

AXMEDOV VOXID NIZOMOVICH

**ORGANIK MODDALARNI
SPEKTRAL USULDA TADQIQ
QILISH**

AXMEDOV V.N.

Organik moddalarni spektral usulda tadqiq qilish.

Qo'llanmada mualliflar organik birikmalarning infraqizil spektrlarini atroflicha tahlil qilishni bayon qilishgan. Shuningdek, funkstional guruhlarning bir-biriga ta'siri natijasida yutilish spektr chiziqlarida bo'ladigan o'zgarishlarni tahlil qilishgan. Mualliflar qo'llanma so'ngida o'zlari tomonidan sintez qilingan oligo (poli)merlarning spektr tahlillarini izohlashgan.

Taqrizchilar:

H.B.Do'stov, kimyo fanlari doktori, professor, BuxMTI;
M.R.Amonov, texnika fanlari doktori, professor, BuxDU;

ANNOTATSIYA

Qo'llanmada muallif organik birikmalarning infraqizil spektrlarini atroflicha tahlil qilishni bayon qilishgan. Shuningdek, funkstional guruhlarining bir-biriga ta'siri natijasida yutilish spektr chiziqlarida bo'ladigan o'zgarishlarni tahlil qilishgan.

АННОТАЦИЯ

В учебной пособии автор описывают комплексный анализ инфракрасных спектров органических соединений. А также проанализировали изменения, происходящие в спектральных линиях поглощения в результате взаимодействия функциональных групп. В конце монографии автор комментируют спектральный анализ синтезированных ими олиго (поли) меров.

ANNOTATION

This methodic guide the author describe a comprehensive analysis of infrared spectra of organic compounds. And also analyzed the changes occurring in the spectral absorption lines as a result of the interaction of functional groups.

MUNDARIJA

KIRISH.....	5
IQ spektroskopiya usulining fizik-kimyoviy asoslari	7
Ko'p atomli molekularlarning tebranishlari	10
Qurilmalar turlari, sxemalar	12
IQ spektrometrlarini qurish va ishlash tamoyillari.....	12
Dispersiv spektrometrlar	12
Yagona va ikkita nurli sxemalar.....	13
Monoxromatorlar	14
Dispersiyon bo'lmagan qurilmalar	14
Infraqizil nurlanish manbalari	16
Infraqizil qabul qiluvchilar.....	17
Eksperimentning texnik asoslari: uzatish spektrlari, umumiy ichki aks ettirishning to'liq buzilgan spektri va diffuzion aks etish.....	17
Yutilish spektrlari.....	17
Gazlar	18
Suyuqliklar va eritmalar	18
Qattiq moddalar.....	19
Miqdoriy tahlil.....	19
Ichki standartlar.....	19
Differensial usul	20
Dastlabki ajratish operatsiyalarining ahamiyati	20
Ichki aks ettirishning buzilish usuli texnikasi	21
IAEBU spektrlarini olish uchun uskunalar	22
Namunalarni tanlash.....	22
Eritmalar va suyuqliklar bilan ishlash.....	23
Namuna tayyorlash texnikasi	23
Tabletkalarni tayyorlash.....	23
Spektrlarni suratga olish.....	24
Namunani tayyorlash usuli va suspenziyalardagi namunalardan (HCB, suyuq kerosin) o'tkazuvchanlik spektrlarini o'lchash.....	25
Suspenziya.....	25
KBr plitalarini maydalash	26
Namuna tayyorlash texnikasi va IAEBU spektrlarini o'lchash	27
Amaldagi materiallar.....	28
IAEBU spektroskopiyasining biriktirilishi.....	28
Ish uslubi	29
Spectrum One Spectrometer foydalanuvchi qo'llanmasi	29
Spektrometr qurilmasi	29
Seriy pivalatning IQ spektrlarini o'rganish	60
Xinonlarning uglevodorodlarga qaytarilish reaksiyasini IQ-spektroskopiya bilan o'rganish ..	65
Ilovalar	76
Adabiyotlar.....	129

KIRISH

Moddalarning tuzilishi va reakstion qobiliyatini o'rganishda fizikaviy tadqiqot usullari juda qimmatli muhim ma'lumotlarni beradi. Molekulaning tuzilishi, stereokimyosi va fizikaviy kattaliklarini aniqlashda fizikaviy tadqiqot usullari kompleks ravishda ishlatiladi va bu usullar bir-birini to'ldiradi.

Kimyoviy element va birikmalarning reakstion qobiliyati va ularning miqdoriy xarakteristikasiga kvant kimyosining keyingi bosqich rivoji imkoniyat yaratdi. Hozirgi zamon kimyo fani aniq ilmiy yo'nalish bo'lib, o'zining muammolarini fizikaviy-matematik apparat yordamida yechadi. Kimyo fani nazariy asosining yaratilishi uning amaliy imkoniyatini rivojlantirdi va kimyo yutuqlarini ilmiy bashorat qilishga olib keldi.

Kimyo fanining sifat va miqdoriy analitik usullari XVIII asrda yaratilgan bo'lsa ham, ular XIX asrda fizikaviy kimyo tarmoqlaridan elektrokimyoviy va termokimyoviy usullar bilan boyidilar. Ammo bularning barchasi XX asrda kimyo taraqqiyoti uchun progressiv o'rin egallash imkoniyatini bermadi. XIX asr oxirlarida kimyoviy tadqiqotlarni amalga oshirishda fizika fani o'zining spektral-optik usullarini ko'llab yangi revolyustion bosqich yaratdi. XX asrdagi kimyo fani keskin yuksalishining asosiy omillaridan biri zamonaviy fizik va fizik-kimyoviy tadqiqot usullarining (UB-, IK-, EPR-, YaMR spektroskopiyasi, rentgen-spektral, rentgen-faza va rentgenstrukturaviy tahlil, mass-spektrometriya, nishonlangan atomlar usuli, aktivastion tahlil, magnitkimyoviy kabi usullar) yaratilishidir.

Zamonaviy tadqiqot usullarining kimyoda qo'llanilishi kimyoviy moddalarning aniq tarkibini hisoblash emas, balki juda murakkab tuzilishga ega birikmalarning nozik molekulyar strukturasi isbotlash, kimyoviy reaksiya jarayoni yo'nalishiga xar xil faktorlarning ta'sirini o'rganish imkoniyatini yaratib berdi.

Organik moddalarning tuzilishi va reaksiyaga kirishish qobiliyatini sintez qilingan maxsulot tarkibini o'rganishda fizik kimyoviy tadqiqot usullari eng

muhim ma'lumotlarni beradi. Molekulaning tuzilishi, fazoviy holati, fizikaviy doimiyliklari va boshqa ko'rsatkichlarni aniqlashda fizikaviy tadqiqot usullarining bir qancha turlari ishlatiladi. Ayrim usullar keng tarqalmagan bo'lib, lekin ulardan olinadigan natija kimyo fani uchun ahamiyatlidir. Masalan, gaz elektronografiyasi va mikroto'lqinli spektroskopiya usullari shular jumlasidandir.

Kimyoviy tadqiqotlarda keng tarqalgan va amaliy jihatdan ahamiyatga ega bo'lgan usullardan optik (ultrabinafsha, infrakizil), radiospektroskopiya (yadro magnit rezonans, elektron paramagnit rezonans) va mass-spektrometriya hisoblanadi. Molekulaning tuzilishi, fazoviy tadqiqot usullarini ikki qismga bo'lish mumkin. Birinchi qismga optik va radioskopik usullar, ikkinchi qismga esa molekulaning geometrik tuzilishini va fazoviy holatini aniqlovchi usullar kiradi.

Bu usullar moddalarning optik xossalaridan foydalanishga asoslangan. Bu usul keyingi vaqtlarda, ayniqsa, nisbatan past temperaturada boradigan jarayonlarda keng qo'llanilmoqda.

Bular orasida eng ko'p qo'llaniladigan spektrofotometrik usuldir. Spektrofotometrik usulda SF-4, SF-4A, SF-16, SF-26M, SF-40 kabi asboblardan foydalaniladi. Bu usulda tarqalayotgan, yutilayotgan, cheklanayotgan (qaytgan) va yoyilayotgan nur (modda tomonidan berilgan yoki unga berilgan nurning) intensivligining to'lqin uzunligi bilan o'zgarishi tekshiriladi va nurning qaysi to'lqin uzunligida eng ko'p (maksimal) yutilishi aniqlanadi. So'ng tajribalar shu to'lqin uzunligida olib boriladi.

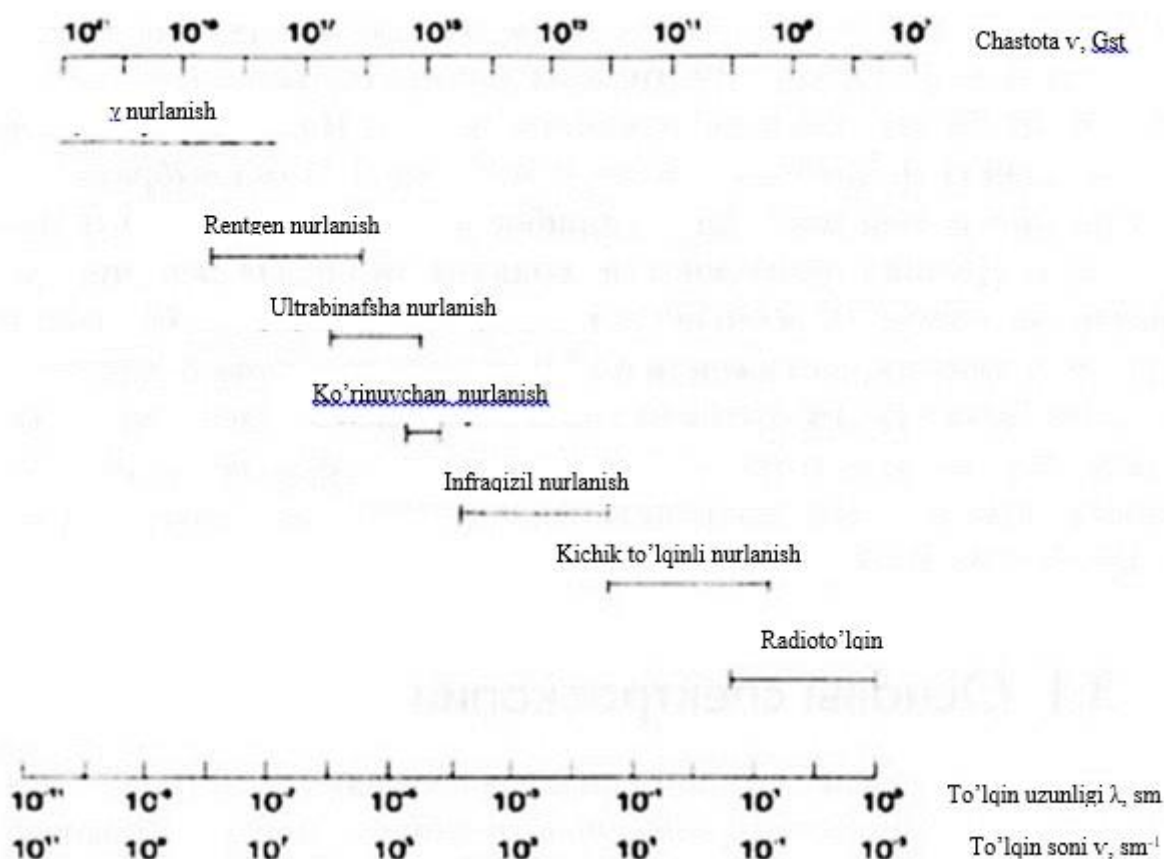
Mazkur qo'llanma infraqizil spektroskopiyadan foydalanish imkoniyatlari yoritilgan bo'lib, iqtidorli talabalar, magistrantlar va ilmiy tadqiqotchilar uchun foydali bo'ladi deb xisoblaymiz. Qo'llanmani yaxshilash borasidagi fikrlarni mualliflar mamnuniyat bilan qabul qiladilar.

Muallif.

IQ spektroskopiya usulining fizik-kimyoviy asoslari

Optik spektroskopiya. Infraqizil spektroskopiya (IQ) va Raman spektroskopiyasi (RS)

Spektroskopik tahlil usullari materiyaning elektromagnit nurlanish bilan o'zaro ta'siriga asoslangan usullar deb ataladi. Spektroskopiyada ishlatiladigan eng muhim tushunchalardan biri bu spektr tushunchasidir. Spektr - bu atomlar yoki molekulalarning bir energetik holatdan ikkinchisiga o'tish paytida so'rilib, ajralib chiqqan yoki tarqalgan elektromagnit tebranishlar energiyasining kvantlari ketma-ketligi.



1. rasm. Elektromagnit spektr sohalari, [1], 152 b.

Shuni ta'kidlash kerakki, elektromagnit spektrning inson ko'zi tomonidan qabul qilinadigan sohasi butun diapazoniga nisbatan juda kichikdir. Radiatsiyaning moddalar bilan o'zaro ta'siri jarayonida yuzaga keladigan jarayonlarning tabiati har xil spektral sohalarda turlicha. Shu munosabat bilan

spektroskopik tahlil usullari ishlatilgan nurlanishning to'liq uzunligiga (energiyasiga) qarab tasniflanadi.

Shu bilan birga, optik spektroskopiya o'rganilayotgan ob'ektlarga ko'ra bo'linadi: atom va molekulyar [2, 8-9 b.]. Atom spektroskopiya moddaning elementar tarkibini sifat va miqdoriy tahlilini o'tkazish uchun ishlatilishi mumkin, chunki har bir elementning o'ziga xos noyob energiya to'plami va atomdagi elektron sathlar orasidagi o'tish intensivligi mavjud.

Molekulyar spektroskopiya ma'lumotlari yordamida molekulalar va qattiq jismlarning elektron tuzilishi, shuningdek ularning molekulyar tuzilishi to'g'risidagi ma'lumotlarni ajratib olish mumkin. Shunday qilib, infraqizil (IQ) spektroskopiya va Raman spektroskopiya (RS) ni o'z ichiga olgan tebranish spektroskopiya usullari moddadagi bog'lanishlarning tebranishlarini kuzatishga imkon beradi. IQ va Raman spektridagi chiziqlar to'plamri moddaning o'ziga xos xususiyati bo'lib, inson barmoq izlari kabi. Agar uning tebranish spektri allaqachon ma'lum bo'lsa, ushbu spektrlardan moddani aniqlash mumkin. Bundan tashqari, IQ va Raman spektrlari o'rganilmagan molekulalarning simmetriyasini va tuzilishini aniqlaydi. Spektrlardan topilgan asosiy tebranishlarning chastotalari moddalarning termodinamik xususiyatlarini hisoblash uchun zarurdir. Spektrdagi chiziqlar intensivligini o'lchash miqdoriy tahlil qilish, kimyoviy muvozanat va kimyoviy reaksiyalar kinetikasini o'rganish va texnologik jarayonlarning borishini nazorat qilish imkonini beradi.

1 - jadval

Spektroskopik usullarning o'zaro bog'liqligi va elektromagnit spektr sohalari [1, 153 b.]

Spektroskopiya usuli	Spektr chegarasi	Energiyaning o'zgarishi
Yadroviy fizik	0,005 - 1,4 A	Yadro
Rentgen	0,1 - 100 A	Ichki elektron
Vakuumli UB-spektroskopiya	10 - 180 nm	Valent elektron
UB-spektroskopiya	180 - 400 nm	Valent elektron
Spektroskopiya	400 - 780 nm	Valent elektron

ko`rinadigan soha		
Yaqin IQ-spektroskopiya	780 - 2500 nm	Molekula (tebranma energiya)
IQ-spektroskopiya	4000 - 400 sm^{-1}	Molekula (tebranma-aylanma energiya)
Mikroto`lqinli spektroskopiya	0,75 - 3,75 mm	Molekula (aylanma energiya)
Elektron paramagnitrezonans	3 sm	Toq elektron(magnit maydonda)
Yadro magnit rezonans	0,6 - 10 m	Yadro spinlari (magnit maydonda)

Radiatsiya oqimining moddalar bilan o'zaro ta'siri natijasida oqimning intensivligi (I_0) yutilish (I_A qiymati bo'yicha), aks ettirish (I_R) va tarqalish (I_S) jarayonlari tufayli kamayadi. Ushbu qiymatlar va moddadan o'tgan I oqim intensivligi o'rtasidagi bog'liqlik quyidagi bog'liqlik bilan ifodalanadi:

$$I_0 = I + I_A + I_R + I_S \quad (1)$$

Spektrning infraqizil sohasida moddaning nurlanish bilan o'zaro ta'siriga asoslangan usullar yutilish, ya'ni, nurlanishni yutish hodisasiga asoslangan. Ushbu spektral sohada emissiya spektrlarini olish va qayd etishdagi qiyinchiliklar tufayli emissiya usullari qo'llanilmaydi.

IQ sohasida foton energiyasini tavsiflash uchun ko'pincha to'lqin raqami deb nomlanadigan miqdor ishlatiladi:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}.$$

Uning o'lchamlari sm^{-1} , ya'ni, bu 1 sm segmentga to'g'ri keladigan to'lqin uzunliklarining soni, to'lqinlar soni energiyaga mutanosib:

$$E = h\nu \quad (3)$$

IQ spektroskopiya yutilish (yoki uzatish) spektri koordinatalarda optik zichlikda (yoki uzatish intensivligida) - to'lqinda ko'rsatilgan.

Atom va molekulyar spektrlarning tuzilishi. Aylanma va tebranish spektrlari.

Atomlar alohida spektral chiziqlar - chiziqli spektrlardan tashkil topgan diskret spektrlar bilan tavsiflanadi. Ulardagi spektral chiziqlar soni tashqi elektronlar qobig'idagi elektronlar sonining ko'payishi bilan o'sib boradi.

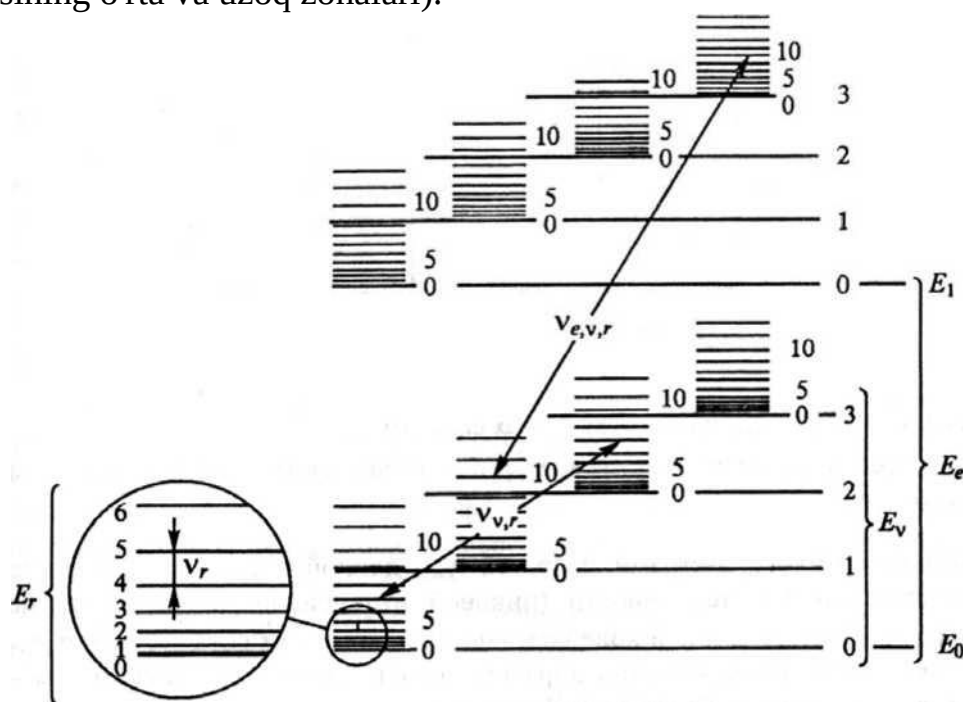
Radiochastota diapazonidagi va uzoq infraqizil sohadagi molekulalarning spektrlari chiziqli xarakterga ega bo'lib, o'rta va yaqin infraqizil, UB va ko'rinadigan sohada chiziqli spektrlar kuzatiladi [3, 206-bet].

Molekulyar spektrlarda spektrlarning paydo bo'lishi molekulada uch xil harakatning mavjudligi bilan bog'liq: elektron, tebranish va aylanish. E molekulasi energiyasi taxminan elektron E_e , tebranish E_v va aylanish E_r

energiyalari yig'indisi sifatida ifodalanishi mumkin:

$$E = E_e + E_v + E_r \quad (4)$$

Ushbu energiya turlari sezilarli darajada farq qiladi $E_e \gg E_v \gg E_r$. (4) ifodaga kiritilgan energiyalarning har biri kvantlanadi, ya'ni, u diskret energiya sathining ma'lum bir to'plamiga mos keladi. Oddiylik uchun u faqat ikkita elektron darajani ko'rsatadi E_e . Har bir elektron sathning E_v tebranish darajalari va har bir tebranish sathining E_r aylanish darajalari mavjud. Molekuladagi elektronlarning energiyasi o'zgarganda, tebranish va aylanish energiyalari bir vaqtning o'zida o'zgaradi va elektronlar o'rniga elektron-tebranish-aylanish o'tishlari kuzatiladi. Ushbu o'tishlarga mos keladigan spektral chiziqlarning chastotalari $\nu_{evr} = \nu_e + \nu_v + \nu_r$ ifodasi bilan aniqlanadi. Bunday chiziqlar soni juda ko'p bo'lganligi sababli, odatda elektron spektr deb ataladigan elektron-tebranish-aylanish spektri keng bir-birining ustiga chiqib ketadigan chiziqlar shaklini oladi. Elektron emissiya va yutilish spektrlari 50-2500 nm (UB, ko'rinadigan va IQ sohalari yaqinida) oralig'ida kuzatiladi. Xuddi shu sababli, tebranish spektrlari ham chiziqli tuzilishga ega ($30\text{-}40 \cdot 10^{-2} \text{ sm}^{-1}$, IQ chegarasining o'rta va uzoq zonalari).



2- rasm. Diatomik molekulaning energiya sathlari diagrammasi.

Ko'p atomli molekulalarning tebranishlari

Uch o'lchovli kosmosdagi molekulalarning barcha mumkin bo'lgan holatlari tarjima, aylanish va tebranish harakatiga tushiriladi [1, 236 b.].

N atomdan iborat molekula faqat $3N$ harakat erkinligiga ega. Ushbu erkinlik darajalari harakat turlari o'rtasida molekula chiziqli yoki yo'qligiga qarab har xil yo'llar bilan taqsimlanadi. Ikkala turdagi molekulalar uchun 3 ta holat erkinligi darajasi va chiziqli bo'lmagan molekulalar uchun aylanish darajalarining soni 3 ga, chiziqli molekulalar uchun esa - 2. Shunday qilib,

erkinlikning tebranish darajalarining ulushi (3-rasm) quyidagicha:

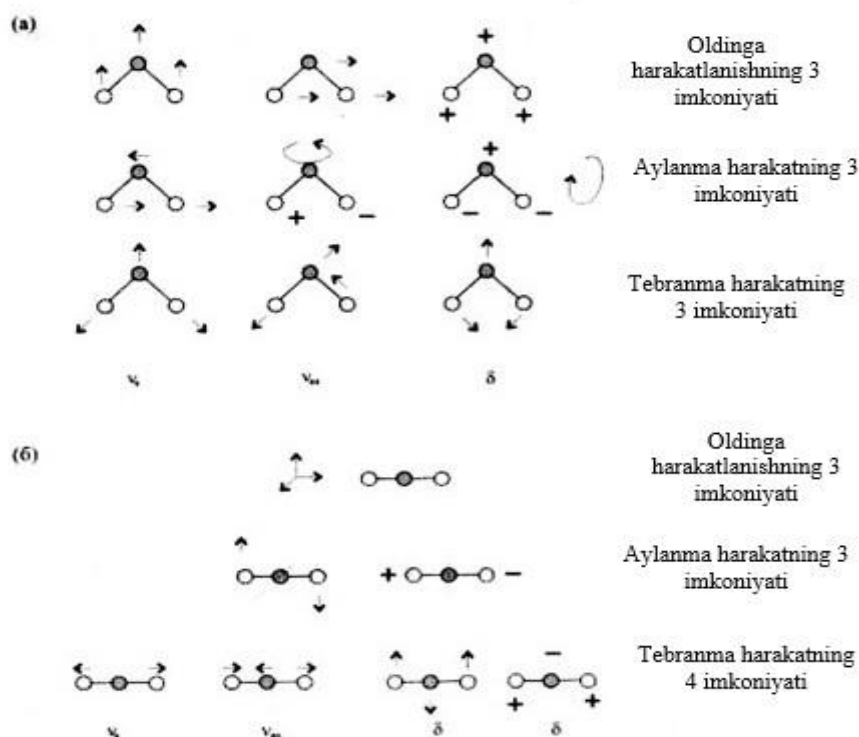
Chiziqli molekularlar uchun $3N-5$ erkinlik darajasi, chiziqli bo'lmagan molekularlar uchun $3N-6$ erkinlik darajasi.

Molekulaning asosiy tebranish usullari normal tebranishlar deyiladi. Aniqroq aytganda, normal tebranishlar bir-biridan mustaqil ravishda sodir bo'ladigan tebranishlardir. Demak, normal tebranish qo'zg'alganda boshqa tebranishlarni qo'zg'atish uchun energiya o'tkazilmaydi. Oddiy tebranishlarda atomlar bir xil fazada va bir xil chastotada tebranadi. Atomlarning assimetrik harakatlari murakkabroq tebranishlarga olib keladi. Molekuladagi atomlarning har bir tebranishi bir nechta normal tebranishlarning chiziqli birikmasi sifatida ifodalanishi mumkin.

Tebranmali rejim nuqtai nazaridan quyidagilar mavjud:

- kimyoviy bog'lanish yo'nalishida yuzaga keladigan va atomlararo masofalar o'zgarib turadigan cho'ziluvchan tebranishlar (v);
- deformatsiya tebranishlari (S), bunda bog'lanish burchaklari o'zgaradi va atomlararo masofalar doimiy bo'lib qoladi.

Infraqizil nurlanish yutilganda, faqat molekulaning dipol momentining o'zgarishi bilan bog'liq bo'lgan tebranishlar qo'zg'aladi. Dipol momenti o'zgarmaydigan barcha tebranishlar IQ spektrlarida ko'rinmaydi.



3 – rasm. Uch atomli molekularning harakatlanishining turli xil imkoniyatlari. a) H_2O molekulas (chiziqli bo'lmagan), b) CO_2 molekulas (chiziqli), [1, 237 b.]

Eksperiment asosida olingan tebranish spektrlarida spektrlar soni

ko'pincha nazariyga to'g'ri kelmaydi. Qoida tariqasida, barcha mumkin bo'lgan tebranishlar hayajonlanmaganligi va ularning ba'zilari buzilganligi sababli eksperimental spektrlarda kamroq diapazonlar mavjud. Overtonlar va murakkab tebranishlar mavjudligi sababli eksperimental spektr nazariyga qaraganda chiziqlarga boy bo'lishi mumkin. Murakkab tebranish chastotalari har xil valent va deformatsiya tebranishlari chastotalarining chiziqli birikmalariga teng.

Qurilmalar turlari, sxemalar

Aralashmalarining IQ spektrlarini o'rganish, qattiq moddada (kristalli yoki amorf) ham, eritmada ham moddani tashkil etuvchi tarkibiy bo'linmalarining (bo'laklarning) tuzilishi, tarkibi, o'zaro ta'siri to'g'risida muhim ma'lumot olishga imkon beradi. IQ spektrlari, shuningdek, kanallar, teshiklar, qatlamlar orasidagi intervallar va tanachalararo bo'shliqlar tufayli moddalar yuzasida so'rib olingan yoki uning hajmi ichida joylashgan molekulalarning holati to'g'risida ma'lumot beradi.

IQ spektral sohasi ko'rinadigan zonaning chegarasidan to'lqin uzunliklarini, ya'ni 0,7 dan 1000 mkm gacha qoplaydi, bu molekulalarning tebranish chastotalarining 10 sm^{-1} pastki chegarasiga to'g'ri keladi. Barcha IQ sohasi an'anaviy ravishda yaqin, o'rta va uzoq yoki uzun to'lqin uzunliklarga bo'linadi. Bunday bo'linish optik materiallarning xususiyatlari (shaffoflik va chiziqli dispersiya) bilan bog'liq holda paydo bo'lgan. Agar yaqin va o'rta sohalar orasidagi chegara $\sim 2 \text{ mkm}$ ($\sim 5000 \text{ sm}^{-1}$) deb hisoblansa, u holda o'rta va uzoq to'lqin uzunlikdagi sohalar orasidagi chegara prizmaning ishchi diapazonining uzun to'lqin uzunlik chegarasi bilan bog'liq bo'ladi. Kristall KBr - 25 mkm (400 sm^{-1}). Bir tomondan, seziy bromid va yodli prizmalar, boshqa tomondan difraksiya panjaralari va interferometrlari bo'lgan IQ spektrometrlari yaratilishi munosabati bilan Xalqaro toza va amaliy kimyo ittifoqi (IUPAC) uzoq to'lqin uzunlikdagi sohani 200 sm^{-1} (past chastotali) ostidan chaqirishni tavsiya qildi. 50 mkm to'lqin uzunligiga mos keladigan CsI prizmasining ishlash oralig'ining chegarasi. Albatta, 10-200 va 10-400 sm^{-1} oraliqlari bilan 400 sm^{-1} dan yuqori bo'lgan sohalar o'rtasida tub farqlar mavjud emas, ammo jihozlar va texnikalar har bir soha uchun o'ziga xos xususiyatlarga ega. 10 sm^{-1} ($\lambda > 1000 \text{ mm}$) dan past bo'lgan spektral oraliq odatda mikroto'lqinli va radiospektroskopiya usullari bilan o'rganiladi.

