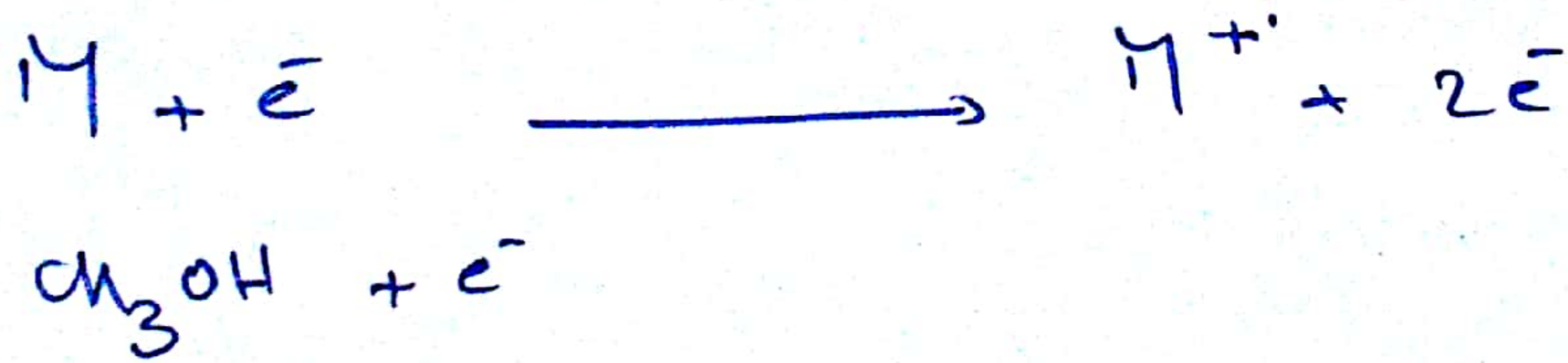
Les objectifs sont :

III مطيافية الكتلة Spectrometrie de Masse

تعتمد هذه التقنية على دراسة طيف الكتلة لأحد مركب عضوي. حيث نتوصل إلى الكتلة المولية لأحد مركب عضوي وصعب التفسيرات الممكنة في روابط هذا المركب.

مبدأ عمل جهاز مطيافية الكتلة هو تحويل المركب (تلك قليلة جدًا من المركب إلى أيونات ثم يرسمها بدلالة الشحنة m/z .

عند إدخال عينة جزيئة من المركب المراد تحلله في جهاز مطيافية الكتلة يتم قذفها بواسطة حزمة إلكترونات ذات طاقة عالية وهذه العملية يمكن أن تؤدي إلى نوع الأيونات من المركب الذي كتلته M وبالتالي يتشكل لنا جذر كاتيوني M^+ أيون هيدروجين H^+ وهذا الأخير له نفس الكتلة المولية للأيون الأم الابتدائي ولكن بألكترون أقل (تلك التي موهنة).



الأيون $1/4$ ببيده بالأيون الأم (كتلته المولية هي نفسها كتلة الأيون
الجزيئي الإيجابي (لأن كتلة e المنزوع مهملة) بالنسبة لكتلة المولية
الجزيئية .

إدخال العينة في جهاز مطيافية الكتلة
تدخل العينة بكميات صغيرة من 0.1 إلى 1 μg وهذا حسب
الحالة الفيزيائية للمادة .

إذا كانت عينة غازية فهي تدخل مباشرة أما إذا كانت العينة سائلة
في الحالة العادية فيتم إدخالها بخار هذه العينة مباشرة أما إذا كانت
صلبة (في درجة الحرارة العادية) فيتم إدخال العينة بعد ذلت المذيبات
بواسطة التبخير .

تأين العينة: يحدث تأين للعينة بواسطة القذف بالإلكترونات (Impact
(*électronique*) أو التصادم الإلكتروني وهذا تقديراً يحدث في حالة المركبات
ذات كتل جولية أقل من $(200 < 400)$.

إما في حالة $(200 < 400)$ فيتم إدخال العينة بواسطة المطاليل بعد الفصل
الكروماتوغرافي .

وبالتالي هناك عمليتين أساسيتين تحدثان عند استخدامه بواسطة
مطيافية الكتلة وهما .

1- التأين (*ionisation*)

2- التكسير (*Fragmentation*)

في العملية الأولى يكون هناك فقدان لإلكترون وبالتالي تتشكل لنا

أيون جزيئي (*ion moléculaire*) كتلته المولية تساوي كتلة الأيون
الجزيئي لأن كتلة e مهملة .

أما في العملية الثانية (التكسير) فيحدث تكسير للجزيء الضعيف في
المركب فتتحلل إلى أيونات أصغر من حيث الكتلة المولية

مكونات جهاز مطيافية الكتلة . هناك خمسة وحدات أساسية في جهاز مطيافية الكتلة (5 وحدات موجودة في كل أجهزة مطيافية الكتلة) .

1- وحدة وضع العينة .

2- غرفة التأين (chambre d'ionisation)

3- وحدة فرز الأيونات وفصلها حسب كتلتها المولية .

4- جمع الأيونات

5- وحدة التسجيل

ويوجد أيضا بين وحدة وضع العينة وحجرة التأين مقياس ضغط دقيقا لتقدير كمية العينة الداخلة لحجرة التأين .

1- وحدة وضع العينة : وهي هذه الوحدة يتم وضع العينة حسب حالتها الفيزيائية (سائلة - صلبة - غازية) .

حيث تخزن المواد الغازية مباشرة أما السائلة فتحرق داخل العينة بواسطة مادة هبيرة من فلور هابز مطايب أو من السيليكون ، وإذا كانت درجة غليان العينات أقل من 1200°C فإنها سوف تتحول إلى مادة غازية في درجة حرارة وحدة وضع العينة وهذا نتيجة الضغط المنخفض في هذه الوحدة .

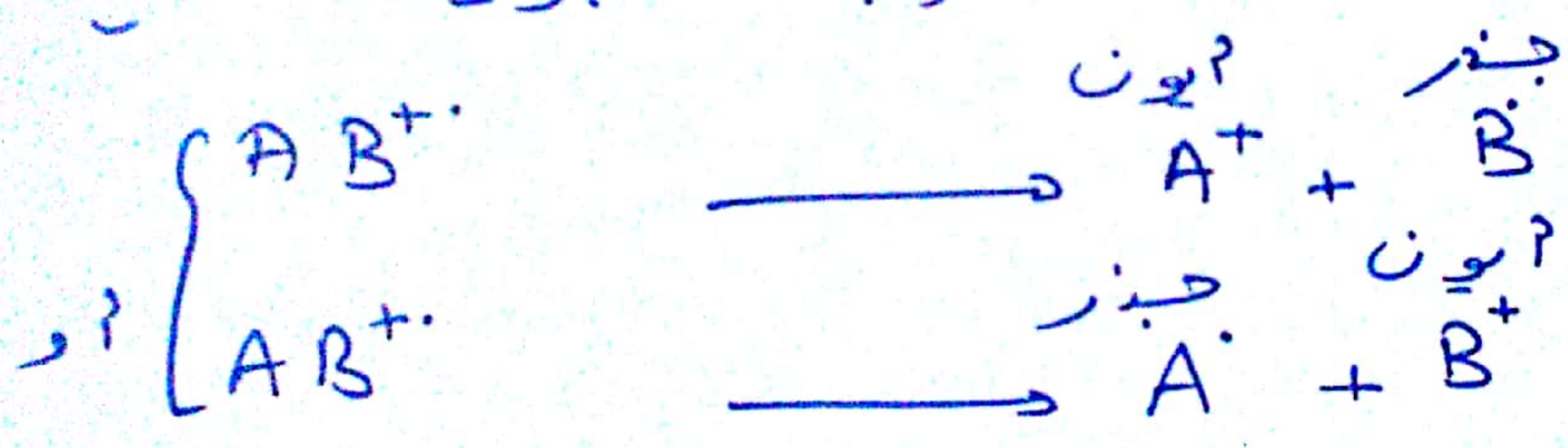
المادة تحرق في وحدة وضع العينة إلى غرفة التأين فقط في حالتها الغازية وهذا بعد تحويلها إلى بخار من أجل تسهيل عملية الانتقال من وحدة إلى أخرى داخل جهاز مطيافية الكتلة .

2- غرفة التأين : في هذه الوحدة تحدث عملية التأين للعينة بمراق مختلف : نذكر منها : التهادم الإلكتروني والتأين الديسايي

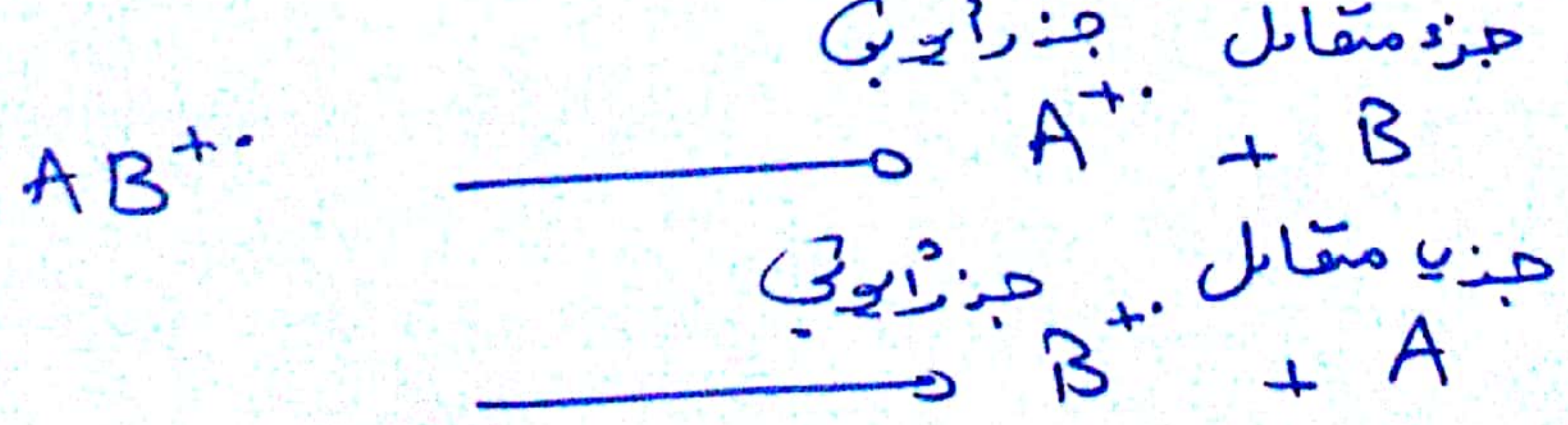
2-1- التأين بالتهدم الإلكتروني : وهي الطريقة الأكثر شيوعا في أجهزة مطيافية الكتلة حيث توضع المادة في حالتها الغازية فتعرض إلى قذف بحزمة من الرق ذات طاقة عالية (حوالي 10eV) فانجذب عن حقل

كهربائي نتيجة فرق الجهد. تتحرك هذه الأيونات نحو القطب الموجب فتتحرك
 جزيئات المادة.
 وبالتالى تتأين جزيئات المادة وتتكون لنا أيونات موجبة فتتحرك
 نتيجة عملية التناظر مع القطب الموجب فتتحرك هذه الأيونات إلى وحدة
 فصل وفرز الأيونات.

آلية تسيير الأيونات الجزيئية: تسيير الأيونات كيميائية في الأيون
 الجزيئي يعتمد أساساً على قوة الرابطة وأيضا درجة استقرار
 الأيون الناتج عن عملية التسيير؟ والمركب لأن ناتج عملية التسيير هل
 ؟ ين يكون ؟ يون ؟ أو مركب غير مشعرون .
 لنفرض مثلا لدينا الأيون الجزيئي AB^{+} والذي ينتج يتكون من
 جزيئين A و B مرتبطين برابطة كيميائية.
 وبالتالي التسيير المكنة لهذا المركب (الجزيئي) هي:



وهي ؟ أيضا ؟ أن يؤدي التسيير إلى:



ملاحظة: الجزيئي المعادل أو الجذر الحذر لا يتم تسجيلها في جهاز
 مطيافية الكتلة.

الأيونات السالبة التي يمكن أن تتكون سيتم إصاها مع القطب الموجب
 نتيجة عملية التناظر مع القطب الموجب والجزيئات السالبة.

