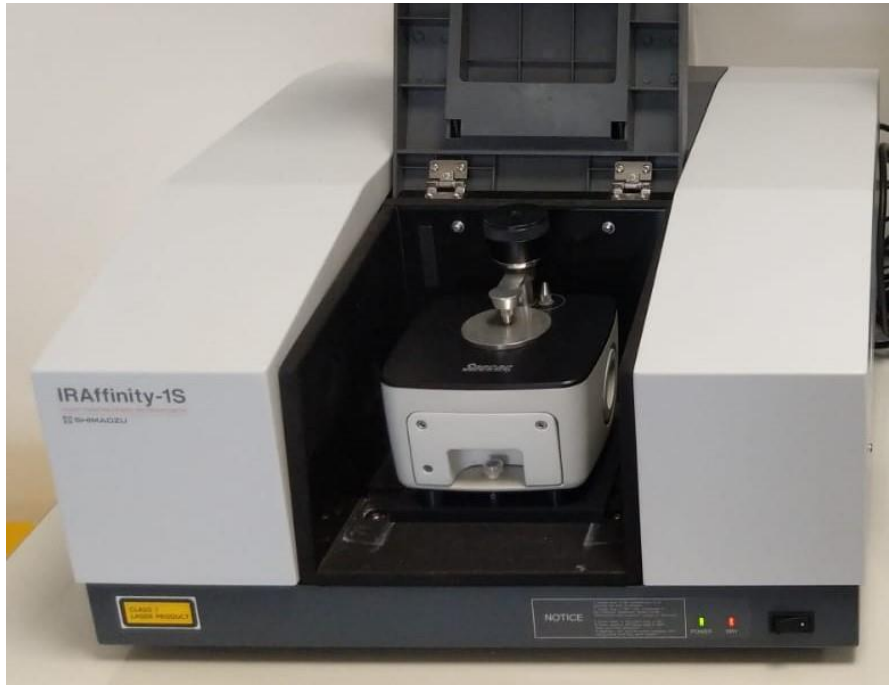
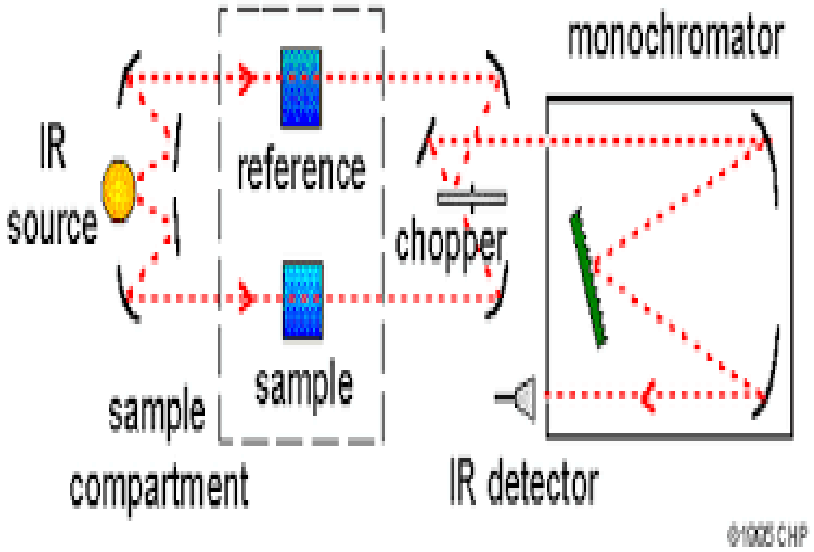


SPECTROMETRY INFRA RED



Introduction

- Spectroscopy is an analytical technique which helps determine structure.
- It destroys little or no sample.
- The amount of light absorbed by the sample is measured as wavelength is varied.

• التحليل الطيفي هو تقنية تحليلية تساعد في تحديد التركيب.

لا يدمر العينه تقريبا

• يتم قياس كمية الضوء التي تمتصها العينة بتغيير الطول الموجي.

Types of Spectroscopy

- Infrared (IR) spectroscopy measures the bond vibration frequencies in a molecule and is used to determine the functional group.
  - يقيس التحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء ترددات اهتزاز الروابط في الجزيء، ويُستخدم لتحديد المجموعة الوظيفية.
- Mass spectrometry (MS) fragments the molecule and measures the masses.
  - يقوم مطياف الكتلة بتجزئة الجزيء وقياس كتلته.
- Nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy detects signals from hydrogen atoms and can be used to distinguish isomers.
  - يكشف التحليل الطيفي بالرنين المغناطيسي النووي عن إشارات ذرات الهيدروجين، ويمكن استخدامه للتمييز بين المتصاوغات.
- Ultraviolet (UV) spectroscopy uses electron transitions to determine bonding patterns.
  - يستخدم التحليل الطيفي بالأشعة فوق البنفسجية انتقالات الإلكترونات لتحديد أنماط الروابط.

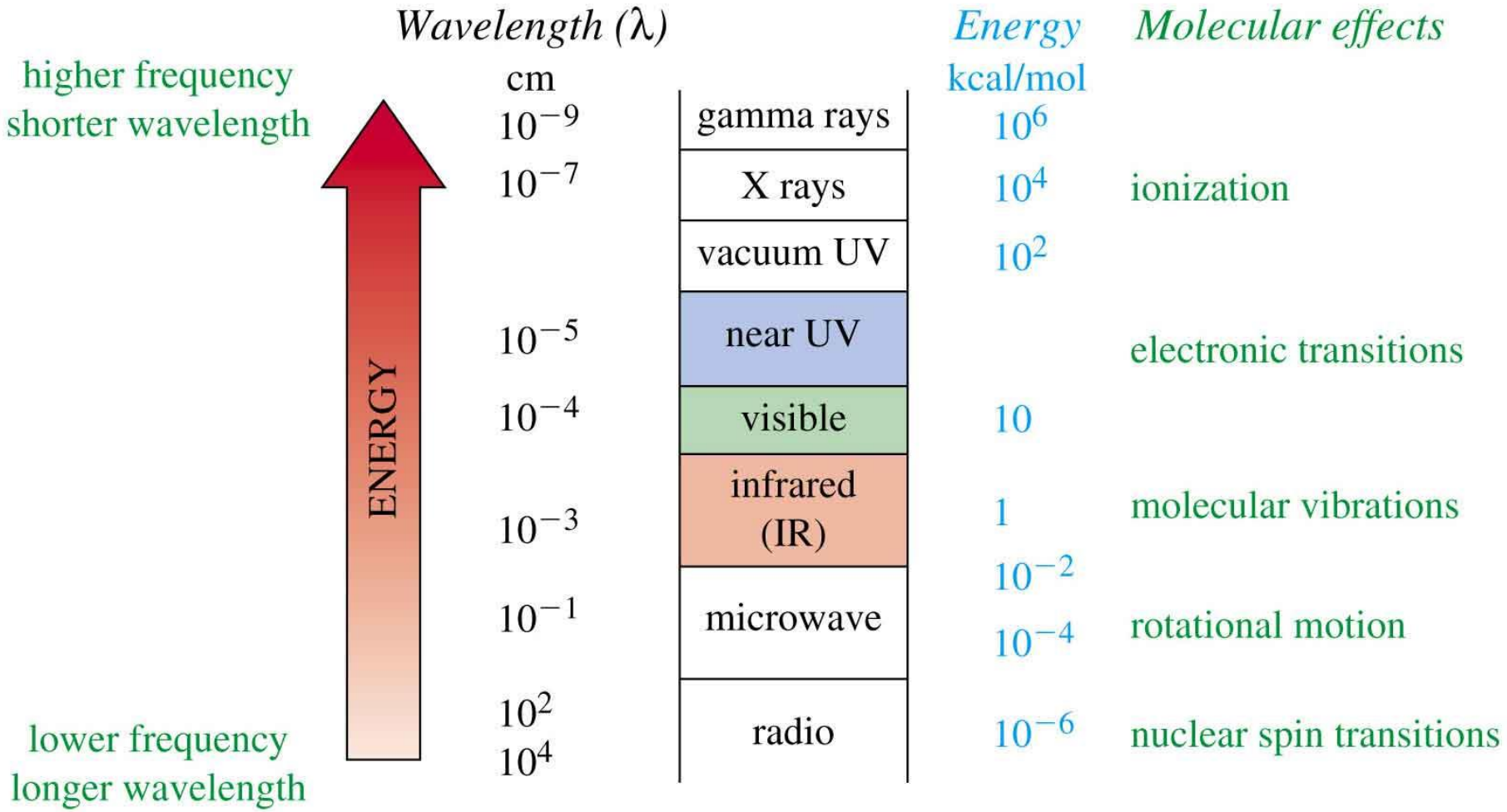
Electromagnetic Spectrum

- Examples: X rays, microwaves, radio waves, visible light, IR, and UV.
- Frequency and wavelength are inversely proportional.

• أمثلة: الأشعة السينية، الموجات الميكروية، موجات الراديو، الضوء المرئي، الأشعة تحت الحمراء، والأشعة فوق البنفسجية.

• التردد والطول الموجي متناسبان عكسيًا.

The Spectrum and Molecular Effects



The IR Region

- Just below red in the visible region.
- Wavelengths usually 2.5-25 μm.
- More common units are wavenumbers, or cm^{-1}, the reciprocal of the wavelength in centimeters.
- Wavenumbers are proportional to frequency and energy.

• أسفل اللون الأحمر مباشرةً في المنطقة المرئية.
• الأطوال الموجية عادةً 2.5-25 ميكرومتر.

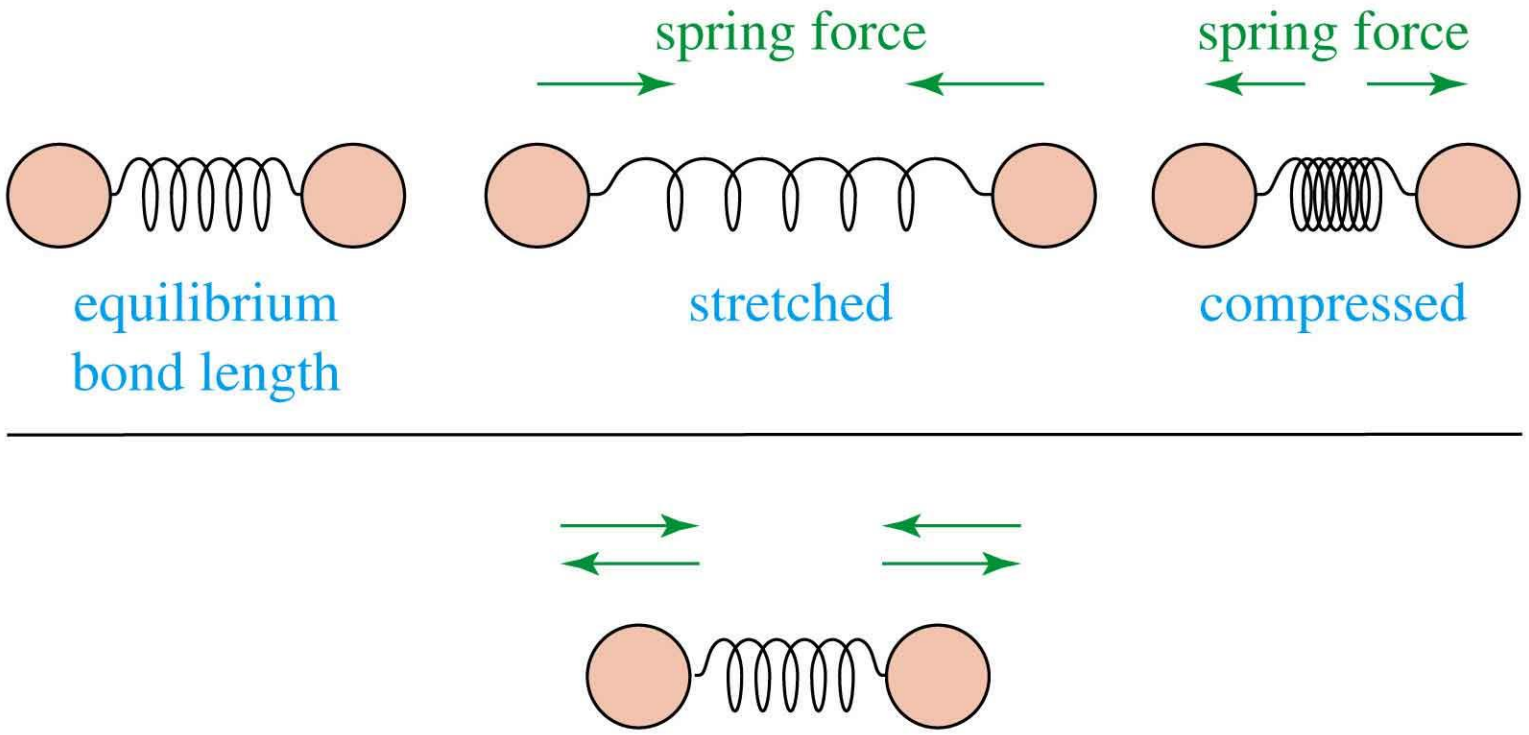
الوحدات الأكثر شيوعًا هي الأعداد الموجية، أو سم'، وهي مقلوب الطول الموجي بالسنتيمترات.

• الأعداد الموجية تتناسب طرديًا مع التردد والطاقة.

Molecular Vibrations

Covalent bonds vibrate at only certain allowable frequencies.

تذبذب الروابط التساهمية فقط عند ترددات معينة مسموح بها.



Stretching Frequencies

Bond	Bond Energy [kcal (kJ)]	Stretching Frequency (cm^{-1})
Frequency dependence on atomic masses		
C—H	100 (420)	3000
C—D	100 (420)	2100
C—C (↓ heavier atoms)	83 (350)	1200 ($\bar{\nu}$ decreases ↓)
Frequency dependence on bond energies		
C—C	83 (350)	1200
C=C	146 (611)	1660
C≡C (↓ stronger bond)	200 (840)	2200 ($\bar{\nu}$ increases ↓)

- Frequency decreases with increasing atomic weight.
- Frequency increases with increasing bond energy.

- ينخفض التردد مع زيادة الوزن الذري.
- يزداد التردد مع زيادة الرابطة الطاقة.

Subject _____ Day _____ Date _____

* اذا بدي أحوضهم كلهم بقانون واحد:

$$\Delta E = h\nu = \frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

أو

$$\bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c}\sqrt{\frac{k}{M}} = 5.3\times10^{-12}\sqrt{\frac{k}{M}}$$

* عشان نحسب عدد الحركات نظرياً:

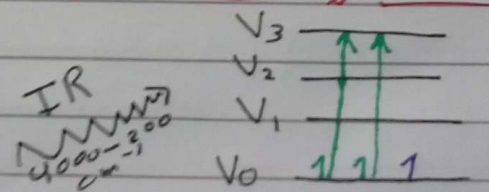
Linear ⟶ $3N-5$

non-Linear ⟶ $3N-6$

حيث N عدد الـ atoms وبنضرب بـ 3 لأنو قلنا عندنا 3 أنواع للحركات، وناقص 6 ~~5~~

3 translation
3 rotation

① combination



* 2 رح ينتقلوا لـ extra levels بسبب الطاقة الزائدة، بس يرجعوا رح يحرروا هاي الطاقة مع بعض بنفس الوقت ويعطوها للثالث $V_3 = V_1 + V_2$

* بالعملي رح يطلعلي 3 Bands أما بالنظري أنا حسبها 1 Band.