IQ spektrometrlarini qurish va ishlash tamoyillari

Spektral asbobsozlik rivojidadagi yutuqlar tufayli infraqizil nurlanishning barcha spektrini qamrab oladigan har xil dizayndagi qurilmalar mavjud.

Spektrni olish printsipiga ko'ra IQ sohasi uchun moslamalarni ikkita katta guruhga bo'lish mumkin: dispersiv va nodispersiv [4, 287 b.].

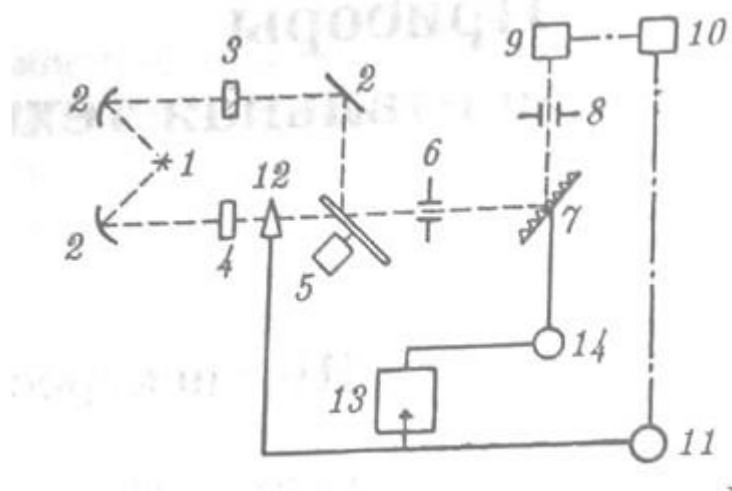
Dispersiv spektrometrlar

Tarqatish moslamasi sifatida biz IQ diapazoni va difraksion panjaralariga

mos dispersiyasi bo'lgan materialdan tayyorlangan prizmalardan foydalanamiz. Odatda, IQ-ning o'rtasi ($400-5000 \text{ sm}^{-1}$) uchun KBr, NaCl va LiF monokristallaridan tayyorlangan prizmalar qo'llaniladi. Hozirgi vaqtda prizmalar ozgina foydalidir va deyarli diffraksiya panjaralari bilan almashtirilib, ular radiatsiya energiyasida katta daromad va yuqori aniqlik bilan ta'minlaydilar. Ammo, ushbu qurilmalarning yuqori sifatiga qaramay, ularning o'rnini tobora dispersiyalanmagan qurilmalar guruhiga kiruvchi Fyure spektrometrlari egallamoqda.

Yagona va ikkita nurli sxemalar

Yoritish sxemasi uchun skanerlash dispersiv infraqizil spektrometrlari bitta nurli va ikki nurli bo'ladi. Yagona nurli sxema bilan tekshirilayotgan yutilish spektri to'lqin uzunligiga to'g'ri keladigan intensivlik egri chizig'ida va fon yutilishi bilan birga qayd etiladi. Odatda, ikkita nurli sxemadan foydalaniladi, bu fonni, ya'ni to'liq elektr uzatish liniyasini tekislash va H_2O va CO_2 atmosfera bug'larini yutishini, shuningdek, nurlarni hujayraning derazalari bilan susaytirishi va agar kerak bo'lsa, erituvchilarning yutilishini qoplaydi.



4 – rasm. Ikki nurli skanerdan o'tkazuvchi IQ-spektrometrning blok diagrammasi [4, 288 b.]: 1 - IQ nurlanish manbai; 2 - oyna tizimi; 3 - ishlaydigan nur va namuna; 4 - taqqoslash nuri va fon komdensatori; 5 - modulyator-to'xtatgich; 6 - monoxromatorning kirish oralig'i; 7 - tarqatuvchi element (difraksiya panjara yoki Littrow oynali prizma); 9 - qabul qiluvchi; 10 - kuchaytirgich; 11 - qayta ishlash dvigateli; 12 - fotometrik takoz; 13 - yozuvchi; 14 - skanerlash vositasi.

Ikki nurli skanerlovchi IQ-spektrometrning blok sxemasi 4-rasmda keltirilgan. Spektr quyidagicha qayd qilinadi: 1-manbadan IQ nurlanishi ikkita nurga bo'linadi. Ishchi nur namunadan, mos yozuvlar nurlari esa qandaydir komdensatordan (erituvchi bo'lgan kyuvet, deraza va boshqalar) o'tadi. To'xtatgich 5 yordamida nurlar navbatma-navbat monoxromatorning kirish oralig'i 6 va u orqali tarqatuvchi elementga 7 yo'naltiriladi. Uning sekin aylanishi bilan supurgi dvigatel 14 tomonidan amalga oshiriladi,

monoxromatorning qabul qiluvchiga 9 chiqish tirqishi orqali 9 yoriq bilan kesilgan tor to'lqin uzunliklari ketma-ket monoxromatik, nurlar. Agar ishchi va mos yozuvlar nuridagi berilgan to'lqin uzunligining nurlanishi har xil intensivlikka ega bo'lsa, masalan, ishchi nurida namunani yutish bilan susaytirilsa, u holda qabul qilgichda o'zgaruvchan elektr signal paydo bo'ladi. Kuchaytirilgandan va konversiyadan so'ng bu signal nurlanish oqimlarini tenglashtirish uchun fotometrik takozni 12 (diafragma) harakatga keltiradigan kon dvigateli 11 ga beriladi (optik nol usuli). Fotometrik takozning harakatlanishi 13 yozuvchisi ruchkasining ordinat bo'ylab, dispers elementning aylanishi esa qog'oz lentani chizish yoki ruchka ushlagichining abstsissa bo'ylab harakatlanishi bilan bog'liq. Shunday qilib, darajalashga qarab, skanerlash paytida uzatishning (yutilish) foizga yoki namunaning optik zichligiga to'lqin soniga (yoki to'lqin uzunligiga) bog'liqligining spektral egri chizig'ini yozib olish mumkin.

Monoxromatorlar

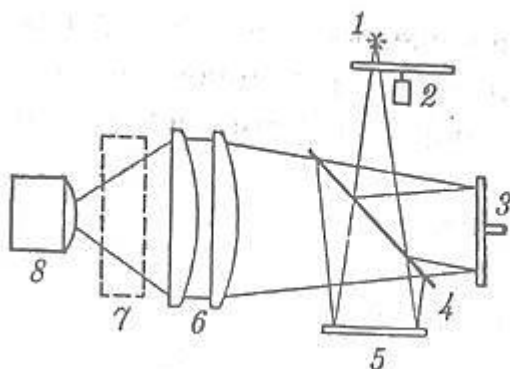
Tekshirish spektrometrlarining asosiy qismi monoxromator hisoblanadi. Tarqatish moslamasi sifatida u mos dispersiyasi bo'lgan IQ sohasida shaffof materiallardan yasalgan prizmalar yoki difraksion panjaralar - esletlar bo'lishi mumkin. Materiallarning tarqalishi ularning shaffofligining uzun to'lqinlar chegarasida eng katta ekanligi va to'lqin uzunligining pasayishi bilan tezda pasayib borishi sababli, IQ o'rta qismida odatda LiF, NaCl, KBr yagona kristallaridan va $200-400\text{ sm}^{-1}$ oralig'ida CsI dan olinadigan prizmalar ishlatiladi.

Dispersiyon bo'lmagan qurilmalar

Furye spektrometrlarining ishlashi elektromagnit nurlanishning aralashuvi hodisasiga asoslangan. Ushbu qurilmalarni ishlab chiqarish uchun bir necha turdagi interferometrlardan foydalaniladi. Eng ko'p ishlatiladigan Maykelson interferometridir. Ushbu qurilmada manbadan infraqizil nurlanish oqimi parallel nurga aylantiriladi va keyin nurni ajratuvchi yordamida ikkita nurga bo'linadi. Bir nur harakatlanuvchi oynaga uriladi, ikkinchisi - sobit. Ko'zgulardan aks etgan nurlar xuddi shu optik yo'l bilan nurni ajratuvchiga qaytariladi. Ushbu nurlar, harakatlanuvchi oyna tomonidan ishlab chiqarilgan yo'l farqi va shu sababli fazalar farqi tufayli xalaqit beradi. Interferentsiya natijasida ma'lum bir yo'l farqi va nurlanish to'lqin uzunligiga mos keladigan interferogrammalarning superpozitsiyasi bo'lgan murakkab shovqin naqshlari olinadi. Birlashtirilgan yorug'lik oqimi namuna orqali o'tadi va radiatsiya qabul qiluvchiga uriladi. Kuchaytirilgan signal kompyuterning kirish qismiga uzatiladi, u interferogrammaning Furye konvertatsiyasini amalga oshiradi va o'rganilayotgan namunaning yutilish spektrini oladi.

Furye konvertatsiyasi murakkab hisoblash protsedurasidir, shu bilan birga, kompyuter texnologiyalarining jadal rivojlanishi spektrometrga o'rnatilgan kichik o'lchamli, tezkor kompyuterlarning yaratilishiga olib keldi, bu esa spektrni olish va uni qayta ishlashni qisqa vaqt ichida amalga oshirish

imkonini beradi.



5 - rasm. Maykelson interferomerining asosiy optik sxemasi (nurlar qulab tushmasdan), [4, 291 b.].

Furye spektroskopiyasida asosan uchta turdagi interferometrlar qo'llaniladi: Fabri-Perot, Maykelson va lamel interferometr.

5 - rasmda misol tariqasida, Maykelson printsiptiga asoslangan Furye spektrometrining sxematik optik diagrammasi keltirilgan. IQ nurlanish oqimi manbai 1, modulli to'xtatgich 2, nurni ajratuvchi 4 tomonidan ikkita nurga bo'linadi. Ulardan biri dvigatel bilan mikrometrik uzatish orqali bog'langan va ma'lum bir harakat uzunligi bilan asta-sekin harakatlanib, asl holatiga qaytishi mumkin bo'lgan oynaga 3 yo'naltirilgan. Ushbu oynadan aks ettirilgan nur 3-oynada o'rnatiladigan yo'l farqiga ega bo'lgan holda, sobit oynadan 5-da aks etgan nurga xalaqit beradi. Bundan tashqari, radiatsiya qabul qilgichdagi 8-linzalar orqali o'rganilayotgan namunadan o'tib hujayra bo'linmasiga joylashtirilgan. Oyna 3 harakatlanayotganda va nur aralashuvi o'zgaruvchan yo'l farqi bilan skanerlash ma'lum bir spektral diapazonda sodir bo'ladi.

Ro'yxatga olingan interferogramma signalning nur yo'llaridagi farqqa bog'liqligini anglatadi va namunani yutish bilan o'zgartirilgan manba energiyasining funktsiyasidir. Zamonaviy Furye spektrometrlari to'plamiga kiritilgan berilgan minikompyuter dasturi bo'yicha amalga oshirilgan olingan interferogrammaning Furye konvertatsiyasi, o'rganilayotgan namunaning yutilish spektrini beradi. O'rganish uchun mavjud bo'lgan spektr oralig'i ishlatilgan nurni ajratuvchi tomonidan aniqlanadi. Barcha IQ sohasini qoplash uchun substratlarda metall panjaralar, plyonkalar yoki dielektrik qoplamalar shaklida bajariladigan bir nechta o'zgaruvchan nurli bo'linmalar talab qilinadi.

Furye spektroskopiyasi bir qator muhim afzalliklarga ega. Interferometrlarning an'anaviy spektrometrlarga nisbatan ikkita asosiy afzalligi quyidagilardan iborat. Birinchidan, bu skanerlash paytida har bir lahzada barcha o'rganilayotgan to'lqin uzunliklarining spektral diapazonining nurlanishi qabul qiluvchiga urilib ketishi, chunki bu an'anaviy qurilmaning monoxromatorida dispers tizim va yoriqlar tomonidan aniqlanadi. Boshqacha qilib aytadigan bo'lsak, interferometrda butun skanerlash vaqtida bir vaqtning o'zida barcha

o'rganilayotgan spektral diapazon haqida ma'lumot olinadi, an'anaviy spektrometrda esa turli vaqtlarda faqat tekshirilayotgan diapazonning tor spektral polosalarida olinadi. Interferometrlarning bu afzalligi, ayniqsa, manbaning nurlanish intensivligi past bo'lgan va signal-shovqin nisbati cheklovchi omil bo'lgan uzoq to'lqinli sohada juda muhimdir.

Ikkinchidan, katta yutuq nurlanish energiyasining oqimini kamaytirmasdan interferometrning aniqlanish kuchini oshirishga imkon beradi. Furey spektrometrining rezolyutsiya quvvati nurlar yo'lidagi maksimal farqga mutanosib bo'lib, masalan, spektrning aniqligini ikki baravar oshirish uchun siz oyna harakatining uzunligini va shunga mos ravishda ro'yxatdan o'tish vaqtini ikki baravar oshirishingiz kerak.

Interferometrlarda difraksion spektrometrlarga qaraganda talab qilinadigan spektral diapazon nurlanishini filtrlash osonroq, ya'ni parazit yoki tarqoq nurni yo'q qilish masalasi ancha soddalashtirilgan.

Ushbu afzalliklar Furey spektroskopiyasining quyidagi afzalliklarini beradi: intensivlikni o'lchashning juda yuqori sezgirligi va aniqligi, ayniqsa ko'p skanerlash va signal to'planishi bilan; juda yuqori aniqlik (10^{-2} sm^{-1} gacha) va to'lqin raqamlarini aniqlashda yuqori aniqlik; yuqori tezlikli javob, ya'ni keng spektral sohani tezda o'rganish qobiliyati (bir necha yuz sm^{-1} oralig'ida skanerlash vaqti $< 1 \text{ s}$).

Infraqizil nurlanish manbalari

Uzluksiz infraqizil nurlanish manbai sifatida odatda silit tayoqchasi ishlatiladi - "global" (kremniy karbididan yasalgan buyum) yoki Nernst shtifti (noyob tuproq elementlari oksidlaridan qilingan) [5, p. 10-11]. Ushbu manbalarning tok bilan yuqori haroratgacha qizdirilgan nurlanish intensivligi egri chizig'i qora tanli nurlanish egri chizig'iga ega. Masalan, $\sim 1300^\circ\text{S}$ haroratdagi globbarda maksimal nurlanish intensivligi $\sim 5000 \text{ sm}^{-1}$ ($\sim 2 \text{ mkm}$) sohaga to'g'ri keladi va $\sim 600 \text{ sm}^{-1}$ ($16,7 \text{ mkm}$) sohada intensivlik qariyb 600 marta pasayadi.

Uzoq to'lqinli infraqizil sohada yaxshi nurlanish manbalari umuman yo'q. Isitadigan qattiq jismlarning issiqlik nurlanishining asosiy qismi yoki gaz zaryadining nurlanishi spektrning ko'rinadigan va IQ ga yaqin sohasiga to'g'ri keladi va uzoq to'lqinli qismida bu manbalarning nurlanish kuchi umumiy quvvatning ahamiyatsiz qismidir. Masalan, umumiy radiatsiya quvvati 1 kVt bo'lgan yoy lampasi faqat 10^{-1} Vt quvvat beradi. 200 sm^{-1} past chastotali chegaraga qadar odatda yuqorida ko'rsatilgan IQ nurlanishining termal manbalari qo'llaniladi, ammo ular I (X) intensivlik egri chizig'i maksimaldan nishab bo'lgan $400\text{-}200 \text{ sm}^{-1}$ oralig'ida ham juda zaifdir. 200 sm^{-1} dan pastda, odatda manba sifatida yuqori bosimli simob lampasi ishlatiladi. Uning ish diapazonining yuqori qismida, asosan, qizdirilgan devorlarning termal nurlanishi, quyida - simob kamoning nurlanish oqimi va plazma emissiyasi qo'llaniladi.

Infraqizil qabul qiluvchilar

Qarshilik termometrlari printsipli asosida qurilgan sezgir termojuftlar ("termoko`rsatgich") yoki bolometrlar o'rta IQ sohasi uchun spektrometrlarda nurlanish detektorlari sifatida ishlatiladi.

Termal detektorlarga, shuningdek, gazning issiqlik kengayishi nurlanish ta'sirida sodir bo'ladigan pnevmatik yoki optik-akustik qabul qilgich (Golay xujayrasi) kiradi. Gaz qoraygan egiluvchan devorli kameraga, oynali tashqi qoplama bilan joylashtirilgan. Oynada aks ettirilgan yorug'lik nurining harakati fotosel orqali qayd etiladi. Ushbu qabul qilgich odatda uzoq to'lqinli IQ sohasi uchun ishlab chiqariladi, bu erda boshqa qabul qiluvchilar guruhi ham qo'llaniladi: kvant yoki foton.

Eksperimentning texnik asoslari: uzatish spektrlari, umumiy ichki aks ettirishning to'liq buzilgan spektri va diffuzion aks etish

Yutilish spektrlari

Umumiy tamoyillar

Agar siz biron bir moddani infraqizil diapazonning uzluksiz yorug'lik energiyasiga duchor qilsangiz va uzatilgan yorug'lik oqimini monoxromatorda to'lqin uzunliklarida parchalasangiz (Furye spektrometridan foydalaning), u holda uzatiladigan yorug'lik intensivligining to'lqin uzunligiga bog'liqligini grafik ko'rinishda ko'rsating, siz IQ spektrini olasiz. Io intensivligi bilan uzluksiz spektrning fonida ma'lum bir moddaga xos bo'lgan to'lqin raqamlari bo'lgan assimilyatsiya diapazonlari paydo bo'ladi [6, 5 b.]. Tadqiqotlar shuni ko'rsatdiki, IQ spektrlari har bir kimyoviy birikma uchun ham, ba'zi atom guruhlari uchun ham individualdir. Moddaning bog'lanishlari tarkibi, tuzilishi va tabiatiga qarab, uning spektri boshqa moddalar spektrlaridan polosalar soni, ularning to'lqinlar sonlari va intensivligi miqyosidagi holati bilan farq qiladi. Binobarin, IQ spektrlari ayrim atom guruhlari borligi uchun kimyoviy birikmalarni aniqlash va sifatini tahlil qilish uchun ishlatilishi mumkin. Bu tebranish spektroskopiyasidagi birinchi va eng oddiy muammo.

Ikkinchi muammo, miqdoriy tahlil uchun tebranish spektroskopiyasidan foydalanish bilan bog'liq. Uni hal qilish uchun faqat spektrdagi chiziqlar intensivligining namunadagi moddaning konsentratsiyasiga empirik bog'liqligini bilish kerak.

Moddalarni aniqlash va miqdoriy tahlil qilish uchun tebranish spektrlarini o'rganish bu kimyo muammolarini hal qilishda keng qo'llaniladigan ushbu usulning barcha imkoniyatlarini aks ettirmaydi. Aynan: a) kimyoviy bog'lanishlar tabiatini o'rganish, b) molekulalar va ionlarning simmetriyasini o'rganish, v) molekulalararo o'zaro ta'sirlarni aniqlash [6, 7 b.].

IQning assimilyatsiya spektrlarini olishda moddalar agregatsiya uch

holatida ham bo'lishi mumkin: gazsimon, suyuq va qattiq. Namunani tayyorlash texnikasi va hujayralar dizayni moddaning agregatsiya holatiga bog'liq. Kyuveta oynalari odatda tuzlarning yagona kristallaridan, asosan gidroksidi va gidroksidi tuproqli metallardan (ko'pincha kaliy bromid) halogenidlaridan tayyorlanadi. Ikkinchisining gigroskopikligi va harorat ta'sirining beqarorligi ko'pincha IQ spektrlarini olishda sezilarli qiyinchiliklarni keltirib chiqaradi [6, 51 b.].

Gazlar

Gazsimon moddalarning spektrini yozishda, derazalari orasidagi masofa 100 mm va undan ortiq bo'lgan kyuetkalar ishlatiladi. Gaz spektrlarini yuqori haroratda yozib olish uchun taxminan 1 m uzunlikdagi kyuvetalarda metall ko'zoynaklar mavjud bo'lib, ularning markaziy qismi elektr toki o'tadigan spiral yordamida isitiladi. Sovutilgan derazalardagi moddalarning bug'lari tarqalishi va kondensatsiyalanishini oldini olish uchun hujayraga bir oz inert gaz kiritiladi [6, 52 b.].

Yorug'lik nurlari yo'lidagi moddalar miqdori gazning harorati va bosimi bilan aniqlanganligi sababli, miqdoriy tahlilning aniqligini olish uchun ushbu parametrlarni sinchkovlik bilan nazorat qilish kerak [5, 209 b.].

Suyuqliklar va eritmalar

Suyuqliklar va eritmalar spektrlarini yozib olish uchun kyuvetalarning ikki turi qo'llaniladi: yig'iladigan va doimiy qalinlik. Yig'iladigan kyuvetalar ikkita derazadan, moslama (pristavka)dan va shisha stakandan iborat. Ularning qalinligi shisha stakan balandligini o'zgartirish orqali o'zgarishi mumkin. Sıdırmalık, shisha oynaning so'nggi yuzalarining oynalar yuzasi bilan ishonchli optik aloqasi bilan ta'minlanadi. Doimiy qalinlikdagi kyuvetalar ikkita yopishtirilgan derazadan iborat bo'lib, ular orasida teflon yoki qo'rg'oshindan yasalgan ma'lum qalinlikdagi oraliq bor. Suyuq hujayralar oynalari orasidagi masofa odatda 0,01 dan 1 mm gacha.

Eritmalarning IQ spektrlarini yozishda odatda erituvchilar tanlanadi, shunda ularning spektr o'rganilayotgan sohasida o'tkazuvchanligi kamida 25% ni tashkil qiladi. Juda keng transmissiya diapazoni CCl_4 , CS_2 , CHCl_3 , CH_3CN , C_6H_6 va boshqalar kabi erituvchilarga xosdir. IQ spektrining ba'zi joylarida suv shaffof emas. Oddiy suvdagi eritmalar bilan bir qatorda og'ir suvdagi eritmalar (D_2O) qayd etilsa, uning tarqalish doirasi sezilarli darajada kengaytirilishi mumkin. Erituvchilarning o'ziga xos assimilyatsiya spektri borligi sababli, namunaning yetarlicha miqdori eriydigan va shu bilan bir vaqtda spektri o'lchanadigan namunaning yutilish bantlariga joylashtirilmaydigan hal qiluvchi tanlashda muammo bo'lishi mumkin. Turli xil erituvchilarning keng assortimentidan foydalaniladi. Laboratoriya xizmatlaridan foydalanadigan aksariyat tashkilotlar eng keng tarqalgan erituvchilar kataloglarini taqdim etadilar, bu erda ular foydalanish uchun mos bo'lgan spektr maydonlarini ko'rsatadilar.

Kuvetli derazalar ishlab chiqarish uchun suvli eritmalar spektrlarini

yozishda maxsus gigroskopik bo'lmagan materiallardan foydalanish kerak: CaF_2 , KRS, AgCl , Si, Ge. [6, 52 b.].

Qattiq moddalar

Qattiq moddalarni bitta kristallarning ingichka bo'laklari (qalinligi mm ning bir necha yuzdan bir qismi) yoki plyonkalar shaklida olib tashlash mumkin, ammo polikristal kukunlar bilan ishlash ancha keng tarqalgan. Bunday kukunlarning zarralari bilan yorug'likning tarqalishini kamaytirish uchun ular IQ nurlari uchun shaffof bo'lgan ba'zi bir yopishqoq suyuqlikda suspenziyalar sifatida tayyorlanadi. Shu maqsadda odatda neft ishlatiladi. aralashma moyidagi suspenziyani tayyorlash uchun bir necha o'n milligramm modda ikki yoki uch tomchi yog 'bilan agat yoki jasper eritmasida yaxshilab maydalanadi. Bulamaç kaliy bromli plastinkaga yupqa qatlam bilan surtiladi va ikkinchi plastinka bilan qoplanadi. Agar namunani tayyorlash jarayoni quruq kamerada olib borilsa, u holda juda gigroskopik moddalarni ham shu tarzda tekshirish mumkin.

Polikristalli kukunlarning IQ spektrlarini yozib olish uchun ularni ortiqcha kaliy bromidi bilan bir necha millimetr qalinlikdagi tabletkalarga bosish ham mumkin. Tabletkalarni olish uchun maxsus vakuumli qoliplardan foydalaniladi va 1 sm^2 ga bir necha tonna bosim o'tkaziladi. Kaliy bromidli tabletkalarni tarmoqli zichligi bo'yicha aralash kompozitsiyalarini taxminiy miqdoriy o'lchovlari uchun ishlatish mumkin. Shuni hisobga olish kerakki, tabletkalarni tayyorlashda labil komplekslar presslash paytida chiqarilgan issiqlik tufayli parchalanishi mumkin. Bundan tashqari, ba'zi birikmalarning kaliy bromidi bilan ion almashinuvi mumkin va kuchli oksidlovchilar brom ionini bromgacha oksidlaydi. Odatda qattiq organik namunaning spektri sezilarli darajada kristalli modifikatsiyaga bog'liq; shuning uchun qattiq namunalar bilan ishlashda namunaning polimorfik shakli doimo bir xil bo'lishiga e'tibor berish kerak [6, 53 b.].

Miqdoriy tahlil

Ichki standartlar

Yuqoridagi shaklda tayyorlangan namunalarni miqdoriy jihatdan o'lchash qiyin, chunki xamirda aniq kontsentratsiyani o'rnatish ham, uni kyuvet oynalarining ma'lum maydoniga miqdoriy ravishda qo'llash ham mumkin emas. Ushbu qiyinchilikni oldini olish uchun ichki mos yozuvlar usulidan foydalanish mumkin. Namunaning o'ziga singdiruvchi bantlari bo'lmagan sohada IQ singdirish bantlariga ega bo'lgan ichki standart tanlanadi. Ichki standart va namunaning belgilangan aralashmasi aralashtiriladi va yuqoridagi kabi xamir sifatida tarqatiladi.

Namunaning assimilyatsiya lentolari va ichki mos yozuvlar assimilyatsiya nisbati namuna konsentratsiyasining o'lchovidir. Kimyoviy moddalar ko'pincha ichki standartlar sifatida ishlatiladi, chunki ular odatda tor bantli oddiy

spektrlarga ega, osongina changlanadi va suspenziyalar hosil qiladi. Buning uchun PbCNS, CaCO₃, dodekanitril, antrasen va metall stearatlar ishlatiladi [5, 211 b.].

Differensial usul

Namuna spektrni yozib olish uchun tayyorlangandan so'ng, o'lchov texnikasini tanlash kerak. Odatda cho'qqining balandligini boshlang'ich sathidan o'lchash va uni namunaning konsentratsiyasi bilan bog'lash kifoya.

Yuqori aniqlik yoki yuqori sezgirlik zarur bo'lgan hollarda, differensial usuldan foydalanish foydalidir. Bunday holda, spektri namuna spektridan chiqarilgan ikki nurli qurilmaning taqqoslash nuriga ehtiyotkorlik bilan tayyorlangan bo'sh tabletka yoki kyuvet qo'yiladi. Namunada mavjud bo'lmagan tarkibiy qismlar, odatda, kyuvetaga yoki mos yozuvlar tabletkasiga ularning spektrlari to'liq qoplanadigan darajada konsentrasiyalarda kiritiladi. Ushbu sharoitda qayd etilgan spektr - bu aralashmada mavjud bo'lgan chiqarib tashlangan komponentlarning spektrlari bilan bir-birining ustiga chiqmasdan faqat bizni qiziqtiradigan tarkibiy qismlarning spektri. Tahlilning aniqligini oshirish uchun mos yozuvlar katakchasiga analitikning ma'lum miqdorini qo'shish mumkin va qatlam qalinligini oshirish yoki asbobning ishlashini oshirish orqali differensial spektrning intensivligini oshirish mumkin.

Agar juda oz miqdordagi moddani aniqlash talab etilsa, u holda namunaning spektri ma'lum bir nazorat moddasiga nisbatan qayd etilishidan iborat bo'lgan ikkilangan differensial usuldan foydalanish mumkin, u holda namuna va taqqoslash kyuveti almashtiriladi va spektr bir xil blankada yoziladi. Ijobiy va manfiy cho'qqilarni birgalikda o'lchab (va ularning balandligini ikki baravar oshirib) sezgirlik oshadi. Ushbu usuldan foydalanganda, qulay holatlarda, moddaning foizning o'n mingdan bir qismini aniqlash mumkin [5, 213 b.].

Dastlabki ajratish operatsiyalarining ahamiyati

Noma'lum namunaning tarkibi qanchalik murakkab bo'lsa, to'g'ridan-to'g'ri IQ o'rganish orqali uning tarkibiy qismlarini muvaffaqiyatli aniqlash imkoniyati shunchalik kam bo'ladi, shuning uchun IQ spektrlarini olishdan oldin har xil ajratish usullaridan foydalanish juda muhimdir. Agar siz plastmassa, atirlar yoki oziq-ovqat kabi ba'zi turdagi namunalarni tez-tez tahlil qilsangiz, juda murakkab aralashmalarning tarkibiy qismlarini deyarli to'liq aniqlaydigan oddiy ajratish va tahlil qilish sxemasini tuzish mumkin. Ushbu sxemalarda aralashmalarni ajratish uchun erituvchi ekstraksiyasi, adsorbsion xromatografiya, ion almashinuvi, keyinchalik olingan fraktsiyalarning IQ spektrlarini yozib olish bilan tayyorlanadigan gaz-suyuqlik xromatografiyasidan foydalanish mumkin. Bunday analitik sxemalardan mayda iflosliklarni va ifloslantiruvchi moddalarni aniqlashda, parallel hosil bo'lgan mahsulotlarni tavsiflashda va boshqalarda foydalanish mumkin [5, 207 b.].