عومياً طريقة التثبيت بالعماد الميوني:

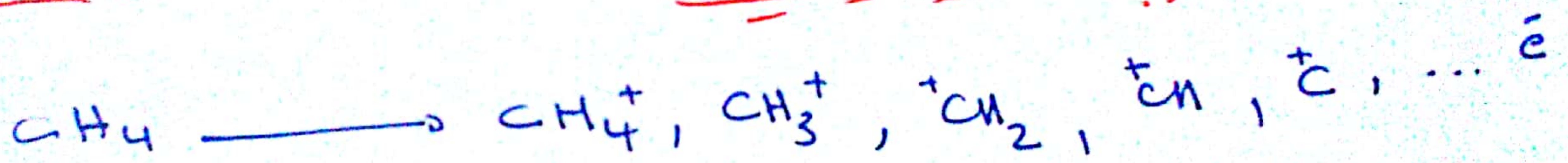
الاستخدام الميوني غير مناسب للعزيمات الغير مستقرة حيث يؤدي إلى تكسير الأيونات الجزيئية إلى أيونات أقل هي الكتلة كما يمكن باختلاف الكاين الأيون الجزيئية في بعض المركبات وعدم التفريق الميوني للغازات يؤدي إلى تأينها وظهورها في طبقات مختلفة.

التثبيت الميوني (Electron capture) (EC)

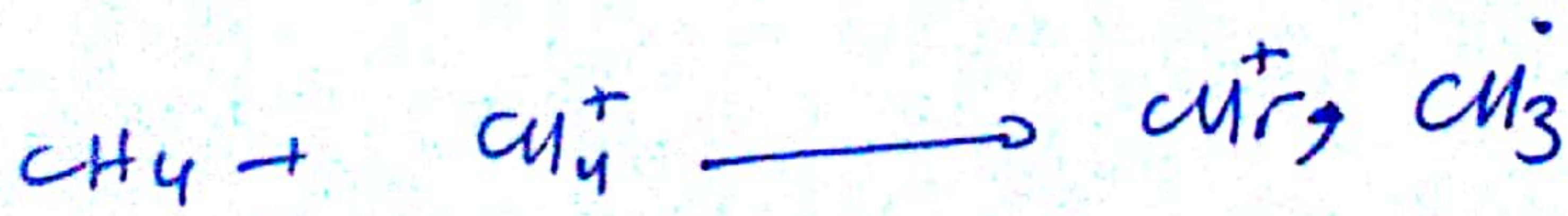
حيث تعتمد هذه الطريقة على استخدام غاز الميثان بتركيز عالي وعموماً يؤدي لتأين غاز الميثان عند دخوله إلى غرفة التثبيت مع العينة نتيجة تعرضه بحزمة الـ e^- .
تأين غاز الميثان يؤدي إلى أيونات يمكنها التفاعل مع جزيئات العينة فتؤدي إلى تأينها.

آلية التثبيت الكيميائي

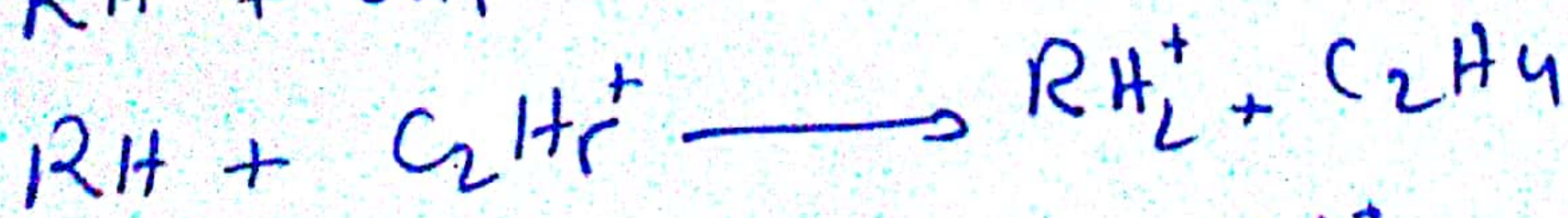
mechanism:



هذه الأيونات يمكنها أن تتفاعل مع جزيئات الميثان المتبقية



ثم تتفاعل هذه الأيونات مع جزيئات الهادة المراد تحليلها



تتصلب الأيون RH_2^+ والذي يمكنه فقدان هيدروجين H_2



وكن في أغلب الأحيان تتصلب على الأيون RH_2^+ والذئ له كتلة جولية أكبر منه كتلة e^- المخرن المراد تحليله Δ .

وحدة الفصل هناك العديد من الأنظمة المختلفة لفصل الأيونات

- مثل
- 1- إرساف الأيونات في مجال مغناطيسي
 - 2- فصل الأيونات باستخدام مجال مغناطيسي و كهربائي معًا .
 - 3- الفصل باستخدام التركيز البثوري المنزوح
 - 4- التركيز البثوري الدائري (مجال مغناطيسي و كهربائي متعامدين)
 - 5- الفصل باستخدام السرعة (فصل الأيونات حسب سرعتها) أي حسب كتلتها
 - 6- ما زالت توضع أولها نفس القاعدة الرئيسية .

وحدة الجمع : بعد مزجها من وحدة الثانية و الفصل يتم تسجيل هذه الأيونات و تحديدها حسب النسبة $\frac{m}{e}$ وبالتالي حسب وزنها الجزيئي لأن في هذه الحالة (2=1) قد تشمل لنا الأيونات الناتجة عن عملية التفسير كذلك الأيون الجزيئي .

أهم الأيونات الناتجة في طيف الكتلة :

الأيون الجزيئي (M^+) (عند ion molecule) وهو ناتج عن

فقدان الجزيء e^- واحد نتيجة تعرضه لحزمة من (e^-) .



هذا الأيون له نفس الوزن الجزيئي للمركب المراد تحليله وهو مهم لتحديد الوزن الجزيئي للجينة مما أنه يعتقد أساساً في درجة استمرار المركب .

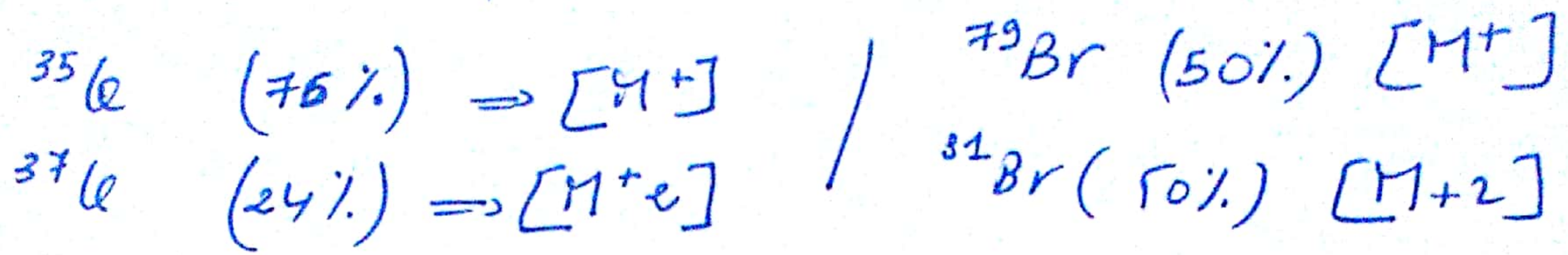
حيث لو حفظان الجزيئات التي تحتوي على روابط آ يمكنها فقدان e^- بسهولة مقارنة بالجزيئات الأخرى التي تحتوي على روابط ك فقط .

الأيون القاعدية : (base peak) هذا الأيون ينبثق من عملية

التكبير للأيون الجزيئي وهو الأيون الذي له أعلى تركيز في طيف الكتلة

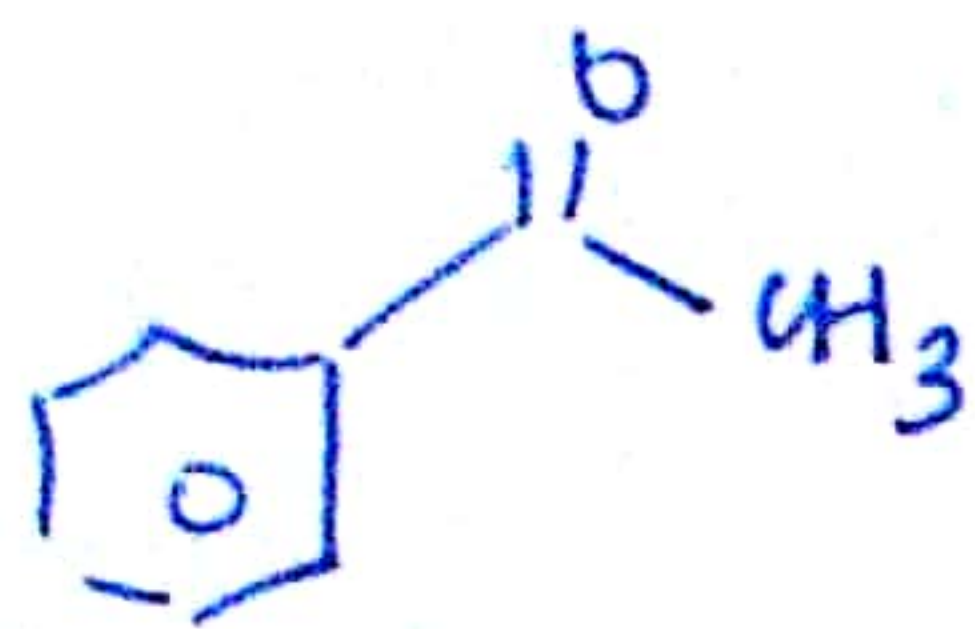
وقد يكون أحياناً الأيون الجزيئي هو الأيون القاعدي .

أيونات النفاثر: يمكن أن تظهر الأيونات المرافقة للنفاثر الطبيعية
 (مستقرة) الهوائية بسبب معينة وهذه الأيونات تكون كتلتها أكبر من كتلة الأيون
 الجزيئي فمثلا الكلور والبروم لهما نفاثر طبيعية متواجدين في الطبيعة
 وبالتالي تظهر لنا في مركبات Br و Cl إشارات خاصة بهذه النفاثر



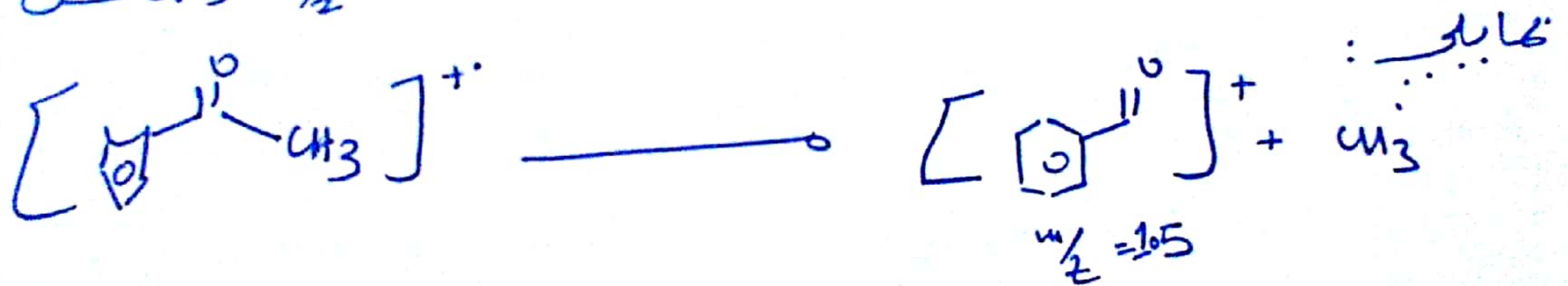
الأيون الثابت المستقر: (metastable) هذا النوع من الأيونات ينتج عن

تأكسد الأيون الجزيئي بين حجرة الثانية وحدة الفصل. فمثلا دراسة



كيف الكتلة لمركب Acetophenone

لوحظ وجود أيون عند القيمة $m/z = 92$ وبذلك تفسر ذلك



كتلة الأيون الثابت المستقر (metastable) - حسابها من العلاقة

$$M_{(MS)} = \frac{(m^+)^2}{m^+}$$

كتلة الأيون الجزيئي

كتلة الأيون الناتج عند تأكسد الأيون الجزيئي

$$M_{(MS)} = \frac{(105)^2}{120} \approx 92$$

أطياف الكتلة لبعض المركبات العضوية:

① الألكانات (Alkanes): ظهور الأيون الجزيئي M^+ والأيونات الخاصة

بفقدان مجموعات Methyl, Ethyl, propyl ... الخ.