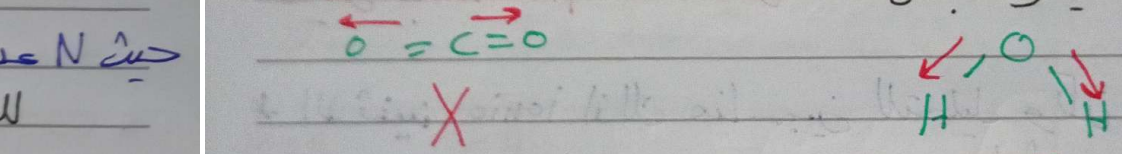
Subject _____ Day _____ Date _____

أنواع الحركة اللي بشوفها بال IR؟؟

A streching

1- symmetrical streching

* الاثنين بتمددوا أو بتقصروا بنفس الطول بدون ما يلغوا بعض



2- Asymmetrical or antisymmetrical streching

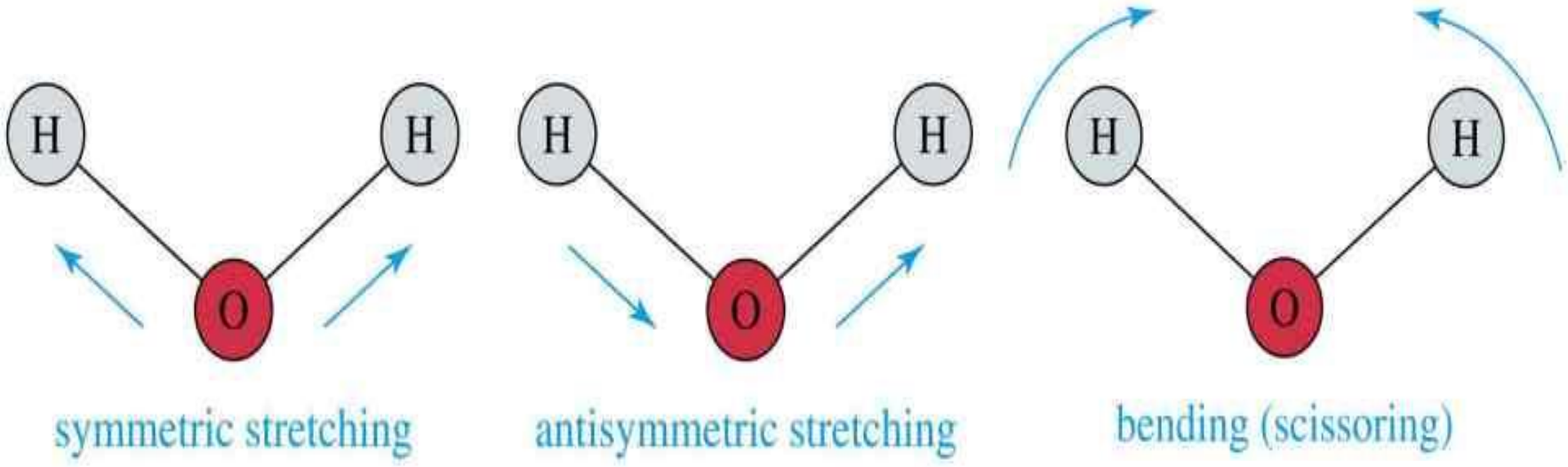
* واحدة تطول والثانية تقصر
* تحتاج طاقة عالية
* الترتيب الكلي:

Asymmetrical streching > symmetrical streching > bending

Vibrational Modes

Nonlinear molecule with *n* atoms usually has 3*n* - 6 fundamental vibrational modes.

الجزيء غير الخطي الذي يحتوي على n ذرة عادة ما يحتوي على 3n -6 وضعية اهتزازية أساسية.



Fingerprint of Molecule

- Whole-molecule vibrations and bending vibrations are also quantitized.
- No two molecules will give exactly the same IR spectrum (except enantiomers).
- Simple stretching: 1600-3500 cm^{-1}.
- Complex vibrations: 600-1400 cm^{-1}, called the "fingerprint region."

• يتم أيضًا تحديد كمية اهتزازات الجزيء الكامل واهتزازات الانحناء.

• لا يوجد جزيئان يعطيان نفس طيف الأشعة تحت الحمراء تمامًا (باستثناء المتماثلات الضوئية).

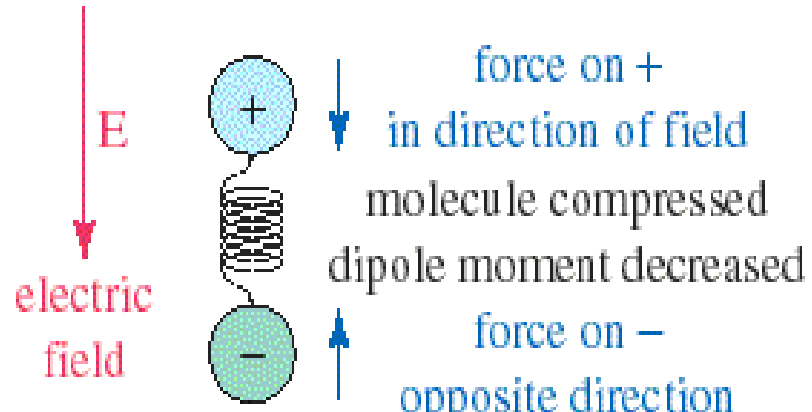
• التمدد البسيط: 1600-3500 سم-1.

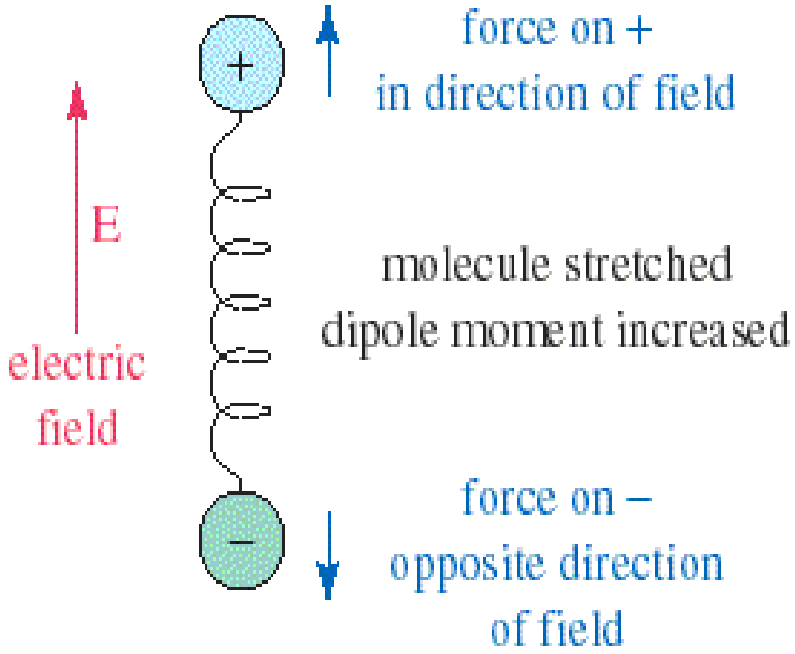
• الاهتزازات المعقدة: 600-1400 سم، وتسمى "منطقة البصمة".

IR-Active and Inactive

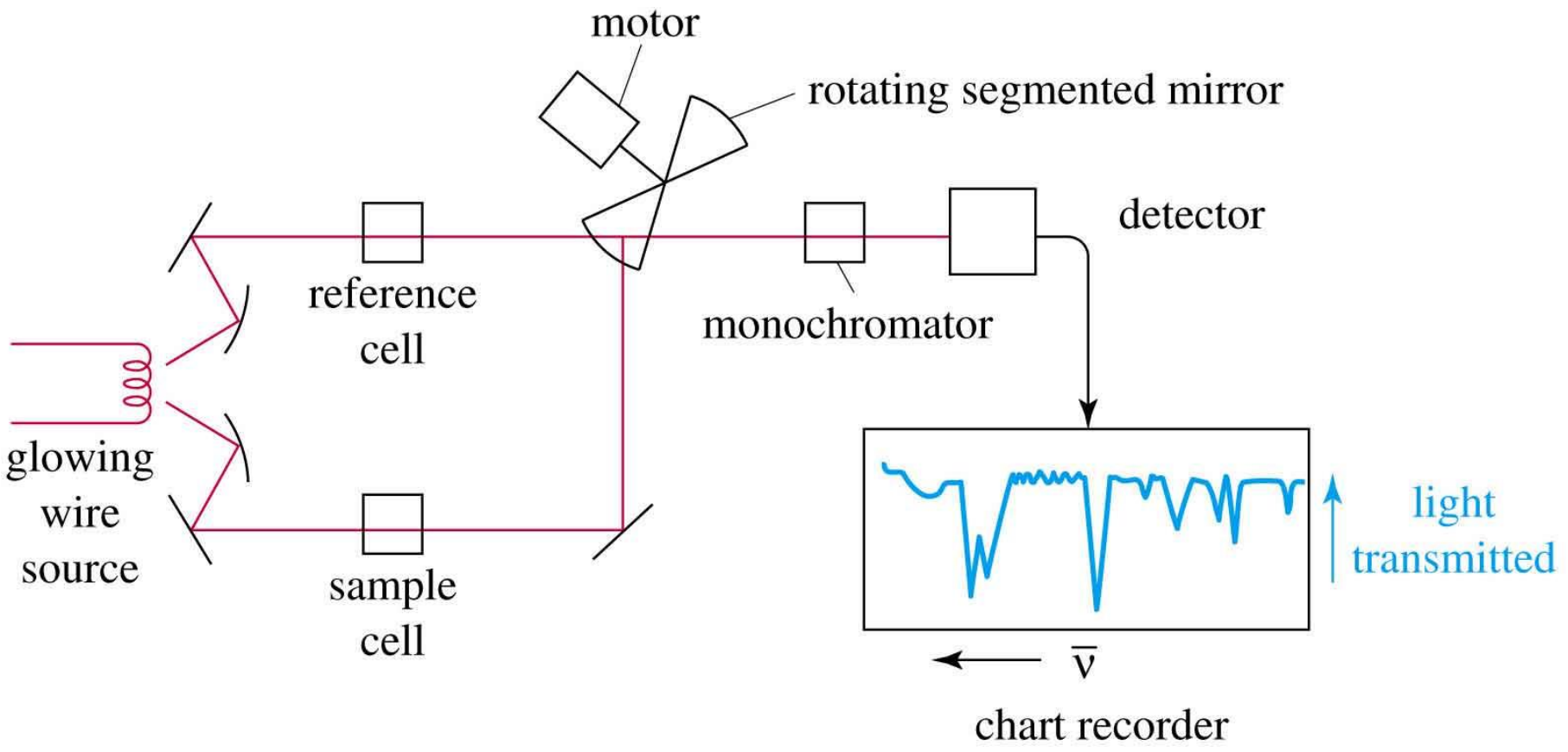
- A polar bond is usually IR-active.
- الرابطة القطبية عادةً ما تكون نشطة في الأشعة تحت الحمراء.
- A nonpolar bond in a symmetrical molecule will absorb weakly or not at all.

الرابطة غير القطبية في جزيء متناظر تمتص بشكل ضعيف أو لا تمتص على الإطلاق.





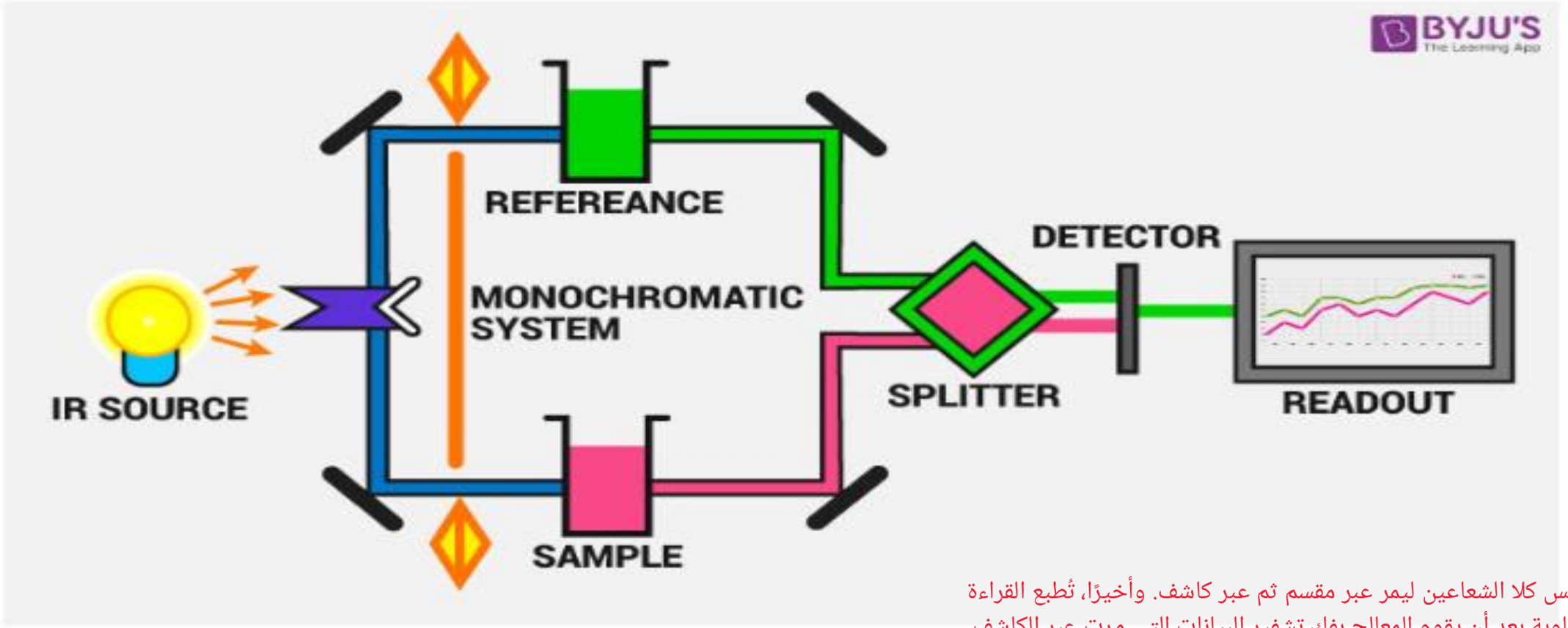
An Infrared Spectrometer



ال أدوات التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء موضحة أدناه أولاً، يتم تقسيم شعاع ضوء الأشعة تحت الحمراء من المصدر إلى قسمين وتمريره عبر المرجع والعينة على التوالي.

IR Spectroscopy Instrumentation

The instrumentation of infrared spectroscopy is illustrated below. First, a beam of IR light from the source is split into two and passed through the reference and the sample respectively.



الآن، ينعكس كلا الشعاعين ليمر عبر مقسم ثم عبر كاشف. وأخيرًا، تُطبع القراءة المطلوبة بعد أن يقوم المعالج بفك تشفير البيانات التي مرت عبر الكاشف.

Now, both of these beams are reflected to pass through a splitter and then through a detector. Finally, the required reading is printed out after the processor deciphers the data passed through the detector.

ما هو المصباح المستخدم في مطيافية الأشعة تحت الحمراء؟
في مطيافية الأشعة تحت الحمراء، يُستخدم مصباح غلوبار كمصدر ضوئي حراري. وهو عبارة عن قضيب من كربيد السيليكون بقطر يتراوح بين 5 و10 مم وطول يتراوح بين 20 و50 مم، يتم تسخينه كهربائيًا إلى درجة حرارة تتراوح بين 1000 و1650 درجة مئوية (1830 إلى 3000 درجة فهرنهايت).

ما هي المذيبات المستخدمة في مطيافية الأشعة تحت الحمراء؟
يُعدّ رابع كلوريد الكربون (CCl4) وثاني كبريتيد الكربون (CD2) من أكثر المذيبات شيوعًا (CS2). تشمل المذيبات المستخدمة للمواد القطبية الكلوروفورم، وكلوريد الميثيلين، والأسيتونيتريل، والأسيتون. يمكن تحليل المواد الصلبة المُختزلة إلى جزيئات دقيقة على شكل معجون رقيق أو معلق.