Ichki aks ettirishning buzilish usuli texnikasi

Ichki aks ettirishning buzilish usuli - bu spektroskopiyaning bir shakli, ammo aks ettiruvchi spektroskopiyaning boshqa shakllaridan ajralib turishi kerak. An'anaviy aks ettirish spektroskopiya shundan iboratki, nurlanish namuna yuzasiga tushadi va bir qator optik elementlardan o'tib, monoxromatorga aks etadi. Ushbu tadqiqotlar uchun moslamalar doimiy yoki o'zgaruvchan tushish burchaklari bilan ishlashga imkon beradi. Oddiy spekulyar spektr uzatish spektriga o'xshamaydi. Yansıtıcı spektroskopini yana bir keng tarqalgan usuli, alyuminiy kabi yuqori darajada aks ettiruvchi sirt ustida joylashgan nozik plyonkalar bilan bog'liq bo'lib, butun qurilma odatiy ko'zgu aks ettirish moslamasiga joylashtirilgan. Shu tarzda olingan spektr odatdagi yutilish spektriga o'xshaydi. Yansıtıcı spektroskopini bu turi ba'zan ikki marta uzatilishi deb nomlanadi, chunki nurlanish namuna orqali o'tadi, oyna yuzasidan aks etadi, yana namunani o'tkazadi va keyin monoxromatorga kiradi. Ikki tomonlama uzatish texnikasi juda keng tarqalgan, ammo uni ishlatish juda nozik qatlamlar shaklida tayyorlanadigan moddalar bilan cheklangan. Sinov namunalari juda qalin bo'lsa yoki juda kuchli singib ketsa, bu yaroqsiz. Bizni qiziqtiradigan aks ettirish spektroskopiya turi optik jihatdan zichroq muhitdan (yuqori sinish ko'rsatkichiga ega bo'lgan muhitdan) tanqidiydan kattaroq burchak ostida, ya'ni oddiy umumiy ichki aks etishi kerak bo'lgan sharoitda namunaga yorug'lik tushganda amalga oshiriladi. Shu bilan birga, tushayotgan nurlanishning bir qismi namunaga kirib boradi va u erda namuna uchun xos bo'lgan to'lqin uzunligi mintaqalarida so'riladi. Natijada, aks ettirish to'liq emas, balki "to'liq ichki aks ettirish bilan buzilgan" bo'lib chiqadi. Kritik burchak - bu sinish burchagi 90° bo'lgan tushish burchagi. Kritik tushish burchagi qiymatini tenglikdan topish mumkin [4, 297 b.]:

$$n_p \sin \Theta = n \sin \varphi \quad (5)$$

bunda n_p va n navbati bilan kristall va namunaning sinish ko'rsatkichlari; Θ - tushish burchagi; φ - aks ettirish burchagi. Kritik tushish burchagi burchagi 90° ga teng, bunda $\sin \varphi = 1$. Demak, kritik burchak qiymatini ifodadan olish oson.

$$\sin \Theta = n/n_p, \quad (6)$$

To'rtta sinishi yuqori bo'lgan kristallar texnika uchun eng qulay ekanligi aniqlandi; talliy bromidiodid (KRS-5), kumush xlorid (AgCl), irtran-2 va germaniy. Ular qo'llanilish darajasiga ko'ra ro'yxatga olingan.

Spektrini olish uchun IQ nurlanishining sinishi yuqori bo'lgan kristallga o'tishi, kritik darajadan kattaroq burchak ostida pastroq sinishi ko'rsatkichi bo'lgan namuna bilan interfeysdan (bir yoki bir necha marta) aks etishi va kristalni monoxromatorga qoldirishi kerak. Olingan spektri odatdagi IQ assimilyatsiya spektriga juda o'xshaydi. To'lqin uzunligi oshgani sayin, spektrdagi kuzatilgan yutilish diapazonlari odatdagi spektrdagi mos keladigan assimilyatsiya polosalariga qaraganda kuchliroq bo'ladi. Bu IAEBU ning to'lqin uzunligiga bog'liqligi sababli, spektrlari va IQ assimilyatsiya spektrlari

o'rtasidagi eng sezilarli farq. Yana bir farq, unchalik sezilmaydigan, bu assimilyatsiya bantlarining maksimal darajasining engil siljishi. Ushbu farqlarning hech biri spektrlarini IQ assimilyatsiya spektrlari bilan solishtirganda jiddiy qiyinchiliklarni keltirib chiqarmaydi.

Tushish burchagi kritik darajaga yaqinlashganda, kuzatilgan IAEBU spektri xalaqit beradigan sinishi ta'siridan juda o'rtacha yoki yomon chiziqlarga aylanadi. Ammo kritik burchakdan og'ish oshib borgan taqdirda ham, assimilyatsiya bantlarining intensivligi ham pasayadi. Agar kristalning sinish ko'rsatkichi namunaning sinish ko'rsatkichiga yaqinlashsa, u holda spektri juda zich bo'ladi, ya'ni polosalarning optik zichligi oshadi. Optimal spektrlarini olish uchun ushbu omillar o'rtasida o'zaro kelishuv zarur. To'g'ri kristallni tanlash yaxshi spektrini olish uchun tushish burchagi oralig'ini tanlashdan ko'ra muhimroq bo'lib chiqadi. Tegishli tushish burchagini tanlayotganda, spektroskopistlar tanqidiy burchakdan ancha kattaroq burchak ostida ishlashga harakat qilishadi. Ammo u ham emas, shuning uchun spektr kam intensiv va spektri sindirish effektlari bilan buzilib ketadigan darajada kichik emas.

IAEBU spektrlarini olish uchun uskunalar

Eksperimental IAEBU texnikasi bo'yicha ko'plab ishlar asosan turli xil konfiguratsiyalardagi kristallarni tanlash va ulardan foydalanishga qaratilgan edi. Bunday holda, kristallar prizma yoki yarim silindrli bo'lganida va bir necha marta aks ettirishda (20 va undan ko'p marta), kristallarga maxsus cho'zilgan shakl berilganda, bitta aks ettirish mumkin bo'lgan shartlar tanlandi.

Eng ko'p IAEBU spektrlari an'anaviy IQ spektrometrlari yoki spektrofotometrlariga joylashtirilgan moslama (pristavka)lar bilan olingan. Ilova ikkita oyna tizimidan iborat: ulardan biri nurlanish manbasini doimiy yoki o'zgaruvchan burchak ostida kristallga yo'naltiradi; nometallning ikkinchi tizimi nurlanishni IQ spektrometrining monoxromatoriga yo'naltiradi. IAEBU kristali va namuna ushlagichi kristal va namuna yuzasi o'rtasida yaxshi aloqa qilish uchun mo'ljallangan bo'lib, ular uchun bir oz bosim ta'minlanadi. Shu kabi oyna tizimlari yaqinda keng tarqalib ketgan sobit burchakli moslama (pristavka)larda qo'llaniladi. Bunday olinadigan birikma spektrometrning kyuvet qismida joylashgan. Hozirgi kunda IAEBU spektrlarini olish uchun tijorat ixtisoslashtirilgan spektrofotometrlar ham mavjud.

Namunalarni tanlash

Qoniqarli IAEBU spektrini olish uchun kristalli materialni tanlab olish kerak, shunda kristall va namunaning sinishi indekslarining optimal nisbati ta'minlanadi, tushish burchagi tanlanadi va kristal bilan namuna orasidagi interfeysda yaxshi aloqa o'rnatiladi. Ikkinchisi eng muhimi, chunki yaxshi aloqasiz qoniqarli IAEBU spektrini olish mumkin emas.

Eng yaxshi IAEBU spektrlari juda tekis, tekis yuzaga ega bo'lgan namunalardan olinadi. Plyonkalar kabi namunalarning silliq yuzasi kristalning ishchi yuzasi va namuna o'rtasida kristalning yuzasiga zarar etkazmasdan yaxshi

aloqa qilishiga imkon beradi (bu uning uzoq umr ko'rish uchun muhim).

Agar namuna tekis bo'lmagan sirtga ega bo'lsa, unda, masalan, katta sa'y-harakatlarni ishlatib, kristall bilan yaxshi aloqani ta'minlashga harakat qilish mantiqiy emas. Bunday holda infraqizil nurlanish faqat tarqaladi, IAEBU spektri ishlamaydi va kristall yo'q qilinadi, yoki eng yaxshisi, almashtirishni talab qiladi. Kristall bilan namuna orasidagi aloqa butun sirt ustida emas, balki ba'zi nuqtalarda amalga oshirilishi ham etarli emas. Oldingi holatda bo'lgani kabi, spektrni olish mumkin emas. Namuna sirtini unga zarar bermasdan etarli darajada tayyorlash mumkin bo'lmagan hollarda, IAEBU usulidan umuman voz kechish kerak.

Kristallga qo'llaniladigan plyonkaning spektrini olish uchun uning IQ singishi allaqachon sezilib turadigan etarlicha qalinligini ta'minlash kerak. Bu shuni anglatadiki, qatlam qalinligi kamida 0,001 mm bo'lishi kerak.

Ba'zi hollarda IAEBU spektrlarini kukunli namunalardan ham olish mumkin, ammo bu ularning kristall yuzasiga yopishishini talab qiladi. Bunday namunalar juda oz. Qoniqarli IAEBU spektrini mayda bo'lingan kukun bilan olish mumkin. Agar namunani kukunni bosib shakllantirish mumkin bo'lsa, bu ham sifatli spektrni olish imkoniyatini oshiradi.

Eritmalar va suyuqliklar bilan ishlash

Kristalldan IQ nurlanishi suyuqlik eritmasiga 0,005 - 0,05 mm chuqurlikka tushishi mumkin. Agar eritmaning tahlil qilinadigan komponenti bunday qatlam qalinligida etarli darajada singdirilsa, u holda qoniqarli sifatli IAEBU spektrini olish mumkin. Suvli eritmalar uchun qayd qilingan IAEBU spektri radiatsiya suyuq muhitga chuqur kirib boradigan darajada faqat suv spektri bo'ladi: 0,05 mm gacha bo'lganida, suv bilan to'liq singishi tufayli spektr amalda yo'q bo'ladi.

IAEBU spektrini o'lchashga tayyorgarlik ko'rayotganda, o'rganilayotgan namuna va kristall o'rtasida kimyoviy reaksiya bo'lmaydiligi ishonch hosil qilishingiz kerak. Bunday holda, kristall yo'q qilinishi mumkin va spektrni olish mumkin emas [5, s. 300]

2. Namuna tayyorlash texnikasi

Namunani tayyorlash texnikasi va ingichka tabletkalarga bosilgan namunalardan (masalan, KBr) o'tkazuvchanlik spektrlarini o'lchash.

Tabletkalarni tayyorlash

1. Kukunni maydalash

Namunadagi kristalit kattaligi radiatsiya tarqalishi jarayonlari tufayli olingan spektrlarning sifatiga kuchli ta'sir qiladi. Tarqatish effektiga yo'l qo'ymaslik uchun planshetni siqish uchun ishlatiladigan namuna kukunidagi zarrachalar hajmi taxminan 1 mkm bo'lishi kerak. Ushbu o'lchamga erishish uchun namunani agat yoki yasma ohak bilan yaxshilab maydalash kerak. Tajribali operatorlar changlarning zarracha kattaligini taktil sezgilariga qarab

baholaydilar.

2. Qolib tayyorlash

Kukun yaxshilab maydalanganidan so'ng, ilgari tortiladi va KBr bilan yaxshilab aralashtiriladi va qolipga solinadi. Shuni ta'kidlash kerakki, qolipning holati muhim rol o'ynaydi - u mutlaqo toza va yaxshi silliqlangan bo'lishi kerak. Ishlatishdan oldin qolip etil spirti bilan artib olinadi. Paxta momig'i va boshqa jun materiallaridan foydalanish istalmagan, tuklarsiz maxsus salfetkalardan foydalanish tavsiya etiladi.

3. Bosish

Kalıpta joylashtirilgan kukun, bosish paytida moddaning qolip hajmida bir xil taqsimlanishini ta'minlash uchun darhol bosishdan oldin spatula bilan tekislanadi. Kukun va kiritilgan musht bilan qolip pressga joylashtiriladi. Bosish jarayoni ikki daqiqa davomida 6 atmosfera kuchi bilan amalga oshiriladi. Mog'or bosimi asta-sekin yumshatilishi kerak, chunki namunadagi bosimning tez tarqalishi tabletkalarning kiruvchi yorilishiga olib keladigan stresslarning paydo bo'lishiga olib kelishi mumkin.

Siqish tugagandan so'ng, planshet qolipdan olinadi va namunalarni saqlash uchun oldindan tayyorlangan idishga joylashtiriladi. Qog'ozdan o'ralgan konvertlar planshetlarni saqlash uchun qulay idish bo'lib xizmat qilishi mumkin - ulardan foydalanish va saqlash uchun qulay.

4. Qoliplama xizmati

Yuqori sifatli tabletkalarni tayyorlash uchun, ish tugagandan so'ng, qolipni zarbadan va qolip devorlaridan moddaning qoldiqlarini olib tashlash uchun qolipni yaxshilab artib turish kerak. Buning uchun etil spirtidan foydalanish tavsiya etiladi. Mog'orning ishchi yuzalarida chizishlarning paydo bo'lishi kerea emas, shuning uchun qoliplarni har doim ehtiyotkorlik va ehtiyotkorlik bilan ishlash kerak.

Spektrlarni suratga olish

1. Qurilmani ishlashga tayyorlash

Radiatsiya manbasini isitish uchun spektrometrni namuna olish boshlanishidan oldin (30-40 daqiqa) oldin yoqish kerak.

2. Orqa fonni suratga olish

Namuna olishni boshlashdan oldin havo spektri spektrometr kamerasida olinadi. Keyinchalik bu spektr namunalari spektrlarini olishda avtomatik ravishda hisobga olinadi.

3. Namuna olish

Tayyor planshet namuna ushlagichiga o'rnatiladi va spektrometrga joylashtiriladi. Spektrni olish uchun pellet etarlicha shaffof bo'lishi kerak, u spektrni yozishni boshlashdan oldin spektrometrning nurlanish detektorini tomonidan qayd etilgan energiya miqdori bilan boshqariladi. Olingan spektrlar ularni keyingi izohlash uchun ma'lumotlar jadvali shaklida saqlanadi.

Namunani tayyorlash usuli va suspenziyalardagi namunalardan (HCB, suyuq kerosin) o'tkazuvchanlik spektrlarini o'lchash

Suspenziya

Tadqiqot uchun qattiq namunalarni tayyorlashning asosiy usullaridan biri bu suyuq parafin yoki geksaxlorobutadien (GXB) tarkibidagi suspenziyani (suspenziyalar, pastalar) tayyorlash usuli bo'lib, u o'zini uzoq muddatli amaliyotda isbotladi. Vazelin moyi - bu o'rtacha tarkibdagi C_{25} to'yingan uglevodorodlarning aralashmasi. U amalda aromatik va to'yinmagan uglevodorodlardan, shuningdek boshqa aralashmalardan mahrum bo'lib, etarli darajada yopishqoqlikka va qattiq sinadigan ko'rsatkichlarga ega, bu esa qattiq moddalarning qoniqarli spektrlarini osongina olishga imkon beradi.

Suspanziya suyuqlikni tayyorlash uchun qattiq moddani vazelin moyi yoki GXB da maydalab mayin kukun holiga keltiriladi. KBr oynalarini siqib, ular orasida xamir qatlami mavjud bo'lib, ular kerakli qalinlikka erishadilar. Keyin kyuvetalarning metall ushlagichiga o'rnatilgan oynalar spektrofotometrغا o'rnatiladi va namuna spektri kerakli to'lqin uzunligi oralig'ida qayd etiladi.

Ko'rinishidan sodda, qoniqarli sifat suspenziyasini tayyorlash jarayoni aslida katta mahorat va mahorat talab qiladi. Ishlab chiqarish odatda quyidagicha tayyorlanadi. 5-10 mg qattiq narsa shisha plastinka ustiga qo'yiladi, so'ngra shisha pestelning boshiga o'rtasiga tomizgich yordamida bir tomchi yog 'surtiladi va u bilan moddalar kuchli ravishda eziladi. Bu erda "maydalash" deganda kristalli, donador va kukunli moddalarni tashkil etuvchi mayda zarrachalar agregatlarini yo'q qilish nazarda tutilgan. Zanglamas po'latdan yasalgan spatuladan foydalanib, shisha plastinka ustidagi pestle bilan o'n besh dumaloq harakatni amalga oshirgandan so'ng, stakan va pesteldan maydalangan barcha suspenziyani plastinka o'rtasiga to'plang va yana maydalang. Odatda, to'xtatib turishni tayyorlash uchta uchta operatsiyadan so'ng tugallangan deb hisoblanadi, ba'zida uni ikkitasi bilan cheklash mumkin, garchi to'rtta yoki undan ortiq operatsiyalar zarur bo'lishi mumkin. Süspansiyon juda qalin yoki juda nozik bo'lishi mumkin, keyin yog'lar yoki qattiq moddalar qo'shilishi kerak. Biroq, eksperimentator turli xil moddalar bilan ishlagan holda, tez orada har qanday namuna uchun yog' va qattiq moddalarni qanday nisbatda olish kerakligini his qilishni o'rganadi.

To'g'ri tayyorlangan suspenziya odatda ko'rinadigan nurda shaffof bo'ladi. Tuzli derazalar orasiga siqilgan atala kerakli qalinlikda ko'rib chiqilganda, plyonkada ko'rinadigan yoriqlar, donachilik va boshqa qonunbuzarliklar bo'lmasligi kerak. Agar tartibsizliklar ko'zga ko'rinadigan bo'lsa, u holda suspenziya qisqa to'lqinli nurlanishni tarqatadi. Bunday holda, assimilyatsiya va uzatish maksimumlari buzilgan bo'lib chiqadi va bunday spektrning qiymati kichik bo'ladi, eng yomon holatda bu shunchaki noto'g'ri bo'ladi.

Qoniqarli spektrni olish uchun zarur bo'lgan suspenziyaning plyonka qalinligi namunaning yutilishiga bog'liq. Agar olinadigan eng yupqa plyonka juda kuchli spektrga ega bo'lsa, u holda suspenziyani moy bilan suyultirish va qayta aralashtirish kerak. Aksincha, agar juda qalin qatlam juda zaif spektrni beradigan bo'lsa, unda ko'proq namuna qo'shilishi va yana hamma aralashtirilishi kerak.

To'xtatilishlar, to'g'ri tayyorlanganda, odatda sifatli maqsadlar uchun ajoyib spektrlarni beradi. Shunday qilib, sifatli tahlil qilish uchun qattiq spektrni olish uchun namunani tayyorlashning eng oddiy va umuman qoniqarli usuli bu to'xtatib turish texnikasi (albatta, agar u umuman qo'llanilsa). Biroq, bu usulning ba'zi kamchiliklari ham bor.

Vazelin moyidagi suspenziya spektrining kamchiliklaridan biri shundaki, yog'ning ichki singishi hududlarida namunaning o'zi singishi haqida ma'lumot olish qiyin yoki deyarli imkonsizdir. Vazelin moyining o'zi uzun zanjirli to'yingan uglevodorodlarga xos yutilish bilan tavsiflanadi: 3000 dan 2800 sm^{-1} gacha bo'lgan juda kuchli polosa ($3,5\text{ mkm}$ sonaqa), 1460 sm^{-1} ($6,85\text{ mkm}$). O'rtacha intensivli polosa 1375 sm^{-1} ($7,27\text{ mm}$) va zaif polosa taxminan 722 sm^{-1} ($13,85\text{ mm}$). Ushbu polosalar molekulalarning metil, metilen va metin guruhlaridagi bog'lanishlarning cho'zilishi va egilishi tebranishlariga bog'liq.

Biroq, bu qiyinchilikni engish oson; vodorod atomlarini o'z ichiga olmaydigan muhit yordamida faqat ikkinchi suspenziyaning spektrini tayyorlash va yozib olish kerak. Suyuq kerosin chiziqlari bo'lgan joylarda singib ketmaydigan geksaxlorobutadienni qabul qilishingiz mumkin. Geksaxlorobutadiyendagi va suyuq kerosin tarkibidagi suspenziyalarga ega bo'lgan holda, bu moddaning dispersiya muhitining assimilyatsiya bantlarisiz to'liq spektrni olish mumkin.

KBr plitalarini maydalash

KBr kristallari eng ko'p hujayra oynalari uchun material sifatida ishlatiladi, ammo ularning gigroskopikligi bir qator qiyinchiliklarga olib keladi. Foydalanish paytida ular bulutli bo'lishi mumkin. Sinov moddasi va organik erituvchi tarkibidagi suv miqdori pastligi yoki havoning yuqori namligi derazalarni bulutli qilish uchun ertami-kechmi, hatto ehtiyotkorlik bilan parvarish qilinsa ham etarli. Bulutni yo'q qilish uchun KBr plitalarini vaqti-vaqti bilan parlatish kerak. KBr plitalarini polishing shunchalik oddiyki, har bir jiddiy spektroskopist ushbu texnikani o'zlashtirishi kerak. Bu etarli darajada tejashni ta'minlaydi, shuningdek umumiy harakatsiz kasb egasi uchun foydali bo'lgan engil jismoniy mashqlar.

Plitalarni maydalash va parlatish shikastlanish chuqurligiga qarab har xil aşındırıcı materiallar yordamida amalga oshirilishi mumkin. Chuqur shikastlanishlar mavjud bo'lganda, plitalar katta tirnalishlarni olib tashlamaguncha, silliqlashdan oldin nozik zımpara qog'ozga tortiladi. Chuqur chizish bo'lmasa, ular plastinkalarni xamirda (Cr_2O_3) silliqlash bilan cheklanadi,

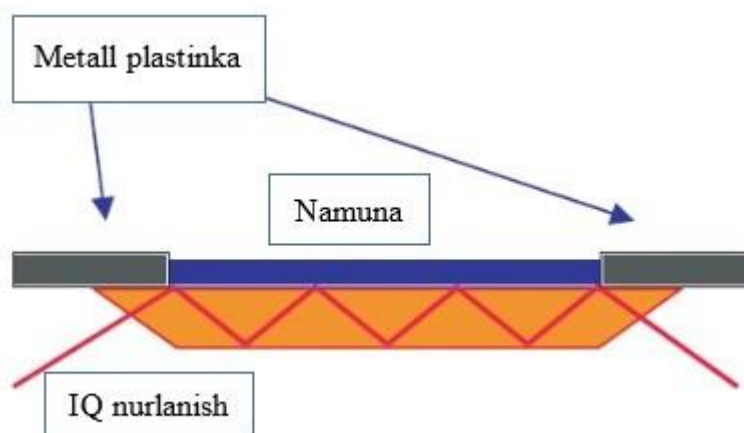
so'ngra mato (flanel) ustida silliqlashadi. Shu bilan birga, matoning sirtini xamir bilan va toza matoni etil spirti bilan namlash tavsiya etiladi. Plitalarni silliqlash va silliqlashda rezina qo'lqop yoki barmoq uchlarini taqinglar. plastinka teri bilan aloqa qiladigan joylarda bulutli bo'lib o'sadi. Polishing dumaloq harakat bilan amalga oshiriladi. Yuqoridagi polishing protsedurasi ba'zi bir amaliyotni, epchillikni va tafsilotlarga e'tiborni talab qiladigan ko'rinadi, aks holda tekis, silliq plastinka ishlamasligi mumkin.

Namuna tayyorlash texnikasi va IAEBU spektrlarini o'lchash

IAEBU texnikasi suyuq va qattiq namunalarni spektroskopiyasi uchun kyuvetalar va KBr plitalariga ehtiyojni yo'q qiladi. IAEBU transmissiya spektrlarini yozish uchun shaffof bo'lmagan namunalarda (qalin namunalar yoki yuqori singdiruvchi materiallar) yaxshi ishlaydi. IAEBU spektridan namuna yuzasi holatini baholash, shuningdek sifatli va miqdoriy tahlillarni o'tkazish uchun foydalanish mumkin.

Asosiy tamoyillar

IAEBU spektroskopiyasida to'liq ichki aks ettirish hodisasi ishlatiladi. Infraqizil nurlanish kristall orqali o'tadi, u erda u to'liq ichki aks ettiradi. Bunday holda, radiatsiya kristal yuzasidan tashqarida ma'lum masofani qoldiradi. Kristalldan paydo bo'lgan to'lqinning intensivligi shu tarzda kristal yuzasidan keskin tushadi. Shu nuqtai nazardan, IAEBU spektroskopiyasida namuna va kristal o'rtasidagi zich aloqani ta'minlash kerak. Buning uchun ko'pgina IAEBU moslama (pristavka)larida namunani kristall yuzasiga bosish uchun moslama mavjud. Kristallni to'liq ichki aks ettirishda qoldiradigan nurlanish kristallga bosilgan namunaviy materialga kiradi. U erda nurlanishning bir qismi namuna tomonidan so'riladi, bu namunaning yutilish spektrini yozib olishga imkon beradi. Namunaning chuqurligiga nurlanishning kirib borishi chuqurligi to'lqin uzunligiga, kristalning sinish ko'rsatkichiga va nurning yuzaga tushish burchagiga bog'liq (6 - rasm).



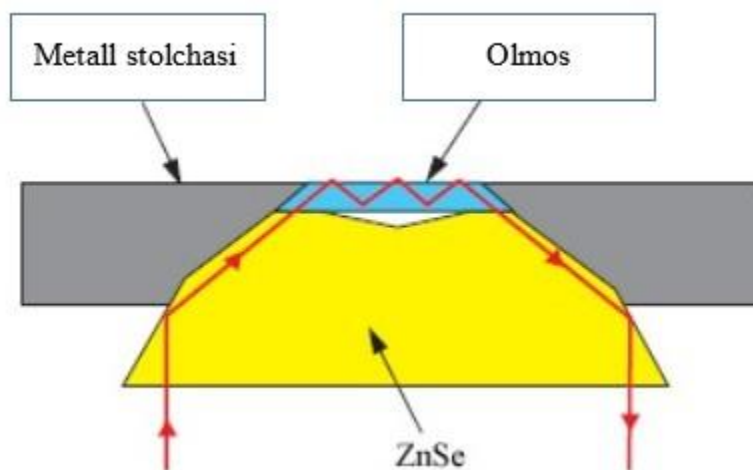
6 - rasm. IAEBU yacheykasi

Amaldagi materiallar

IAEBU spektroskopiyasida ishlatiladigan kristal yuqori sinish ko'rsatkichiga ega bo'lishi kerak. Umuman olganda, kristalning sinishi ko'rsatkichi o'rganilayotgan namunaning sinishi ko'rsatkichidan kattaroq bo'lishi kerak. Bizning holatimizda, IAEBU kristali sifatida olmosli derazali sink selenid ishlatilgan. Buning sababi olmos IAEBU spektroskopiyasi uchun kimyoviy va fizik xususiyatlari jihatidan juda mos bo'lganligi bilan bog'liq. Kuchli kislotalar, gidroksidi, oksidlovchi moddalar va boshqa kimyoviy moddalarning ta'siriga sezgir emas, bu esa har qanday moddalar bilan ishlashga imkon beradi. Olmosning aşınma qarshiligi, olmos oynasiga zarar bermasdan qattiq changlarni otish imkonini beradi. Olmosning birdan-bir kamchiligi uning narxidir, shuning uchun olmos IAEBU oynasida oz miqdorda ishlatiladi. IAEBU kristalining qolgan qismi sink selenid kristalidir, u sinishi ko'rsatkichi jihatidan olmosga o'xshash va ancha arzon bo'lib, uni olmosning iqtisodiy jihatdan foydali o'rnini egallaydi.

IAEBU spektroskopiyasining biriktirilishi

IAEBU moslama (pristavka)larining ko'p turlari mavjud, ammo eng qulay va keng tarqalgani gorizontall moslama (pristavka)lar bo'lib, ular turli xil kompozitsiyalarning suyuq va qattiq namunalarini tahlil qilishni osonlashtiradi. Ilova markazda olmosli oynasi bo'lgan namunalar uchun metall pog'onadir (7 - rasm) va siqish moslamasi (vint), bu esa olmos kristaliga namunaviy materialning yaxshi aloqasini ta'minlaydi. Moslama (pristavka)ning umumiy ko'rinishi quyidagi fotosuratda ko'rsatilgan (7- rasm).



7 - rasm. IAEBU moslama (pristavka)si ish o`rni tuzilishi sxemasi



8 - rasm. IAEBU uchun fotosurat moslama (pristavka)si

Ish uslubi

IAEBU moslama (pristavka)si IQ-spektrometrga o'rnatiladi va fon olinadi.

IAEBU spektroskopiyasining afzalliklaridan biri shundaki, u maxsus namuna tayyorlashni talab qilmaydi. Agar namuna juda qo'pol bo'lsa, tahlildan oldin uni maydalash kerak bo'lishi mumkin. Kukun namunasi biriktirma markazidagi olmosli oynaga joylashtirilgan. Siqish vidasi olmos oynasining markazidan yuqorisida joylashgan. Siqish vintini sekin va bir xil aylantirib, namunadagi kerakli bosimga erishiladi (kompyuter monitoridagi shkala bo'yicha 146 - 147 birlik). Shundan so'ng, spektr olinadi.