② المركبات الهالوجينية RX (Halogenes): ظهور الأيون الخاص بفقدان ذرة

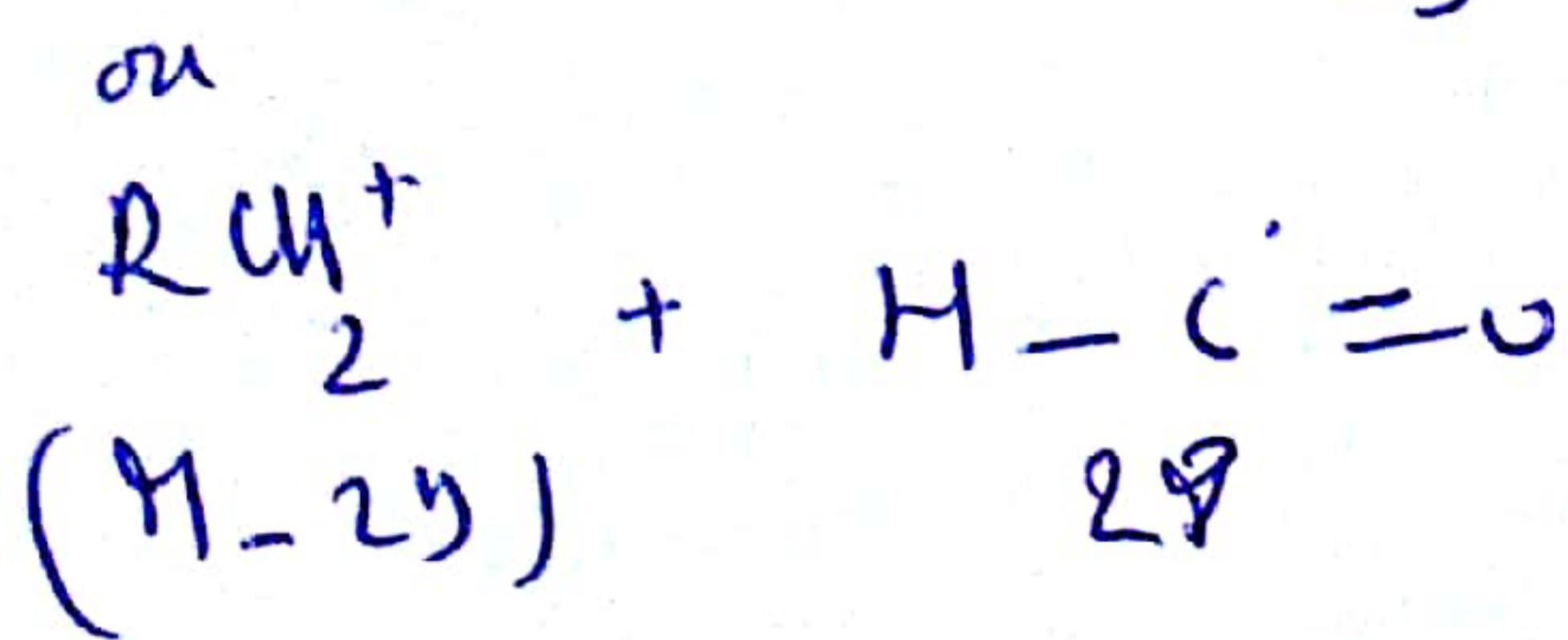
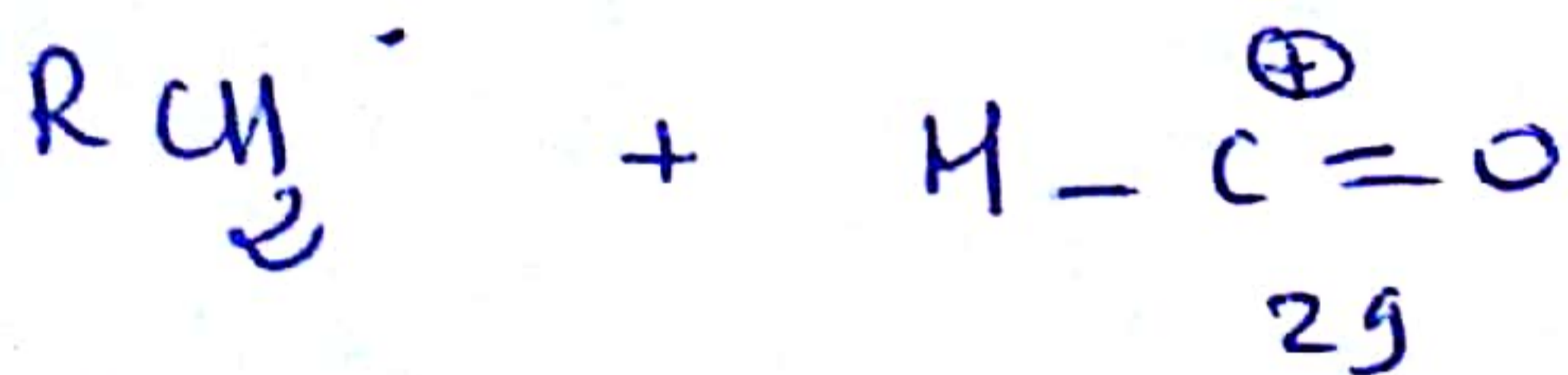
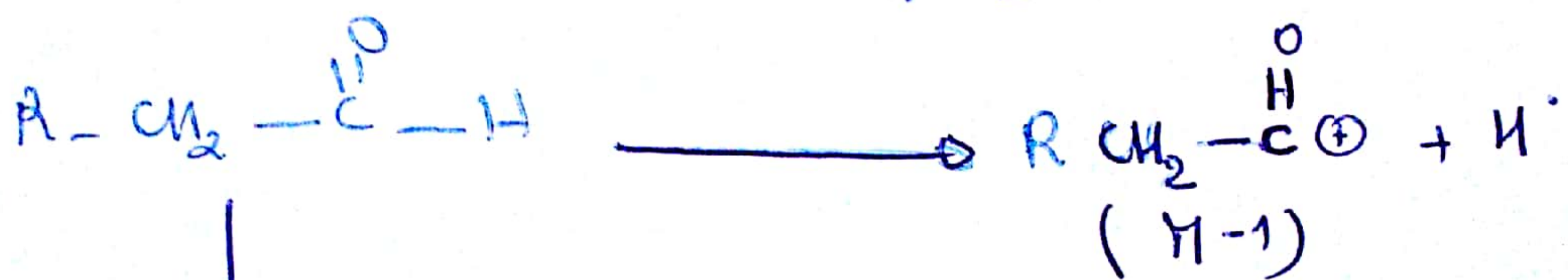
هالوجين X وبالتالي الفئمة $(M-X)$.

③ الكحولات ROH (Alcohol): ظهور الأيون $(M-18)$ بتفكيك مرتفع

نتيجة لفقدان جزيء H_2O .

④ الإثيرات (Ethers): التفكيك دائما يؤول بجوار ذرة الأوكسجين

⑤ الألدهيدات (Aldehydes): وجود الأيونات الخاصة ب $(M-1)$ و $(M-29)$



⑥ الإستونات (cétones):

ظهور التفكيكات الخاصة بالرابطة α للكربونيل α جوار الرابطة

$(C=O)$.

⑦ المركبات العطرية (Aromatics): ظهور الأيون الجزيئي بتفكيك

عالي نتيجة لاستقرار السلسلة هذه المركبات.

IV. الرنين النووي المغناطيسي: Spectroscopie de Résonance

Magnétique Nucléaire (RMN)

صوت تقزبية من تقنيات التحليل الطيفي يستغل عادة في تحديد بنيت
(الصيغة المفصلة) للمركبات الكيميائية سواء كانت طبيعية أو مصنعة
مثل الأدوية.

الحايات النظرية: كل ذرة لها عزم مغناطيسي يثبت بالشكل

$$\mu = \gamma \cdot L$$

γ : ثابت النسبة المغناطيسية
(constant gyromagnétique)

$$L \neq 0$$

L : هو عدد السبين (nombre de spin)

إذا كان لدينا مركب عضوي عنصر كيميائي X له عدد سبين A
وعدد سبيني X فإنه يثبت بالشكل

$$\begin{matrix} A \\ X \\ 2 \end{matrix}$$

وإذا كان A زوجياً فإن $(L=0)$ مثل ^{12}C , ^{16}O
وإذا كان A زوجياً و X فردياً فإن $(L=1)$ مثل ^{14}N و 2H ($L=1$)
وإذا كان A فردياً فإن $L=1/2$ مثل 1H و ^{13}C , ^{15}N , 3P