يُستخدم رابع كلوريد الكربون كمذيب في مطيافية الأشعة تحت الحمراء لأنه يمتص عند تردد منخفض أقل من 1600 سم-1. علاوة على ذلك، فإن رابع كلوريد الكربون مذيب غير قطبي، أي أنه لا يتداخل مع أطياف الامتصاص.

Which lamp is used in IR spectroscopy?

For infrared spectroscopy, a Globar is employed as a thermal light source. It's a silicon carbide rod with a diameter of 5 to 10 mm and a length of 20 to 50 mm that's been electrically heated to 1,000 to 1,650°C (1,830 to 3,000 degrees Fahrenheit).

Which solvent are used in IR spectroscopy?

Carbon Tetrachloride (CCl4) and Carbon Disulfide (CD) are the most prevalent solvents (CS2). Solvents for polar materials include chloroform, methylene chloride, acetonitrile, and acetone. Solids reduced to fine particles can be analysed as a thin paste or mull.

Carbon tetra chloride is used as a solvent in IR spectroscopy because it absorbs at a shallow frequency below 1600 cm−1. Moreover, carbon tetrachloride is a non-polar solvent, i.e. it does interfere with the absorption spectra.

Can we use water in IR spectroscopy?

Because water has two high infrared absorption peaks, it cannot be employed as a solvent for IR spectroscopy. Also, water is a polar solvent that dissolves alkali halide disks, which are extensively employed in IR.

هل يمكننا استخدام الماء في مطيافية الأشعة تحت الحمراء؟
نظرًا لوجود قمتين امتصاص عاليتين في نطاق الأشعة تحت الحمراء للماء، لا يُمكن استخدامه كمذيب في مطيافية الأشعة تحت الحمراء. كما أن الماء مذيب قطبي يُذيب أقراص هاليدات القلويات، والتي تُستخدم على نطاق واسع في مطيافية الأشعة تحت الحمراء.

Sample Preparation

يمكن الحصول على أطياف الأشعة تحت الحمراء من عينات في جميع الحالات (السائلة والصلبة والغازية).

Infrared spectra may be obtained from samples in all phases (liquid, solid and gaseous).

Liquid samples can be sandwiched between two plates of a salt (commonly sodium chloride, or common salt, although a number of other salts such as potassium bromide or calcium fluoride are also used). The plates are transparent to the infrared light and do not introduce any lines onto the spectra.

يمكن وضع العينات السائلة بين لوحين من الملح (عادةً كلوريد الصوديوم، أو ملح الطعام، على الرغم من استخدام عدد من الأملاح الأخرى مثل بروميد البوتاسيوم أو فلوريد الكالسيوم). الألواح شفافة للأشعة تحت الحمراء ولا تُضيف أي خطوط إلى الأطياف.

أ) تقنية الطحن: في هذه التقنية، تُخلط العينة المطحونة ناعماً مع مادة النوجول (عامل الطحن) في هاون من الرخام أو العقيق، باستخدام مدقة، لتكوين عجينة سميكة. تُوضع طبقة رقيقة على ألواح الملح. ثم تُوضع هذه الألواح في مسار شعاع الأشعة تحت الحمراء، ويُسجل الطيف.

Sampling of solids

Various techniques used for preparing solid samples are as follows

a) **Mull technique:** In this technique, the finely crushed sample is mixed with Nujol (mulling agent) in n a marble or agate mortar, with a pestle to make a thick paste. A thin film is applied onto the salt plates. This is then mounted in a path of IR beam and the spectrum is recorded.

b) **Solid run in Solution** – In this technique, solid sample may be dissolved in a non-aqueous solvent provided that there is no chemical interaction with the solvent and the solvent is not absorbed in the range to be studied. A drop of solution is placed on the surface of alkali metal disc and solvent is evaporated to dryness leaving a thin film of the

c) **Case film technique** – If the solid is amorphous in nature then the sample is deposited on the surface of a KBr or NaCl cell by evaporation of a solution of the solid and ensured that the film is not too thick to pass the radiation.

ب)تقنية الذوبان في المحلول: في هذه التقنية، يمكن إذابة عينة صلبة في مذيب غير مائي بشرط عدم وجود تفاعل كيميائي مع المذيب وعدم امتصاص المذيب في النطاق المراد دراسته. توضع قطرة من المحلول على سطح قرص من فلز قلوي، ويُبخر المذيب حتى الجفاف تاركاً طبقة رقيقة من المادة.

ج)تقنية غشاء العلبة: إذا كانت المادة الصلبة غير متبلورة، تُرسب العينة على سطح خلية من بروميد البوتاسيوم أو كلوريد الصوديوم عن طريق تبخير محلول المادة الصلبة، مع التأكد من أن لا يكون الفيلم سميكًا جدًا بحيث لا يسمح بمرور الإشعاع.

d) **Pressed pellet technique** – In this technique, a small amount of finely ground solid sample is mixed with 100 times its weight of potassium bromide and compressed into a thin transparent pellet using a hydraulic press. These pellets are transparent to IR radiation and it is used for analysis.

د) تقنية القرص المضغوط: في هذه التقنية، تُخلط كمية صغيرة من عينة صلبة مطحونة ناعمًا مع 100 ضعف وزنها من بروميد البوتاسيوم، ثم تُضغط لتشكيل قرص رقيق شفاف باستخدام مكبس هيدروليكي. هذه الأقراص شفافة للأشعة تحت الحمراء، وتُستخدم في التحليل.

A large benchtop hydraulic press

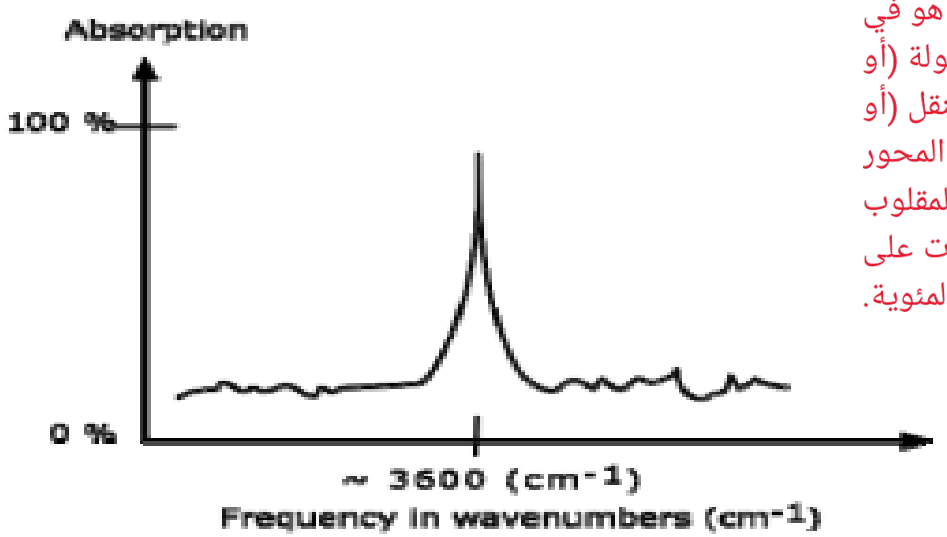
FT-IR Spectrometer

- Uses an interferometer.
- Has better sensitivity.
- Less energy is needed from source.
- Completes a scan in 1-2 seconds.
- Takes several scans and averages them.
- Has a laser beam that keeps the instrument accurately calibrated.

• يستخدم مقياس التداخل.
• يتميز بحساسية أعلى.
• يحتاج إلى طاقة أقل من المصدر.
• يُكمل المسح في غضون 1-2 ثانية.
• يُجري عدة مسوحات ويحسب متوسطها.
• يحتوي على شعاع ليزر يُحافظ على معايرة الجهاز بدقة.

AN IR SPECTRUM IN ABSORPTION MODE

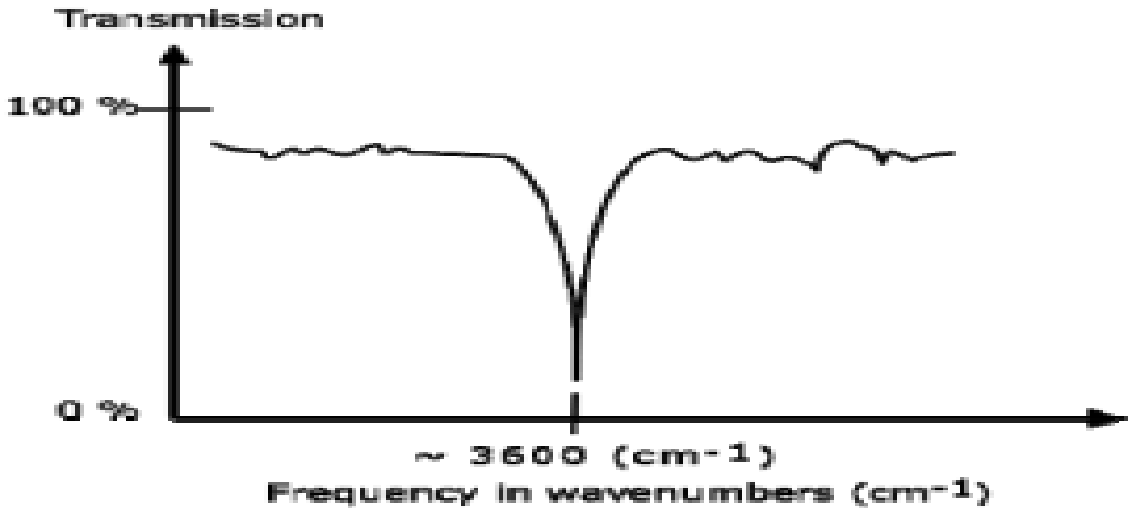
The IR spectrum is basically a plot of transmitted (or absorbed) frequencies vs. intensity of the transmission (or absorption). Frequencies appear in the *x*-axis in units of inverse centimeters (wavenumbers), and intensities are plotted on the *y*-axis in percentage units.



طيف الأشعة تحت الحمراء هو في الأساس رسم بياني للترددات المنقولة (أو الممتصة) مقابل شدة النقل (أو الامتصاص). تظهر الترددات على المحور السيني بوحدات السنتيمتر المقلوب (الأعداد الموجية)، وتُرسم الشدات على المحور الصادي بوحدات النسبة المئوية.

The graph above shows a spectrum in **absorption** mode.

AN IR SPECTRUM IN TRANSMISSION MODE



The graph above shows a spectrum in **transmission** mode.
This is the most commonly used representation and the one found in most chemistry and spectroscopy books. Therefore we will use this representation.

الرسم البياني أعلاه يظهر طيفًا في وضعية الإرسال. هذا هو التمثيل الأكثر شيوعًا المستخدم والواحد الموجود في معظم الكتب المتعلقة بالكيمياء والطيفية. لذلك سنستخدم هذا التمثيل.

The absorption band intensity depends on:

1) The size of the change in dipole moment associated with the vibration.

Change in dipole moment Absorption intensity

1) مقدار التغير في عزم ثنائي القطب المرتبط بالاهتزاز.
التغير في عزم ثنائي القطب شدة الامتصاص

OH > NH > CH

2) The number of bonds responsible for the absorption.

2) عدد الروابط المسؤولة عن الامتصاص.

Ex. C-H stretch is more intense for Octyl iodide (17 C-H) than for Methyl iodide (3 C-H)

مثال: يكون تمدد الرابطة C-H أكثر شدة في يوديد الأوكتيل (17 C-H) منه في يوديد الميثيل (3 C-H).

3) The sample concentration. Concentrated samples have greater numbers of absorbing molecules.

3. تركيز العينة: تحتوي العينات المركزة
على عدد أكبر من الجزيئات الممتصة.

Vibrational frequency or wave number depend upon the following:

1. BOND STRENGTH

The frequency of vibration will be directly proportional to strength of bond (K).

E.g.- Stretching vibration of triple bond will appear at high frequency than that of either a double or single bond

	C≡C	C=C	C-C
Frequency=	2150 cm^{-1}	650 cm^{-1}	200 cm^{-1}

2. MASS: Vibrational frequency is inversely proportional to the masses at the ends of the bond.

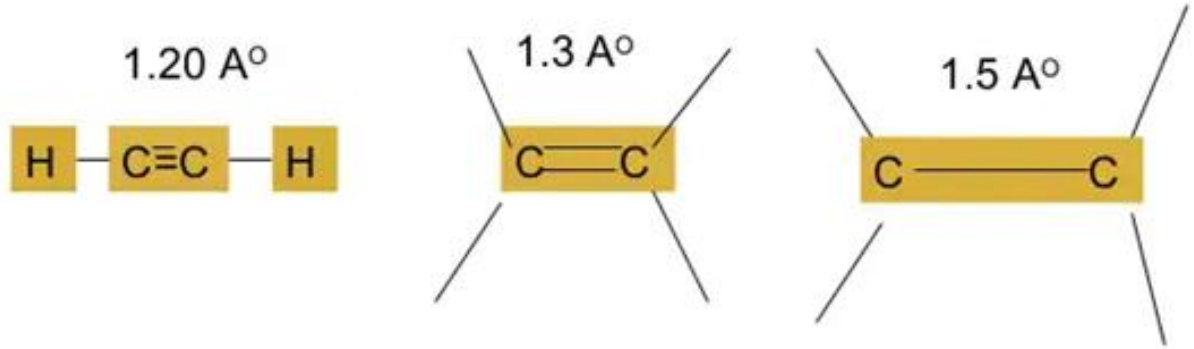
C-H	C-C	C-O	C-Cl	C-Br	C-I	
3000	1200	1100	750	600	500	cm^{-1}

2. الكتلة: يتناسب تردد الاهتزاز عكسيًا مع كتل طرفي الرابطة.

3. Hybridization:

- Hybridization affects the bond strength or force constant(K).
- Bonds are stronger in order :

SP	>	SP^2	>	sp^3
3300 cm^{-1}		3100 cm^{-1}		2900 cm^{-1}

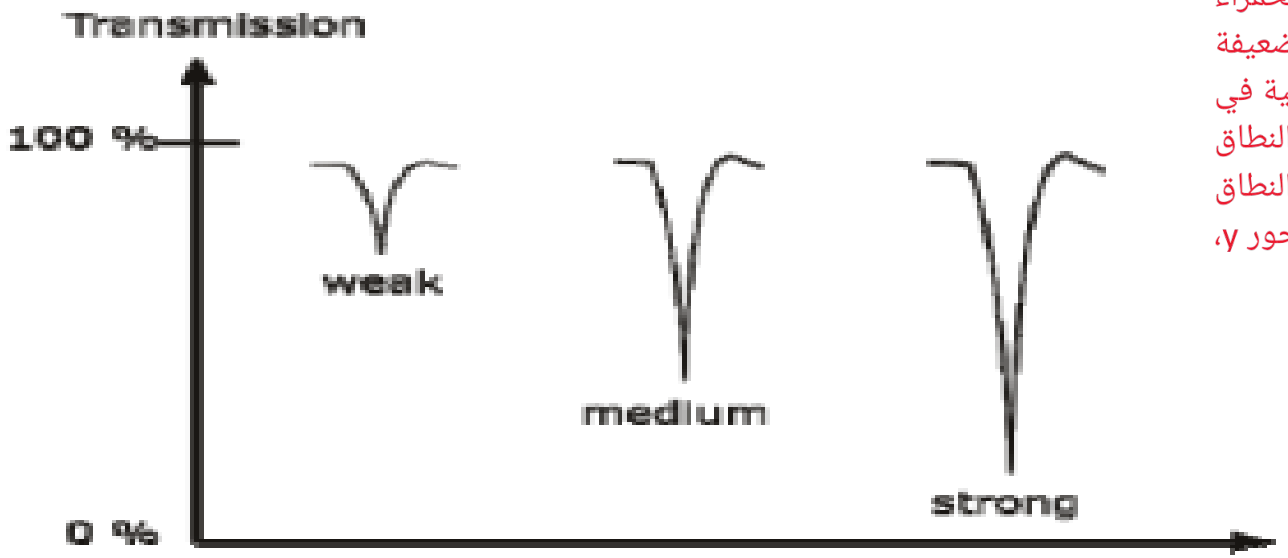


1)تردد الاهتزاز يتناسب طرديًا مع قوة الرابطة (K).
مثال: يظهر اهتزاز التمدد للرابطة الثلاثية بتردد أعلى من تردد الرابطة الثنائية أو الأحادية.