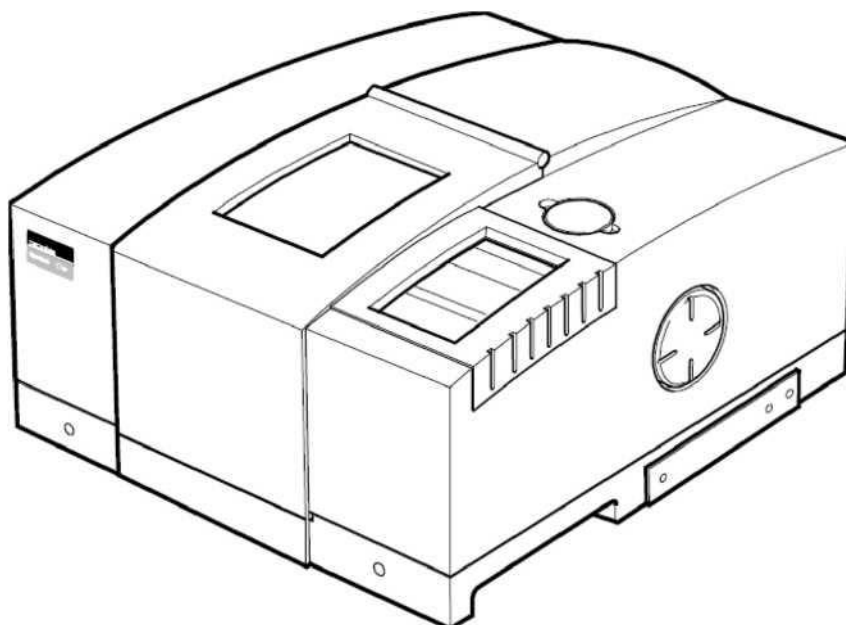
Rasmga tushirish tugagandan so'ng, sahnadagi namunaviy modda yo'q qilinadi yoki undan keyingi foydalanish uchun saqlanadi. Bosqichning tafsilotlari etil spirti bilan yaxshilab silinib, namuna izlari ularning yuzalaridan to'liq olib tashlanmaguncha. Moslama (pristavka) qismlar bilan barcha harakatlar rezina qo'lqop yoki barmoq uchida amalga oshiriladi.

3. Spectrum One Spectrometer foydalanuvchi qo'llanmasi

Spektrometr qurilmasi

Spektrometr tur

Spektrum One spektrometri (9 - rasmga qarang.) - bu dastgoh uskuna bo'lib, u quyidagilardan tashkl topgan:



9 - rasm. Spektrometrnibg umumiy ko`rinishi

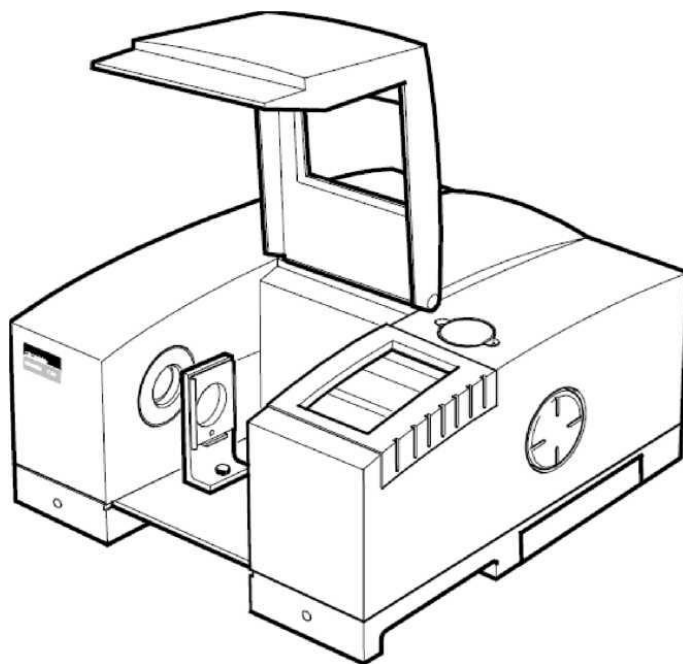
1. tozalangan namuna bo'limi;
2. optik o'lchash tizimi;
3. o'rta infraqizil diapazondagi nurlanish detektori;
4. elektron boshqaruv tizimi.

Spectrum One bir nurli va nisbiy rejimlarda, shuningdek interferogramma rejimida ishlashi mumkin. O'lchovlar 7800 dan 370 sm^{-1} gacha (CsI asosidagi nurni ajratuvchi bilan 220 sm^{-1} gacha) $0,5 \text{ sm}^{-1}$ o'lchamda amalga oshiriladi. Spectrum One shaxsiy kompyuterga maxsus yo'nalish yoki local tarmoq yordamida ulanishi va Spectrum dasturidan foydalanishi mumkin. Ushbu dasturiy ta'minot sizga asbobni boshqarish va olingan spektrlarni qayta ishlashga imkon beradi.

Kyuvetlar bo'limi

Kyuvet bo'limi (10-rasm) asbobning old tomonida joylashgan. Qopqoqni ko'tarib, ushlagich sifatida tanadagi paneldagi chuqurchadan foydalanib ochish mumkin.

Infraqizil nur namunaviy bo'limga chap teshik orqali kiradi. Namuna orqali o'tgandan so'ng, nur sensori hujayra bo'linmasining o'ng tomonidagi teshik orqali uradi.



10 - rasm. Kyuveta bo`limi

Namuna ushlagichi va boshqa aksessuarlar namuna bo'linmasining orqa qismidagi ulagichga o'rnatiladigan qo'llab-quvvatlash taxtasiga o'rnatiladi. Shuningdek, aksessuarlar o'rnatish uyasiga yoki namunaviy kassetaga joylashtirilishi mumkin. Standart ravishda etkazib beriladigan taglik plitasida transmision fotosuratlar uchun namuna panjarasi mavjud.

O`chirgich va aloqa portlari

O`chirgich, elektr kabeli ulagichi va aloqa portlari Spectrum One-ning orqa qismida joylashgan. O`chirgich I / O bilan belgilanadi (yoqish / o'chirish).

Optik tizim

Optik tizimning xavfsizligi quvvat tugmachasining avtomatik qulflanishi bilan ta'minlanadi. Korpusni ochgandan so'ng, optik tizimga kirish ochiladi. Tizimning izchil, ishonchli ishlashi oz miqdordagi harakatlanuvchi yoki sozlanishi qismlar bilan ta'minlanadi, shuningdek optik tizimni namlik va tebranishdan himoya qiladi.

Tizimning optik barqarorlik

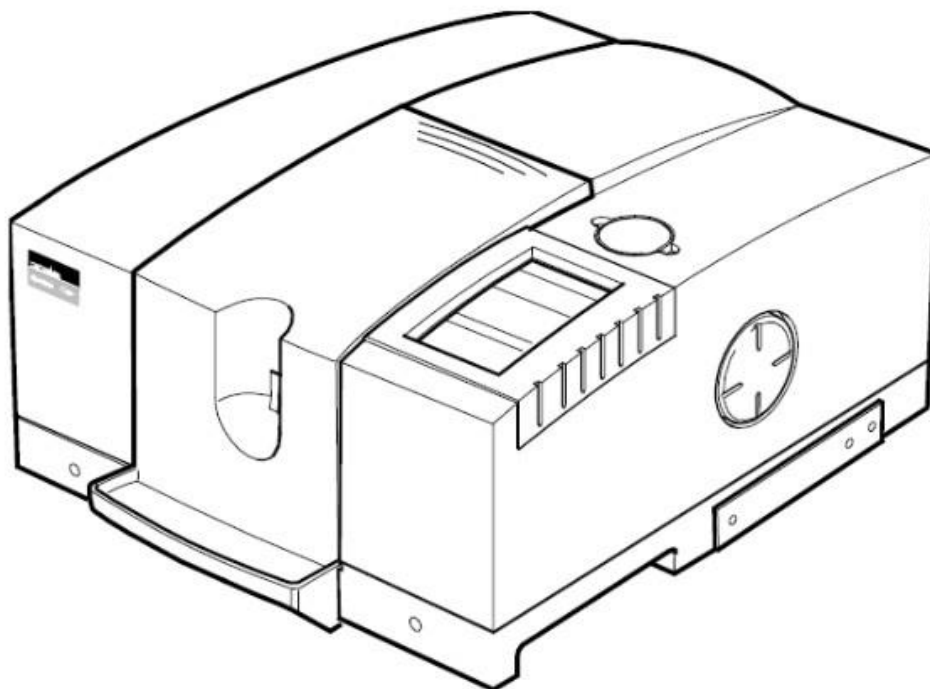
O'rnatilgan optik tizim fabrikada tozalanadi va muhrlanadi. Ichkarida joylashgan quritgich ichkariga kirishi mumkin bo'lgan suv bug'ini va karbonat angidridni olib tashlaydi. O'rnatilgan namlik sensori sizni quritgichni almashtirish kerak bo'lganda ogohlantiradi. Kyuvet bo'limi optik tizimdan KBr yoki CsI oynalari bilan ajralib turadi.

Optik moslama harakatlanuvchi bo'lib, u aniq joylashishni va ish sharoitlariga moslashishni ta'minlaydi. Interferometr yopiq konstruksiyada ishlab chiqarilgan va vibratsiyaga qarshi tayanchlarga o'rnatiladi, bu esa uni

laboratoriya stoli orqali uzatiladigan havo va zarba yuklarining ta'siridan himoya qiladi. Uzoq umr ko'rish uchun interferometrda kam ishqalanuvchi podshipniklar va elektromagnit haydovchi ishlatiladi.

Spectrum One konsollari

Qurilma faqat Spectrum One uchun ishlab chiqarilgan bir qator ixtisoslashgan moslama (pristavka)lar bilan ta'minlangan. Bularga avtomatik namuna almashtirgich, diffuz aks ettirish moslamasi, FIR moslama (pristavka)si (FIR moslama (pristavka)si) va universal IAEBU kiradi (11-rasmga qarang).



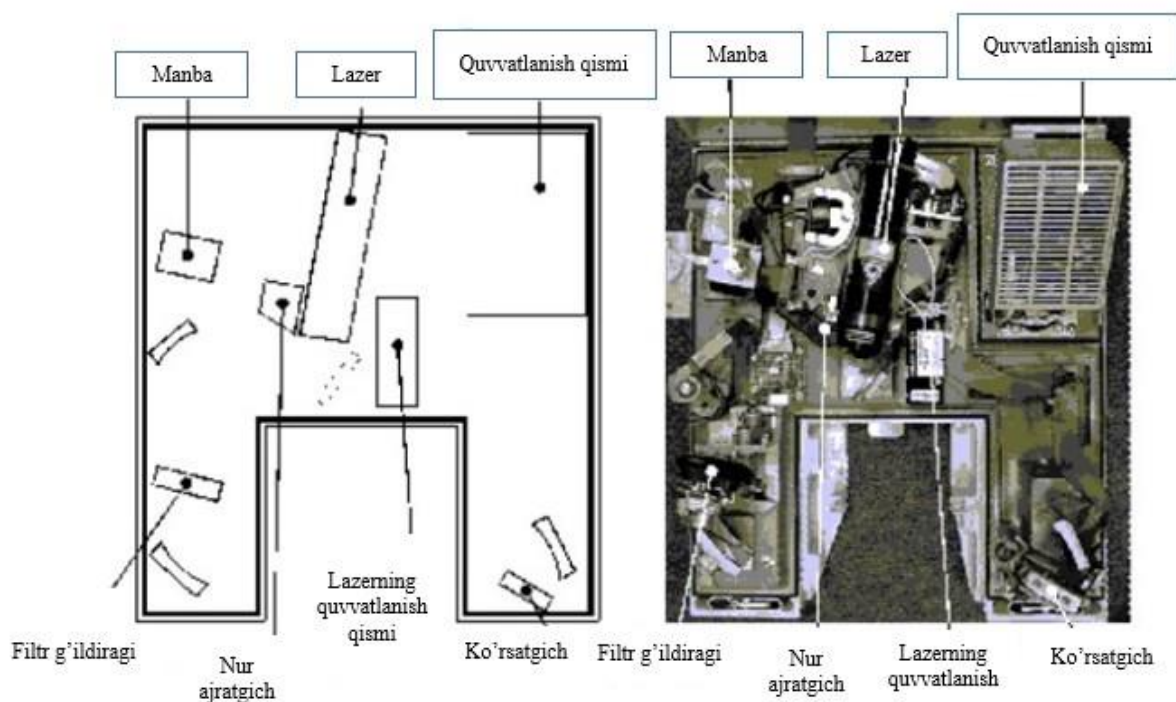
11 - rasm. Diffuziyali qaytargichli Spectrum One

Ushbu aksessuarlarni o'rnatish oson, avtomatik ravishda taniladi va Spectrum dasturi tomonidan boshqariladi.

HFIR va Diffuz Reflectance Attachment-ni o'z ichiga olgan Spectrum GX kengaytirish to'plamlari Spectrum One-ga o'rnatilishi mumkin.

Qurilmaning ichki tuzilishi

12 - rasmda Spectrum One ning asosiy tarkibiy elementlarini ko'rsatadi.



12 - rasm. Spectrum One ning konstruktiv elementlari

Asboblarga texnik xizmat ko'rsatish

O'zingizning spektringizga g'amxo'rlik

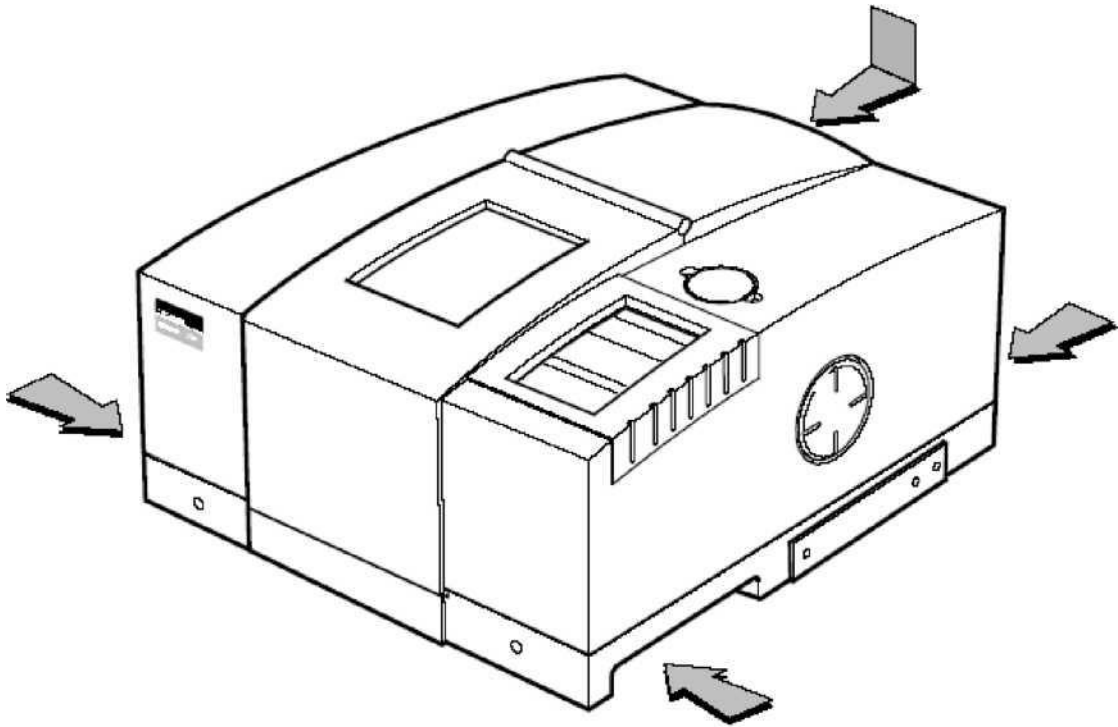
Qurilmaning tashqi qismini nam mato bilan tozalash mumkin. Agar kerak bo'lsa, agressiv bo'lmagan yuvish vositasidan foydalaning. Butun Spectrum One-ni tozalashdan oldin, asbobning sezilmaydigan tomonidagi kichik joyni tozalashga harakat qiling.

Qurilmaga suyuqlik kirishiga yo'l qo'ymang. Agar suyuqlik tasodifan qurilmaga to'kilsa, uni darhol olib tashlang. Agar asbobga biror narsa kirib qolsa, quvvatni o'chiring va Perkin-Elmer Corporation xizmat ko'rsatish muhandisiga murojaat qiling.

Asbobning biron bir optik yuzasiga tegmang yoki tozalamang, chunki bu uning xususiyatlarini o'zgartiradi va asbobning mos keladigan qismiga zarar etkazishi mumkin. Iltimos, qurilma oynalari gigroskopik ekanligini va suv yoki suvga asoslangan moddalar bilan yuvib bo'lmasligini unutmang.

Spektrni ko'chirish

Spectrum One-ni harakatlantirishdan oldin quvvatni o'chiring, 60 soniya kuting va elektr simini uring. Shaklda ko'rsatilgandek, asbobni uchidan pastga uchidan ko'tarish mumkin. 3.5. Jihozni ko'tarish uchun ikki kishi talab qilinadi, chunki uning umumiy vazni 30 kg.



13 - rasm. Spectrum One ni ko`tarish nuqtasi

Spectrum One-ni sovuq muhitdan iliqroq joyga ko'chirish natijasida hosil bo'lgan kondensatsiya namuna bo'linmasi oynalariga zarar etkazishi mumkin. Buning oldini olish uchun namlovchi qismga yangi quritadigan qoplarni soling; quritgichni olib tashlashdan oldin, qurilma IAEBUof-muhit haroratiga etib borishiga imkon bering.

Quritgichni almashtirish

Spectrum One optik tizimi zavodda tozalangan. Bu nurni ajratuvchi va kyuvet bo'lagi oynalaridagi KBr optikasini namlik shikastlanishidan himoya qiladi. O'zgartiriladigan quritadigan sumkalar tozalashni ta'minlaydi.

Har olti oyda bir quritgichni eski, ishlatilgan quritgich sifatida almashtiring, u namlikni saqlamaydi va KBr optikasiga doimiy zarar etkazishi mumkin. Asboblarni boshqarish dasturining Texnik xizmat ko'rsatish qismida belgilangan vaqt oralig'ida kompyuter ekranida quyidagi xabar paydo bo'ladi, quritgichni almashtirish kerakligini ogohlantiradi (14 -rasm).



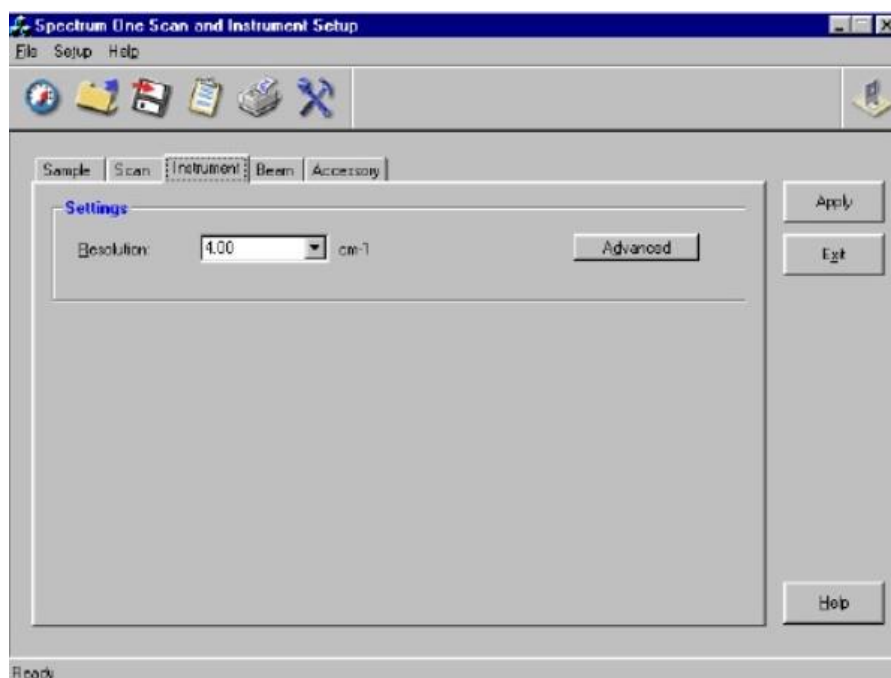
14 - rasm. Quritgichni almashtirish to'g'risida xabar

Ushbu xabar paydo bo'lganda, quritgichni almashtiring. Quritgich almashtirilganligi to'g'risida dasturiy ta'minotga xabar berguningizcha ogohlantirish paydo bo'ladi.

Agar qurilmada namlik sensori o'rnatilgan bo'lsa, u qurilma ichidagi namlik yuqori bo'lganida sizni ogohlantiradi, shundan keyin namlagichni almashtirish kerak.

Quritgich qachon oxirgi marta almashtirilganligini aniqlash

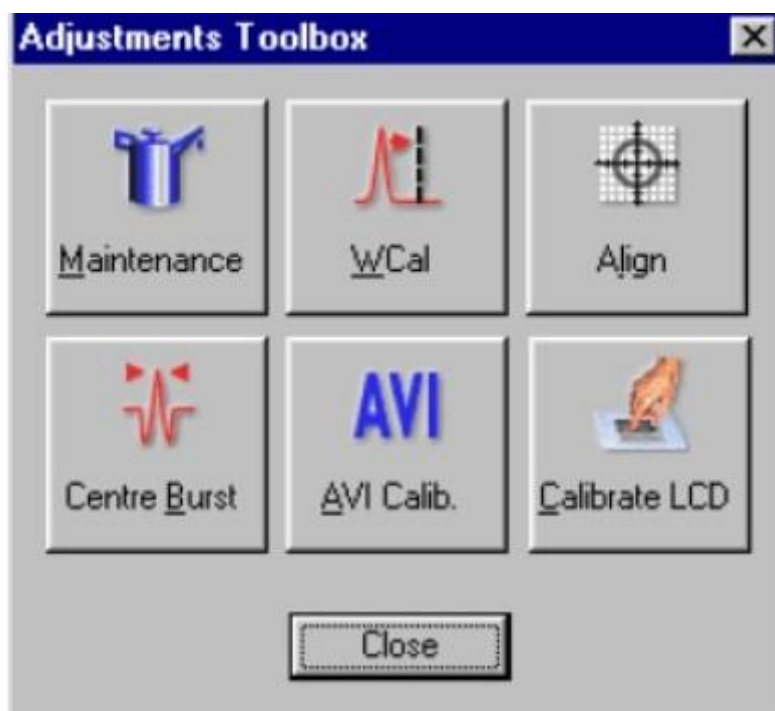
1. Sozlash menyusini ko'rsating va Instrument-ni tanlang. Scan and Instrument yorliqlari paydo bo'ladi (15 - rasm).



15 - rasm. Setup dialogi oynasi

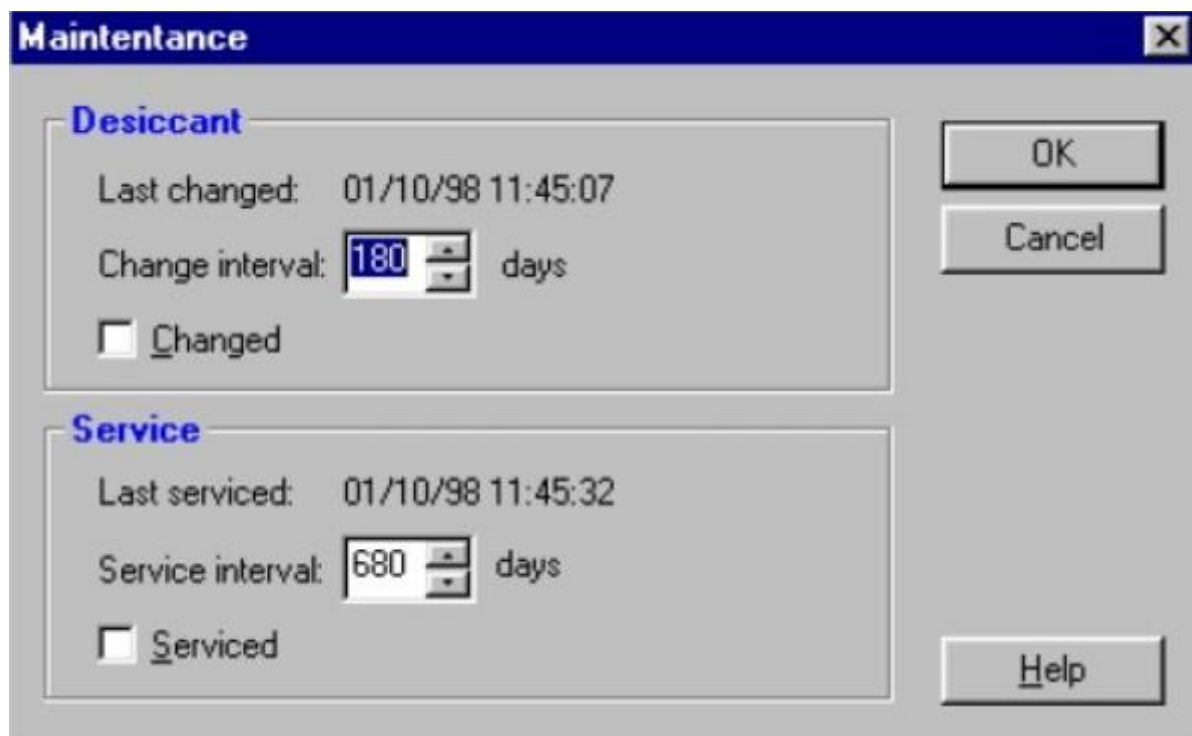
2. Belgini bosing

Ekranda sozlash vositalari to'plami paydo bo'ladi (16 - rasm).



16 - rasm - Adjustments dialogi oynasi

3. Maintenance ni tanlang. Texnik xizmat ko'rsatish dialog oynasi paydo bo'ladi (17-rasm).



17 - rasm. Maintenance dialogi oynasi

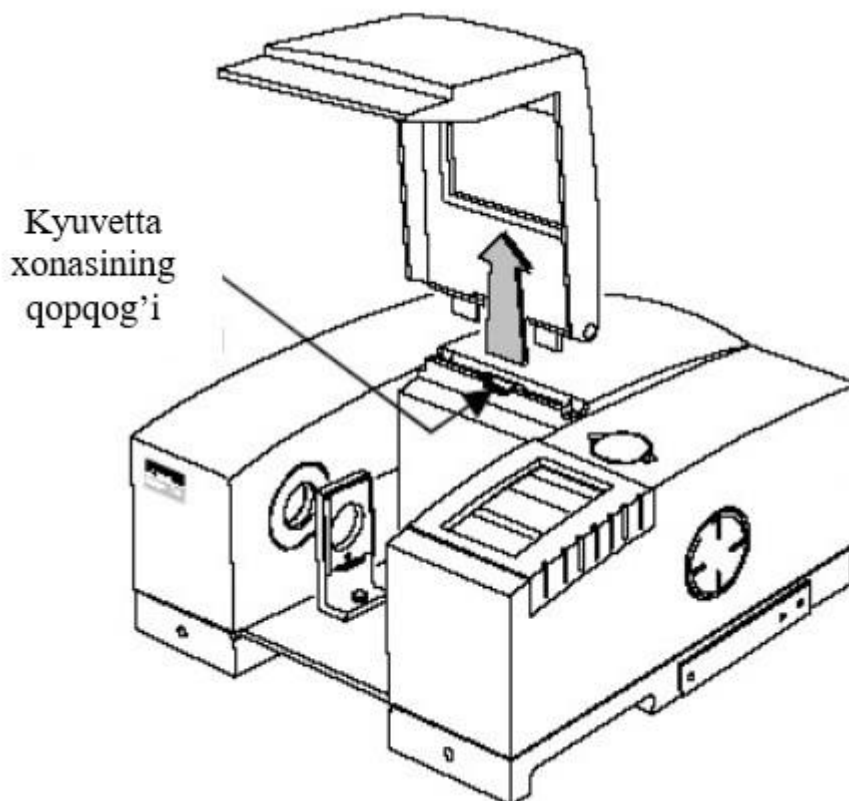
Quritgich oxirgi marta almashtirilgan sana Desiccant bo'limida berilgan.

4. Zarurat bo'lganda, dialog oynasini o'zgartiring. Quritgichni

almashtirish oralig'i o'rnatilganligini tekshiring.

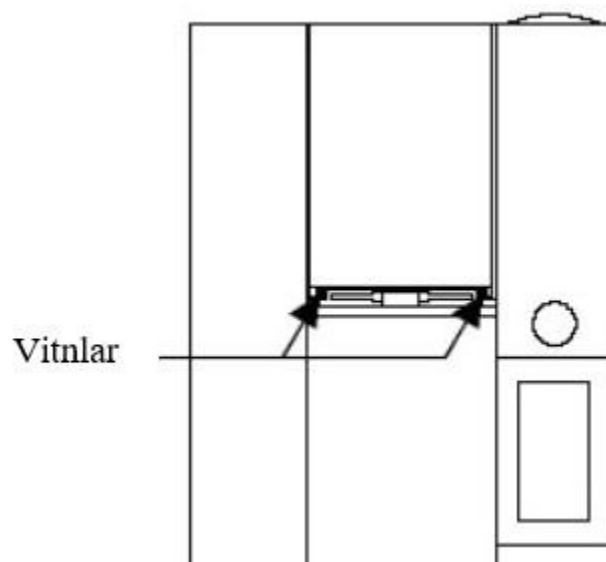
Bir martali ishlatiladigan quritgichni almashtirish

O'rnatilgan bo'lsa, namuna bo'linmasining qopqog'ini echib oling. Buning uchun klipni bosing, qopqog'ini vertikal holatga o'tkazing va echib oling (18-rasm).



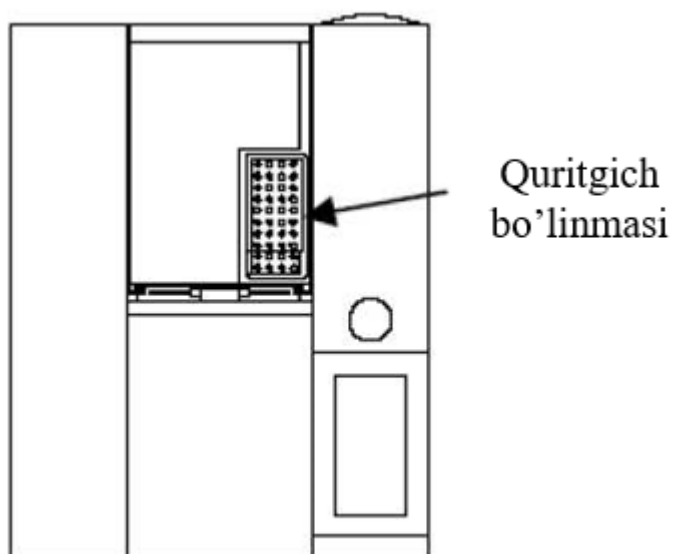
18 - rasm. Kyuveta bo'linmasi qopqog'ini yechib olish

Keyin, qurituvchi bo'linma qopqog'ini ushlab turgan ikkita vintni echib oling (19-rasm).