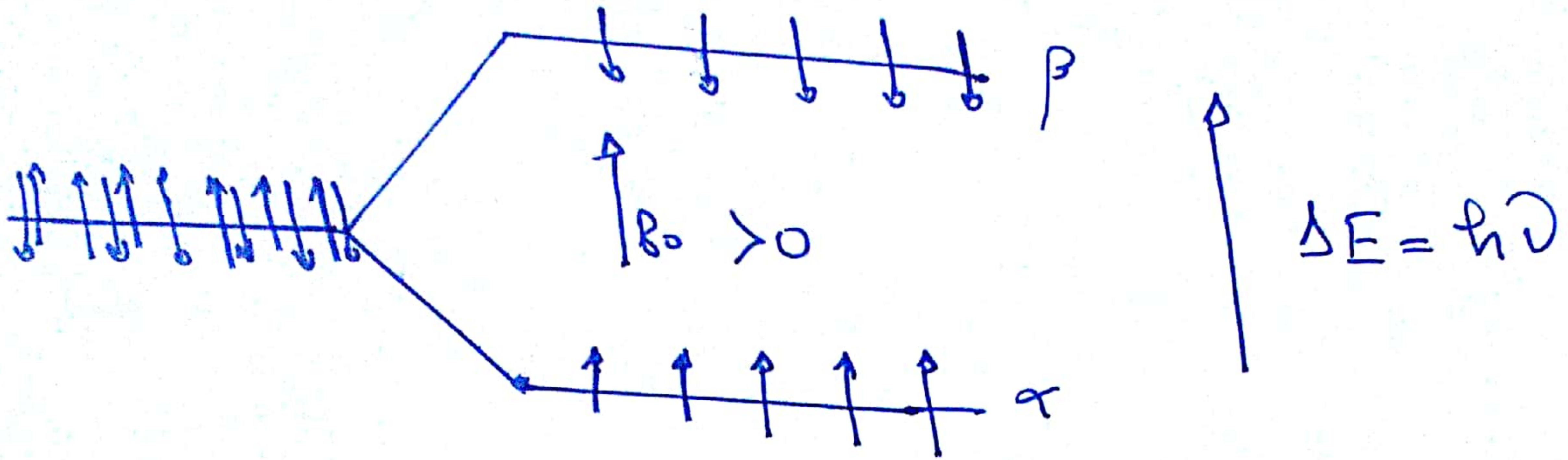
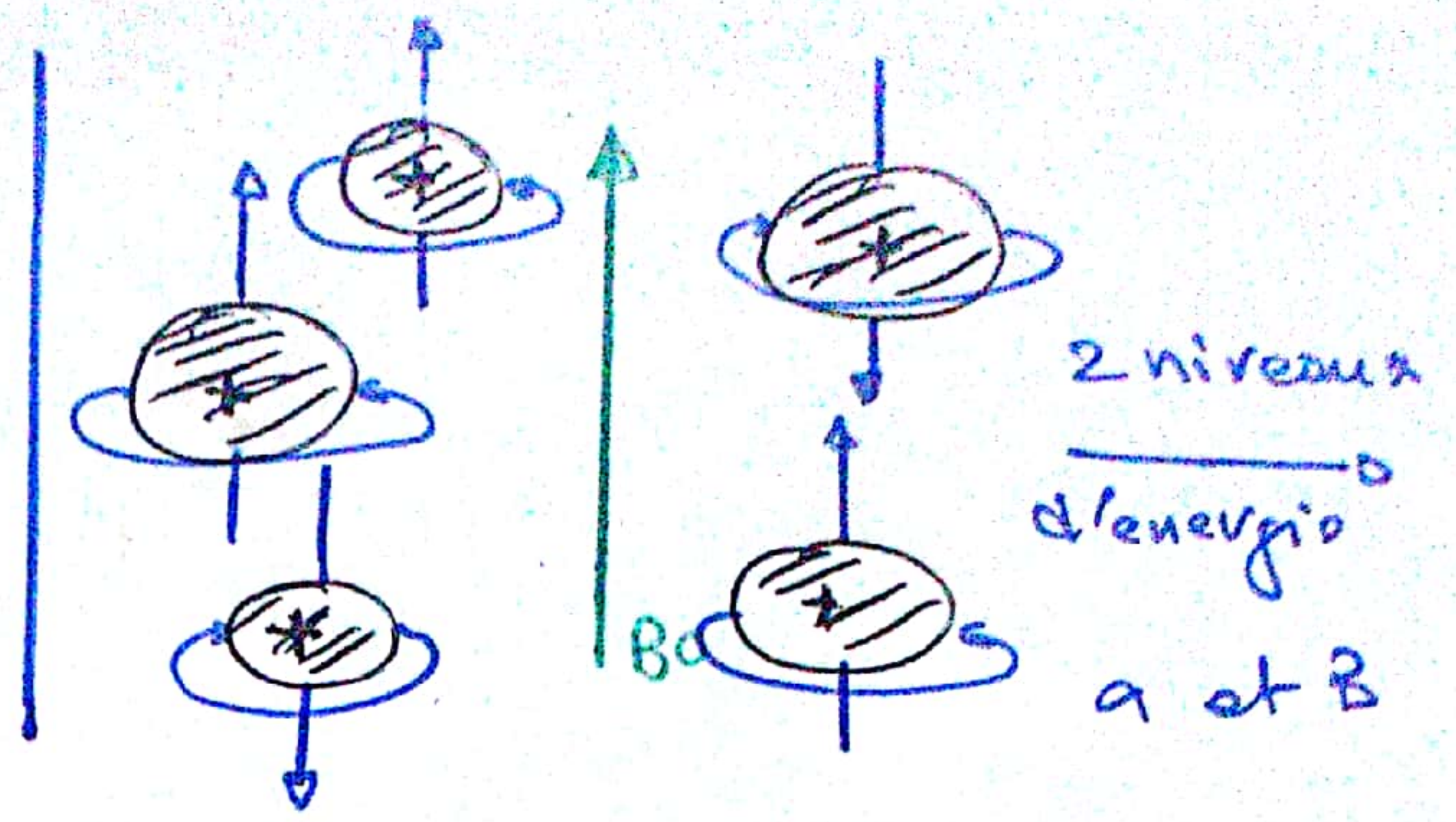
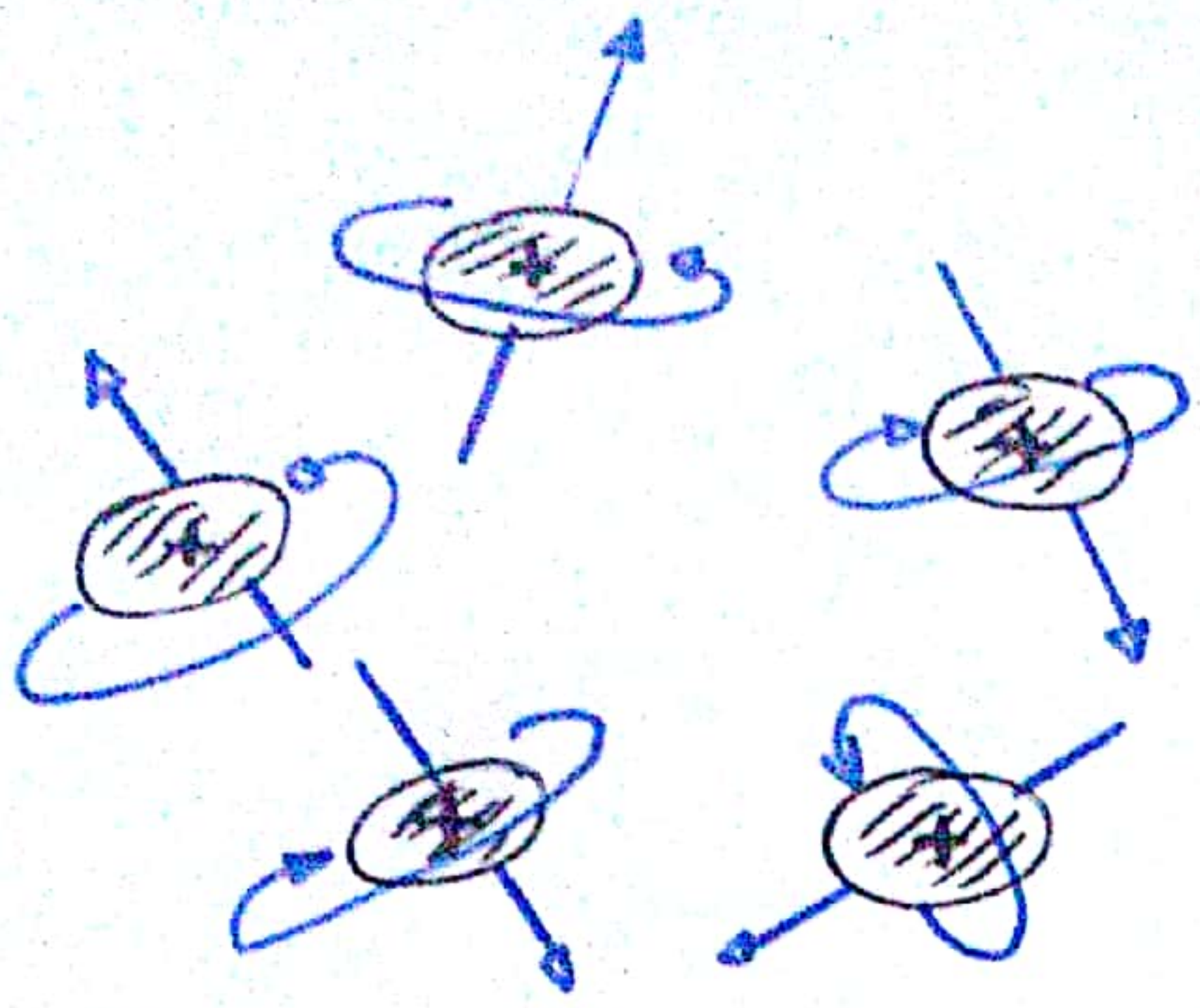
$$\text{حيث } (L=1/2)$$

العدد الكمي المغناطيسي يكون l يأخذ القيم التالية

$$-l \leq m \leq +l$$

$$\text{وبالتالي يكون ص 2 بل } L=1/2 \Rightarrow m = \pm 1/2$$

وفي غياب الحقل المغناطيسي فإن العزم المغناطيسي للأيون يكون عشوائياً
أحياناً حالة تخطيط حقل مغناطيسي B_0 فإن العزم يكون متوازي مع الحقل
المغناطيسي سواءً في نفس الاتجاه أو في اتجاه معاكس وبالتالي يكون لدينا
مستويين للطاقة α و β .



$$E_{\alpha} = -\frac{1}{2} \gamma \frac{h}{2\pi} B_0$$

$$\Rightarrow \Delta E = h\nu = \gamma \frac{h}{2\pi} B_0$$

$$E_{\beta} = +\frac{1}{2} \gamma \frac{h}{2\pi} B_0$$

الفرق بين عددي فوتون في المستويين α و β يعطى بواسطة علاقة التوزيع لبولتزمان

$$\frac{N_{\alpha}}{N_{\beta}} = e^{\Delta E/kT}$$

فمثلا في جواز 400 MHz من اجل ^1H فان $B_0 = 9.1 \text{ T}$

$$\Delta E = 2.68 \cdot 10^{-25} \text{ Joule} \quad \text{و} \quad N_{\alpha}/N_{\beta} = 1.000062$$

تواتر الرنين يعطى بالعلاقة $\nu = \gamma/2\pi \cdot B_0$

وفي هذه الحالة فإنه بتعديل القيمة في الحالة الطبيعية وصنا بينه باعتبار قيم صغيرة من اللفات (spins) يمكننا إعطاء إشارات RMN.

لا صوابية مغناطية خاصة بل قوة مثله

$$\gamma^{12}\text{C} = 6,728 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1} \cdot \text{T}^{-1}$$

$$\gamma^1\text{H} = 26,752 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1} \cdot \text{T}^{-1}$$

$$B^0 = 9,47 \text{ T} \quad \left(\begin{array}{l} 400 \text{ MHz pour H et} \\ 100 \text{ MHz pour } ^{12}\text{C} \end{array} \right)$$

كل أنوية الهيدروجين تفتقر عنده نفس التواتر $\nu = \gamma/2\pi B_0$

ممكن إلقاء الرصية بالأخضر تولد نقل مغناطيسي ضعيف ومعكس
للنقل B_0 وبالتالي صوت الأتواتر السيلها نفس الجوار تفتقر عنده نفس
التواتر.

الانزياح الكيميائي (Déplacement Chimique)

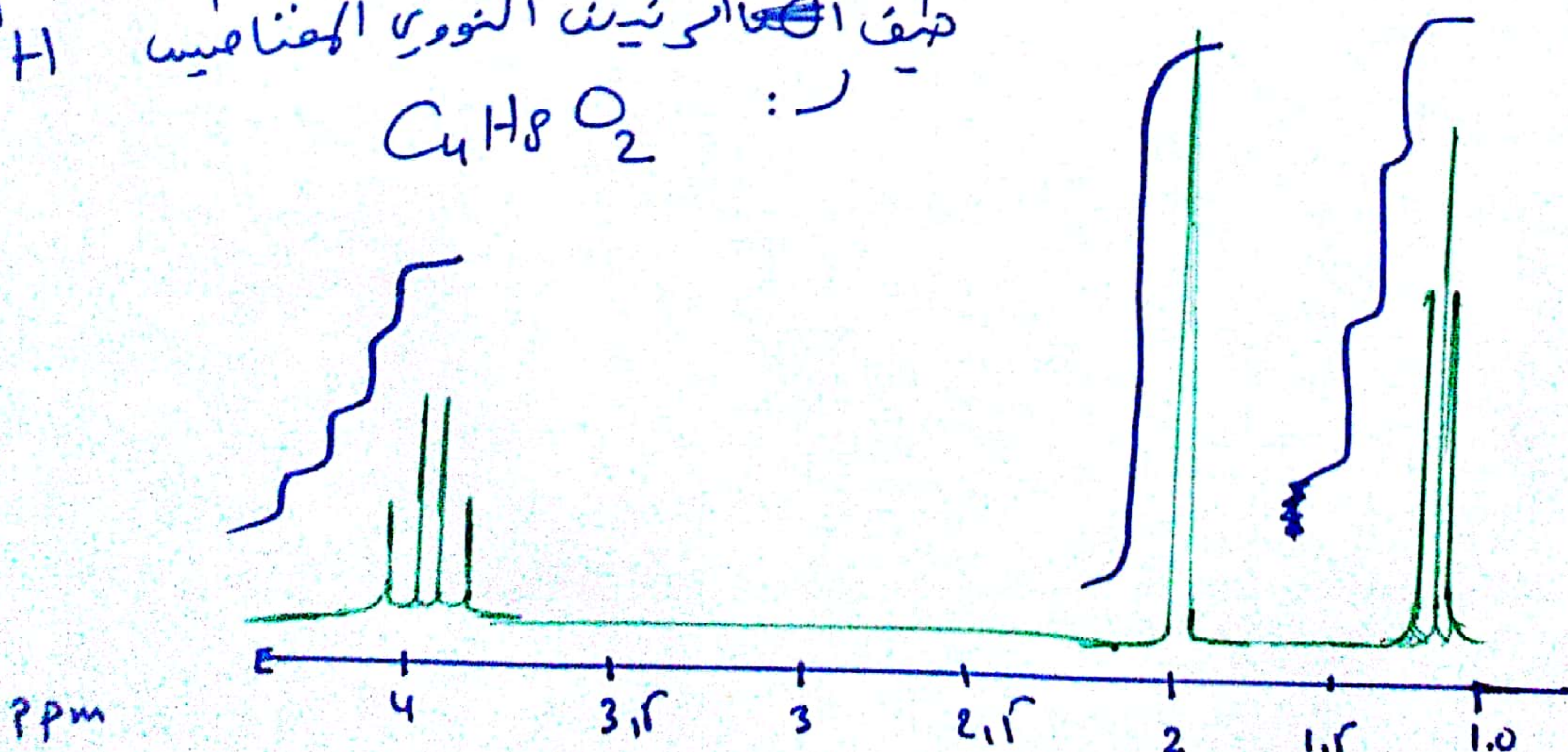
يغير الانزياح الكيميائي بالعلامة $\nu - \nu_{ref}$ $\times 10^6$ ppm
تواتر نظري حسب قيمة B_0
تواتر الرنين للنواة

تواتر النواة المرجعية.

وحدة الانزياح الكيميائي ppm

$\text{ppm} = \text{partie par million}$.