3. التهجين:
• يؤثر التهجين على قوة الرابطة أو ثابت القوة (K).

CLASSIFICATION OF IR BANDS

IR bands can be classified as **strong** (s), **medium** (m), or **weak** (w), depending on their relative intensities in the infrared spectrum. A strong band covers most of the *y*-axis. A medium band falls to about half of the *y*-axis, and a weak band falls to about one third or less of the *y*-axis.



يمكن تصنيف نطاقات الأشعة تحت الحمراء إلى قوية (s) ومتوسطة (m) وضعيفة (w)، وذلك بناءً على شدتها النسبية في طيف الأشعة تحت الحمراء. يغطي النطاق القوي معظم المحور y، بينما يمتد النطاق المتوسط إلى حوالى نصف المحور y،

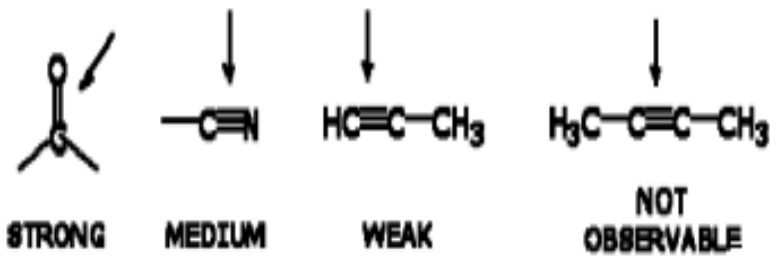
لا تُظهر جميع الروابط التساهمية نطاقات في طيف الأشعة تحت الحمراء. فقط الروابط القطبية تُظهرها. وتُسمى هذه الروابط بالروابط النشطة بالأشعة تحت الحمراء.

INFRARED ACTIVE BONDS

Not all covalent bonds display bands in the IR spectrum. **Only polar bonds do so. These are referred to as IR active**.

The intensity of the bands depends on the magnitude of the **dipole moment** associated with the bond in question:

- Strongly polar bonds such as carbonyl groups (C=O) produce strong bands.
- Medium polarity bonds and asymmetric bonds produce medium bands.
- Weakly polar bond and symmetric bonds produce weak or non observable bands.



تعتمد شدة النطاقات على مقدار عزم ثنائي القطب المرتبط بالرابطة المعنية:

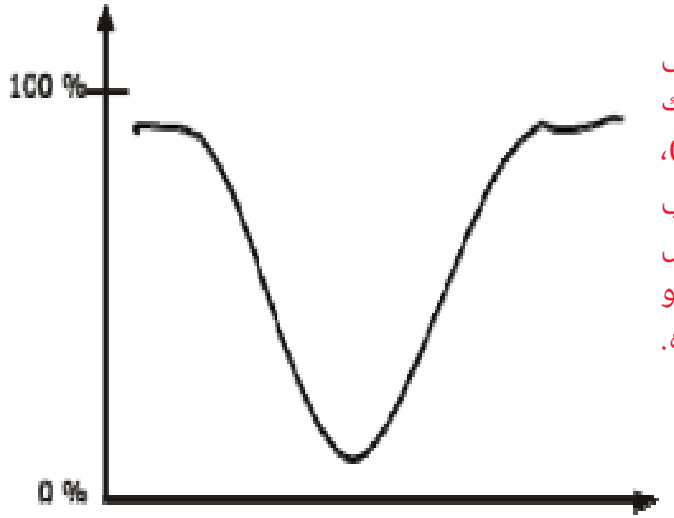
- تُنتج الروابط القطبية القوية، مثل مجموعات الكربونيل (C=O)، نطاقات قوية.
- تُنتج الروابط متوسطة القطبية والروابط غير المتماثلة نطاقات متوسطة.
- تُنتج الروابط ضعيفة القطبية والروابط المتناظرة نطاقات ضعيفة أو غير قابلة للملاحظة.

تأتي أشكال نطاقات الأشعة تحت الحمراء بأشكال متنوعة. اثنان من أكثرها شيوعًا هما النطاق الضيق والنطاق العريض. الأشرطة الضيقة رفيعة ومدببة، كالخنجر. أما الأشرطة العريضة فهي واسعة وأكثر نعومة.

INFRARED BAND SHAPES

Infrared band shapes come in various forms. Two of the most common are **narrow** and **broad**. Narrow bands are thin and pointed, like a dagger. Broad bands are wide and smoother.

A typical example of a broad band is that displayed by O-H bonds, such as those found in alcohols and carboxylic acids, as shown below.



مثال نموذجي على النطاق العريض هو ذلك الذي تُظهره روابط O-H، مثل تلك الموجودة في الكحولات والأحماض الكربوكسيلية، كما هو موضح أدناه.

INFORMATION OBTAINED FROM IR SPECTRA

• يُعدّ التحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء (IR) مفيدًا جدًا في توفير معلومات حول وجود أو عدم وجود مجموعات وظيفية محددة.

- IR is most useful in providing information about the presence or absence of specific **functional groups**.

- IR can provide a **molecular fingerprint** that can be used when comparing samples. If two pure samples display the same IR spectrum it can be argued that they are the same compound.

• يمكن أن يوفر التحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء بصمة جزيئية يمكن استخدامها عند مقارنة العينات. إذا أظهرت عينتان نقيتان نفس طيف الأشعة تحت الحمراء، فيمكن الاستدلال على أنهما نفس المركب.

- IR **does not** provide detailed information or proof of molecular formula or structure. It provides information on molecular fragments, specifically functional groups.

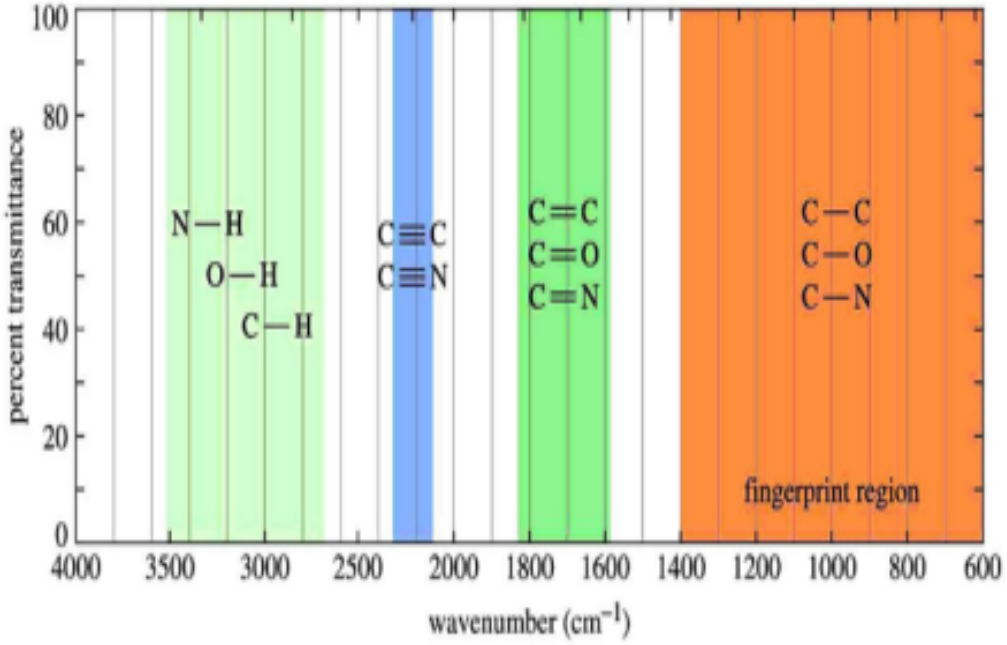
• لا يوفر التحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء معلومات تفصيلية أو دليلًا على الصيغة الجزيئية أو البنية. بل يوفر معلومات عن أجزاء جزيئية، وتحديدًا المجموعات الوظيفية.

- Therefore it is very limited in scope, and must be used in conjunction with other techniques to provide a more complete picture of the molecular structure.

• لذلك، فإن نطاقه محدود للغاية، ويجب استخدامه بالتزامن مع تقنيات أخرى لتوفير صورة أكثر اكتمالًا للبنية الجزيئية.

IR ABSORPTION RANGE

The typical IR absorption range for covalent bonds is **600 - 4000 cm^{-1}**. The graph shows the regions of the spectrum where the following types of bonds normally absorb. For example a sharp band around 2200-2400 cm^{-1} would indicate the possible presence of a C-N or a C-C triple bond.



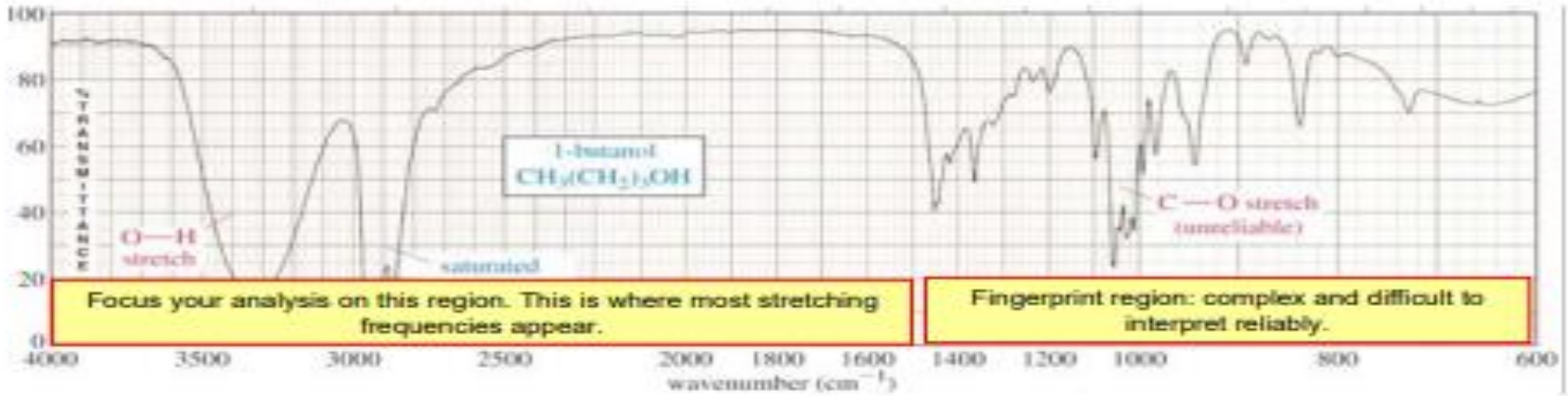
Graphics source: Wade, Jr., L.G. *Organic Chemistry*, 5th ed. Pearson Education Inc., 2003

يتراوح نطاق امتصاص الأشعة تحت الحمراء النموذجي للروابط التساهمية بين 600 و4000 سم-1.
يوضح الرسم البياني مناطق الطيف التي تمتص فيها الأنواع التالية من الروابط عادةً. على سبيل المثال، يشير وجود حزمة حادة حول 2200-2400 سم-1 إلى احتمال وجود رابطة ثلاثية C-N أو C-C.

على الرغم من إمكانية استخدام طيف الأشعة تحت الحمراء بأكمله كبصمة طيفية لأغراض مقارنة الجزيئات، إلا أن النطاق 600-1400 سم−1 يُسمى منطقة البصمة الطيفية. عادةً ما تكون هذه منطقة معقدة تُظهر العديد من الحزم، والتي غالبًا ما تتداخل مع بعضها البعض. هذا التعقيد يحد من استخدامها كبصمة طيفية، ويجب على المبتدئين تجاهلها عند تحليل الطيف. كطالب، يجب أن تركز تحليلك على بقية الطيف، أي المنطقة الواقعة على يسار 1400 سم−1.

THE FINGERPRINT REGION

Although the entire IR spectrum can be used as a fingerprint for the purposes of comparing molecules, the **600 - 1400 cm^{-1}** range is called the **fingerprint region**. This is normally a complex area showing many bands, frequently overlapping each other. This complexity limits its use to that of a fingerprint, and should be ignored by beginners when analyzing the spectrum. As a student, you should focus your analysis on the rest of the spectrum, that is the region to the left of 1400 cm^{-1}.



Graphics source: Wade, Jr., L.G. *Organic Chemistry*, 6th ed. Pearson Prentice Hall Inc., 2006

Carbon-Carbon Bond Stretching

- Stronger bonds absorb at higher frequencies:
  - C-C 1200 cm^{-1}
  - C=C 1660 cm^{-1}
  - C≡C 2200 cm^{-1} (weak or absent if internal)
- Conjugation lowers the frequency:
  - isolated C=C 1640-1680 cm^{-1}
  - conjugated C=C 1620-1640 cm^{-1}
  - aromatic C=C approx. 1600 cm^{-1}

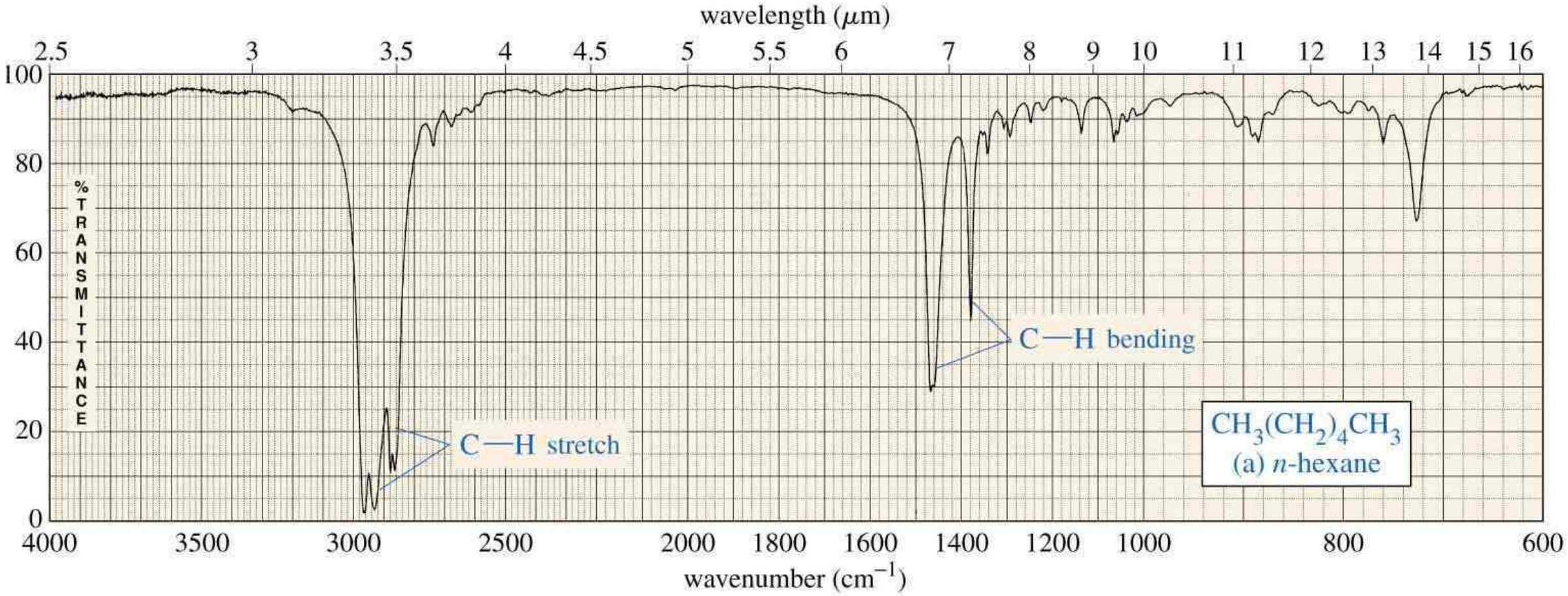
Carbon-Hydrogen Stretching

Bonds with more *s* character absorb at a higher frequency.