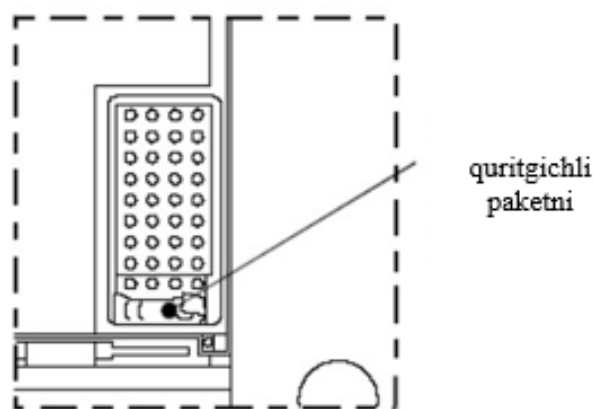
19 - rasm. Qurituvchi bo'linma qopqog'ini ushlab turadigan vintlar

Qopqoqni oching va ishlatilgan to'rtta quritadigan paketni olib tashlang (20-rasm). Ularning qanday o'rnatilishiga e'tibor bering.



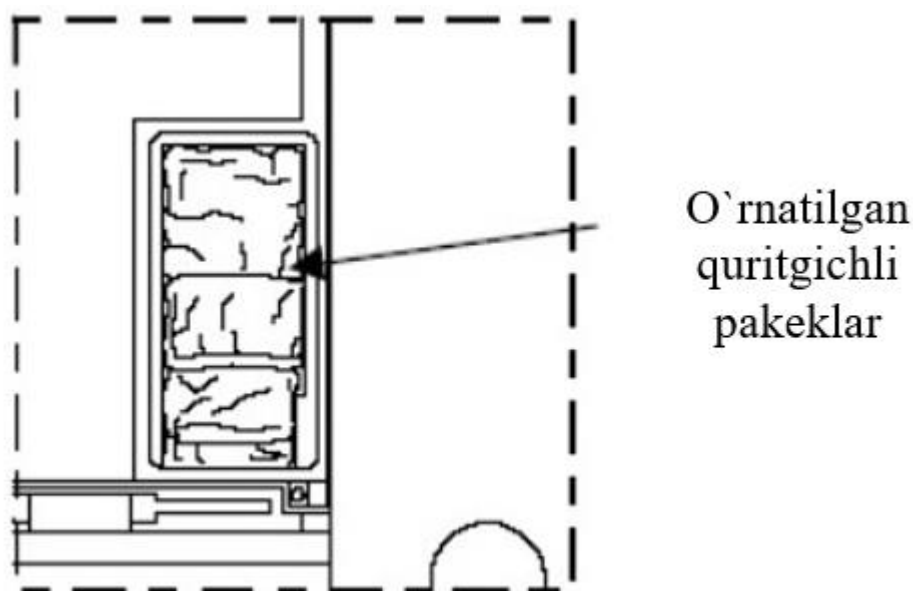
20 -rasm. Quritgichni olib tashlash

Birinchi paketning qurituvchi qismini korpusi old qismidagi chuqurchaga joylashtiring (21-rasm).



21 - rasm. Birinchi quritgichli paketni o`rnatish.

Qolgan uchta paketni birma-bir qutiga joylashtiring (22-rasm). O`rnatilgan sumkalarning qora rezina qistirmalari darajasidan oshib ketmasligini tekshiring.

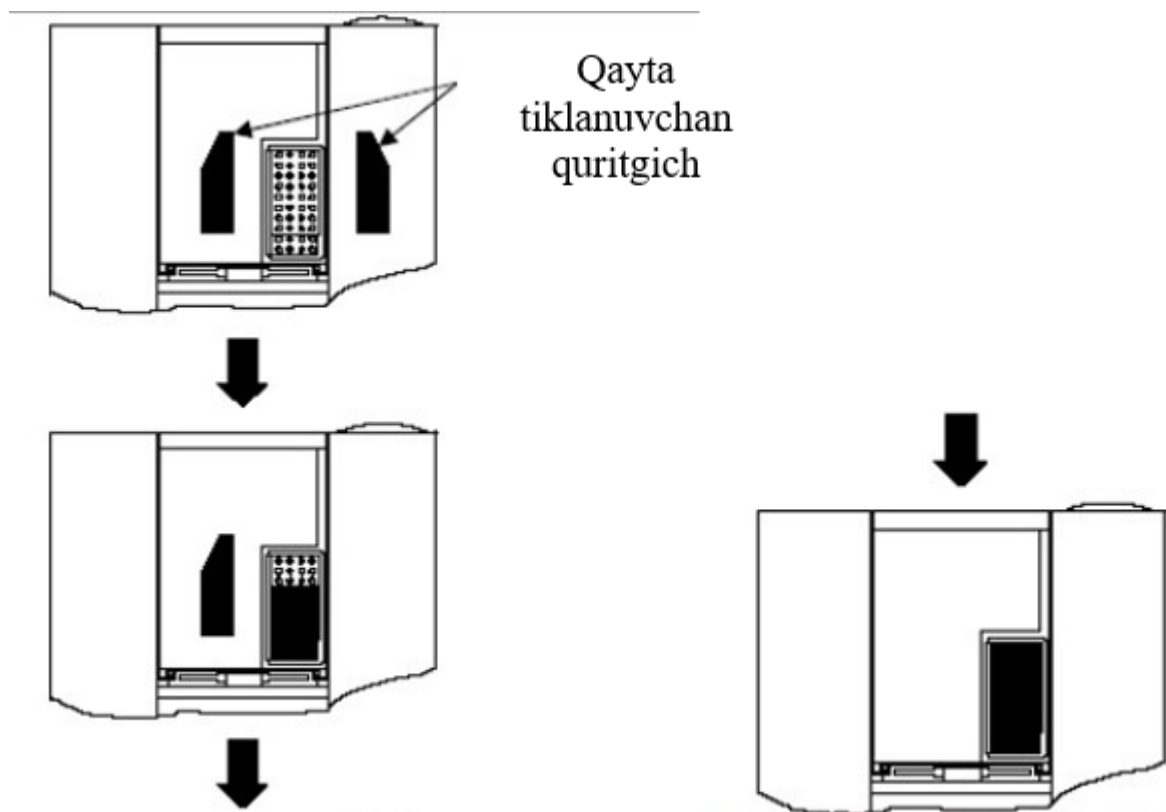


22 - rasm. O`rnatilgan quritgichli pakeklar

Qopqoqni yoping va vintlarni torting. Namuna bo'limi qopqog'ini joyiga qo'ying.

Qayta tiklanadigan quritgichni o'rnatish

Olti oylik xizmat muddatidan keyin qayta tiklanishi mumkin bo'lgan qurituvchi vosita ham mavjud. Ushbu quritgich bilan qoplarni quritadigan pechda 250°C haroratda 8 soat ushlab turish orqali tiklash mumkin. Keyingi sovutish quruq atmosferada amalga oshirilishi kerak. Yaxshi natijalarga erishish uchun ishlatishdan oldin sumkalarni qayta tiklang. Standart to'plamda to'rtta qayta ishlanadigan quritgich mavjud, shunda siz barcha quritgichni zudlik bilan almashtira olasiz va qurilishni qayta qurishda quritgichsiz qoldirmaysiz. Qayta ishlanadigan quritgichni o'rnatishda 23-rasmdagi protseduraga amal qiling.



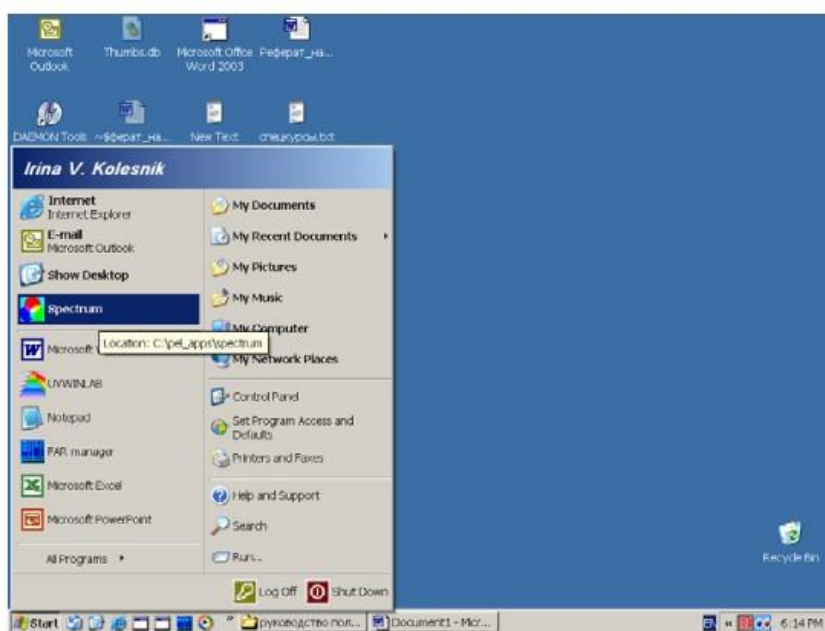
23 - rasm. Qayta tiklanadigan quritgichni o'rnatish

O'lchash uslubi

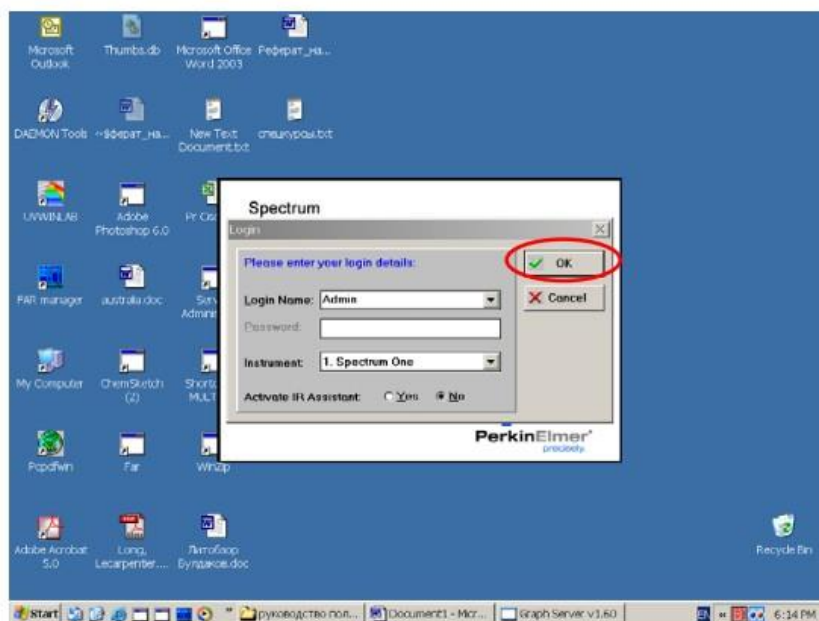
Jarayon tartibi

1. Dasturning ochilishi

Boshlash menyusidan Spektrum ni tanlang

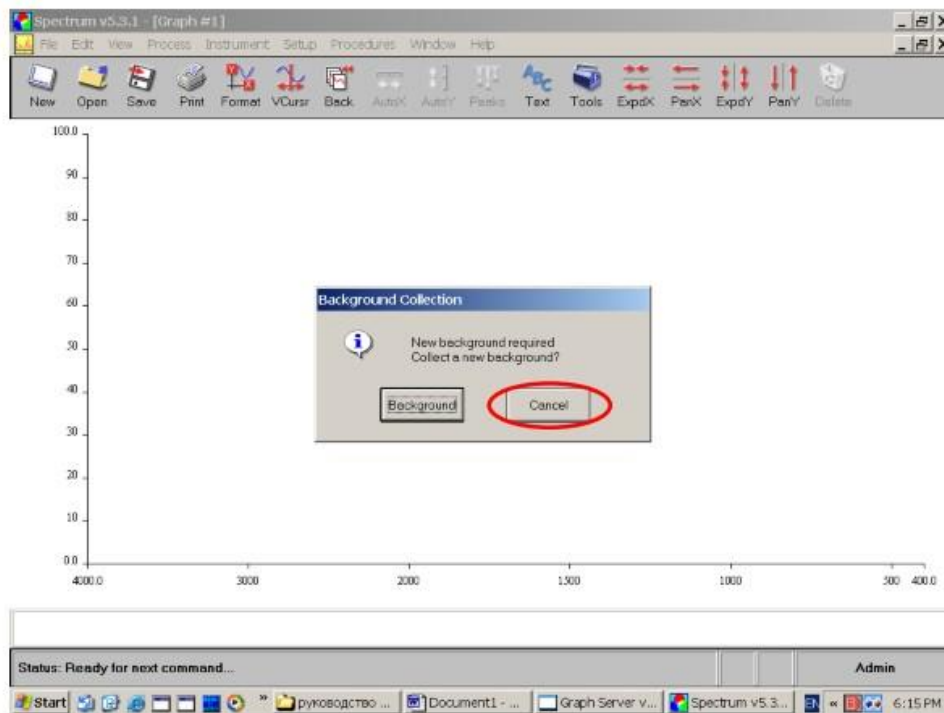


va paydo bo'lgan **OK** oynada bosing.

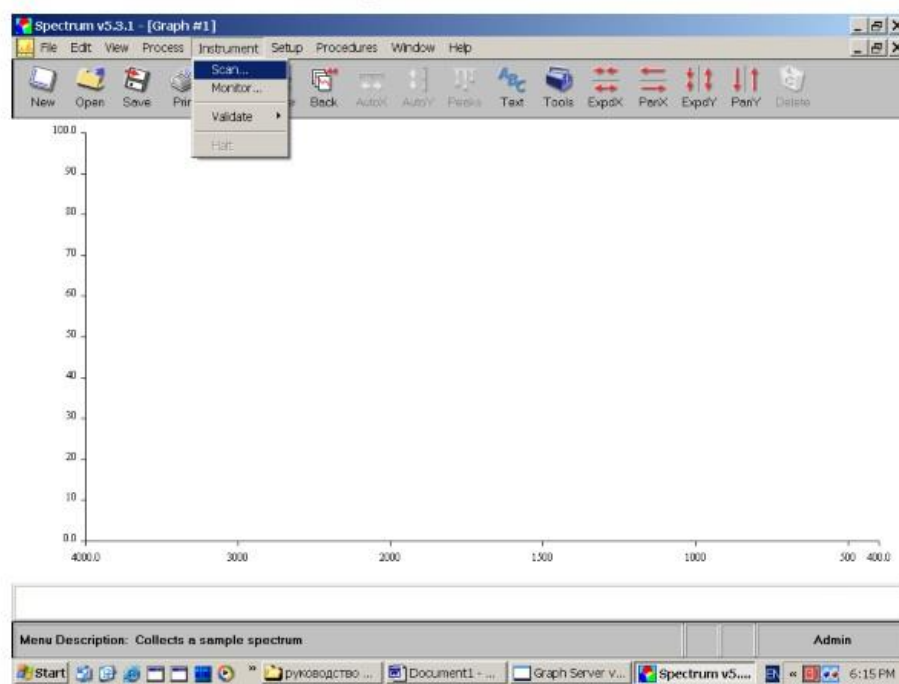


2. Spektri fonini suratga olish

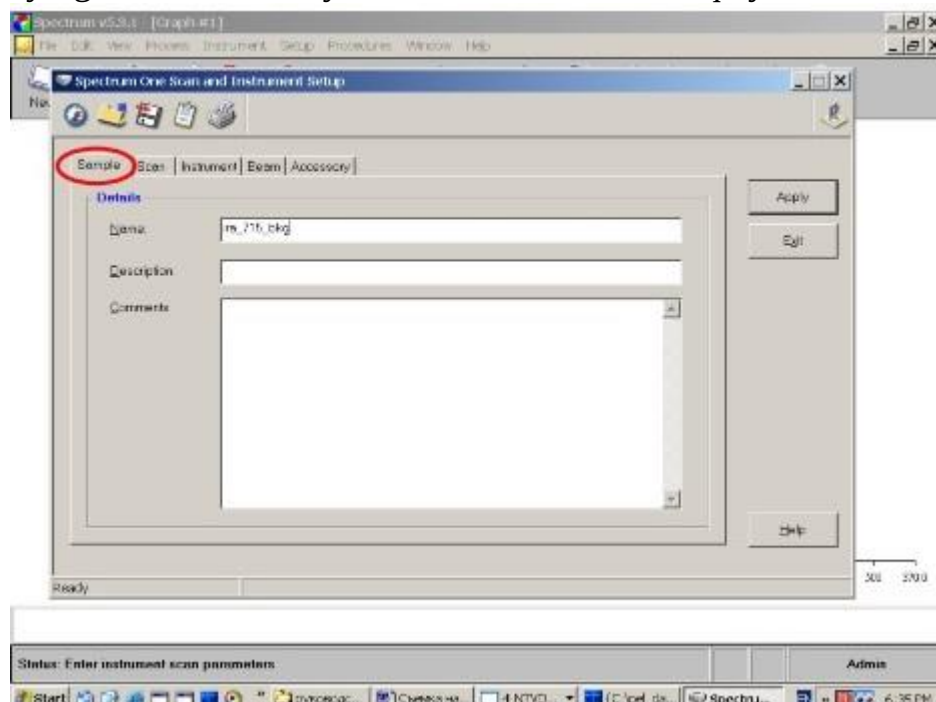
Keyinchalik, fonni olib tashlash uchun dasturning asosiy oynasi va Fonlarni yig'ish oynasi ochiladi. Bekor qilish tugmasini bosing. Buning sababi shundaki, dastur avtomatik ravishda fon spektrini faqat bitta skanerlashni amalga oshiradi, shu bilan birga namuna spektrini ro'yxatdan o'tkazishda signal-shovqin nisbatlarini oshirish uchun kamida o'n oltita skanerlash talab etiladi. Shunga ko'ra, fon spektri bir xil sharoitda o'lchanishi kerak.



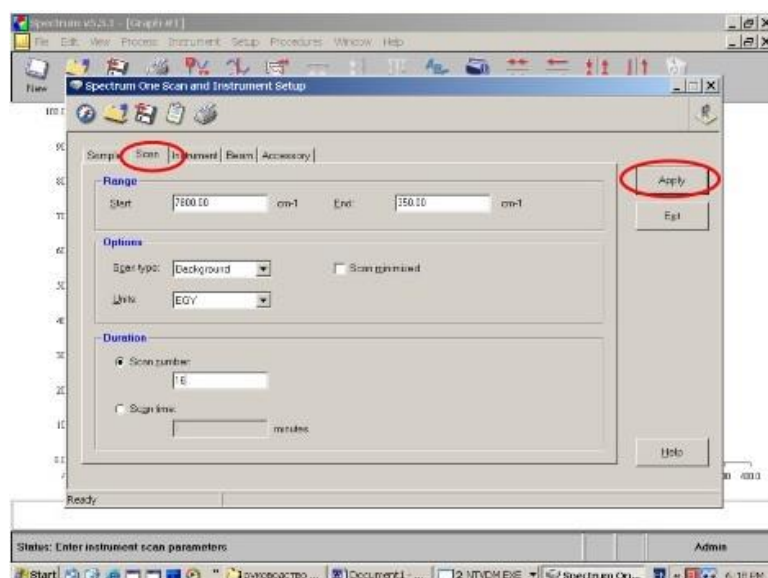
Instrument oynasida ***Scan ni tanlang***



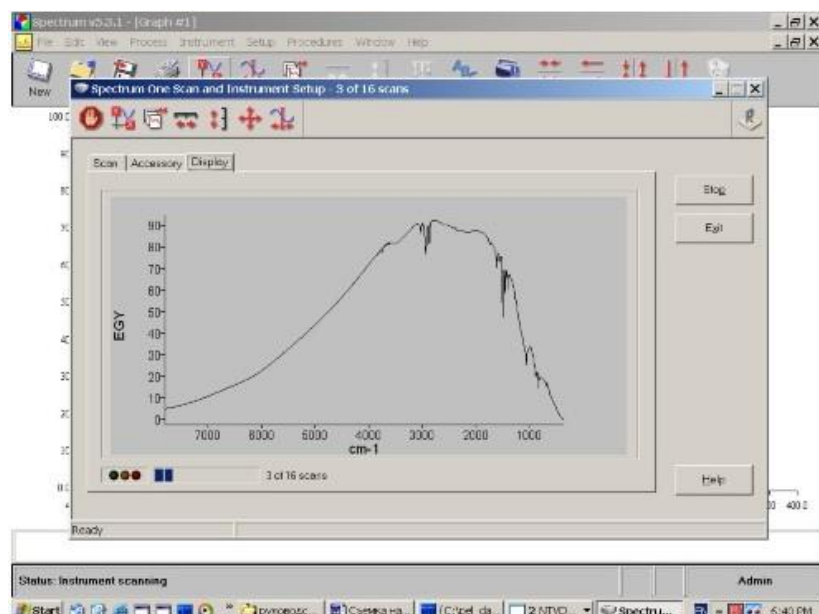
Namuna yorlig'ida fayl nomini o'rnatish, masalan, ira_715_bkg. Fayl nomi albatta _bkg bilan tugashi kerak, chunki bu holda spektrometr uni avtomatik ravishda keyingi o'lchovlar seriyasi uchun fon sifatida saqlaydi.



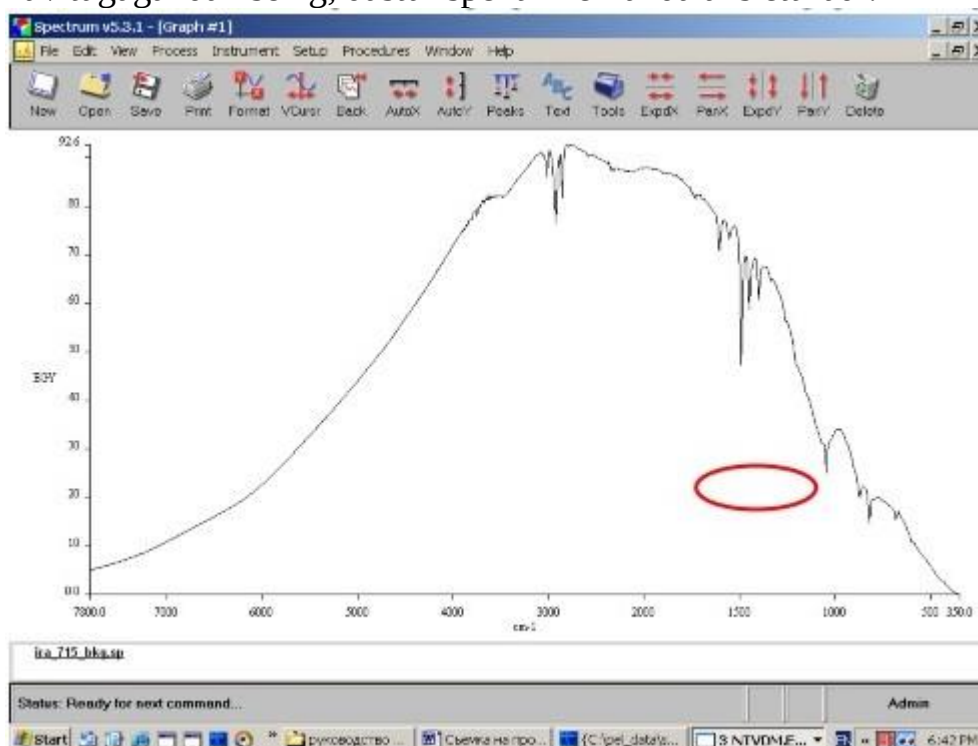
Skanerlash yorlig'ida quyidagi parametrlarni o'rnatish: (Boshlash: 4000 cm^{-1} , Tugatish: 350 cm^{-1} , Skanerlash turi: fon, birliklar: EGY, Skanerlash raqami: 16). Yuqoridagi o'ng burchakda Ilova-ni bosing, so'ngra Scan-ni tanlang.



Bunda kulrang oyna ochiladi, unda o'lchangan spektr, pastki burchakda esa o'tkazilgan skanerlar soni ko'rsatiladi.



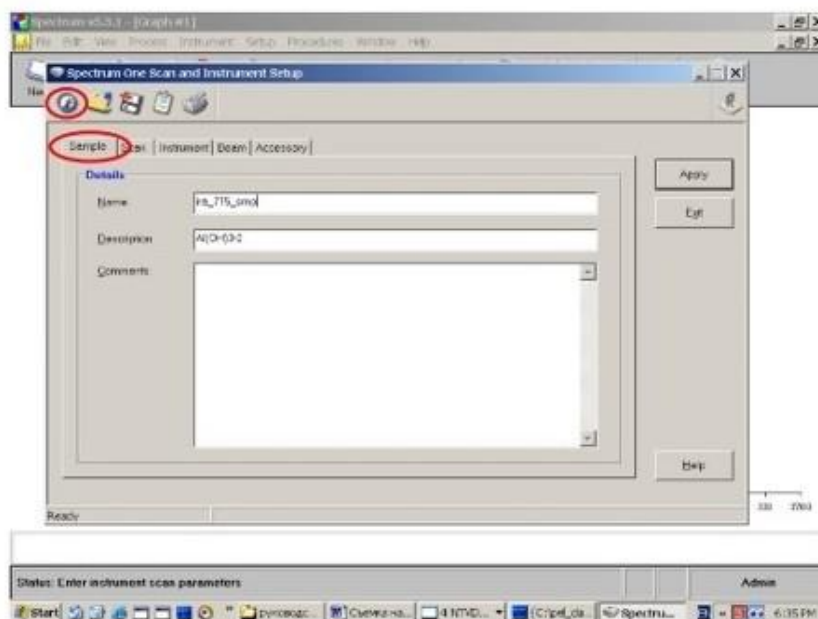
Tekshiruv tugagandan so'ng, dastur spektrni ekranda aks ettiradi.



2. Namuna olish

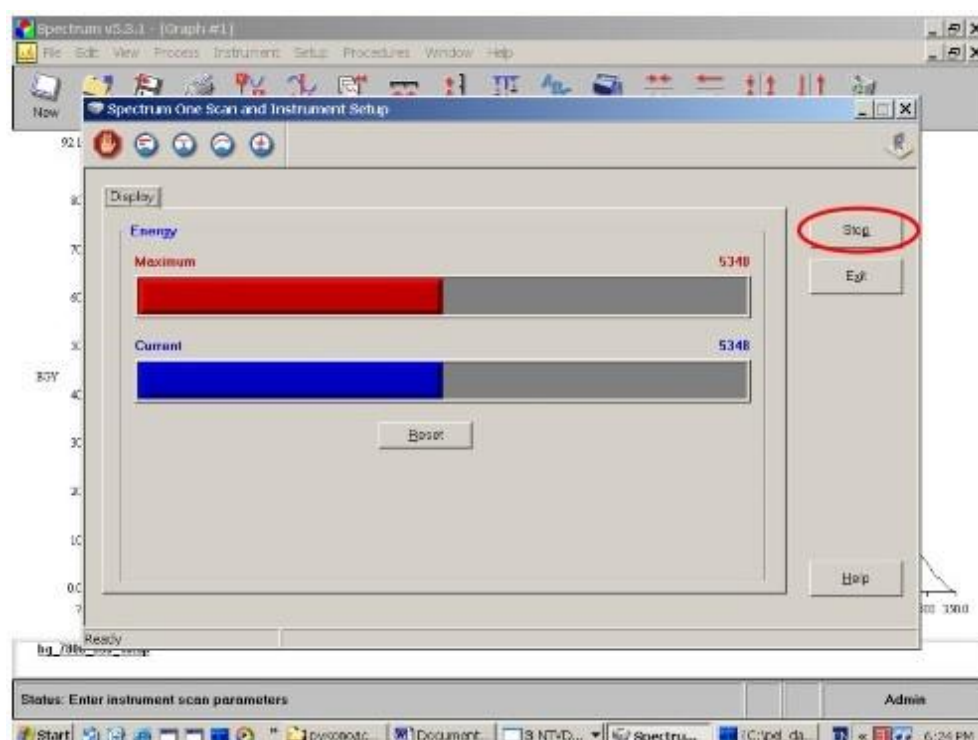
Instrument oynasida Scan ni tanlang.

Namuna yorlig'ida **Sample** nomini o'rnatish, masalan, ira_715_smp, shuningdek tavsif (tavsif) va kerak bo'lsa izohlarni yozing: namunaning mohiyati, qanday olinganligi, mumkin bo'lgan molekulyar formulasi va boshqalar. So'ngra, Scan yorlig'ida skanerlash turini o'rnatish: sample.