كيف التعرف على النوى المغناطيسية ^1H
: $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$



عدد الإشارات = 3
 11 11 11
 (البيروتونات)

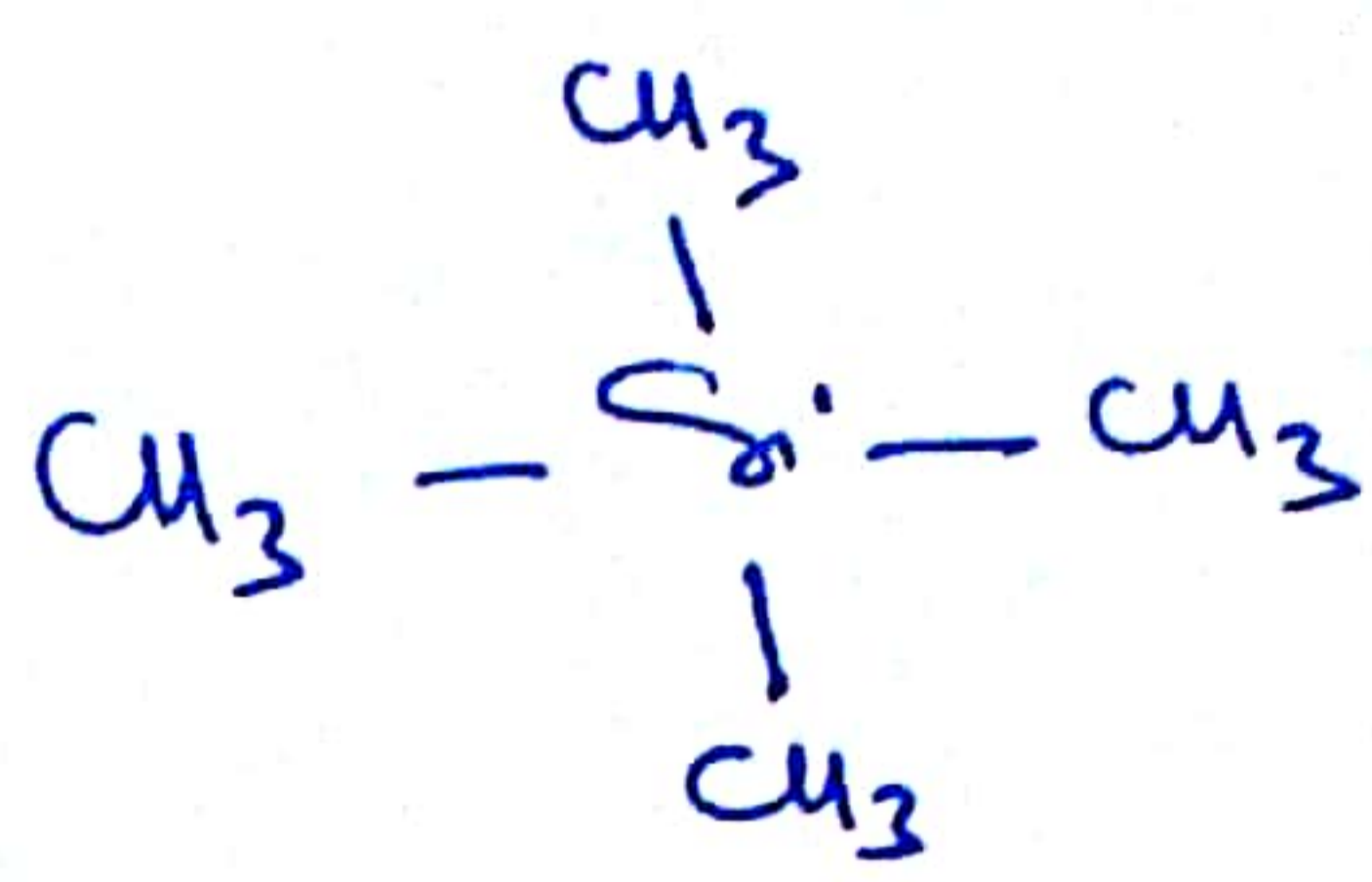
إشارة واحدة عند 1,2 ppm (بمقابل 3 بيروتونات)

إشارة مزدوجة عند 2 ppm (بمقابل 3 بيروتونات)

إشارة رباعية عند 4 ppm (بمقابل 2 بيروتونات)

ملاحظة: طول الإشارة يمثل عدد البيروتونات (التكامل) و طبيعة الإشارة تمثل عدد البيروتونات المجاورة + 1.

المرجع TMS: (Tetramethylsilane).



(1H) متكافئة وبالتالي نوع واحد من الأهدروجنات عند القيمة $\delta = 0 \text{ ppm}$.

حيث لو كانت جميع المربعات العنصرية لها نفس الأهدروجنات تظهر عند القيمة $10 \text{ ppm} < \delta < 0$.

جميع الأطياف فان قواسم الرنين تتغير و لكن لا يتغير ثابت داي لا يتغير بتغير الجواز. فمثلا CHCl_3 (Chloroform).

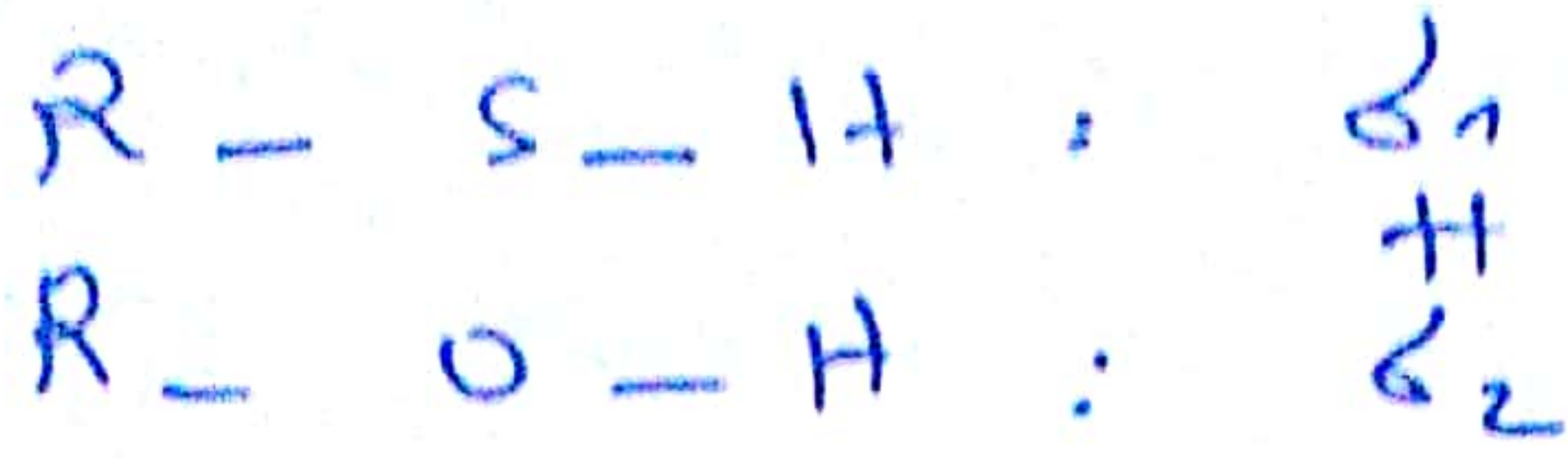
جواز (HRMN, 60 MHz) $\delta = 7,28 \text{ ppm}$

جواز 300 MHz $\delta = 7,28 \text{ ppm}$

جواز 400 MHz $\delta = 7,28 \text{ ppm}$.

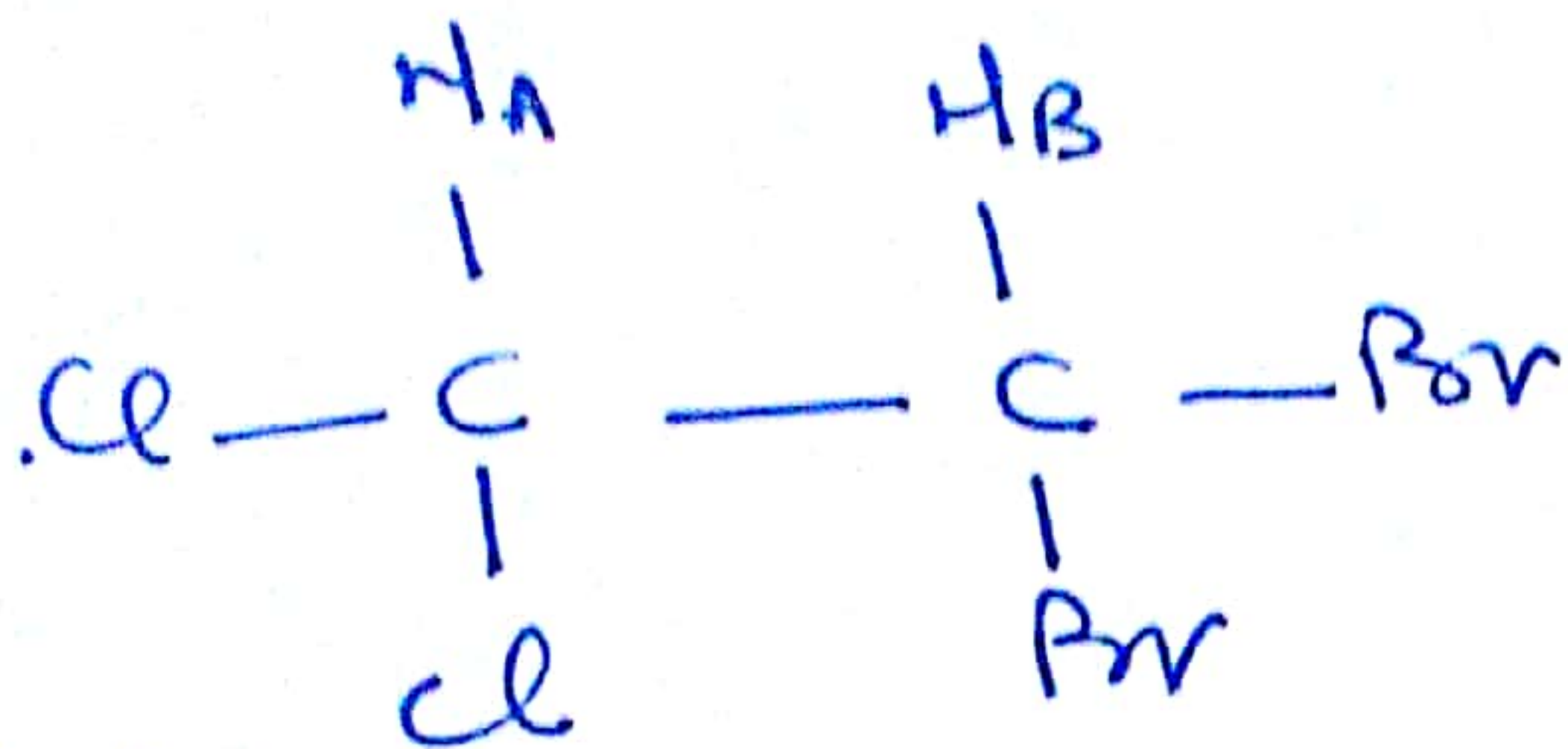
العوامل المؤثرة على الانزياح اليميائي : هناك عاملان أساسيان يؤثران

على الانزياح اليميائي .
 العامل الأول هو كهرسالبية الذرات المجاورة حيث لاحظنا ان كلما زادت قيمة كهرسالبية الذرة المجاورة تزيد قيمة δ .



العامل الثاني هو الفعل الأنيزوتروبي (Effects Anisotropie) وهو الخلل المغناطيسي الناتج عن الروابط π .