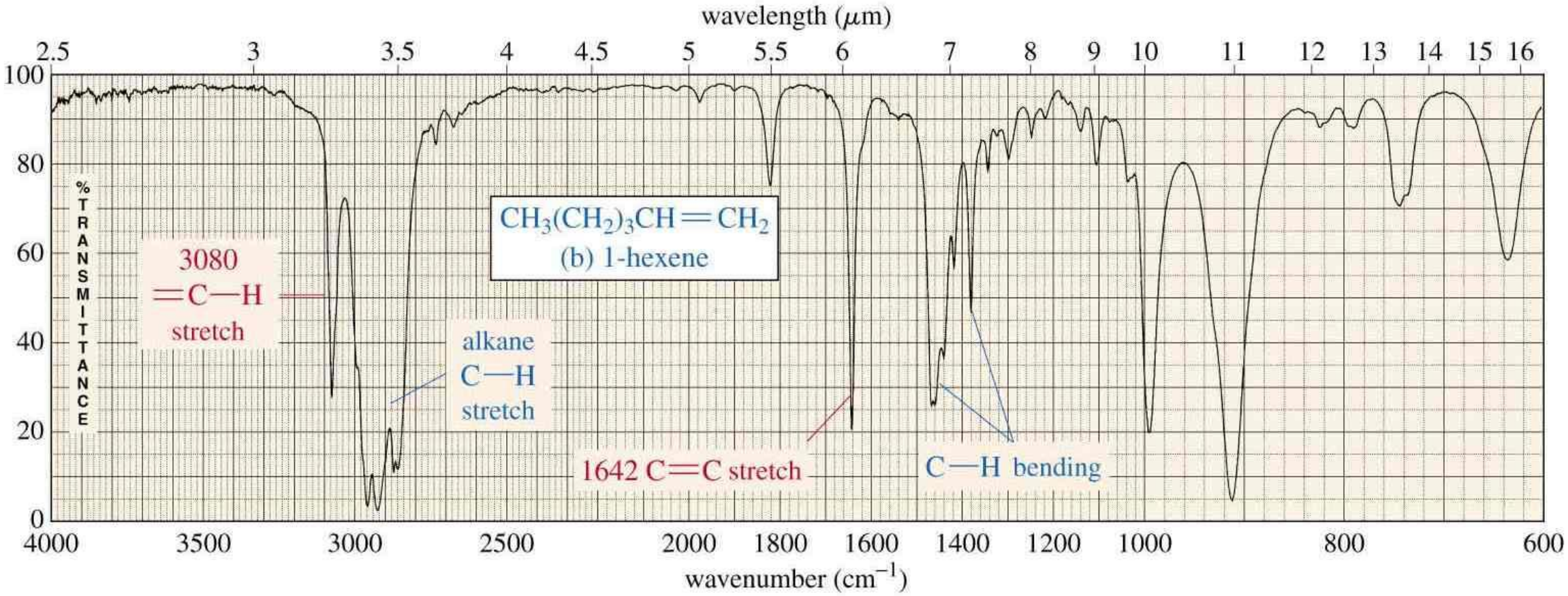
الروابط ذات الطابع s الأكثر امتصاصًا عند تردد أعلى.

- sp^3 C-H, just below 3000 cm^{-1} (to the right)
- sp^2 C-H, just above 3000 cm^{-1} (to the left)
- *sp* C-H, at 3300 cm^{-1}

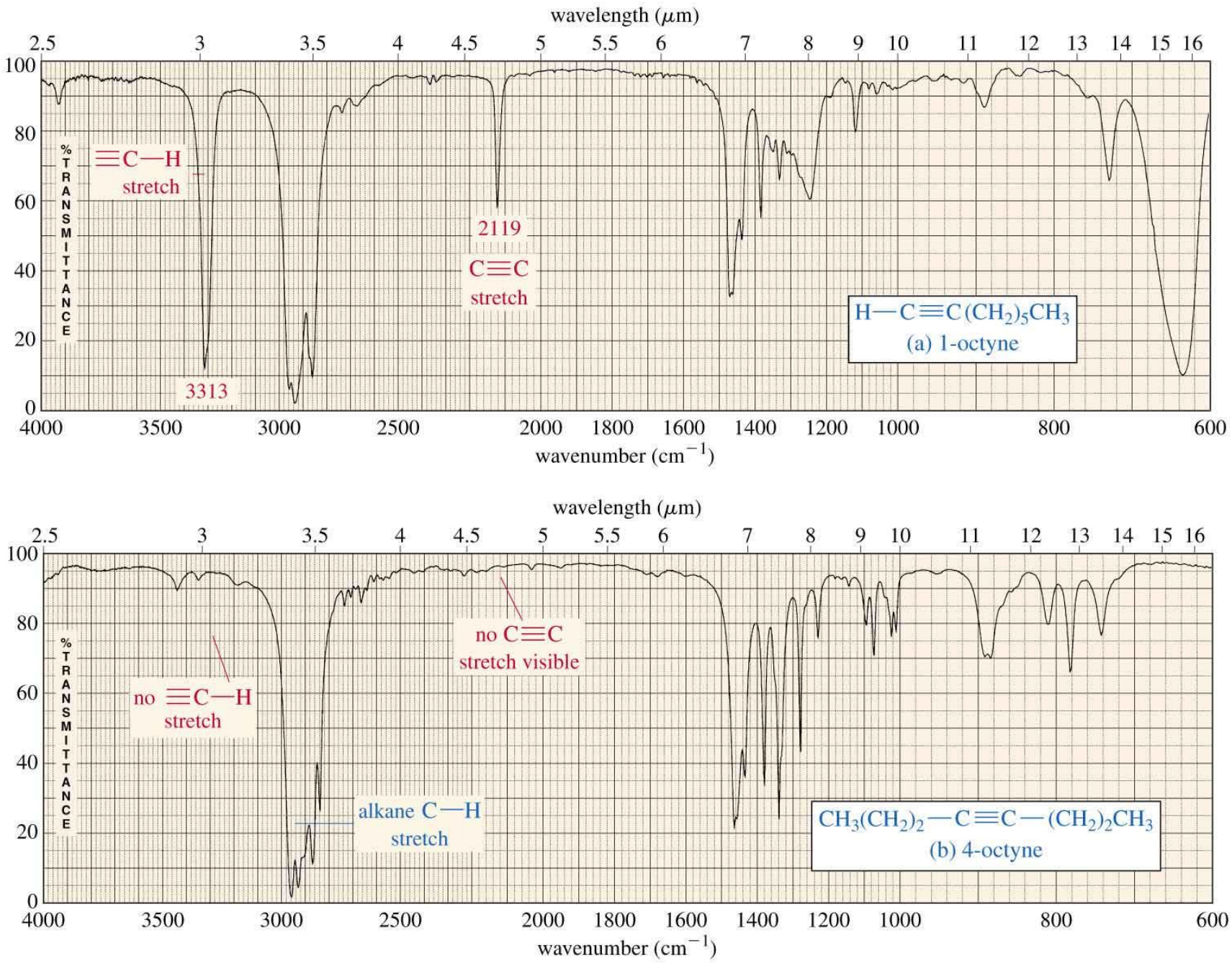
An Alkane IR Spectrum



An Alkene IR Spectrum



An Alkyne IR Spectrum



O-H and N-H Stretching

- Both of these occur around 3300 cm^{-1}, but they look different.
  - Alcohol O-H, broad with rounded tip.
  - Secondary amine (R_2NH), broad with one sharp spike.
  - Primary amine (RNH_2), broad with two sharp spikes.
  - No signal for a tertiary amine (R_3N)

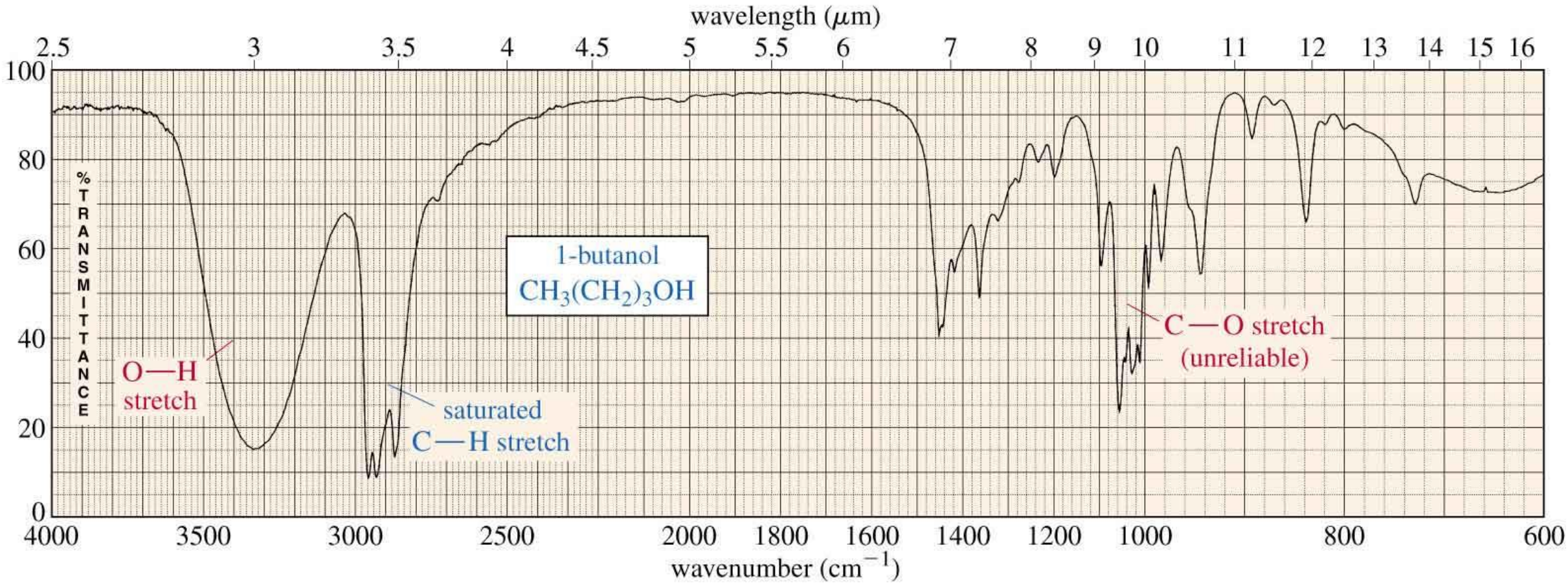
• يحدث كلاهما حول 3300 سم-1، لكنهما يبدوان مختلفين.

• الكحول O-H، واسع مع طرف منحني.

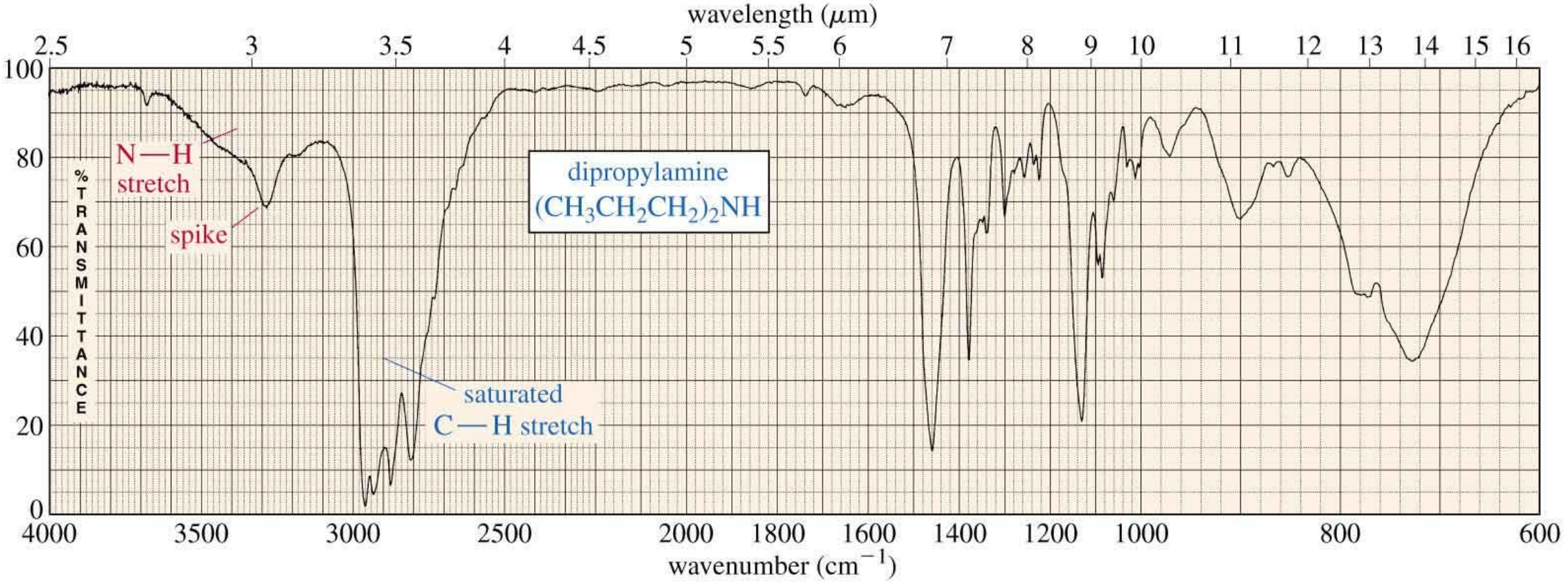
• الكحولي: عريض ذو طرف مستدير. الأمين O-H الثانوي (R,NH):

عريض مع قمة حادة واحدة. الأمين الأولي (RNH):
عريض مع قمتين حادتين.