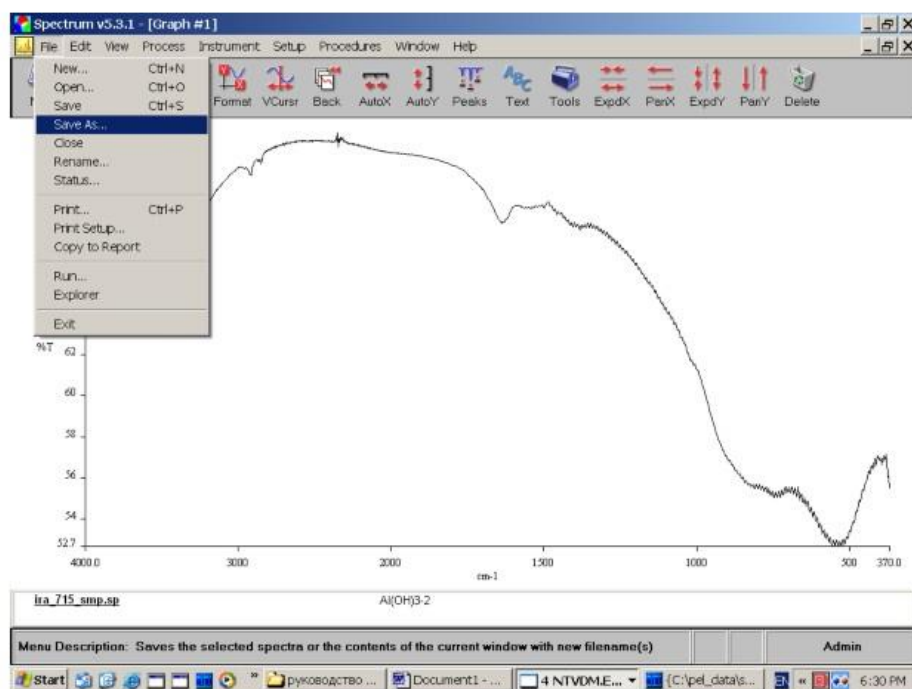


Keyin yuqoridagi rasmda ko'rsatilgandek yuqori chap tugmachani bosing. Ushbu operatsiyani bajarish planshetning uzatilgan yorug'lik nuriga nisbatan maqbul holatini (eng yuqori uzatish intensivligi) topish uchun zarurdir. Bunday holda siz ekranda kuzatilishi mumkin bo'lgan eng yuqori energiya qiymatini topish uchun qo'lingizni ehtiyotkorlik bilan kyuvet bo'lagiga yopishtirishingiz va namuna ushlagichini yuqoriga, pastga va u yoqdan bu tomonga siljitirishingiz kerak. Energiya qiymatlari (pastdagi rasm) 1000 dan past bo'lganligi IQ spektrini yozib olish uchun namuna shaffof emasligini anglatadi va namunani tayyorlashni takrorlash kerak, bu esa tabletdagi analit miqdorini kamaytiradi.

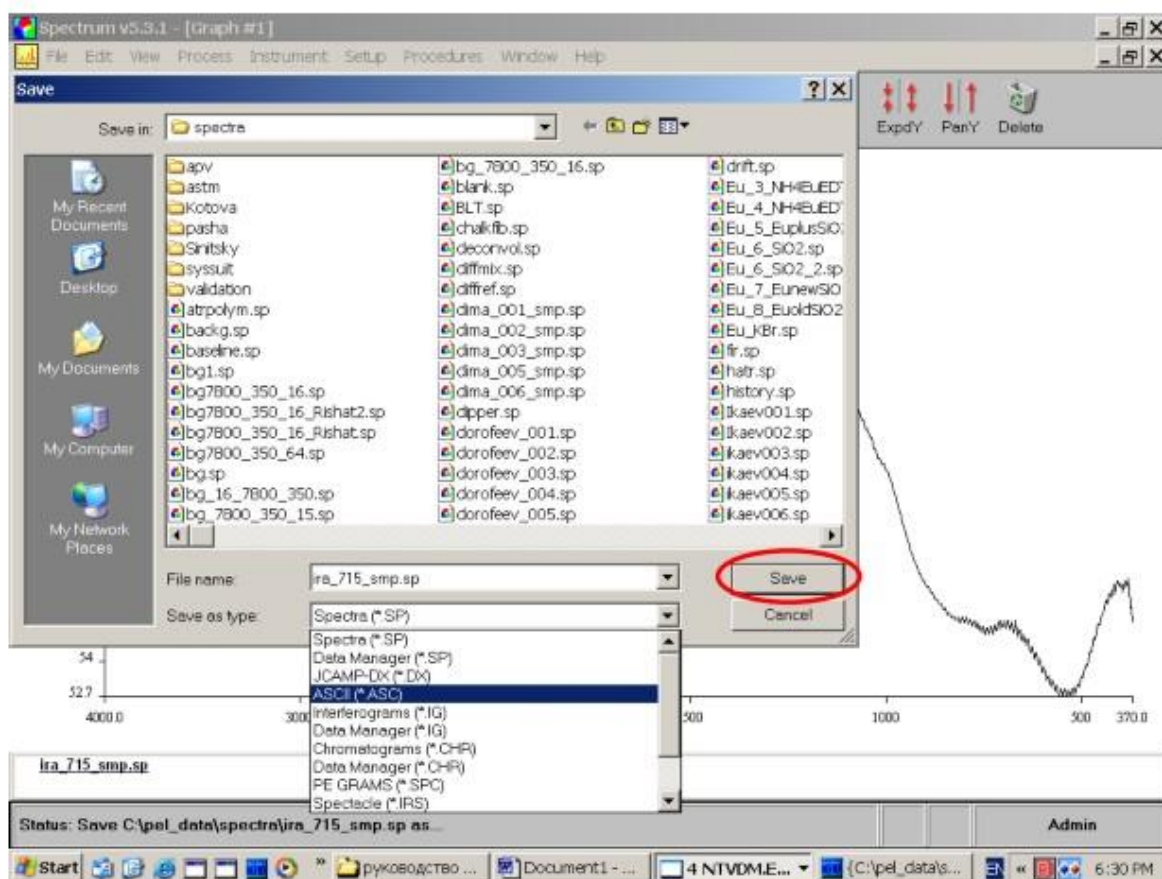
So`ngra **Stop**, **Apply** va **Scan** ni bosing.



Keyinchalik, Fayl menyusidagi Save as buyrug'ini tanlab, natijada olingan File ni saqlashingiz kerak.

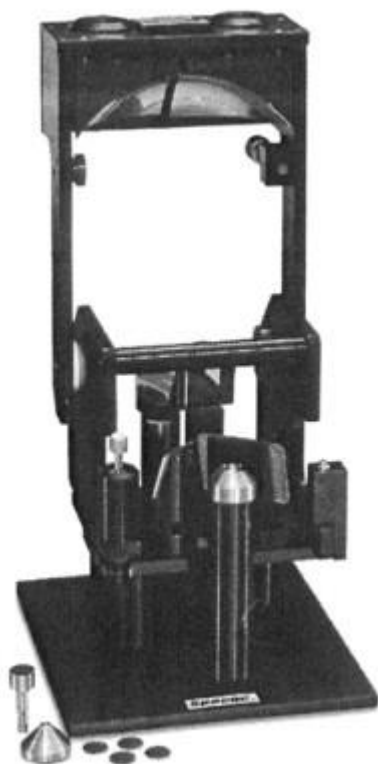


ACSII formatni tanlang va Save tugmasini bosing.



Diffuz aks ettirish spektrlarini olish uchun biriktirma

Yorug'likning qattiq jismdan aks etishi tarqoq yoki ko'zoynakli bo'lishi mumkin yoki ikkala komponentga ham ega (to'liq aks ettirish). Diffuz nurli nur - bu namunaviy material tomonidan tarqalib ketgan nurlanish. Ushbu biriktirma (25-rasm.) O'qdan tashqari optik elementlarning maqbul konfiguratsiyasidan foydalanadi, bu sizga aks ettirilgan nurlanishning diffuz komponentining maksimal intensivligini ajratish va aniqlashga imkon beradi, bu esa spekulyar aks ettirishning hissasini minimallashtiradi. Ko'zgularning eksa tashqarisida joylashishi, shuningdek, moslama (pristavka) imkoniyatlarni kengaytirishga imkon beradi, uni boshqa ixtisoslashtirilgan moslama (pristavka)lar bilan birgalikda ishlatadi, masalan, gaz atmosferasida o'lchov kamerasi.



25 - rasm. Diffuz aks ettirish spektrlarini olish uchun moslama (pristavka)ning umumiy ko'rinishi

Namunaviy kyuvet to'plami standart 11 mm stakan, 4 mm mikro stakan va moyil stakanni o'z ichiga oladi. To'liq aks ettirish namunalarini olish uchun moyil kosadan foydalanish mumkin. Bundan tashqari, 12 mm diametrli abraziv pichoqlar bilan birgalikda ishlatiladigan abraziv yuzaga ega namuna ushlagich mavjud. Aşındırıcı chiziq yordamida siz namuna yuzasidan namuna olishingiz va keyin uni moslama (pristavka)dagi tegishli ushlagichga qo'yishingiz mumkin.

Moslama (pristavka)dagi nur yo'lining yo'nalishi muhim ahamiyatga ega. Chapdan o'ngga yoki o'ngdan chapga nur yo'nalishidagi birikma (nurlanish

manbasidan spektrometrdagi detektorga yo'nalish) faqat mos keladigan taglikka mos keladi, bu ham spektrometrdagi nur yo'nalishi bilan belgilanadi. Taglik taxtasini o'zgartirib, biriktirma turli xil spektrometrlarga o'rnatilishi mumkin, ammo spektrometrlarning optik tizimlari bir xil nur yo'nalishiga ega bo'lishi kerak.

Yetkazib berishning to'plami

- Chapdan o'ngga yoki o'ngdan chapga nur tarqalishi uchun tuzilgan yig'ilgan optikali 1 ta moslama (pristavka)

- chapdan o'ngga yoki o'ngdan chapga nur yoyilishi uchun tuzilgan 4 ta qavs bilan 1 taglik taxtasi

- namuna egasi uchun 1 ta yordam
- 1 ta mikro namunaviy idish (diametri 4 mm, chuqurligi 2,5 mm)
- 2 ta namunaviy stakan (diametri 11 mm, chuqurligi 2,5 mm).
- 1 qiyalik kosasi
- 2 ta abraziv ushlagich
- 1 ta abraziv yostiqchalar va yopishtiruvchi pastki yuzasi (diametri 20 va 12 mm)

- 1 uzun T shaklidagi olti burchakli kalit
- 1 olti kalit 1,5 mm
- 1 dona olti burchakli kalit 2,0 mm
- Nometalni aylantirish va sozlash uchun 1 ta qo'l
- Moslama (pristavka) taglikni mustahkamlash uchun murvatlar va yuvish moslamalari

Spektrometrga o'rnatish uchun plyonkani taglik taxtasi va boshqa qismlar bilan birga paketdan ehtiyotkorlik bilan olib tashlang.

Ehtiyot choralari

Aksessuar va unga qo'shib qo'yilgan standart taglik plitasi va namuna ushlagichlari bilan ishlashda, xavfli moddalar bilan ishlashdan tashqari (masalan, namuna zaharli, xavfli bo'lsa) maxsus ehtiyot choralari talab qilinmaydi.

Gaz kamerasi bilan to'ldirilgan moslama (pristavka) bilan ishlashda gaz kamerasi uchun foydalanuvchi qo'llanmasida tavsiya etilgan ehtiyot choralariga rioya qilish kerak, chunki u erda yuqori harorat va bosim ishlatilgan.

O'rnatish

Asosiy plitani o'rnatish

Diffuz aks ettirish spektrlarini olish uchun biriktirma spektrometr ichidagi maxsus tayanch plastinkada o'rnatiladi, bu esa ish paytida uning barqarorligini ta'minlaydi. Ushbu biriktirma tayanch plitasi va tahlillar o'tkazilishi kerak bo'lgan spektrometr ichidagi mahkamlash uchun zarur boltlar to'plami bilan ta'minlangan.

Ba'zi modellarning spektrometrlari bilan ishlashda (masalan, Mattson,

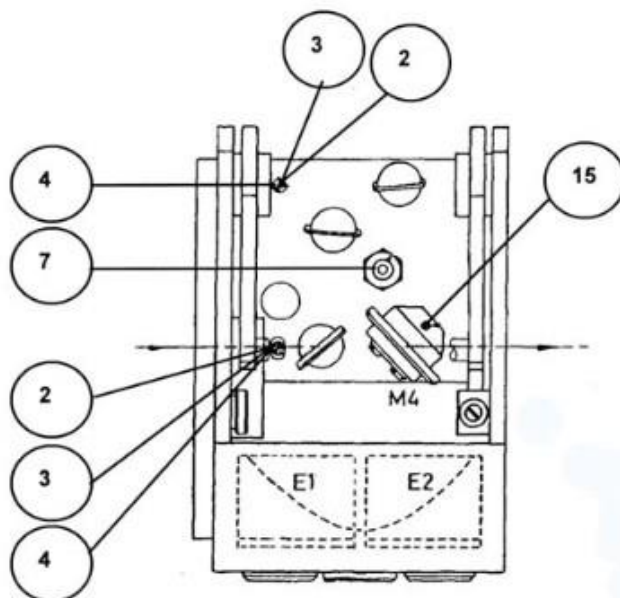
Bruker va Nicolet 500/700), unga optik zanjirni o'rnatishdan oldin biriktirma taglik taxtasini namuna bo'linmasiga alohida o'rnatish talab qilinadi. Spektrometrlarning boshqa modellariidan foydalanilgan taqdirda, moslama (pristavka)ning taglik taxtasida optik sxemani o'rnatish spektrometr namunalari bo'linmasiga o'rnatilishidan oldin amalga oshiriladi.

Asosiy plitaga biriktirmaning optik sxemasini qotirish

A) Moslama (pristavka)ning optik qismini ehtiyotkorlik bilan ko'taring va taglik taxtasi ustiga qo'ying. Ramkani elliptik nometall bilan tushirilgan (ishchi) holatda ushlab turish yaxshiroqdir, bu sizga biriktirma teshiklari va murvatlarining joylashishini ko'rishga imkon beradi va ularni taglik taxtasidagi tayoqchalar bilan tekislang. Moslama (pristavka)ning optik qismini taglikning tagiga (1) tushiring, shunda moslama (pristavka)ning optik qismining pastki qismidagi ikkita nazorat teshigi (2) o'rnatish tayanchlarida (4) ikkita joylashtiruvchi pim (2) ga o'rnatiladi va moslama (pristavka)ning boshqa tomoni uchinchi tekis o'rnatish tayanchida joylashgan (5).

Eslatma: O'rnatish teshiklari va pinlar / tayanchlar chap tomonda o'ng tomonga yo'nalish uchun biriktirmalarda chap tomonda va o'ngdan chapga yo'nalishda o'ng tomonda joylashgan. Nurni o'ngdan chapga yo'naltirish uchun (yoki aksincha) taglik taxtasida chapdan o'ngga nurli nurli biriktirmani o'rnatish mumkin emas.

Namuna ushlagichi (6) tayanch plitasining old qismida elliptik nometall ostida joylashgan bo'lishi kerak (E1, E2, 26-rasmga qarang).



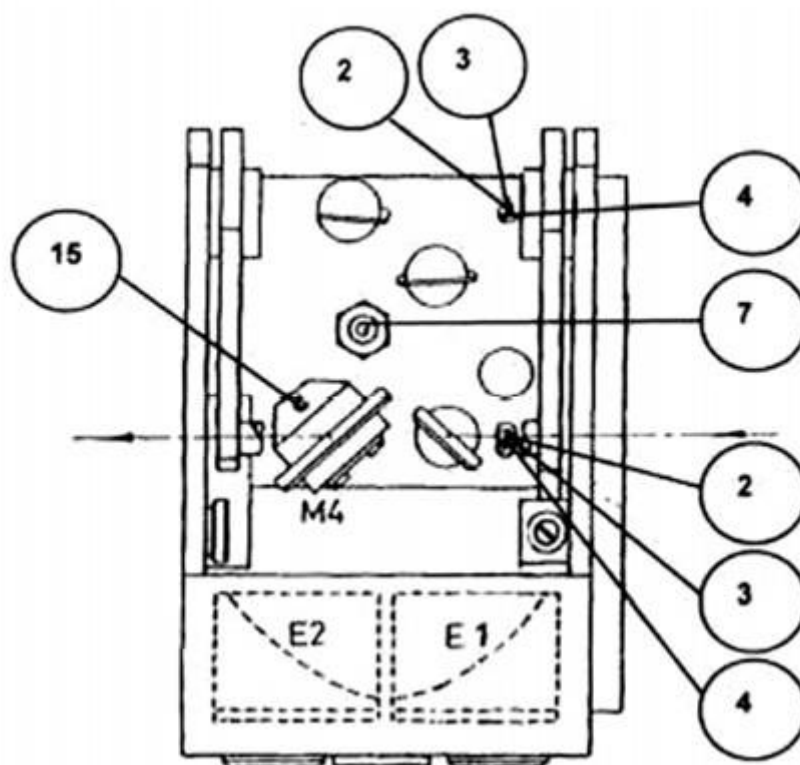
26 - rasm. Chapdan o'ngga nur yo'nalishi uchun biriktirmaning yuqoridan ko'rinishi

B) T shaklidagi olti burchakli kalit yordamida olti burchakli boltni (7) taglik taxtasidagi to'rtinchi o'rta tayanchga ehtiyotkorlik bilan torting (27 - rasm). Boltni taglik taxtasiga mahkamlash uchun ozgina tortilishi kerak, lekin

haddan tashqari tortilmagan bo'lishi kerak.

(Moslama (pristavka)ning optik qismi to'rtinchi o'rta tayanchga to'liq yotmasligi kerak).

C) Agar optik qism spektrometrdagi namuna bo'linmasida emas, balki taglik taxtasiga mahkamlangan bo'lsa, spektrometrga tayanch taxta bilan o'rnatib qo'ying. O'rnatilgan moslama (pristavka)ni maxsus tutqichni (8) ushlab ko'tarish va ko'chirish mumkin.



27 - rasm. Nurni o'ngdan chapga yo'naltirish uchun biriktirmaning yuqoridan ko'rinishi

Moslama (pristavka)ni darajalash

Diffuz aks ettirish spektrlarini olish uchun moslama (pristavka) ishlab chiqaruvchi tomonidan etkazib berilgunga qadar kalibrlangan va spektrometrning samaradorligini oshirish uchun faqat kichik sozlash talab qilinadi.

Eslatma: faqat ellipsoid oynalar (E2) va oyna (M4) sozlanishi mumkin. Ko'zgular (E2) va (M4) spektrometrning konfiguratsiyasiga qarab optik elementning chap yoki o'ng tomonida joylashgan.

Moslama (pristavka)ni sozlash va ishlashdan oldin namunani tanlangan stakanlardan biriga yoki abraziv yostiqa qo'yish kerak. Ezilgan KBr yoki KCl kukuni hizalama va fon spektrlari uchun mos yozuvlar namunasi sifatida olinishi kerak. Kukunni stakanga (9) qo'yish kerak, u o'z navbatida namuna ushlagichiga (6) joylashtiriladi. Namuna to'kilmasligi uchun stakanni avval

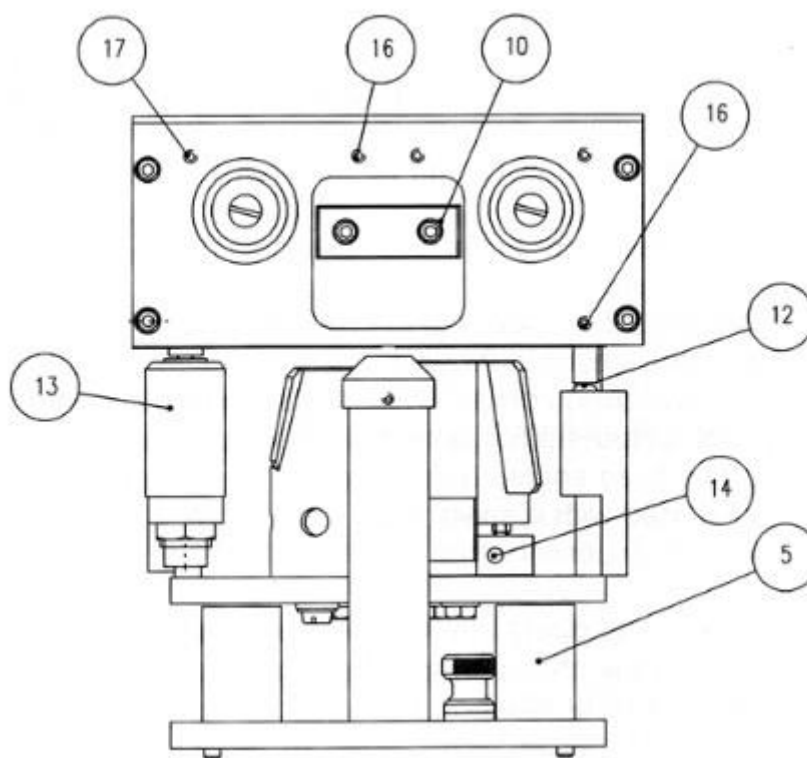
spektrometrdan optik elementni ko'tarib to'ldiring.

Namunani stakanga joylashtirish

A) standart 11 mm stakanni oling va ingichka dispersli kaliy bromidi yoki kaliy xlorid kukuni bilan to'ldiring. Shundan so'ng, yuqori sirtni stakan yoki silliqlangan metall plastinka bilan yaxshilab tekislang, shunda kukun darajasi stakaning yuqori qismiga teng bo'ladi.

B) Elliptik nometallni (E1, E2) qo'lingizni (10) ilova ushlagichining tayanch qo'lini vertikal holatiga o'tkazib sozlang.

C) KBr yoki KCl kukuni bilan to'ldirilgan idishni namuna ushlagichiga ehtiyotkorlik bilan joylashtiring (6). Moslama (pristavka)ga namunaning eng kichik to'kilishidan ham qochishga harakat qiling.

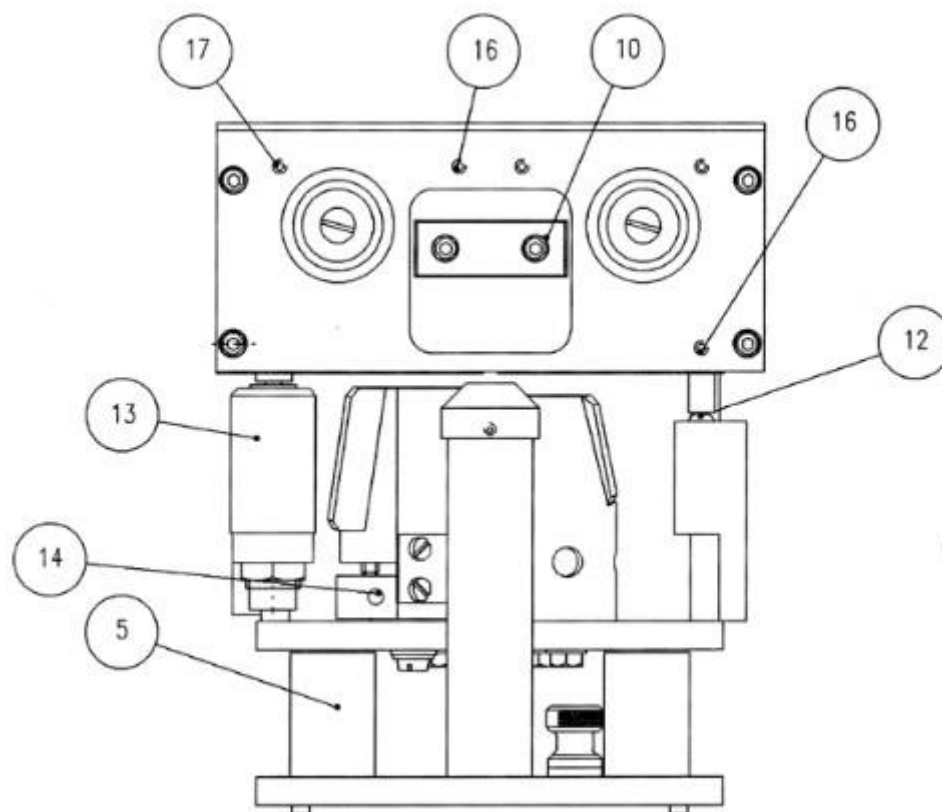


28 - rasm. Chapdan o'ngga nur yo'nalishi uchun biriktirma ko'rinishi

D) Elliptik nometallni (E1, E2) biriktirma ushlagichining tayanch qo'lini pastki holatiga tushiring, shunda balandlikni sozlovchi mikrometr vidasi (11) po'latdan yasalgan sharga (12) o'rnatiladi. Vibratsiyali söndürücü (13) harakatlanayotganda elliptik oynaning ustki tayanch qismi po'latdan yasalgan sharga suyanib, mahkamlanishga zarar etkazmasdan o'rnatilishini ta'minlash uchun moslangan.

Ushbu bosqichda spektrometrni aniqlash tizimida namunadan detektorgacha oz miqdordagi nurlanish aks etayotganini ko'rish mumkin. Detektorga qancha energiya tushishini ko'rish uchun Spectrum One boshqaruv

dasturining yuqori panelidagi Instrument → Monitor menyusini oching.



29 - rasm. Nurni o'ngdan chapga yo'naltirish uchun biriktirmaning oldindan ko'rinishi

Aniq tekislash

Namuna namuna ushlagichga o'rnatilgandan va spektrometrni aniqlash tizimi namunaviy nurlanish orqali uzatiladigan oz miqdordagi energiyani ko'rsatgandan so'ng, spektrometr optikasini aniq sozlash kerak. Bu spektrometrning aniqlash tizimi tomonidan o'lchangan signalning maksimal darajasi kuzatiladigan oynalarning shunday holatini topishdan iborat. Nometallni aylantirish uchun qo'lni joylashtiring va uni asbobning old qismida joylashgan chiqish oynasining (M4) panelidagi (14) teshikka joylashtiring. Signalni kuzatayotganda qo'lni yumshoq o'ngga yoki chapga siljiting. Ushbu qo'l tashqi oynani (M4) aylantirib o'rnatadi.

E) 2 mm Allen kalitini vertikal ravishda yuqoriga qarab tekis uchi o'rnatilgan vintga (15) joylashtiring va signalni kuzatayotganda soat yo'nalishi bo'yicha yoki teskari yo'nalishda buriling.

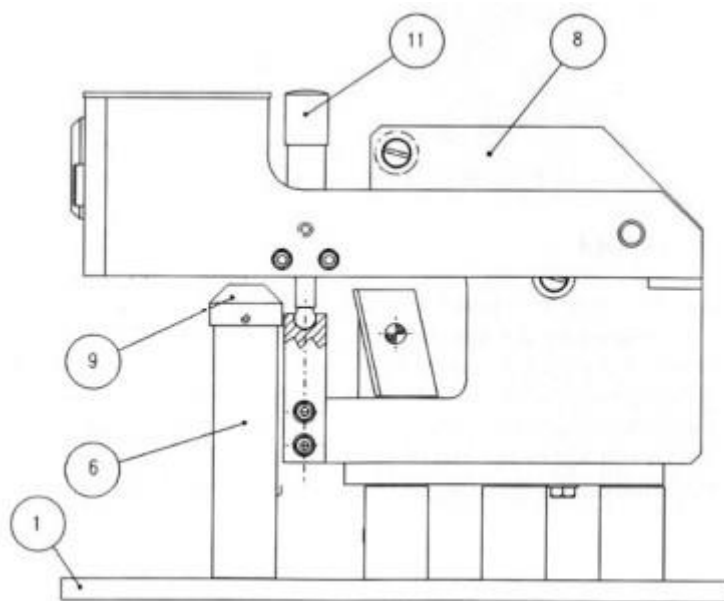
Spektrometr nurining optik yo'lini qo'lingiz bilan to'sib qo'ymaslik uchun ehtiyot bo'ling.

F) 1,5 mm Allen tugmachasidan foydalanib, signalni kuzatayotganda kalitni diagonali vintlardek (16) joylashtirib, soat yo'nalishi bo'yicha yoki soat

miliga teskari burab, tashqi elliptik oynani (M2) sozlang.

Eslatma: Sozlashda burchakli vintni (17) ishlatmang!

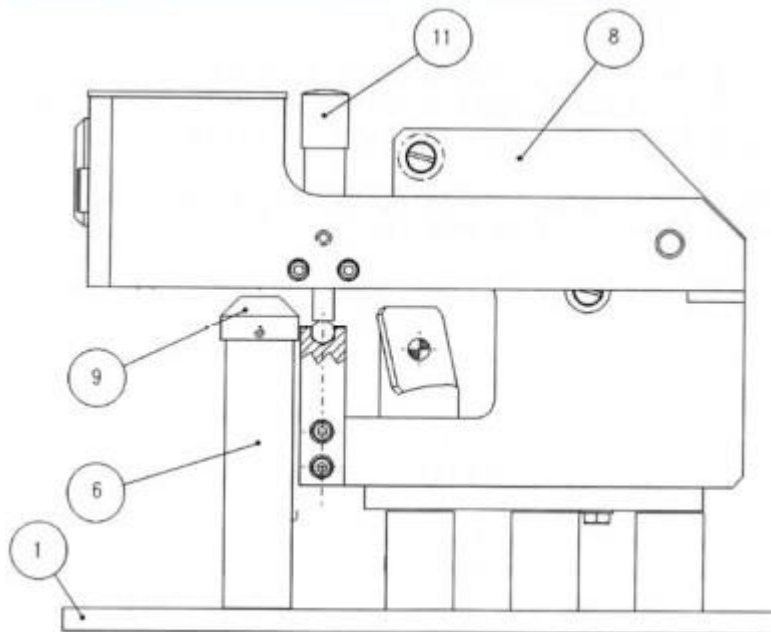
G) Elliptik nometallning namuna yuzasidan balandligini sozlash orqali signalni ko'taring. Mikrometrni sozlash murvatini (11) soat yo'nalishi bo'yicha burab qo'yish, ko'zgulardan namunaga qadar bo'lgan masofani oshiradi, soat sohasi farqli o'laroq, bu masofani kamaytiradi va ularni namunaga yaqinlashtiradi. Shu bilan birga, nometall va namuna o'rtasida minimal masofa mavjud, unga erishgandan keyin soat sohasi farqli ravishda aylanishni to'xtatish kerak. Elliptik nometallning qo'l bilan harakatlanishi tebranish söndürücüsü (13) tomonidan to'xtatiladi.



30 - rasm. Nurni chapdan o'ngga yo'naltirish uchun moslama (pristavka)ning yon proektsiyasi

H) namunadan o'tgan nurlanishning energiya qiymati maksimal bo'lguncha E) va H) bosqichlarini takrorlang. Odatda, namuna orqali uzatiladigan energiya to'g'ridan-to'g'ri nurga nisbatan taxminan 5% ni tashkil qiladi.