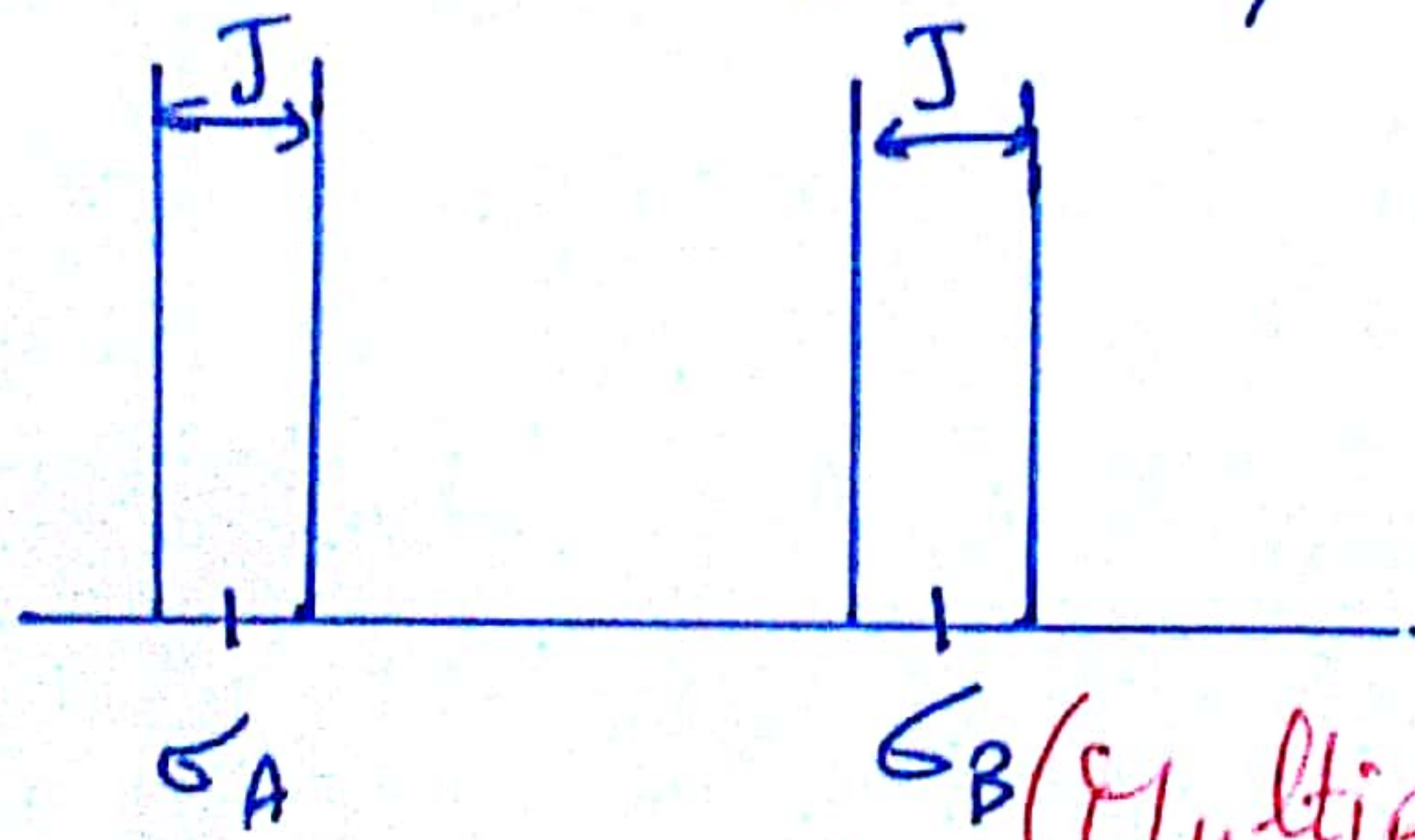
التزاوج الSpin-spin =



ليكن المركب التالي:

الذي يحتوي على نوعين من الكهيدروجينات H_A و H_B (متجاورين) (Voisins)

حوران البنيات A في الحقل B_0 . لأنها الناشئة على الحقل المتقارب حول الذرة B بواسطة (د) الروابط والعكس صحيح وبالتالي تكون H_A و H_B أن يتزاوجا (د) بواسطة ثابت تزاوج J وحدته الهرتس



تعدد ونوع الإشارات (Multiplicity) ν_B

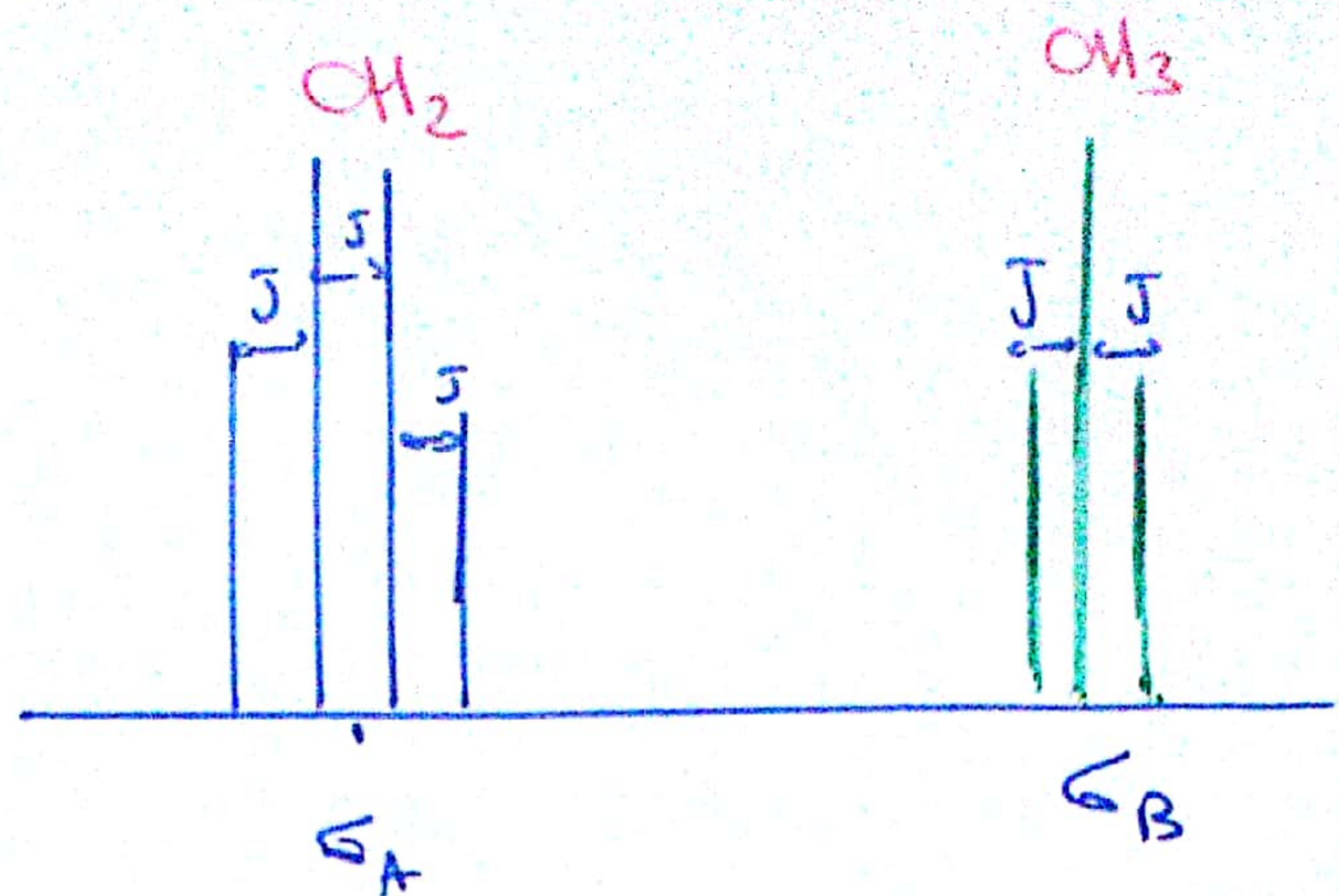
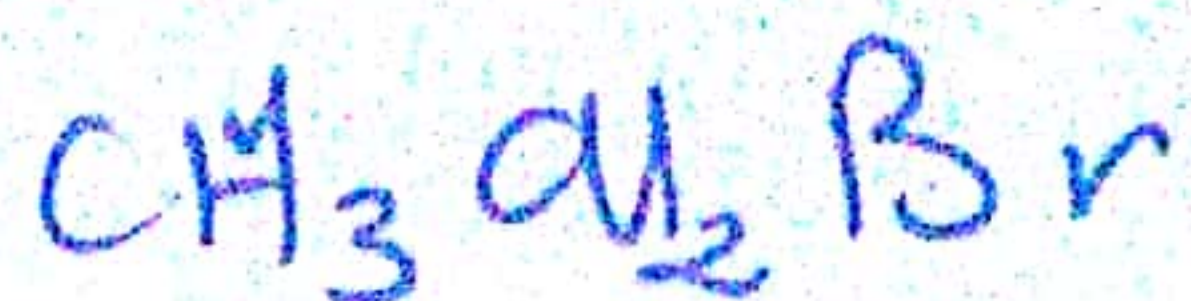
إذا كان هناك تزاوج مع مجموعة من الأنوية من ذرات

الهيدروجين فإن نوع الإشارة يكون $(n+1)$ معناه (عدد الإشارات)

إذا كان الهيدروجين يتزاوج مع $2H$ فإن الإشارة تكون ثلاثية

ومعنى تقريبا بالعلاقة $(2n+1)$ فقط ويكون بالبنية لأنواع

1H $(n+1)$ فقط .



شدة ضوء الإشارة تعطي بواسطة قاعدة مثلث باسكال (Triangle de Pascal)

Singulet	→	أحادية	1					
Doublet	→	ثنائية	1	1				
Triplet	→	ثلاثية	1	2	1			
quadruplet	→	رباعية	1	3	3	1		
	→	خماسية	1	4	6	4	1	
	→	سداسية	1	5	10	10	5	1

تحليل بعض المبادئ الهيدروجينية (بعض المربعات)

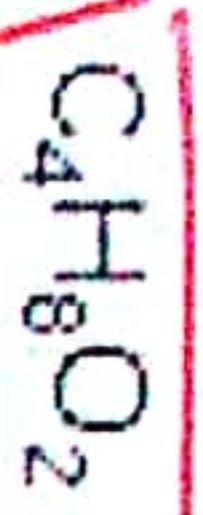
1/ تحديد عدد الإشارات وأنواع الهيدروجينات.

2/ كامل كل إشارة.

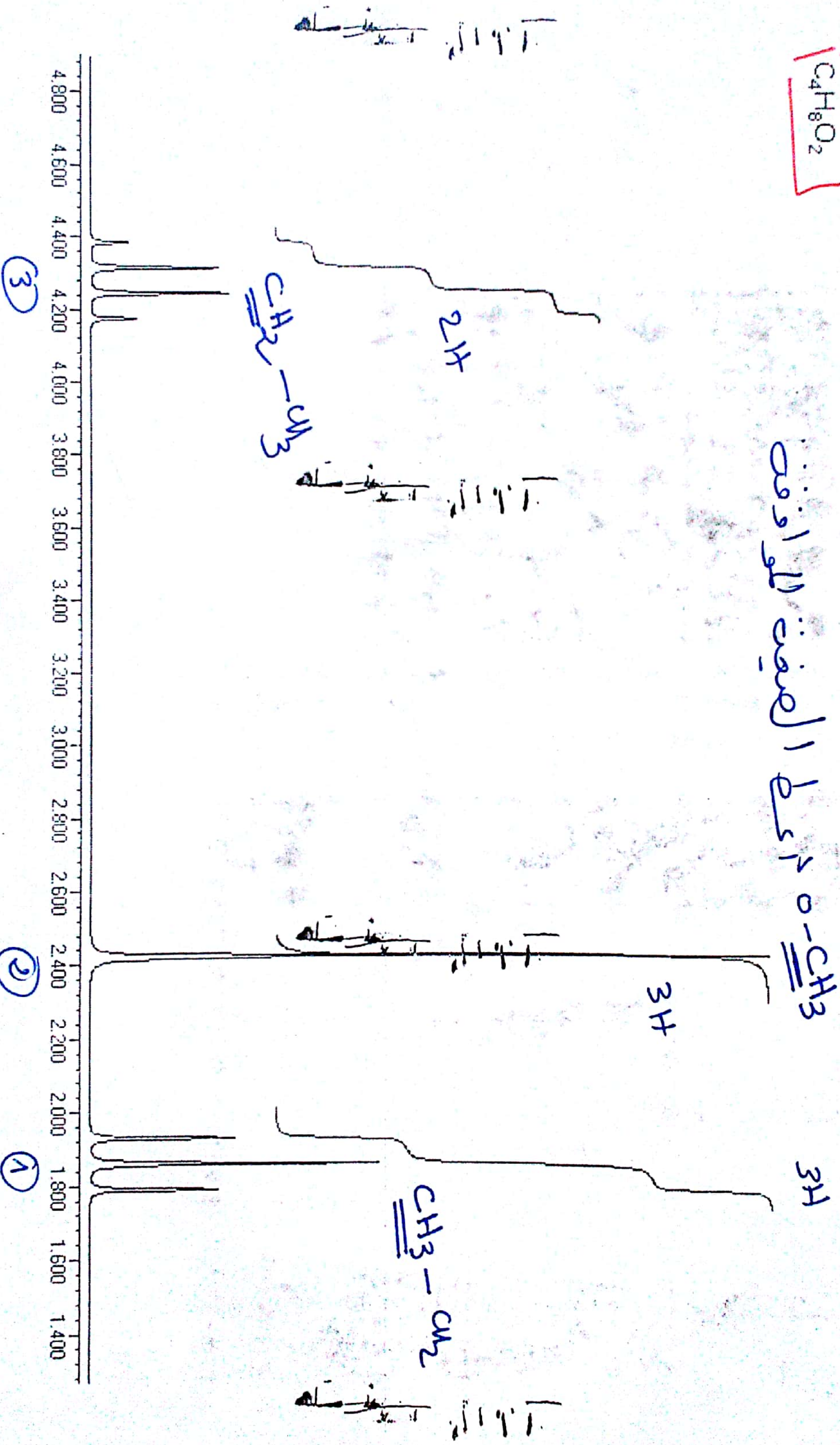
3/ تحديد قيم الإزواج الأيسر (Tableaux de K)

4/ عدد كل إشارة وحساب قيم J.