An Alcohol IR Spectrum



An Amine IR Spectrum



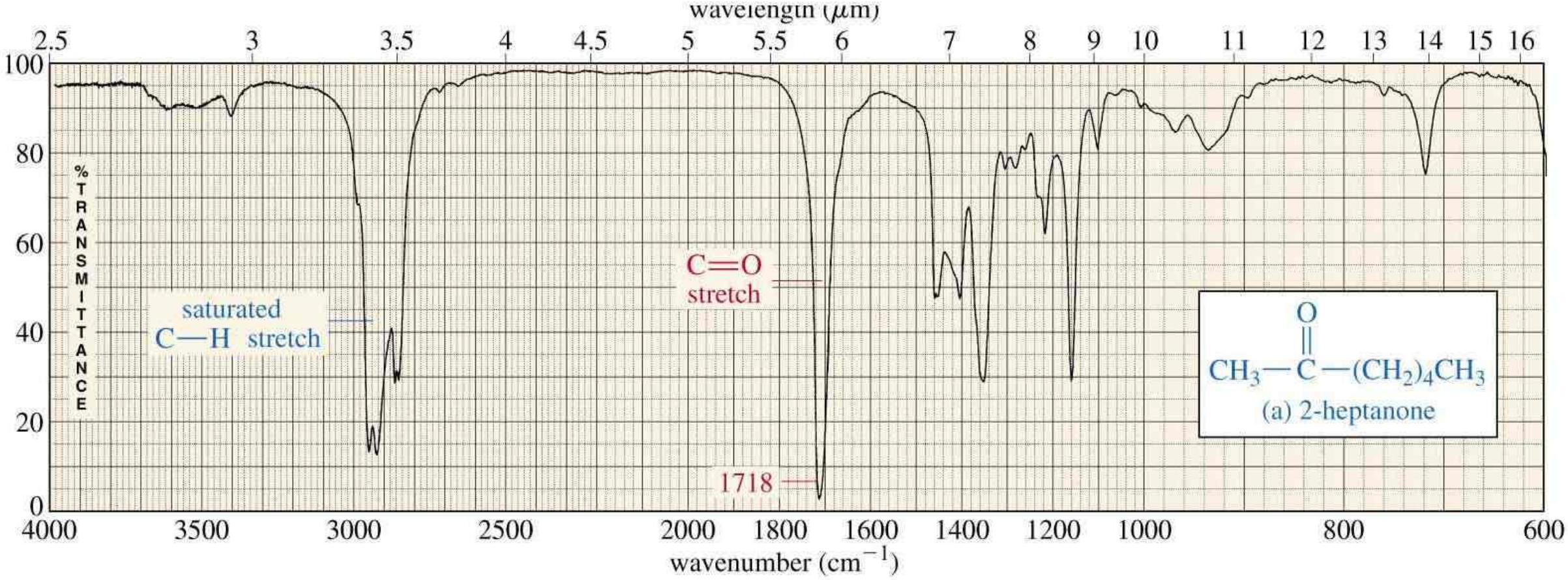
Carbonyl Stretching

- The C=O bond of simple ketones, aldehydes, and carboxylic acids absorb around 1710 cm^{-1}.
- Usually, it's the strongest IR signal.
- Carboxylic acids will have O-H also.
- Aldehydes have two C-H signals around 2700 and 2800 cm^{-1}.

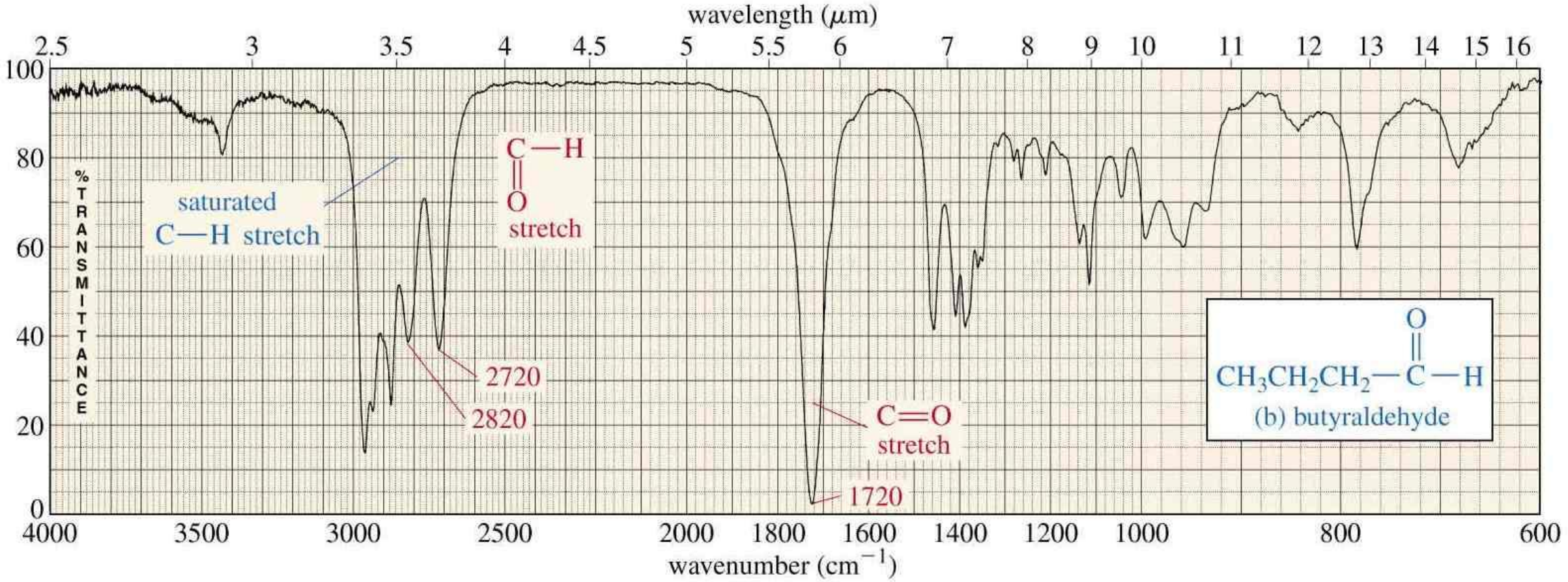
• تمتص رابطة C=O في الكيتونات البسيطة والألدهيدات والأحماض الكربوكسيلية عند حوالي 1710 سم-1. • عادةً ما تكون هذه أقوى إشارة في طيف الأشعة تحت الحمراء. • تحتوي الأحماض الكربوكسيلية أيضًا على مجموعة O-H.

• تحتوي الألدهيدات على إشارتين لرابطة C-H عند حوالي 2700 و2800 سم-1.

A Ketone IR Spectrum

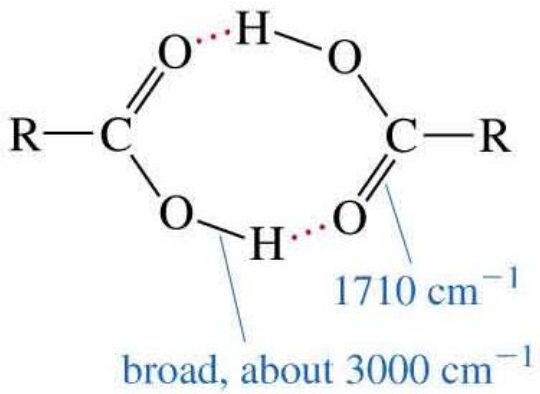


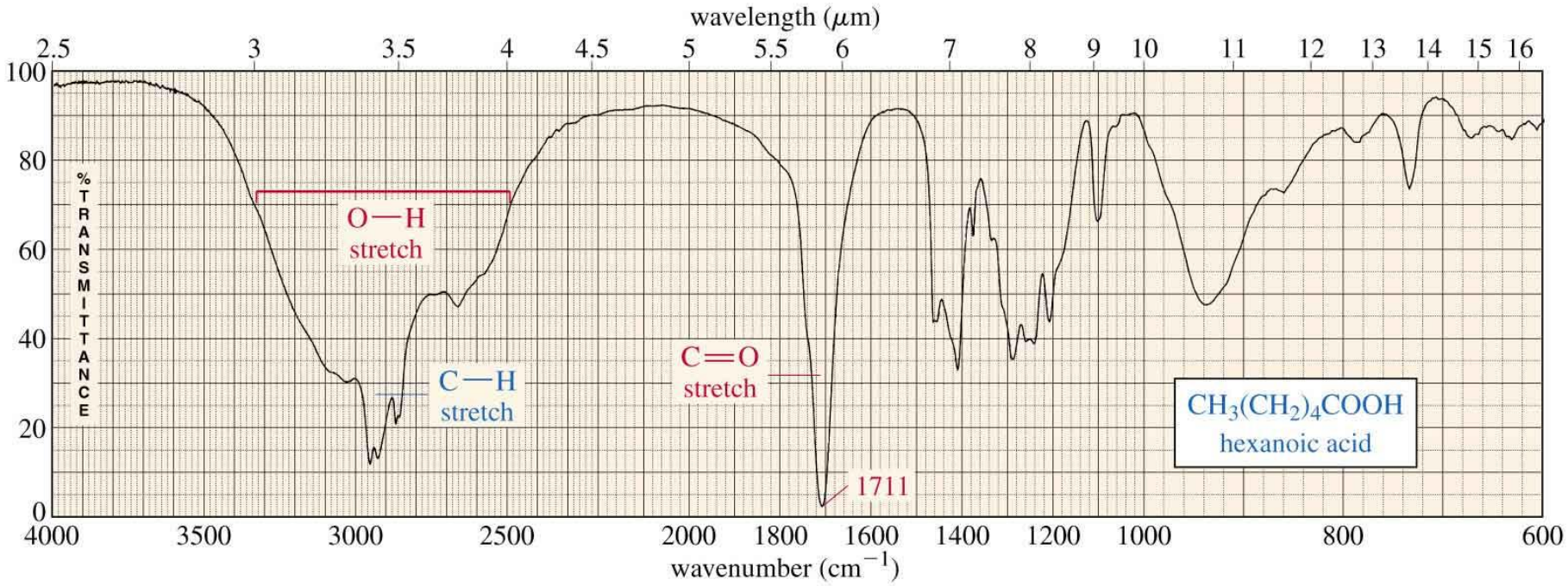
An Aldehyde IR Spectrum



O-H Stretch of a Carboxylic Acid

This O-H absorbs broadly, 2500-3500 cm^{-1}, due to strong hydrogen bonding.





Variations in C=O Absorption

- Conjugation of C=O with C=C lowers the stretching frequency to ~1680 cm^{-1}.
- The C=O group of an amide absorbs at an even lower frequency, 1640-1680 cm^{-1}.
- The C=O of an ester absorbs at a higher frequency, ~1730-1740 cm^{-1}.
- Carbonyl groups in small rings (5 C's or less) absorb at an even higher frequency.

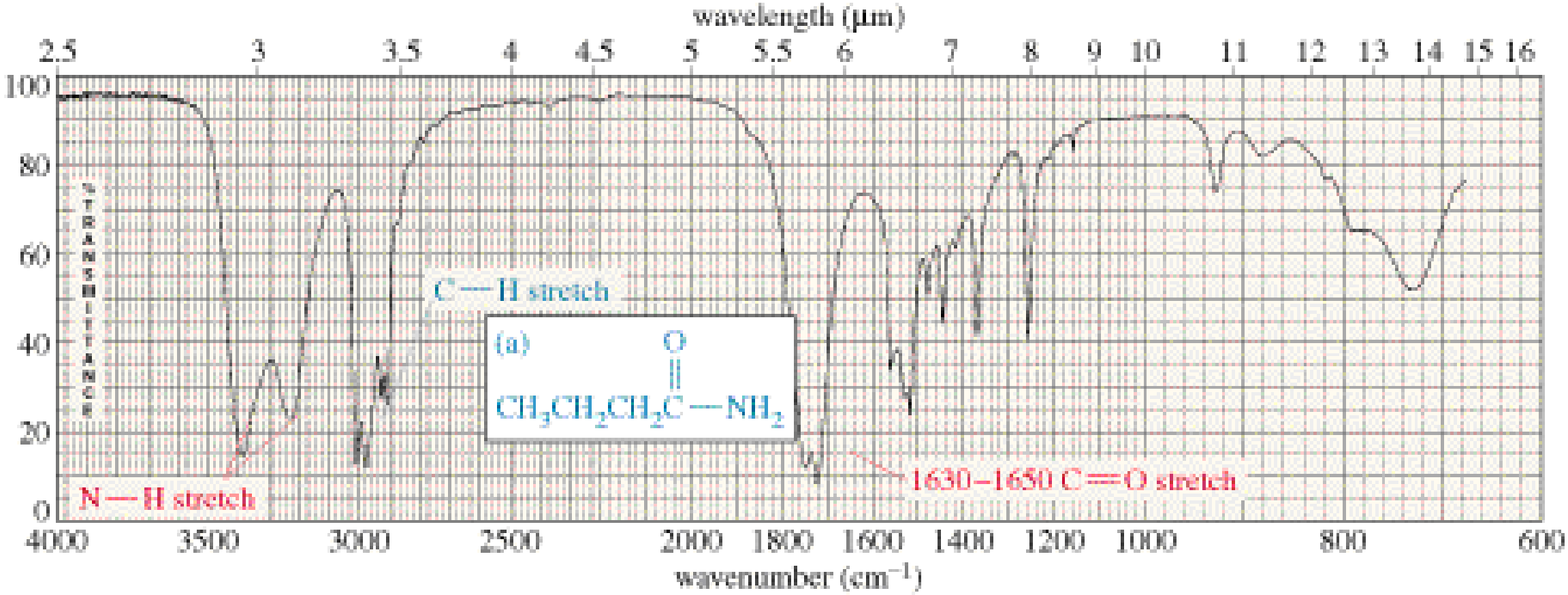
• اقتران C=O مع C=C يخفض تردد التمدد إلى ~1680 سم-1.

• تمتص مجموعة C=O في الأميد عند تردد أقل، 1640-1680 سم-1.

• تمتص مجموعة C=O في الإستر عند تردد أعلى، ~1730-1740 سم-1.

• تمتص مجموعات الكربونيل في الحلقات الصغيرة (٥ ذرات كربون أو أقل) عند تردد أعلى.

An Amide IR Spectrum



Carbon – Nitrogen Stretching

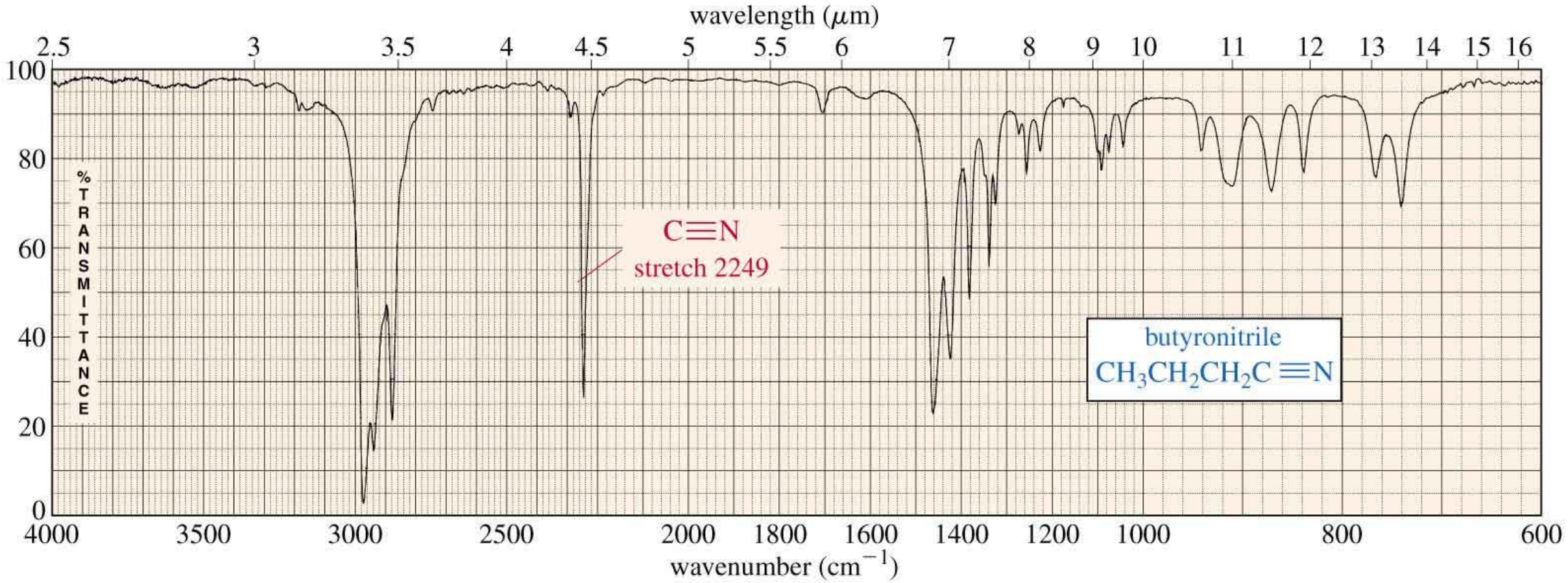
- C - N absorbs around 1200 cm^{-1}.
- C = N absorbs around 1660 cm^{-1} and is much stronger than the C = C absorption in the same region.
- C ≡ N absorbs strongly just *above* 2200 cm^{-1}. The alkyne C ≡ C signal is much weaker and is just *below* 2200 cm^{-1} .