Yansitilgan yorug'likning tarqoq va ko'zoynakli qismlarini to'playdigan egilgan chashka ishlatilganda, eng yuqori energiya signali kuzatiladi. E) va H) protseduralarini ishlatishdan tashqari, energiya signalini egilgan stakanni ozgina aylantirib oshirish mumkin. Energiya signali optimallashtirilgandan so'ng, egilgan stakan ustidagi mahkamlash vintini mahkam torting va shu bilan stakanni namuna ushlagichining dastagiga mahkamlang.



31 - rasm. O'ngdan chapga nur yo'nalishi bo'yicha moslama (pristavka)ning yon proektsiyasi

Namuna tahlili

Diffuziya aks ettirish spektrlarini olish uchun biriktirma ustidagi namunalarni o'rganish namunaviy stakanlarda ham, abraziv ushlagichlar yordamida ham amalga oshiriladi.

Namunasi uchn chashka

A) nozik disperslangan KBr yoki KCl kukunlari yordamida fon aks ettirish spektrini olib tashlang (o'lchov tartibi bo'limiga qarang). (Qo'llab-quvvatlash qo'lidagi elliptik nometall pastga qarab bo'lishi kerak)

C) Elliptik nometallni (10) qo'l bilan, vertikal holatga ko'taring, namuna stakanidan o'tishga imkon bering.

C) namuna kosasini olib, namuna va KBr yoki KCl aralashmasi bilan to'ldiring. Shundan so'ng, aralashmaning yuqori yuzasini shisha plastinka yoki silliqlangan metall plastinka bilan yaxshilab tekislang, shunda kukun darajasi stakaning yuqori qirrasida bo'ladi.

E) To'ldirilgan stakanni ushlagichga qo'ying va elliptik oynalarni pastga tushiring. Namuna spektrini yozib oling (o'lchov protsedurasi bo'limiga qarang).

Abraziv tutqichlari

Abraziv plitalardan foydalanganda, plitalarning spektrlari fon sifatida ishlatilishi kerak. **Biroq**, ular ba'zi spektrometrlarda past signal o'tkazuvchanligini berishi mumkin. Bunga yo'l qo'ymaslik uchun fon signalini yaxshilash uchun abraziv yostiqqa KBr yoki KCl kukuni sepish tavsiya etiladi.

E) Abrziv **ushlagichni** oling va po'lat ushlagichning yuziga 11 mm toza abraziv yostiqni ulang (ular pastki qismida yopishqoq).

F) Abraziv ushlagichni va plastinani biriktirmaning namuna ushlagichi (6) ga joylashtiring (abraziv ushlagichining qisqichini namuna ushlagichining yuqori qismida joylashgan teshikka joylashtiring), elliptik oynalarni pastga tushiring va aks ettirish spektrini fondan yozib oling (o'lchov tartibi bo'limiga qarang).

G) abraziv ushlagich va yostiqqa kirish imkoniyatini ta'minlash uchun elliptik nometallni ko'taring va ularni namuna ushlagichidan olib tashlang. Abraziv plastinka yordamida namuna yuzasidan namuna oling.

H) abraziv tutqich va pichoqni qo'shimchaga joylashtiring. Elliptik nometallni pastki holatiga tushiring va tuproq namunasining spektrini yozing (o'lchov tartibi bo'limiga qarang).

Shartli belgilar

1. Dasturxonning asosiy taxtasi
2. Ruxsat etilgan uyalar
3. Taglik taxtasida joylashgan dübel pimi
4. Pimni aniqlash uchun tayanch plastinka tayanchi
5. Yassi tayanch oyog'i
6. Namuna egasini qo'llab-quvvatlash
7. Olti burchakli kalit
8. Abraziv plastinka ushlagichi
9. Kubok namunasi
10. Qo'shimchani ko'tarish uchun tutqich
11. Balandlikni sozlash uchun mikrometrli vint
12. Chelik shar (to'xtash)
13. Tebranish tormozi
14. M4 tashqi tashqi oynasi
15. M4 tashqi oynasi uchun burilishni sozlash vidasi
16. E2 tashqi elliptik oynali diagonali vintlardek
17. E2 tashqi elliptik oyna uchun burchakli vint

E1 Elliptik oynaning ichida E2 Elliptik oynaning tashqarisida M4 Tashqi oynada

4. O'lchov natijalari

1-masala. Alyuminiy gidroksidning IQ spektrlarini o'rganish

1-sonli muammoni o'rganish ob'ektlari:

1. alyuminiy gidroksidi ($\text{Al}(\text{OH})_3$ -1 deb belgilangan)

2. $\text{Al}(\text{OH})_3$ -1 termogravimetrik analizidan so'ng 25-1100°C harorat oralig'ida olingan alyuminiy gidroksidi ($\text{Al}(\text{OH})_3$ -2 deb belgilangan)

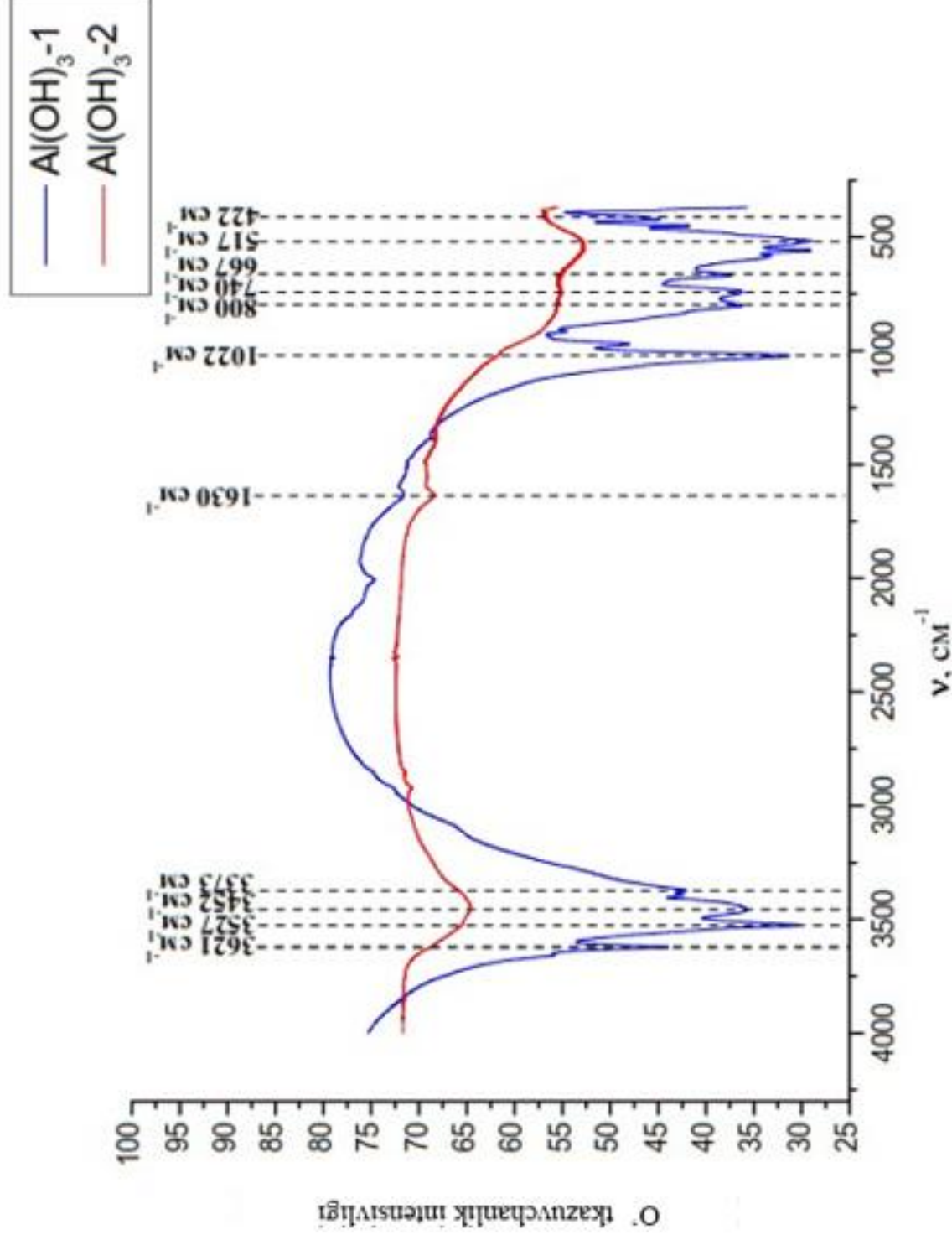
Dastlabki alyuminiy gidroksidning IQ-spektrida (31-rasm.) -OH bog'lanishining cho'zilgan tebranishlari sohasida bir nechta yutilish bantlari kuzatiladi, ulardan biri 3621 cm^{-1} da tor bo'lgan -OH bog'lanishining cho'zilgan tebranishlariga mos keladi, vodorod aloqalari bilan buzilmaydi, boshqalari esa 3452 cm^{-1} va 3373 cm^{-1} , alyuminiy oksidhidroksidning bog'langan

gidroksillalarining tebranishlarini cho'zish [7]. 1630 sm^{-1} diapazoni suvning egilish tebranishlariga to'g'ri keladi, 1022, 970, 800 va 740 sm^{-1} diapazonlari gidroksidlarning OH guruhlarining egilish tebranishlaridan kelib chiqadi. Al-O aloqasi $559\text{--}422\text{ sm}^{-1}$ hududida yutilish polosalarini beradi.

O'z navbatida $\text{Al}(\text{OH})_3\text{--}2$ ning IQ spektri - OH bog'lanishining cho'zilgan tebranishlarini (3452 sm^{-1}), suvning egilish tebranishlarini (1630 sm^{-1}), Al-O bog'lanishining tebranishlarini ($559\text{--}422\text{ sm}^{-1}$) saqlaydi. va $1022\text{--}740\text{ sm}^{-1}$ hududida gidroksidlarning -OH guruhlarining egilish tebranishlari, ammo -OH guruhlarining barcha tebranishlarining intensivligi sezilarli darajada pasayadi.

Suyuq kerosin va geksaxlorobutadienda qayd etilgan alyuminiy gidroksidlarning IQ spektrlarida (32-rasm) KBr tabletkalarida qayd etilgan alyuminiy gidroksidlarning spektrlarida bo'lgani kabi bir xil tebranish chastotasi diapazonlari mavjud. Vazelin moyidagi spektrlarning tahlili $2000\text{--}350\text{ sm}^{-1}$ chastota diapazonida va geksaxlorobutadienda qayd qilingan spektrlarning tahlili - $4000\text{--}2000\text{ sm}^{-1}$ chastota diapazonida amalga oshirildi, bu vazelin moyi va geksaxlorobutadienning $4000\text{--}2000\text{ sm}^{-1}$ diapazonlarida singishi bilan bog'liq. va mos ravishda $2000\text{--}350\text{ sm}^{-1}$ (33-rasm). Shuni ta'kidlash kerakki, suyuq kerosinda qayd qilingan spektrlarda suvning deformatsiya tebranishining 1630 sm^{-1} diapazoni geksaxlorobutadiyendagi spektrlarga nisbatan deyarli yo'q.

Alyuminiy gidroksidni 1100°S haroratgacha qizdirgandan so'ng, -OH bog'lanishlarining barcha tebranishlarining intensivligi sezilarli darajada pasayadi, lekin butunlay yo'qolmaydi, bu $\text{Al}(\text{OH})_3\text{--}2$ tarkibida hanuzgacha gidroksil guruhlari mavjudligini ko'rsatadi



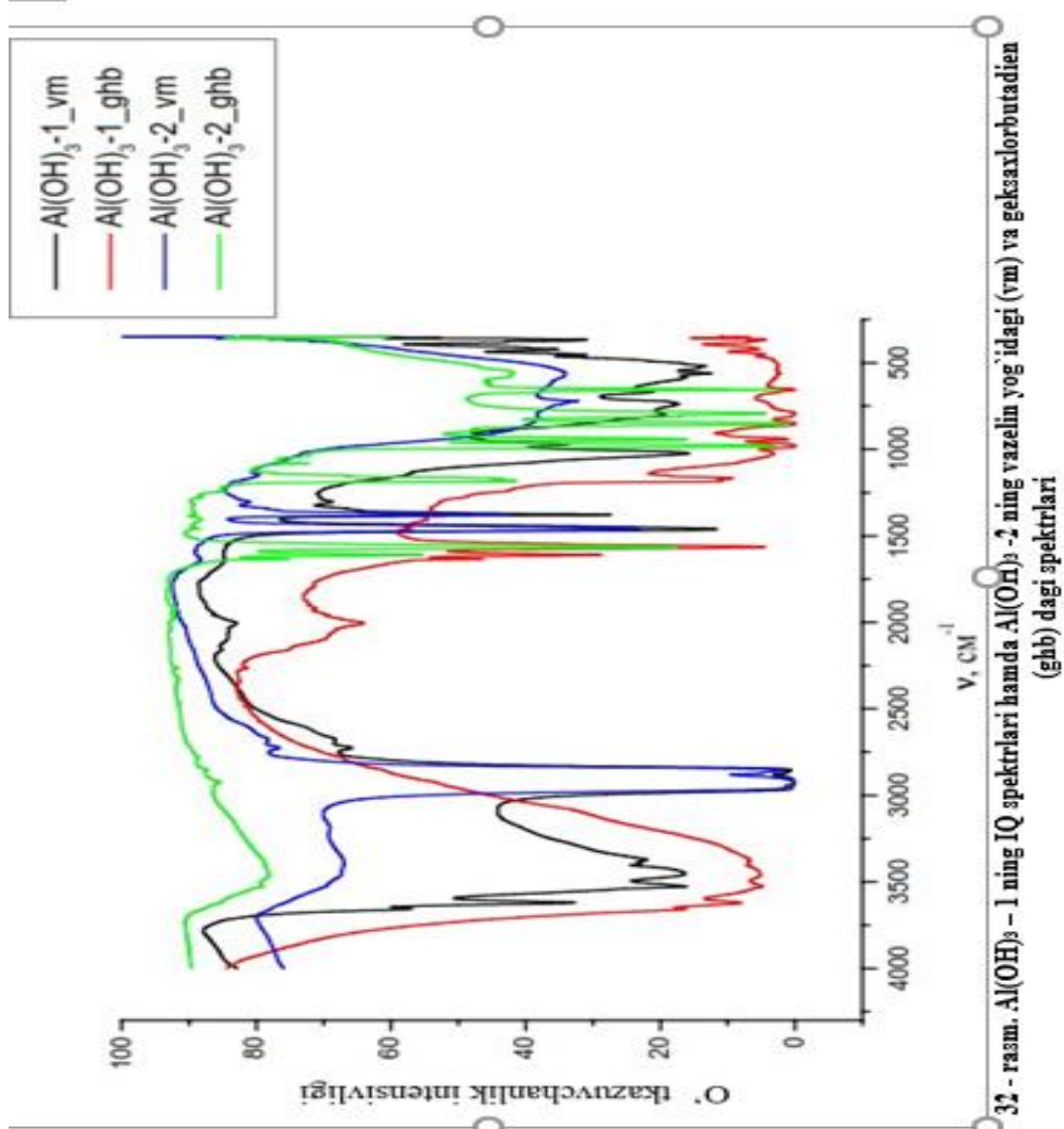
31 - rasm. Al(OH)_3-1 alyuminiy gidroksidining IQ spektrlari va Al(OH)_3-1 (Al(OH)_3-2 belgisi) termogravimetrik analizidan so'ng olingan modda. Spektrlar KBr dagi planshetlardan olingan.

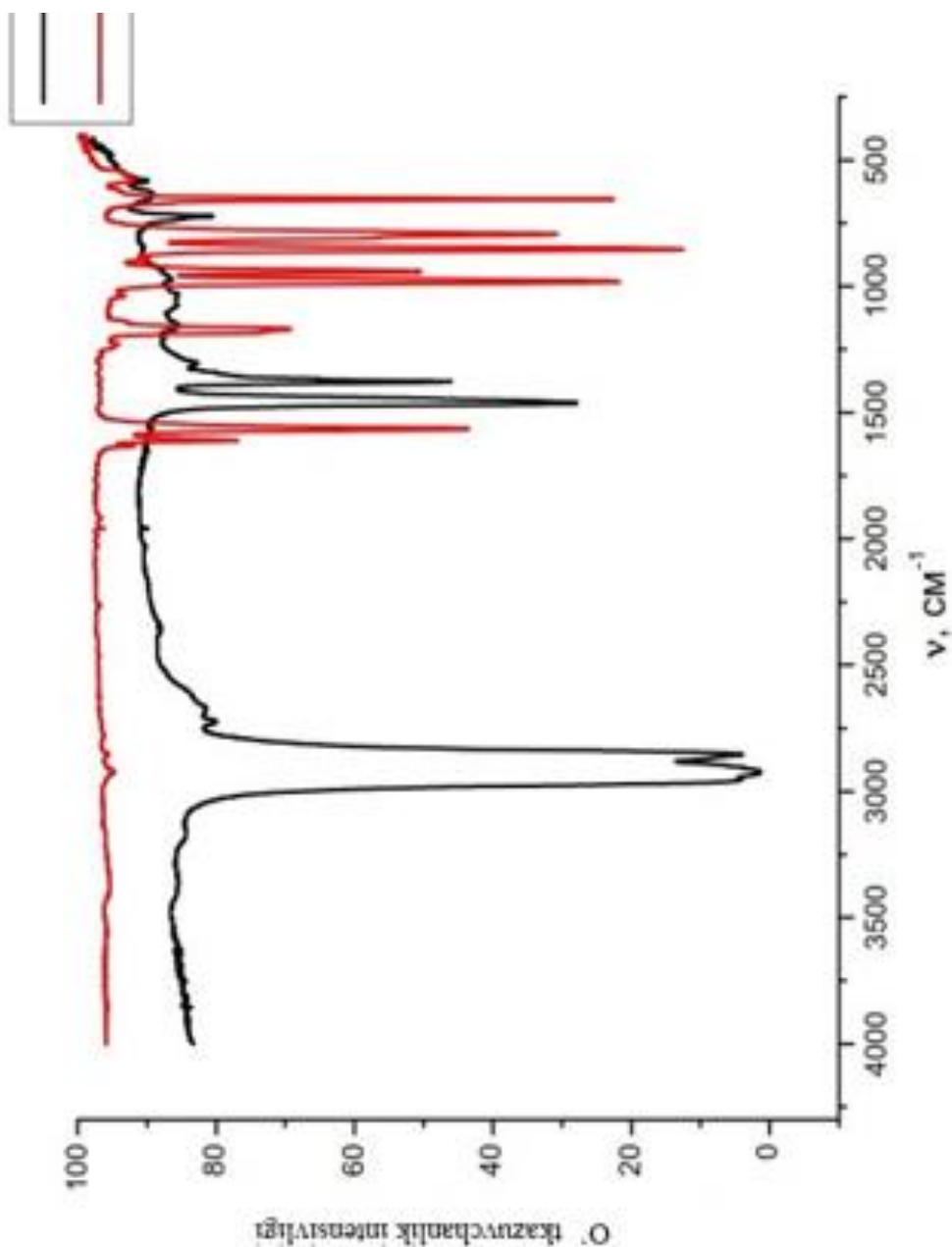
2 - jadval. $\text{Al}(\text{OH})_3$ – 1 ning IQ spektroskopik qiymatlari

Tebranish chastotasi sm^{-1}	Tavsifi	O`tkazih intensivligi, %
3621	Valent tebranishlar bog`i – OH	44
3527		30
3452	alyuminiy oksohidroksidning bog'langan gidroksillalarining tebranishlarini to`plami	36
3373		42
1630	suvning deformatsion tebranishlari	72
1022	gidroksidlarning -OH guruhlarining deformatsiya tebranishlari	31
970		48
800		36
740		36
667		37
559	Al-O bog`ining tebranishi	30
517		30
451		42
422		45

3 - jadval. $\text{Al}(\text{OH})_3$ – 2 ning IQ spektroskopik qiymatlari

Tebranish chastotasi, sm^{-1}	Tavsifi	O`tkazish intensivligi, %
3527	-OH valent tebranishlar bog`i	67
3452	alyuminiy oksohidroksidning bog'langan gidroksillalarining tebranishlarini to`plami	65
1630	Suvning deformatsion	72
740	gidroksidlarning -OH guruhlarining deformatsiya tebranishlari	55
540	Al-O bog`ining tebranishi	53





33 - rasm. vazelin yogʻI (vm) va geksaxlorbutadienning IQ spektri

2- masala. Seriy pivalatning IQ spektrlarini o'rganish

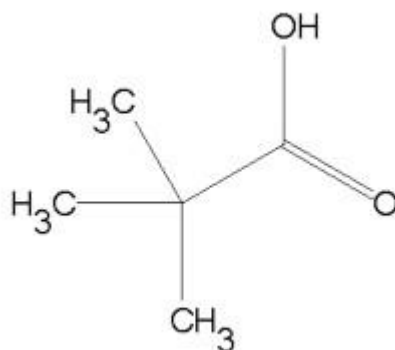
Noyob tuproq elementlarining (III) pivalatlar (trimetilatsetatlar) - bu shoxlangan alkil radikallari (tert-butil) bo'lgan karboksilatlar va shuning uchun ular yaxshi o'zgaruvchanlikka ega, bu ularni KVH jarayonlarida ishlatish uchun jozibali kashshoflar qiladi. Xususan, seriy pivalat $[Ce (Piv)_3(H Piv)_3]_2$ qiziqish uyg'otadi, chunki u fan va texnikaning turli sohalarida qo'llaniladigan seriy oksidi CeO_2 ning ingichka plyonkalarini yotqizish uchun kashfiyotchi sifatida ishlatilishi mumkin (HTSC plyonkalarini yotqizish uchun buferli qatlam, kimyoviy datchiklar va boshqalar). Shuningdek, seriy karboksilatlarini o'rganish koordinatsion birikmalardagi Ce (III) va Ce (IV) ning stabillashuvi nuqtai

nazaridan qiziqarli bo'lishi mumkin [8].

Biz IAEBU usuli bilan olingan seriy pivalatning IQ spektrlarini o'rganib chiqdik. Seriy pivalatning sintezi paytida Ce (III) komplekslari bilan sodir bo'lgan strukturaviy o'zgarishlar to'g'risida xulosalar chiqarildi.

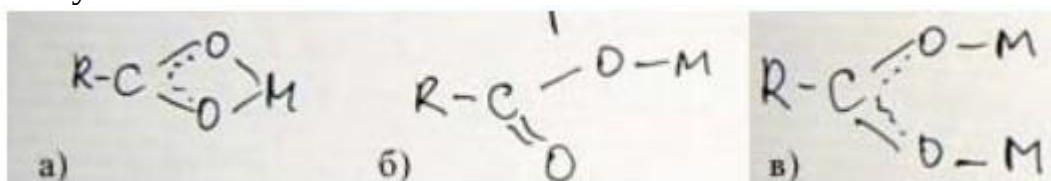
Pival kislota – ligand sifatida

Pival kislota (HPiv) - bu uch-butil qismi bo'lgan karboksilik organik kislota. Pival kislota formulasi quyida keltirilgan.



Pival kislotasining tuzilish formulasi

Pival kislota ligand vazifasini o'tashi mumkin. Ce (III) holatida, ikkita koordinatsiya variantlari mumkin:



Karboksilat ligandlarini mumkin bo'lgan muvofiqlashtirish turlari

Pival kislota bilan seriy (III) ikkilamchi kompleks hosil qiladi, bu erda pival kislota qoldiqlari ko'priq vazifasini bajaradi. Seriy kompleksida (Ce (III) - KS = 8) muvofiqlashtirish uchun qo'shimcha imkoniyatlarni suv yoki pival kislota egallashi mumkin.

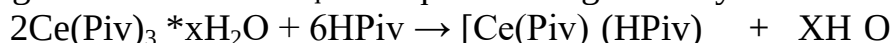
Seriy (III pivalar) sintezi

Pivalat seriy [Ce(Piv) (HPiv)] sintezi 2 bosqichda boradi:

1. Suvli pivalat sintezi:



2. n-geksandan HPiv ortiqcha miqdorda olinganda hayta kristallizatsiyasi:



Natijalar

Har bir bosqichda olingan mahsulot ajratib olindi va kukun shaklida IQ spektrometrdan IAEBU usuli bilan qayd etildi. Olingan spektrlar Xatoda taqdim

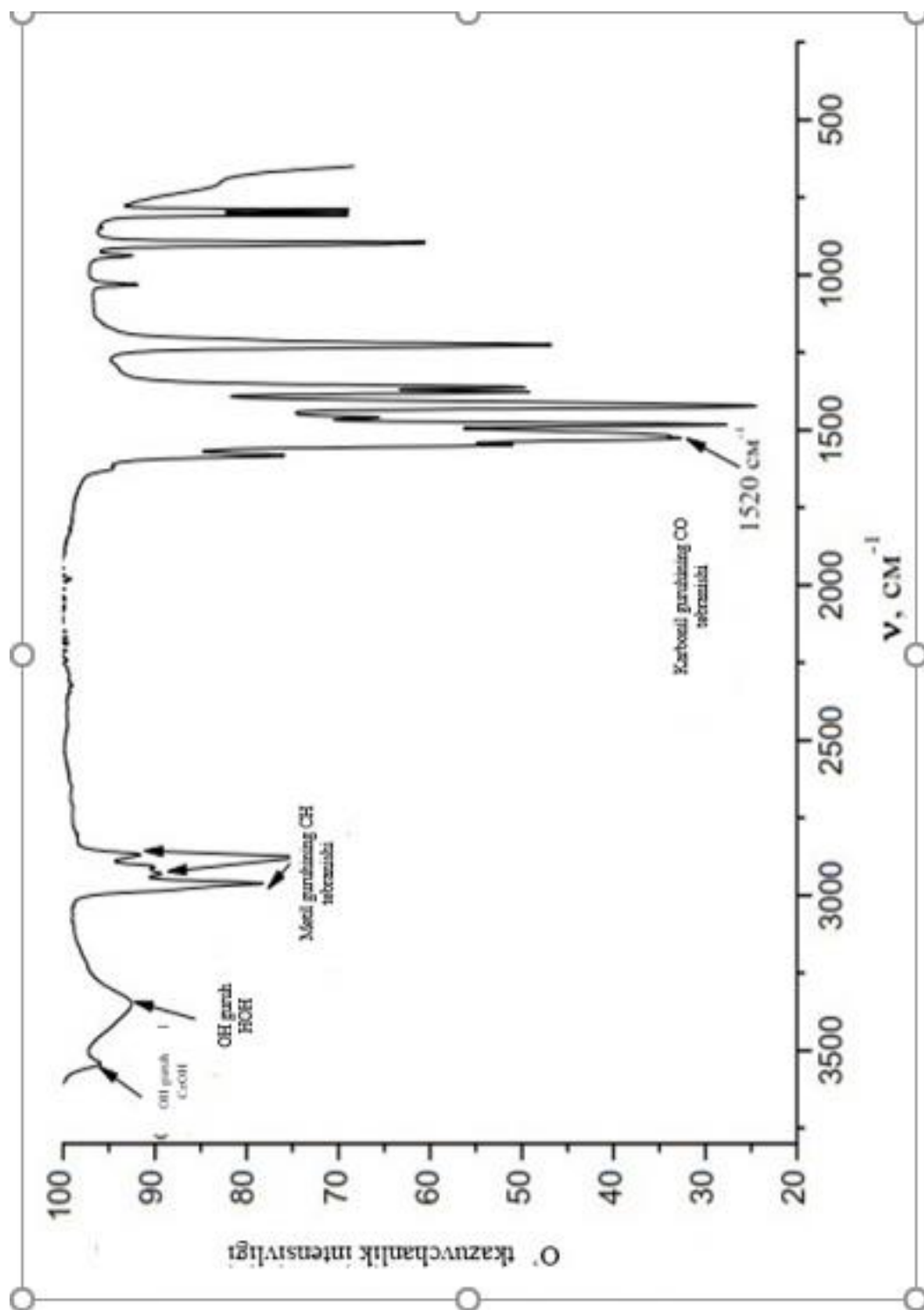
etilgan! Malumot manbasi topilmadi. va Xato! Malumot manbasi topilmadi. 7.

Berilgan spektrdan (34-rasm.) Ko'rinib turibdiki, suvli pivalat (sintezning birinchi bosqichi mahsuloti) ligandlar sifatida suv va gidroksil guruhlarini o'z ichiga oladi va pivalik kislota qoldiqlari kompleksda faqat ko'prik ligandlari sifatida mavjud, chunki yutilish zonasi, karboksil guruhidagi CO tebranishlari erkin karboksil guruhining CO tebranishlarining yutilish chastotasiga ($1700 - 1780 \text{ cm}^{-1}$) nisbatan past chastotalarga (1520 cm^{-1}) kuchli siljiydi. Spektrdan Xatoga qadar! Malumot manbasi topilmadi. 7. Ko'rinib turibdiki, pivalik kislota ortiqcha miqdorida n-geksandan perikristallangan seriy pivalatda suv yo'q, ammo HPival pivalik kislota ko'priksiz ligandlari mavjud. Buni 1686 cm^{-1} gacha bo'lgan assimilyatsiya polosasi moddasining spektrida paydo bo'lishi bilan baholash mumkin, bu muvofiqlashtirilgan pivalik kislota karboksil guruhining CO tebranishiga mos keladi. Ushbu tepalikning holati, shuningdek, erkin karboksil guruhining CO tebranishlariga nisbatan uzoqroq to'lqin uzunliklariga siljiydi, lekin ko'prik guruhlar (1520 cm^{-1}) kabi kuchli emas.