01 = مسألة

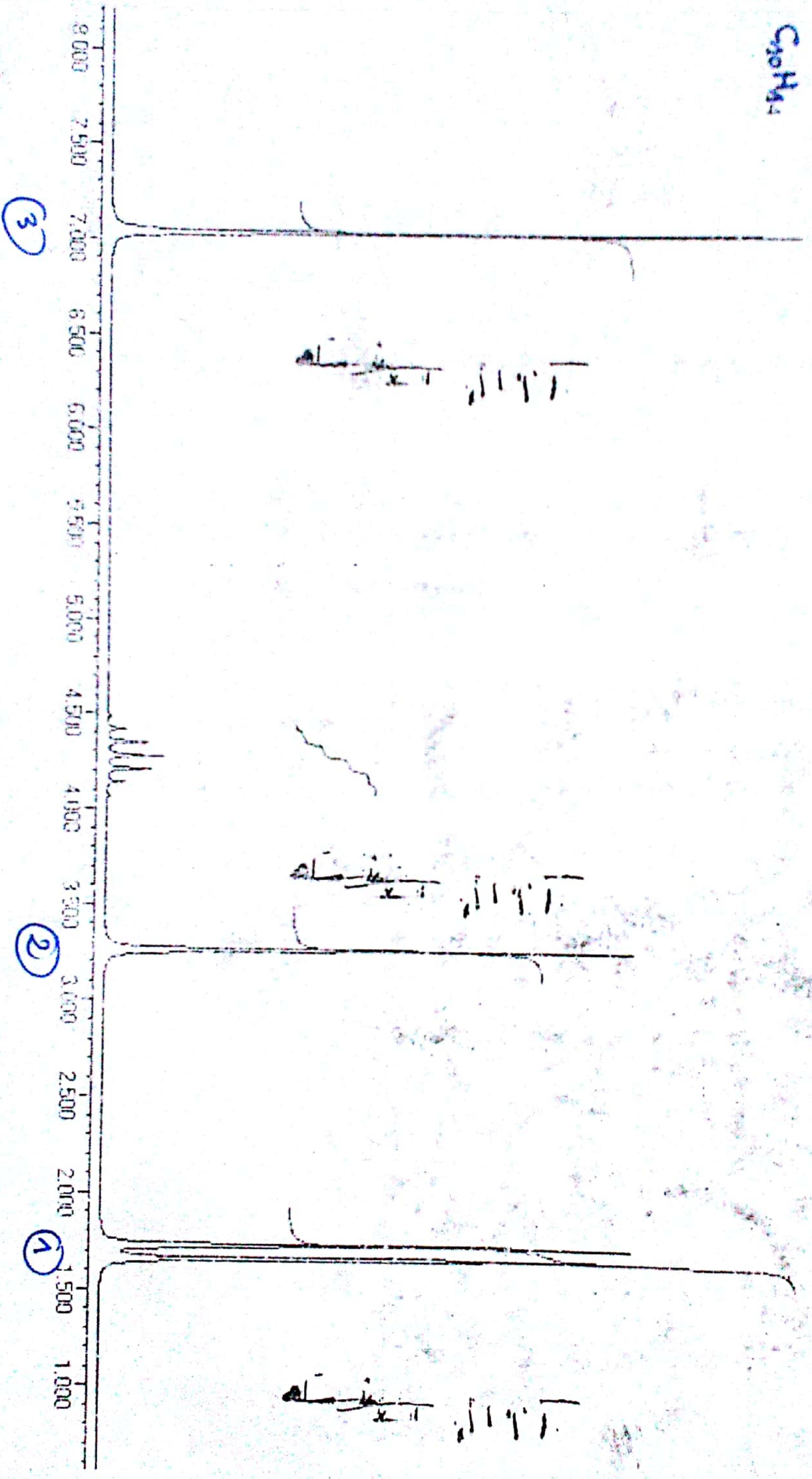


بنية الجزيء المرغوبة للامتحان



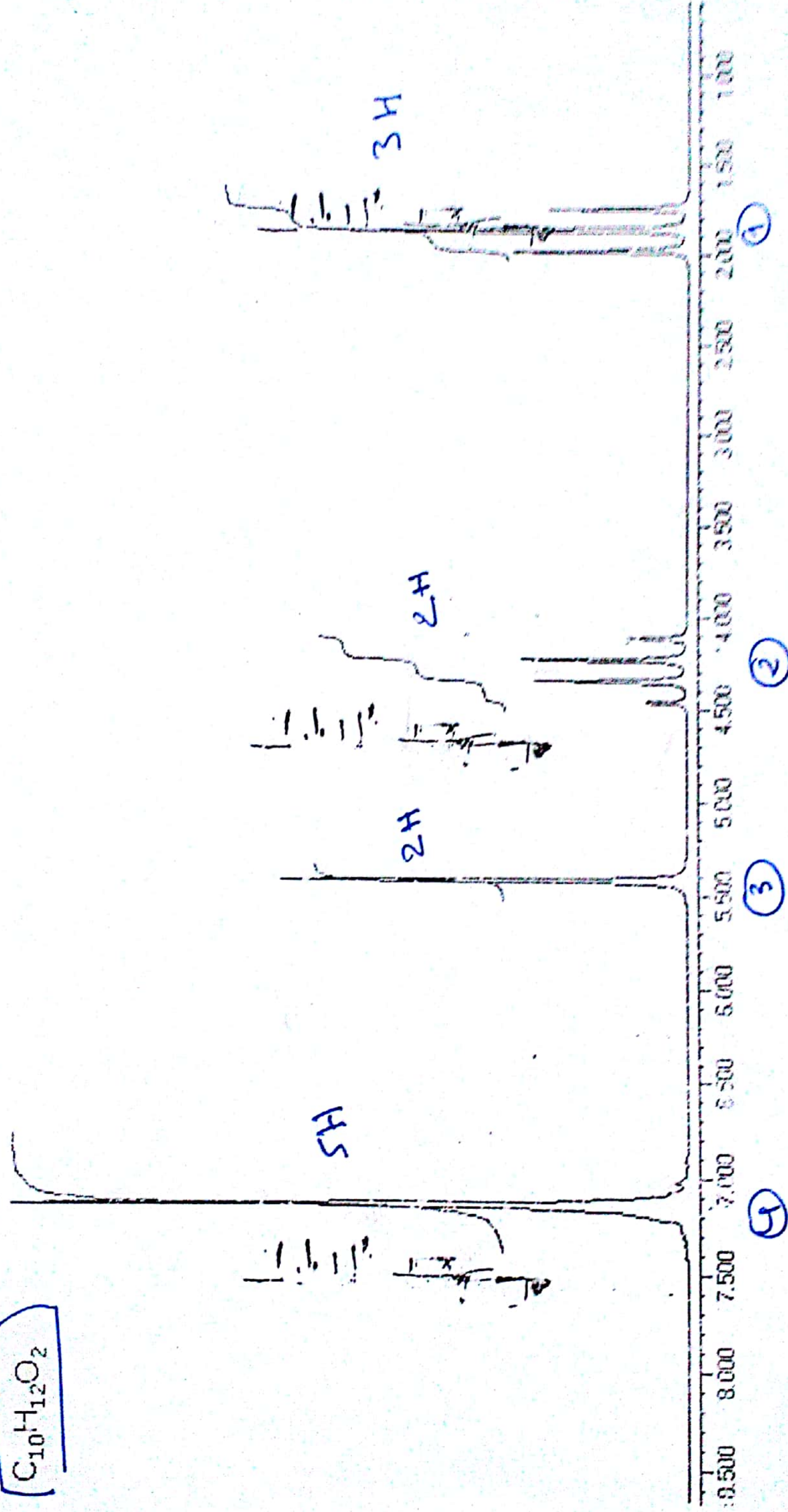
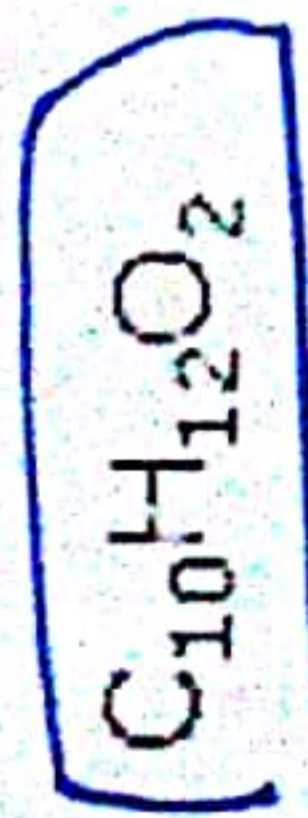
مثال ٥٢

آلية التبريد والدفن



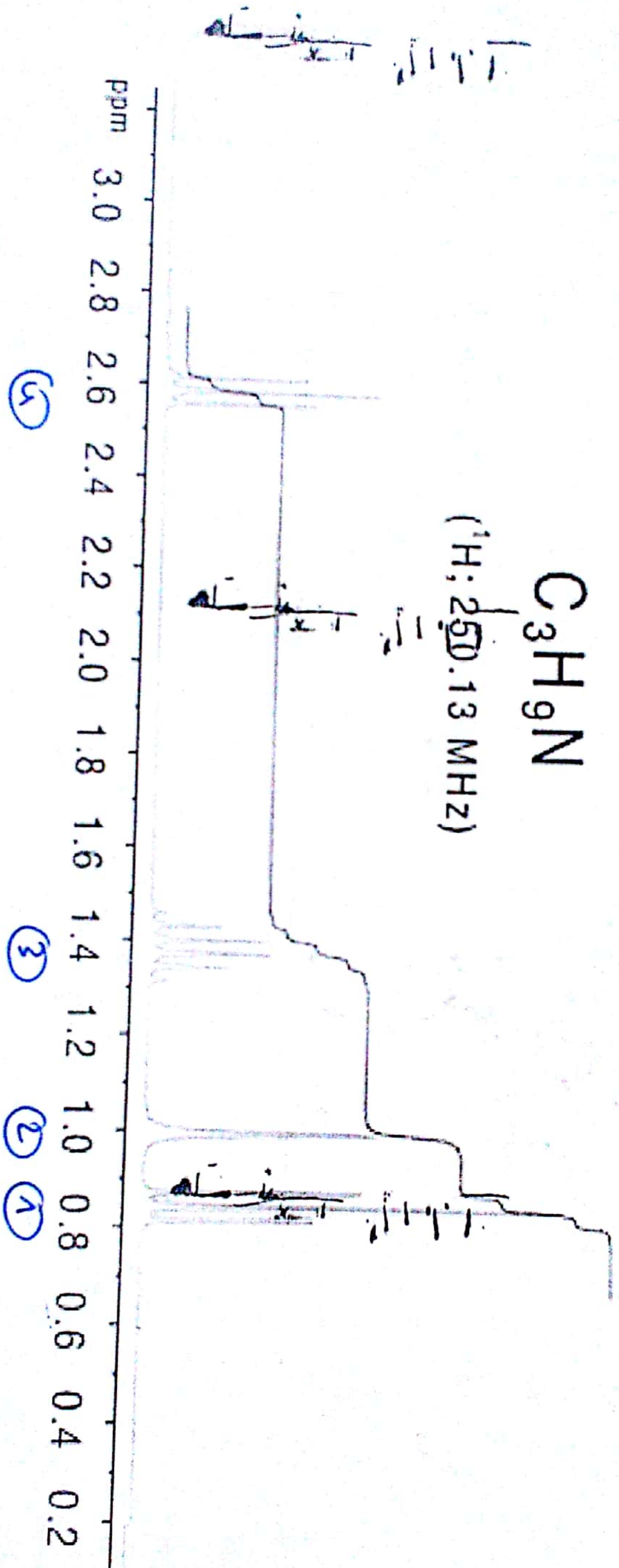
مسألة 03 :

أعط الهيكلة الآتية للطيف التالي .