• يمتص الرابط C-N عند حوالي ١٢٠٠ سم-1.

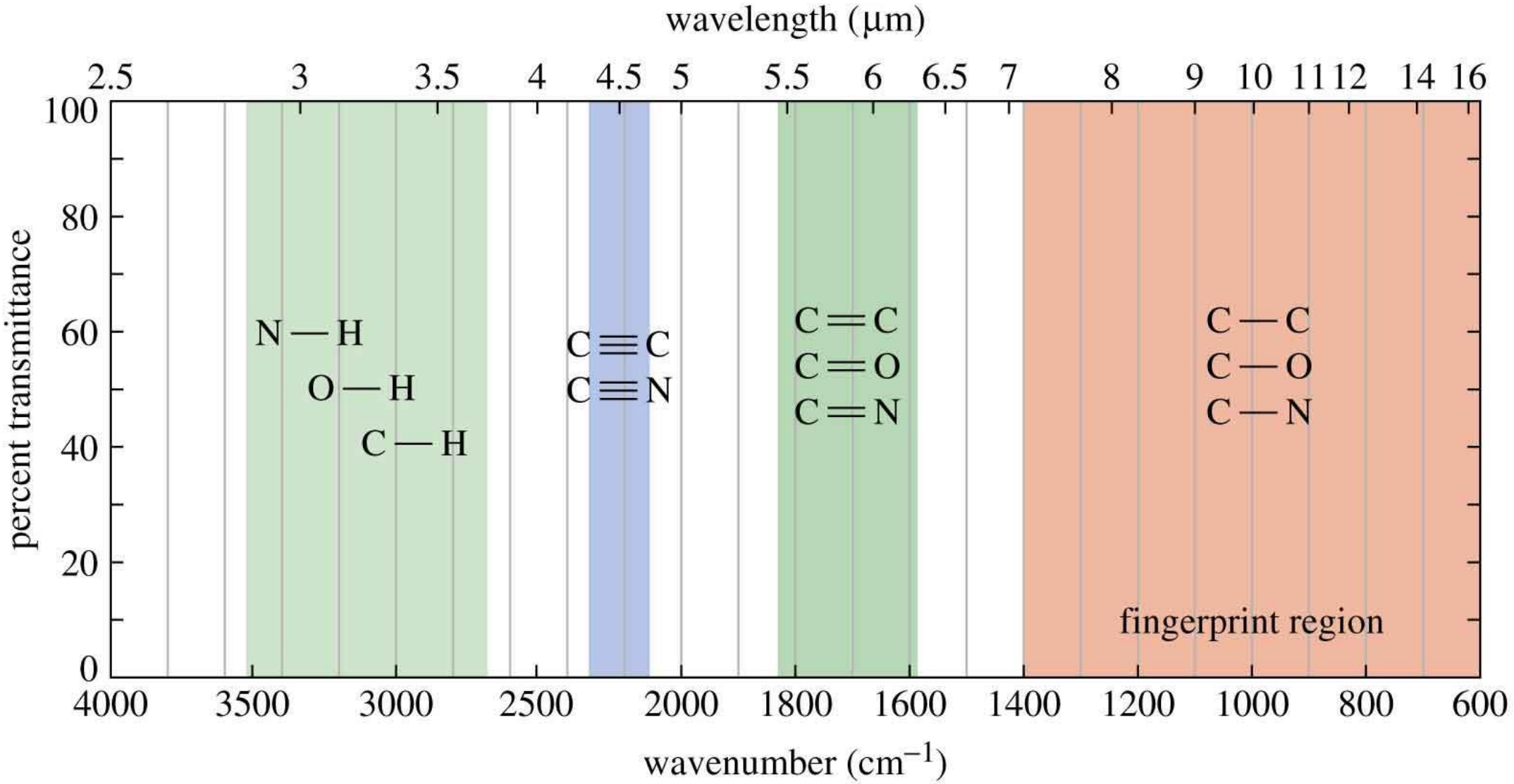
• يمتص C=N عند حوالي 1660 سم-1 وهو أقوى بكثير من امتصاص C= في نفس المنطقة.

• يمتص C=N بقوة فوق 2200 سم-1 بقليل. إشارة الألكاين C=C أضعف بكثير وتقع أسفل 2200 سم-1 بقليل.

A Nitrile IR Spectrum



Summary of IR Absorptions



Strengths and Limitations

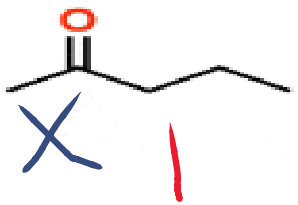
- IR alone cannot determine a structure.
- Some signals may be ambiguous.
- The functional group is usually indicated.
- The *absence* of a signal is definite proof that the functional group is absent.
- Correspondence with a known sample's IR spectrum confirms the identity of the compound.

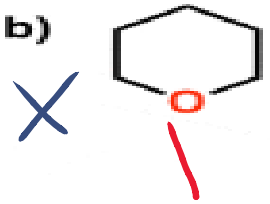
• لا يمكن تحديد البنية باستخدام الأشعة تحت الحمراء وحدها. • قد تكون بعض الإشارات غامضة. • عادةً ما يتم تحديد المجموعة الوظيفية. • غياب الإشارة دليل قاطع على غياب المجموعة الوظيفية.

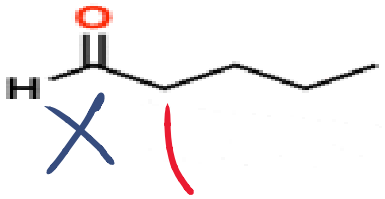
• مطابقة طيف الأشعة تحت الحمراء لعينة معروفة تؤكد هوية المركب.

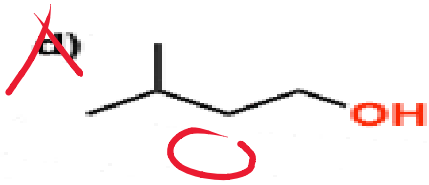
e

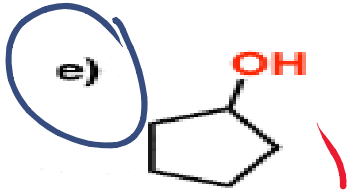
Which of these molecules best corresponds to the IR spectrum below?

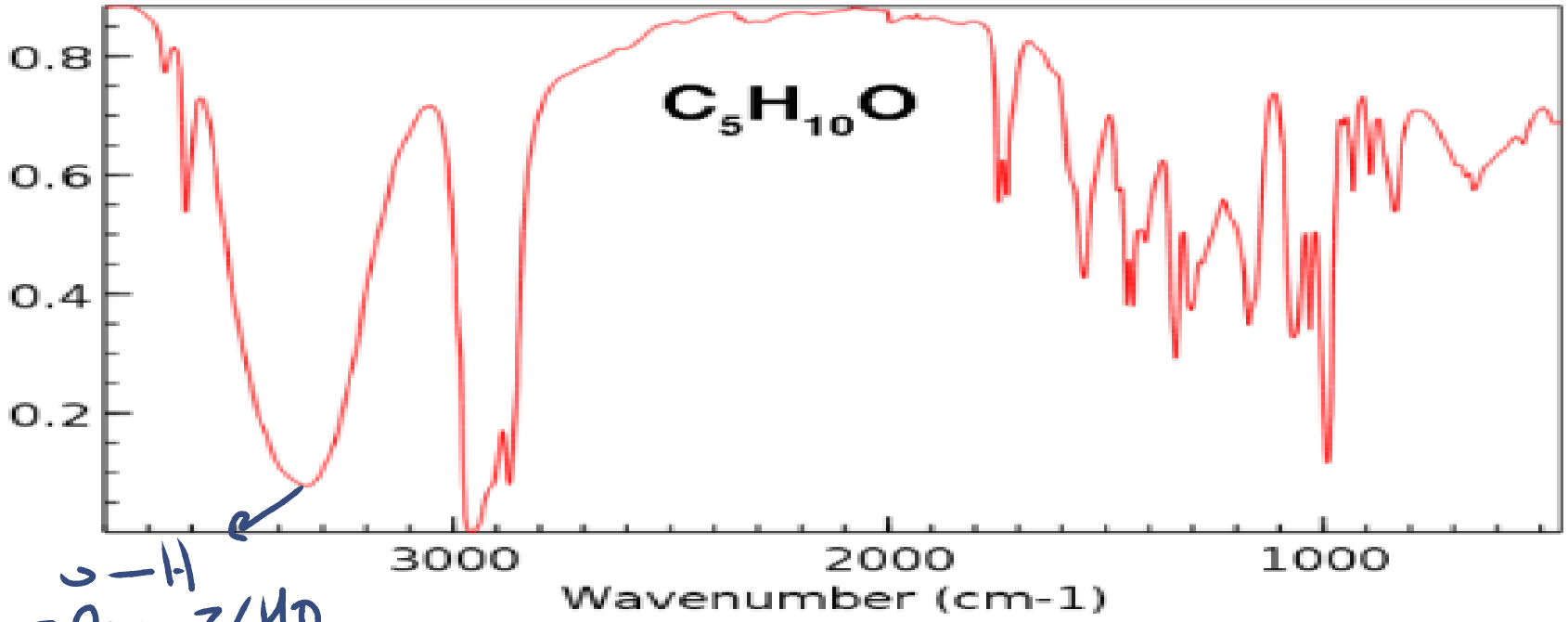
a) 

b) 

c) 

d) 

e) 



O–H
3200–3640
broad

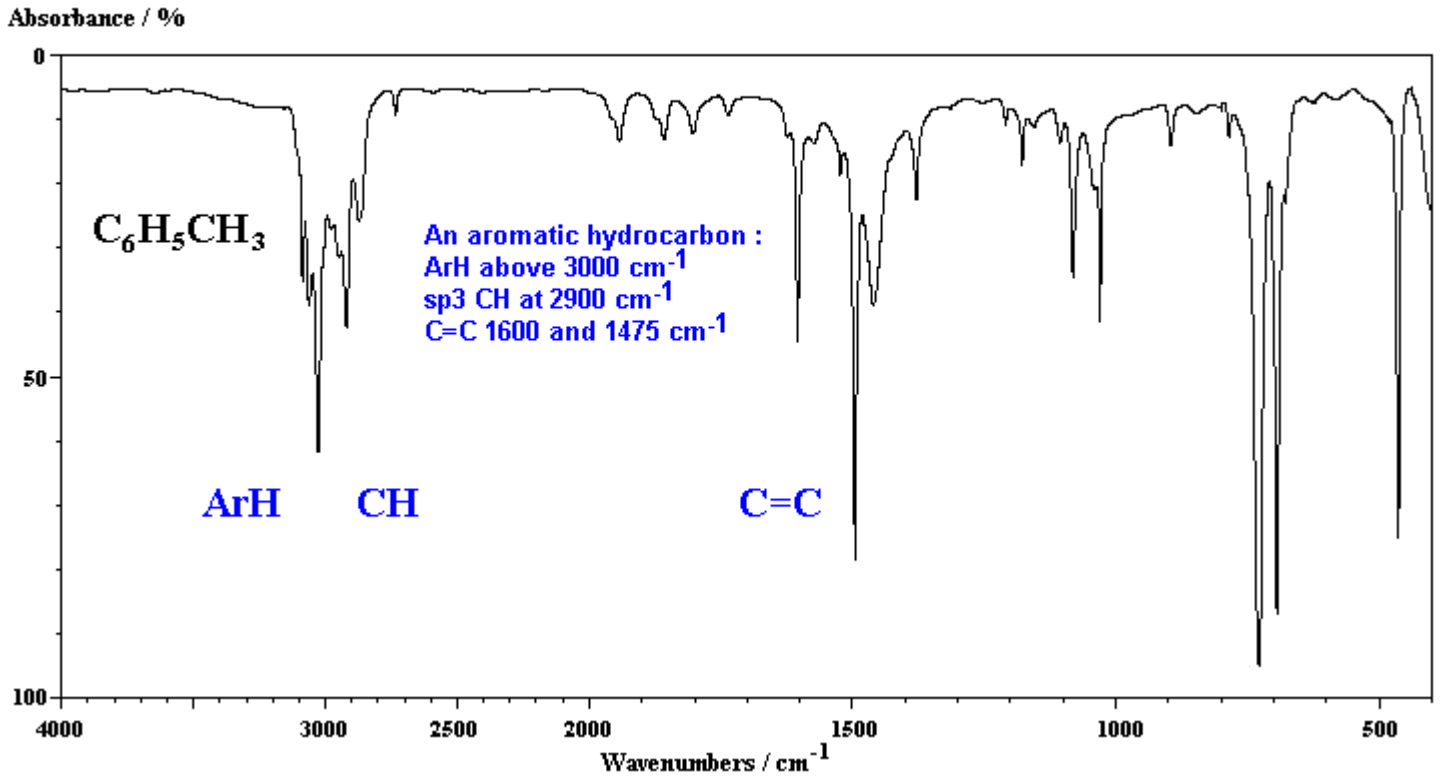
$IHD = \frac{1}{2}(2C + (2 - H))$

$= \frac{1}{2}(10 - 8) = 1$

ring

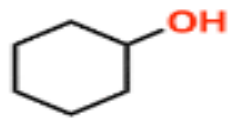
double bond

toluene, we can see both the aromatic and aliphatic CH stretches, and two absorptions for the aromatic C=C stretches.

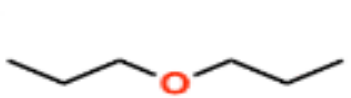


d

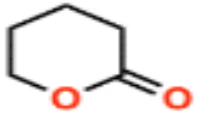
Which of these molecules best corresponds to the IR spectrum below?

a) 

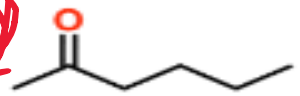
1

b) 

0

c) 

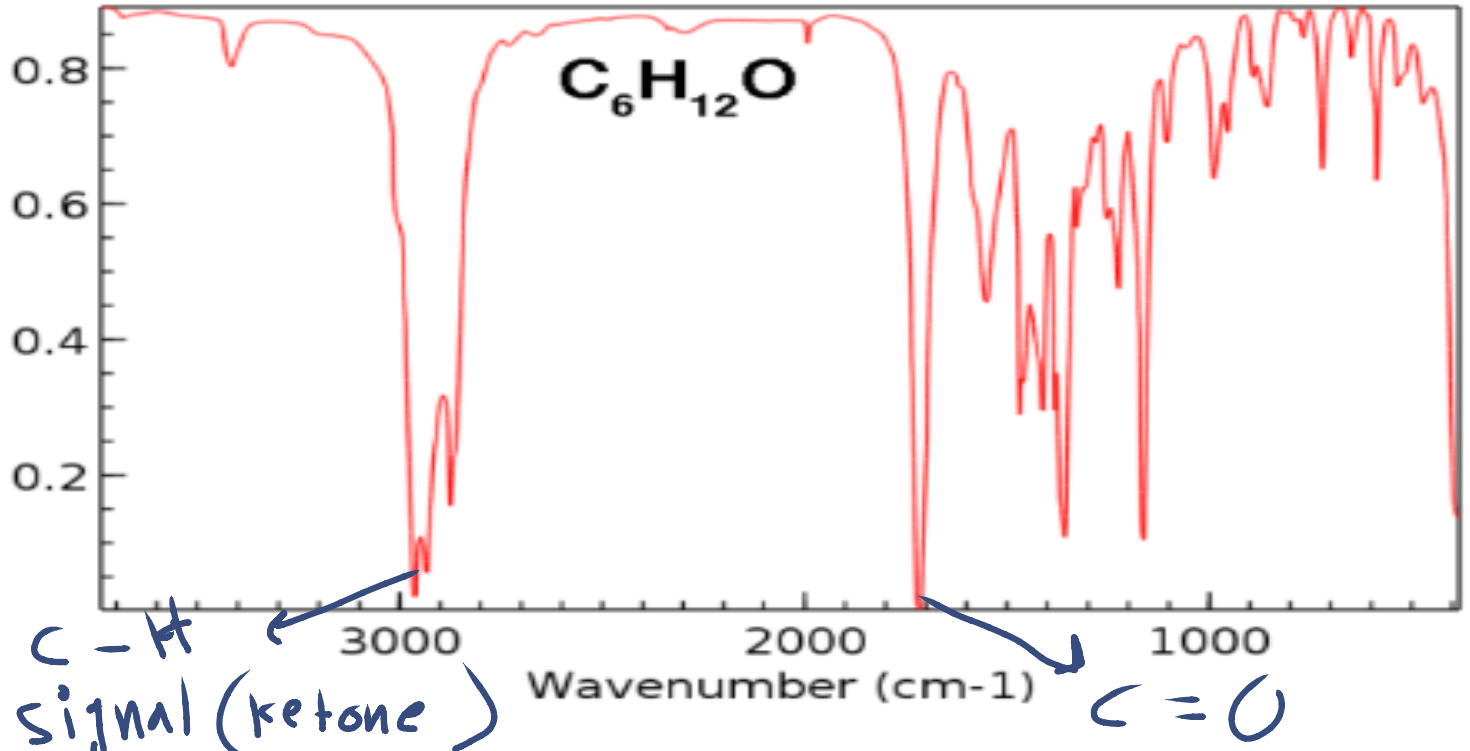
2

d) 

1

e)

1



C-H

one signal (ketone)

C=O

IHD = $\frac{1}{2}(2C+(2-H))$

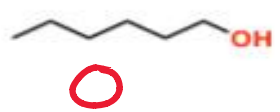
$= \frac{1}{2}(12+-10) = 1$

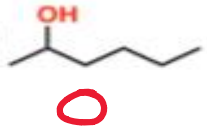
ring

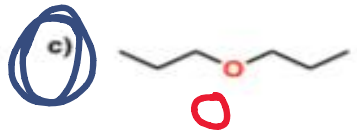
double bond

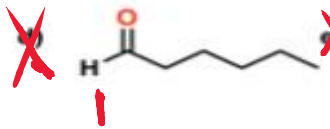
C

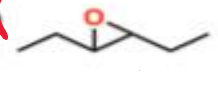
Which of these molecules best corresponds to the IR spectrum below with molecular formula $C_6H_{14}O$?

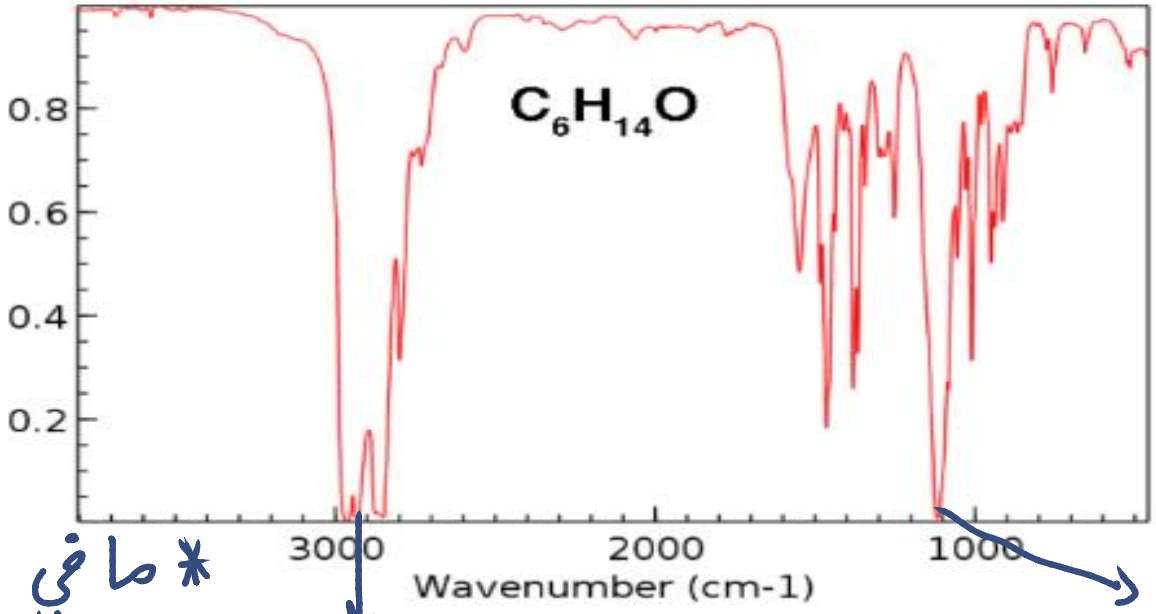
a) 

b) 

c) 

d) 

e) 



$$IHD = \frac{1}{2}(2C + (2 - H))$$
$$= \frac{1}{2}(12 + -12) = 0$$ → no ring or double bond

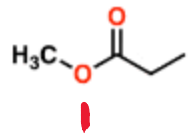
band في ما *
alcohol O-H N
X 3640 – 3200

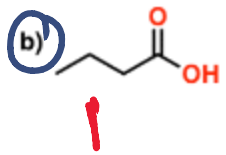
C-H

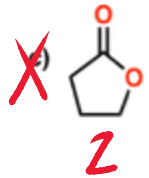
1050 – 1275 C–O
alcohol ↔ ether

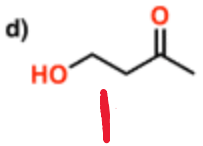
b

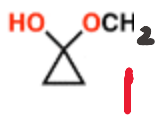
Which of these molecules best corresponds to the IR spectrum below?

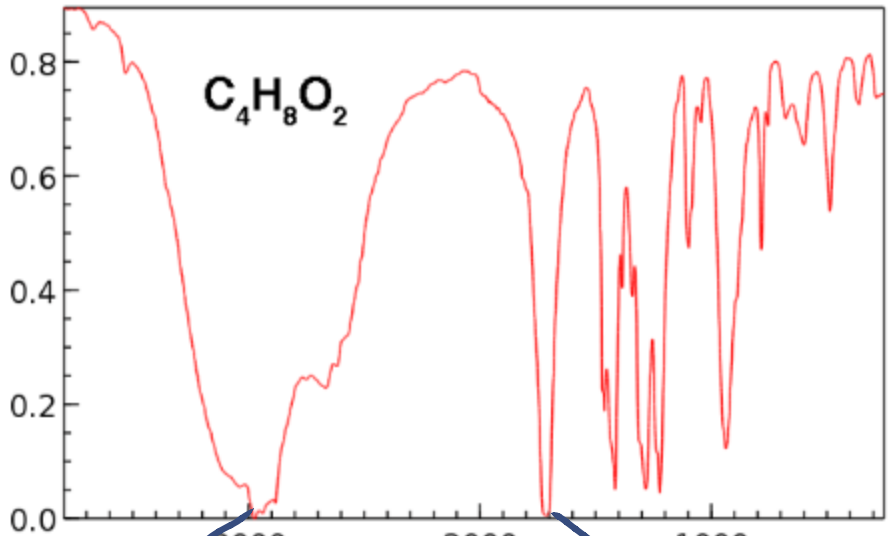
a) 

b) 

c) 

d) 

e) 



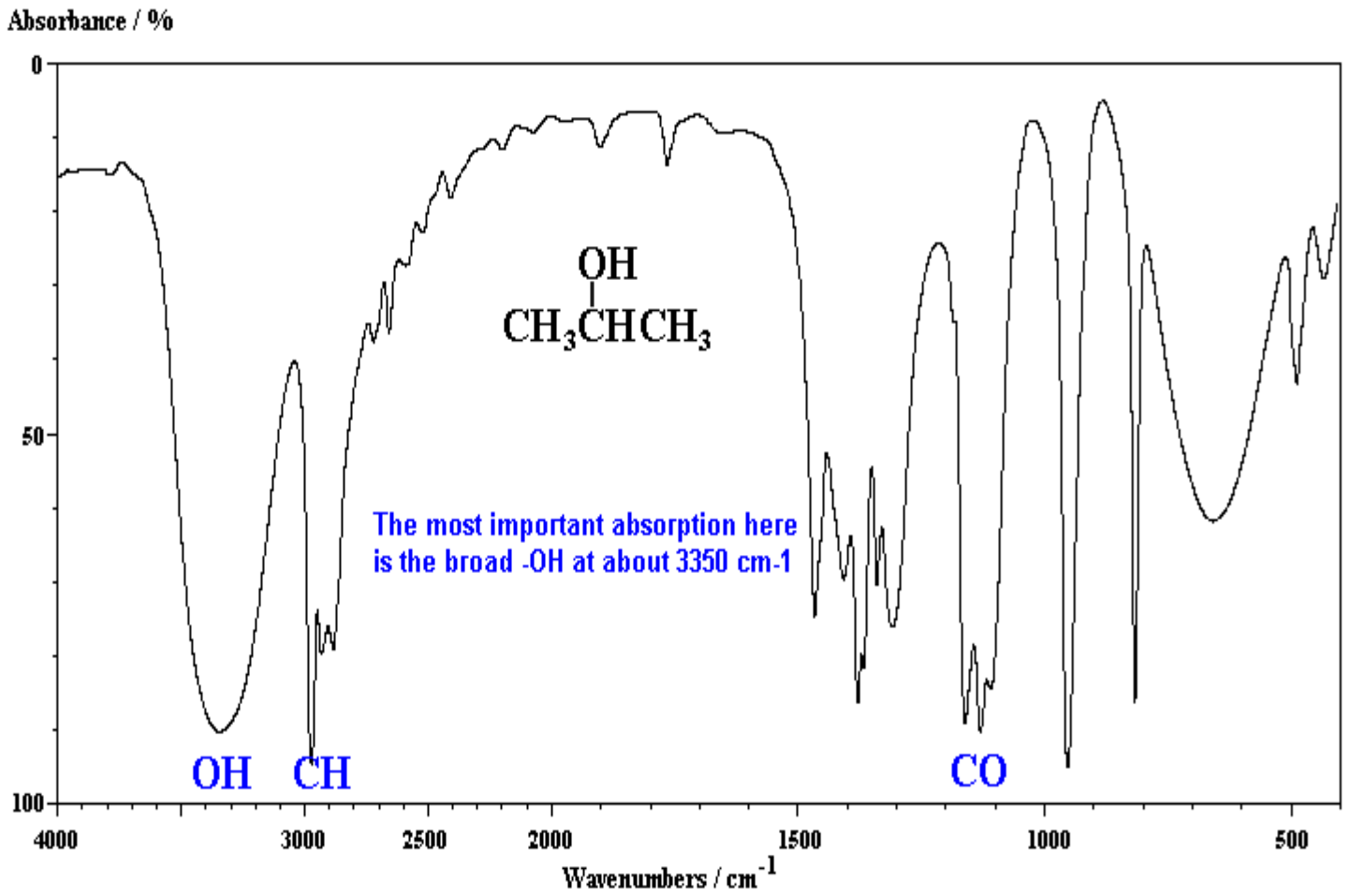
O-H
2500-3100
broad

C=O

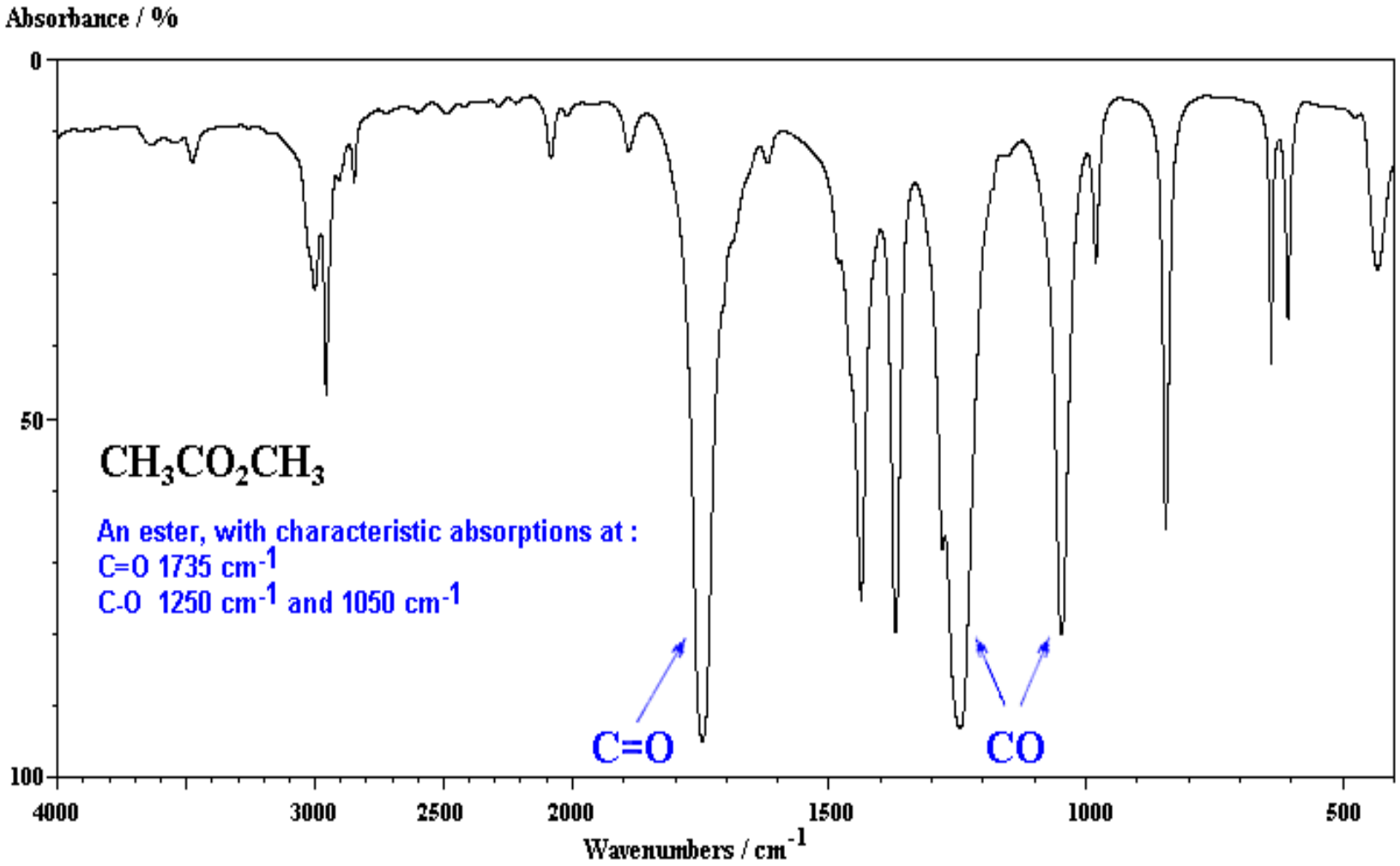
$IHD = \frac{1}{2}(2C + (2 - H))$

$= \frac{1}{2}(8 + -6) = 1$ → ring, double bond

An **alcohol**. The characteristic absorption of an alcohol, such as 2-propanol, is the broad band due to the hydrogen bonded -OH group around 3200-3400 cm



An **ester** has the following key absorptions, the C=O (here 1746 cm^{-1}) and typically two bands for the C-O (not always easy to identify, here at a sp^3 C-O and sp^2 C-O bonds.



This example is propionitrile, $CH_3CH_2C{\equiv}N$. This is is characterised by the strong and sharp C≡N at 2250 cm^{-1} (Note that this is in the same region as the alkyne C≡C).