مركب 04 =

آلية التخليق المقترحة:



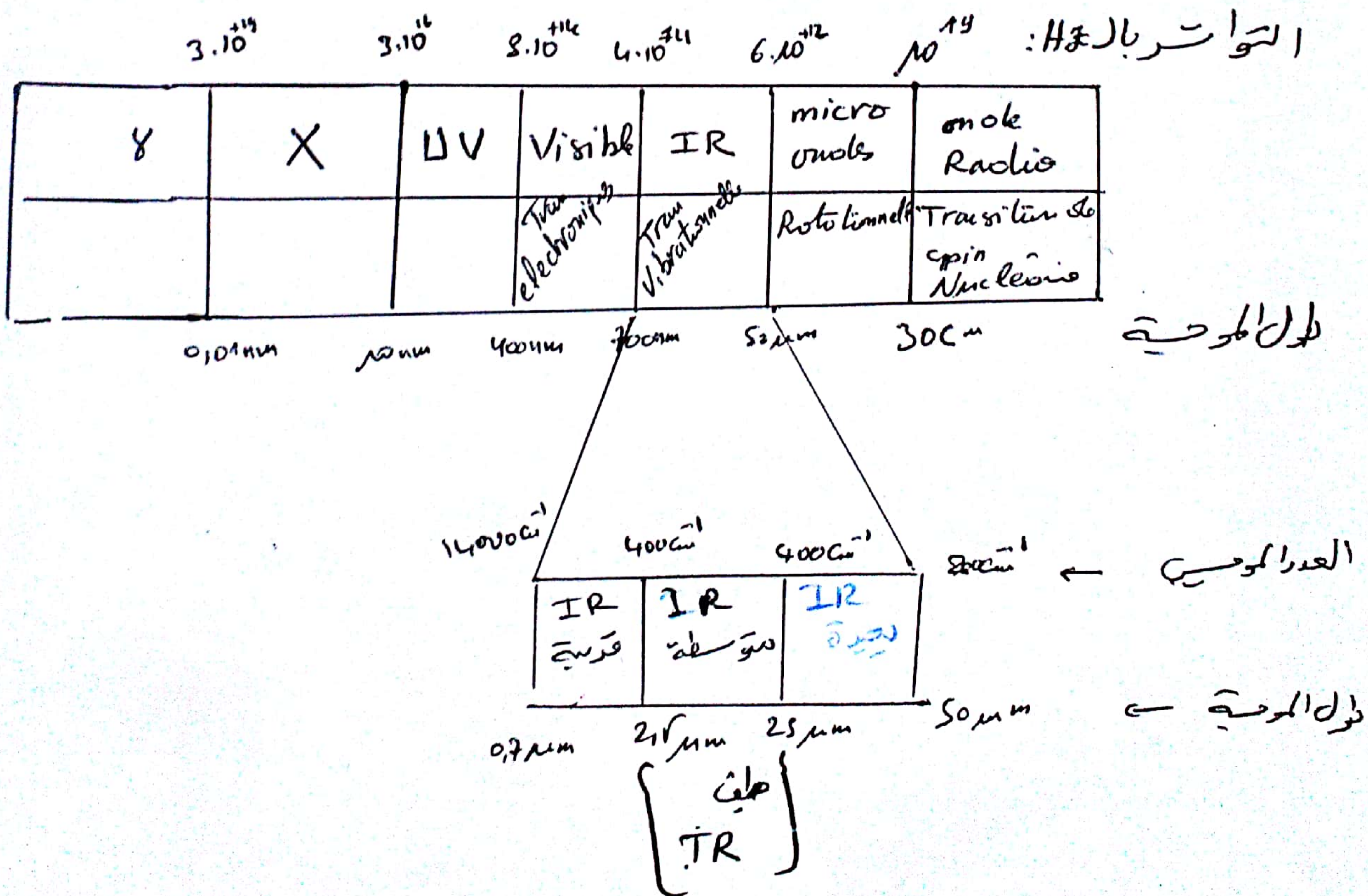
آلية التخليق المقترحة:

مطيافية الأشعة تحت الحمراء

Spectroscopie Infra Range

المجال الطيفي للأشعة تحت الحمراء Domaine spectral de l'IR يعبر عنها بـ المجال المرئي (Spectroscopie Visible) ^{بعبارة أخرى} الطاقة و سعة مطيافية الأشعة تحت الحمراء (Spectroscopie Infrarouge) يعبر عنها أو تتشابه في إسهامها من الأشعة المسؤولة عن التفاعلات بين مستويات الطاقة الخاصة بالاهتزاز والدوران للجزيئات حيث تكون مستويات الطاقة في (IR) هي نفسها مستويات طاقة الاهتزاز للروابط الجزيئية.

مدى الأشعة IR في الطيف الكهرومغناطيسي (IR dans le spectre EM)



- الطيف الكهرومغناطيسي -

من خلال الشكل السابق (الخط الأحمر ومغناطيسي) يمكن أن نعبّر عن طول موجية في المجال الأحمر ومغناطيسي بالعديد من القيم والوحدات المختلفة. وكلها مرتبطة فيما بينها.

• التواتر (Fréquence ν) بالهرتز.

• طول الموجة λ بالمتر أو μm .

• العدد الموجي σ بـ cm^{-1} .

ومن خلال الشكل السابق نلاحظ أن طيف الأشعة تحت الحمراء يحتوي على

ثلاث مناطق من المجال IR.

IR قريبة (IR proche) IR بعيدة (IR lointain) و

IR المتوسطة (IR moyen) كل هذه القيم مقصوري بين 700nm و 50

(μm).

في حين أن IR μm فال الموجة المستخدمة في التحليل مقصورة بين

$2,5\text{ }\mu\text{m}$ و $25\text{ }\mu\text{m}$ وهو ما يساوي عددي مقصوري بين 4000 cm^{-1} و 400 cm^{-1} .

IR Spectroscopie moléculaire
d'absorption

- مطيافية الامتصاص الجزيئية:

مطيافية الأشعة تحت الحمراء عبارة عن مطيافية الامتصاص الجزيئية حيث تتصرف العينات المدروسة إلى أن اشعته كعرو ومغناطيسية وهذه بعض الإشعاعات يتم إمتصاصها من طرف الجزيء. حيث دراسة هذه الإشعاعات تعطينا بعض المعلومات عن الجزيء.

$$T \text{ (Transmittance)} = \frac{I}{I_0} \quad (I \text{ et } I_0 \text{ désigne l'intensité}$$

de la radiation avant et après traversée de la substance étudiée.

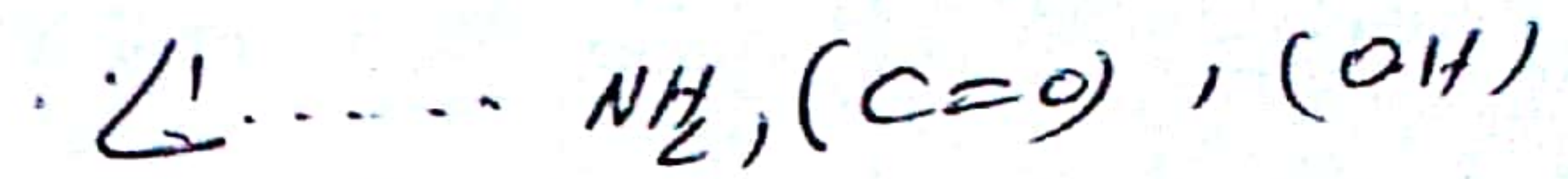
وحسب قانون بير لamber (Beer-Lambert) فإن

$$A = \text{Log} \left(\frac{I_0}{I} \right) = -\text{Log} (T)$$

(2)

العلاقة بين مطيافية الأشعة تحت الحمراء والمجموعات الوظيفية :

تعتبر ^{مطيافية} الأشعة تحت الحمراء أداة مهمة لتحديد المجموعات الوظيفية داخل الجزيئات لأنها تلتصق أو تختد ستوهات وتعدلات (استثبات) اللزجة (elongation et déformation de liaisons). كما يمكن أيضا تحديد كشف الروابط المتماثلة (liaison asymétrique) في المجموعات الوظيفية مثل



طيف الأشعة تحت الحمراء : السكالات يوضع طيف الأشعة تحت الحمراء لمركب.

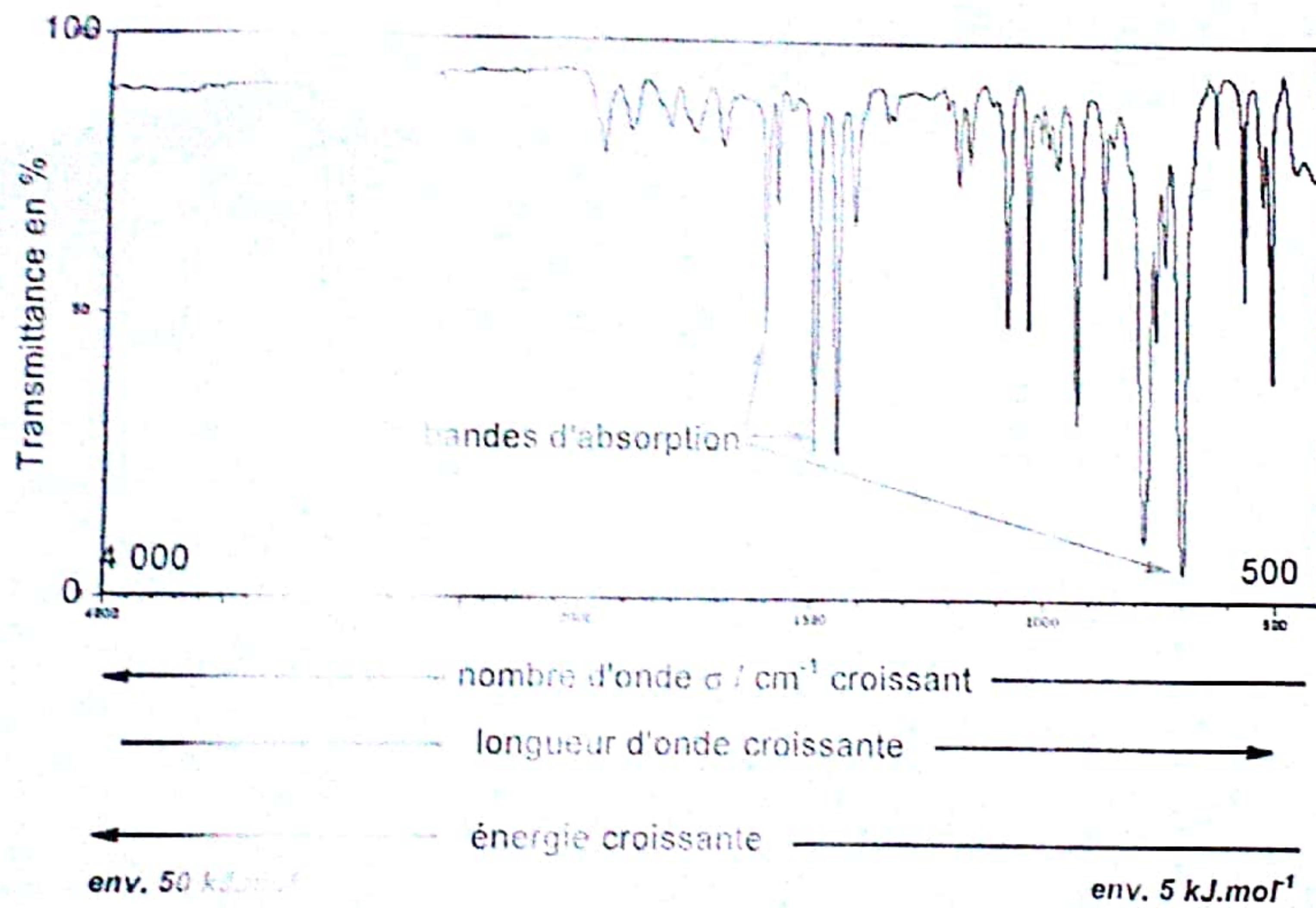


Figure 1 : allure d'un spectre infrarouge

دراسة وتحليل طيف الأشعة تحت الحمراء IR. تحتوي طيف الأشعة تحت الحمراء العديدة من الأشعة تحت الحمراء وهو ما يفرض علينا معرفة العديد من القواعد: حيث يتكون طيف IR من المناطق بعمق

- 4000 - 2500 cm^{-1} → liaisons C-H, NH et OH
- 2500 - 2000 cm^{-1} → liaisons C≡C, C≡N
- 2000 - 1500 cm^{-1} → liaisons C=C, C=O
- 1500 - → liaisons C-O, C-F, C-Cl

حيث هي الحارة الهامة المناطق الثلاث الأولى كافية لتصنيف المجموعة الوظيفية في المجرب.

مثال: طيف IR لـ Spectre de la pent-1-én-3-one $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO-CH=CH}_2$