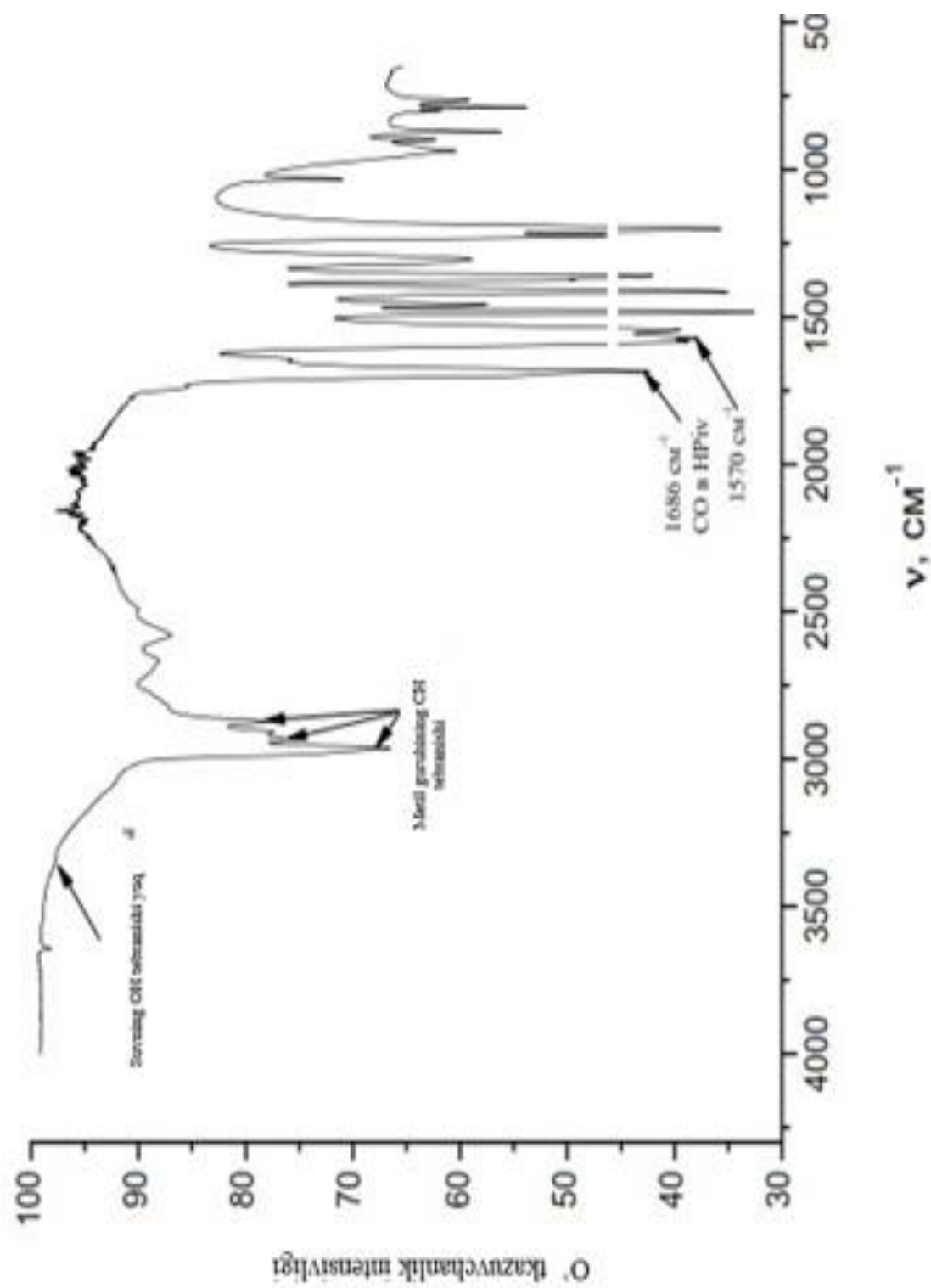
Xulosalar

1. Suvli va suvsiz seriyum (III) pivalatlar namunalari IQ spektroskopiyasi bilan o'rganildi.

2. Olingan IQ spektrlarini talqin qilish amalga oshirildi, suv va pivalik kislota ligandlarini komplekslarda muvofiqlashtirish to'g'risida xulosalar chiqarildi.



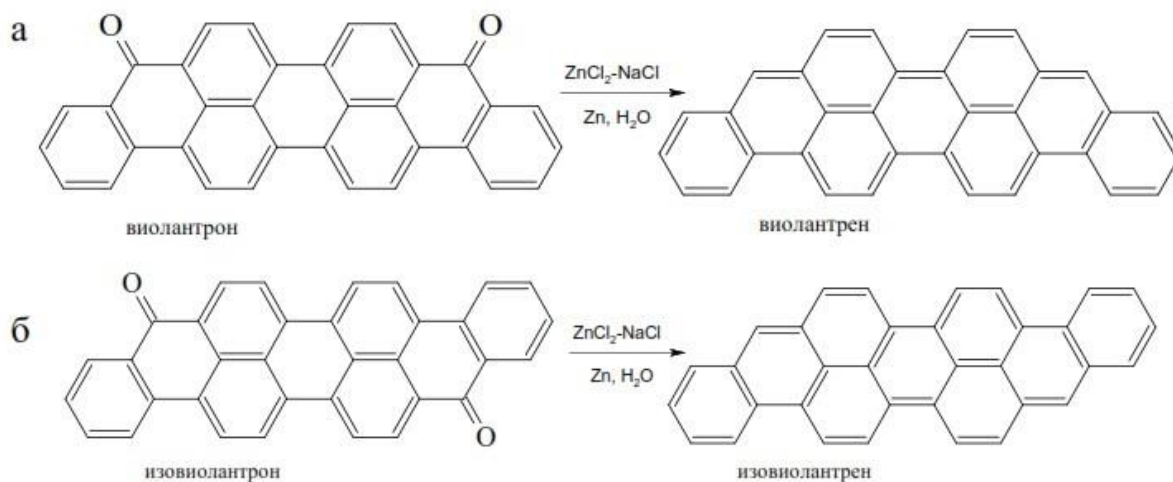
34 - rasm. $\text{Ce}(\text{Piv})_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ ning IR spektri



35 - rasm. $[\text{Ce}(\text{Piv})_3(\text{HPiv})_3]$: ning IR spektri ??

3 - masala. Xinonlarning uglevodorodlarga qaytarilish reaksiyasini IQ-spektroskopiya bilan o'rganish

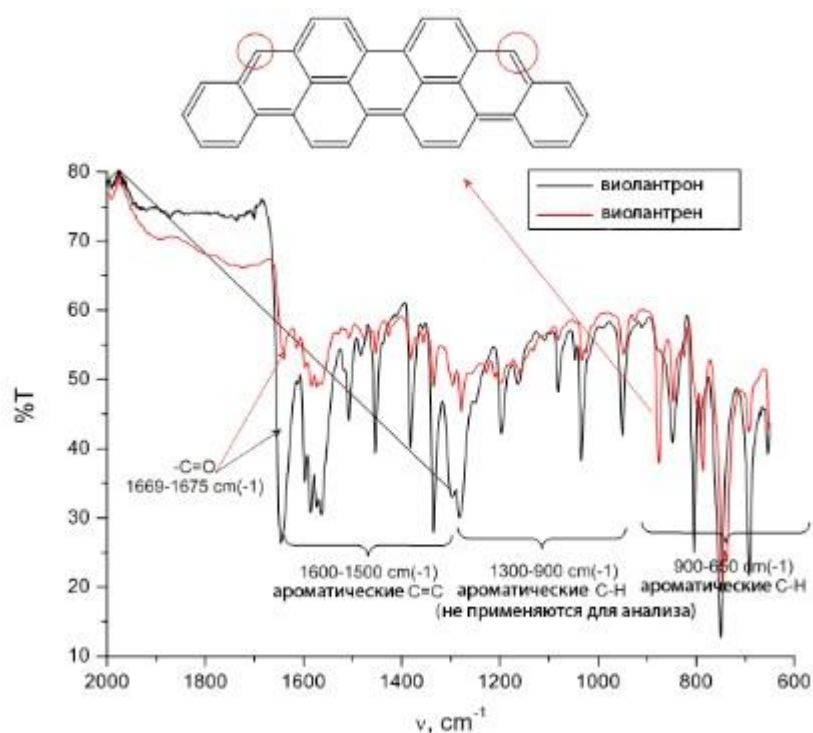
Sink kukuni ta'sirida keton kislorodining xinonlarda (violantrone va izoviolantrone) kamayishi paytida (sxema 1). Reaksiyalardagi mahsulotlar va boshlang'ich moddalar xromatografik tizimlarda kimyoviy tuzilishi va harakatchanligi bilan o'xshash bo'lib chiqdi, bu ularning tahlilini ancha qiyinlashtiradi. ushbu usullardan foydalangan holda. Reaksiya samaradorligini tezkor baholashga ehtiyoj bor edi. Buning uchun boshlang'ich materiallar va reaksiya mahsulotlarining IQ spektrlari tahlili o'tkazildi. ViolIAEBUon va uning qaytarilishi mahsuloti - violantrenning spektrlari 36-rasmda, izoviolantron va uning qaytarilishi mahsuloti - izoviolantrenning spektrlari 37-rasmda keltirilgan.



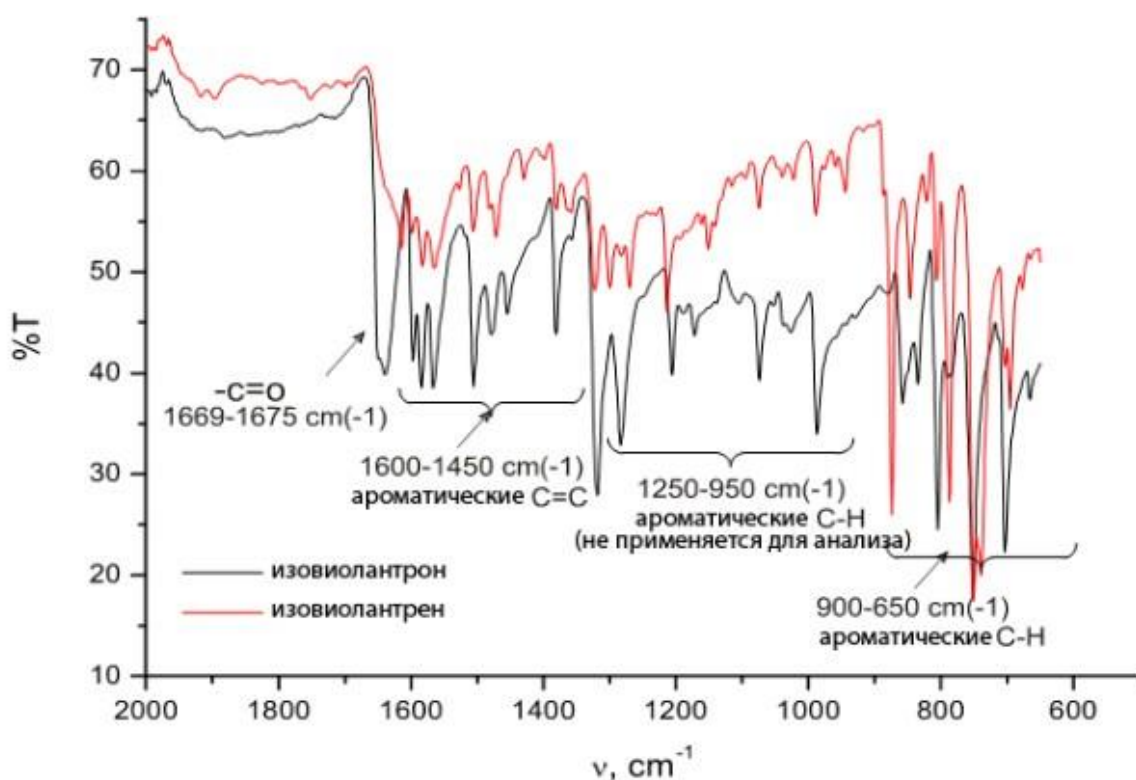
1-Sxema. Violantron (a) va izoviolantron (b) dagi keton kislorodini qaytarilish sxemalari

IQ spektrlaridan ko'rinib turibdiki (36-rasm va 37-rasmlarga qarang.) C = O tebranishlarining yutilish intensivligi spektrdagi boshqa polosalarga nisbatan kamaygandan keyin sezilarli darajada pasayadi, bu xinonni qaytarish reaksiyasining o'tishini bildiradi. Taxminan 890 cm^{-1} yuqori intensivlik cho'qqisi paydo bo'ladi, bu aromatik yadroda C-H bog'lanishlari tizimida yangi tebranish paydo bo'lishiga mos keladi.

Shunday qilib, IQ-spektroskopiya yordamida xinonlarning rux kukuni bilan kamayishi haqiqatan ham davom etayotganligi isbotlandi.



36 - rasm. Violantron va violantrenning qaytarilish mahsuloti IQ spektrlari



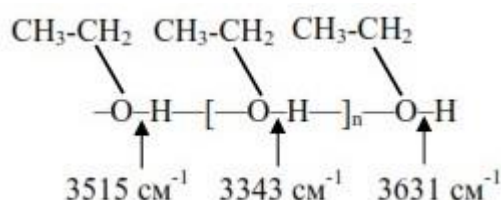
37 - rasm. Izoviolantron va izoviolantrenning qaytarilish mahsuloti IQ spektrlari

4 - masala. Etil spirti eritmasidagi uglerodto`ortxloridda vodorod

bog'lanishining hosil bo'lish jarayonini IQ-spektroskopiya usulida o'rganish.

Ma'lumki, [9] etanol molekulari o'zaro vodorod aloqasini hosil qiladi. Ushbu topshiriqning maqsadi bu jarayonni etil spirti eritmalaridagi to'rt xil konsentratsiyali tetrakloriddagi uglerodda o'rganish edi. 38-rasm. CCl_4 da $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ eritmalaridan turli xil etil spirti konsentratsiyali uzatish spektrlari ko'rsatilgan. 2974, 2926 va 2890 cm^{-1} gacha bo'lgan CH guruhlarining tebranish diapazonlari konsentratsiyaning o'zgarishi bilan o'zgarmaydi (38-rasm, 6-jadvalga qarang). 3631, 3508 va 3343 cm^{-1} gacha bo'lgan assimilyatsiya diapazonlari mos ravishda monomerik, dimerik va polimerik gidroksil guruhlarining singishi bilan bog'liq. Etil spirti 0,01 M dan yuqori bo'lmagan konsentratsiyalarda monomerik shaklda mavjud va OH polimer guruhining kuchli singishi 1,0 M konsentratsiyasida aniq bo'ladi.

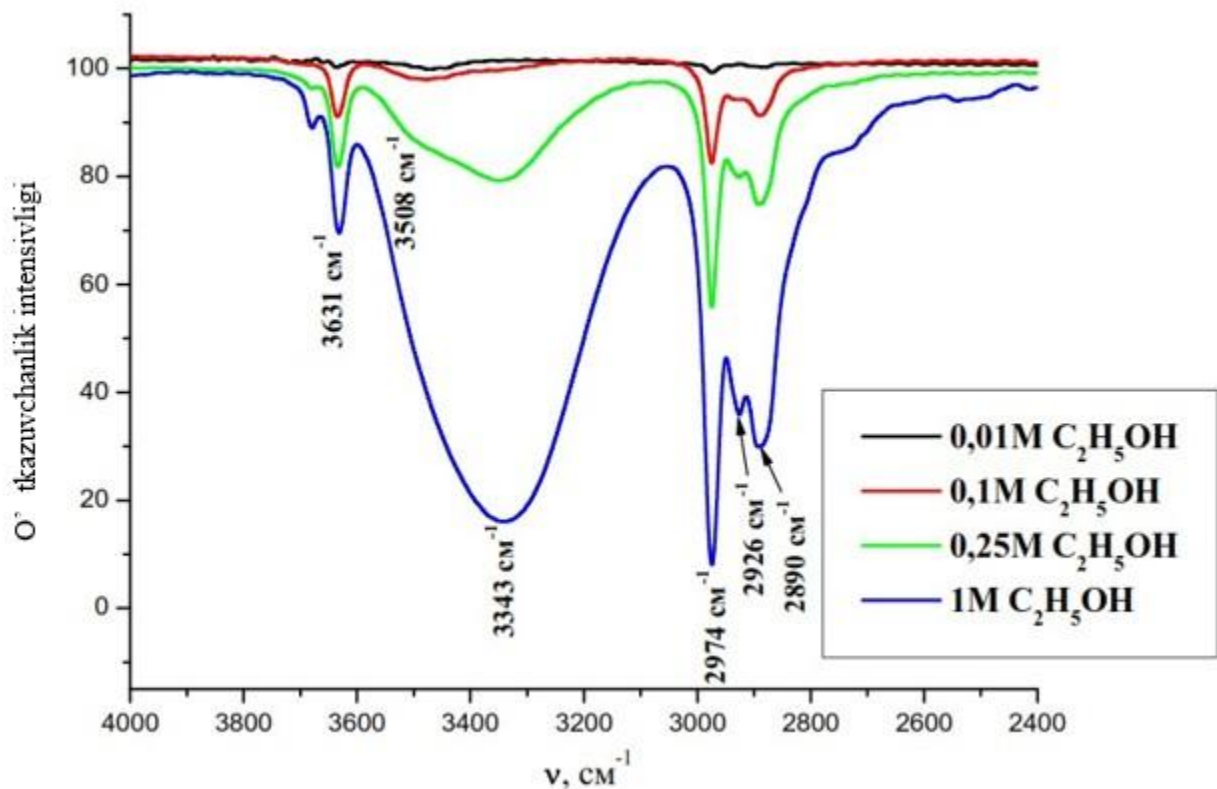
3631 cm^{-1} darajadagi lenta, "monomerik" gidroksil terminali tufayli, haqiqiy monomerda yuqori chastotalarga ozgina siljiydi (terminal gidroksil 3620 cm^{-1} yutadi, monomer esa 3650 cm^{-1}).



Shunday qilib, to'rt karbonli uglerod tarkibidagi etil spirti eritmalarida vodorod bog'lanishini hosil qilish jarayoni IQ spektroskopiyasi bilan o'rganildi.

6 - jadval. $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ va CCl_4 eritmasida ba'zi bir atomlarning tebranish chastotalari

Tebranish chastotasi, cm^{-1}	Tavsifi
3631	monomerli gidroksil guruhining yutilishi
3508	dimerik gidroksil guruhining yutilishi
3343	polimerik gidroksil guruhining yutilishi
2974	CH guruhining valent tebranishi
2926	
2890	



38 - rasm. CCl_4 tarkibidagi $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ eritmalaridan turli xil etil spirti konsentratsiyalari bilan tarqalish spektrlari

5 - masala. Miqdoriy tahlil

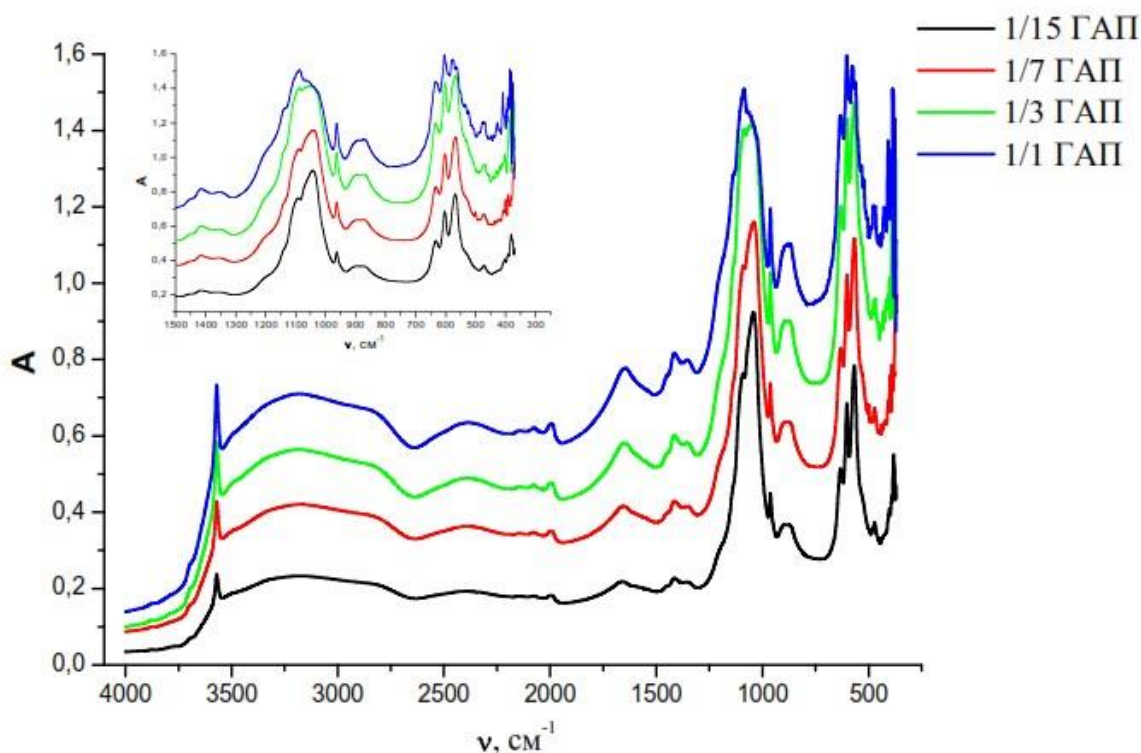
Karbonat gidroksiapatitlar (HAP karbonat) shikastlangan suyaklar, bo'g'inlar va tishlarni tiklash yoki hatto almashtirish uchun juda qulay istiqbolli biomateriallardir [10].

Sintez jarayonida turli darajadagi gidroksil guruhlar va fosfat ionlarini karbonat ionlariga almashtirish bilan olingan karbonat gidroksiapatitlari har xil xususiyatlarga ega. Shu munosabat bilan karbonat ionlarini HAP anionlariga almashtirish darajasini aniqlash juda muhim vazifadir. Bu holda karbonat ionlari gidroksiapatitdagi gidroksil guruhlarini (A tipidagi karbonat-HAP) yoki fosfat ionlarini (B tipidagi karbonat-HAP) yoki har ikkala gidroksil guruhini va fosfat ionlarini (aralash AB turidagi HAP karbonat) almashtirishi mumkin.

Ushbu muammoni hal qilish uchun eng mos usullardan biri IQ spektroskopiya usuli bo'lib, u ma'lum ionlarni almashtiradigan karbonat miqdorini miqdoriy jihatdan aniqlashga imkon beradi, chunki A va B tipidagi karbonat ionlarining tebranish chastotalari har xil bo'ladi.

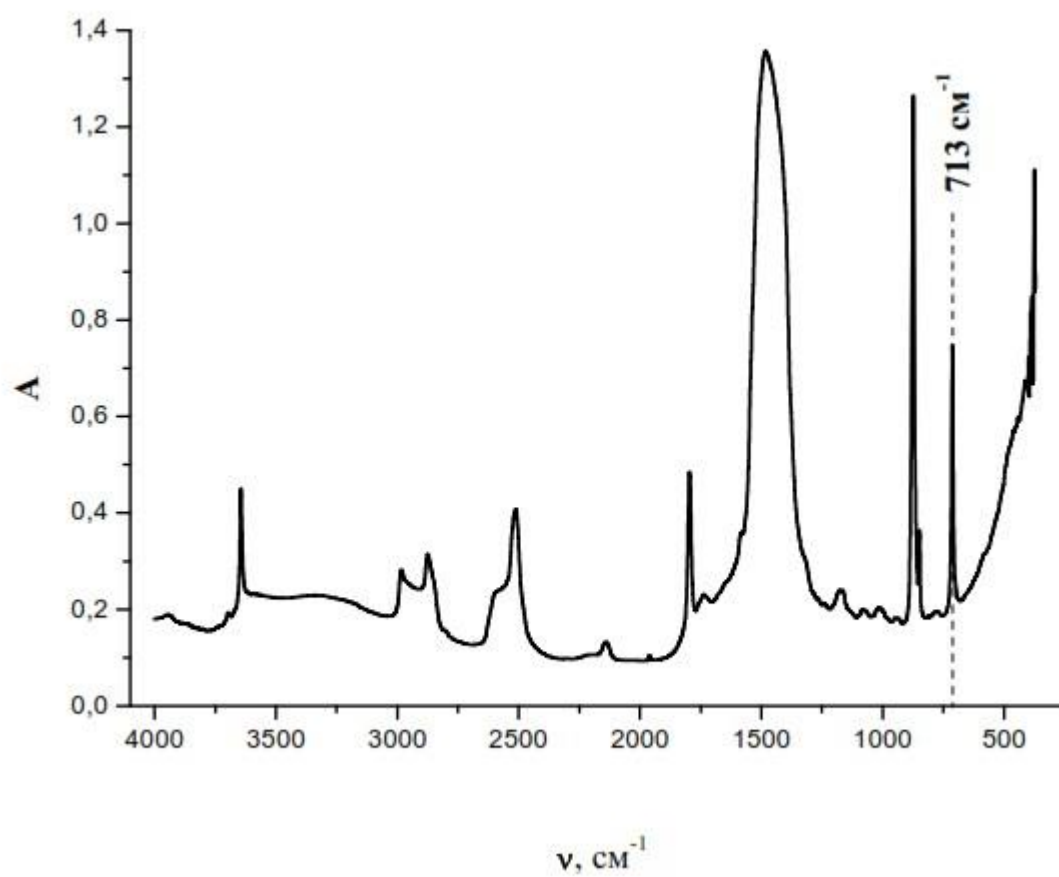
Seminarining ushbu vazifasi doirasida kaltsiy karbonatning gidroksiapatit bilan mexanik aralashmasidagi miqdoriy tahlili diffuz aks ettirish spektrlarini yozish uchun biriktirma yordamida IQ spektroskopiyasi orqali amalga oshirildi. Ushbu ishning birinchi bosqichida bromli kaliy bilan uning tarkibidagi HAPning optimal konsentratsiyasi tanlandi. Buning uchun gidroksapatit va kaliy bromidning massa

nisbati 1/15, 1/7, 1/3, 1/1 bo'lgan aralashmalardan IQ spektrlari olingan (39-rasm). HAP: KBr = 1:15 nisbati bo'lsa, tebranish intensivligi etarlicha yuqori emas; ammo HAP: KBr nisbatining 1/1 ga ko'payishi bilan tebranish diapazonlari kengayadi va xiralashadi. Shu munosabat bilan HAPning optimal konsentratsiyasi sifatida HAP: KBr = 1:7 nisbati tanlangan bo'lib, u gidroksiapatit bilan mexanik aralashmasidagi kaltsiy karbonatning keyingi miqdoriy tahlilida ishlatilgan.

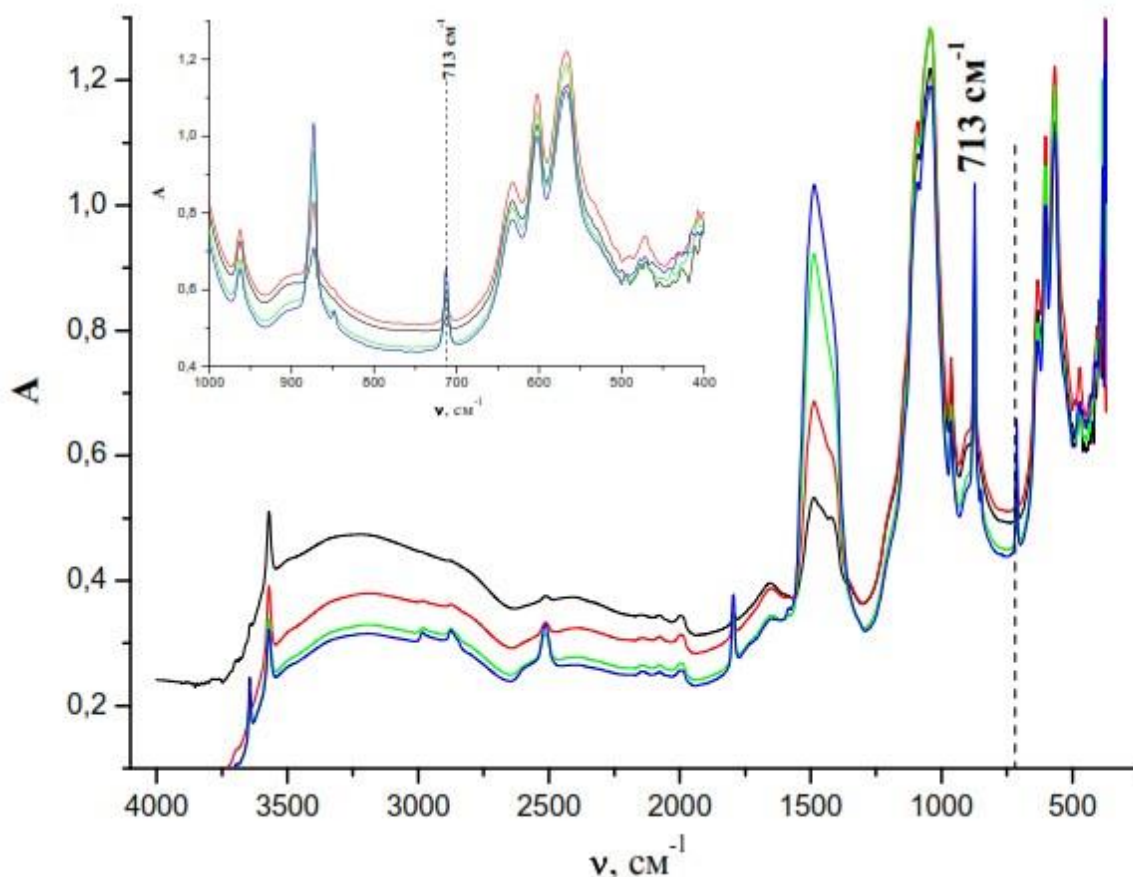


39 - rasm. Turli nisbatdagi GAP va KBr arakashmasining IQ spektri

Ishning ikkinchi bosqichida karbonat miqdori bo'yicha darajalash grafigi tuzildi. Buning uchun IQ spektrlari sof kaltsiy karbonatidan va HAP: KBr = 1:7 optimal nisbati bilan aralashmalardan va HAP (5, 10, 20, 30%) bilan aralashmadagi turli xil karbonat tarkibidan olingan. Olingan spektrlar 40 va 41 - rasmlarda keltirilgan.



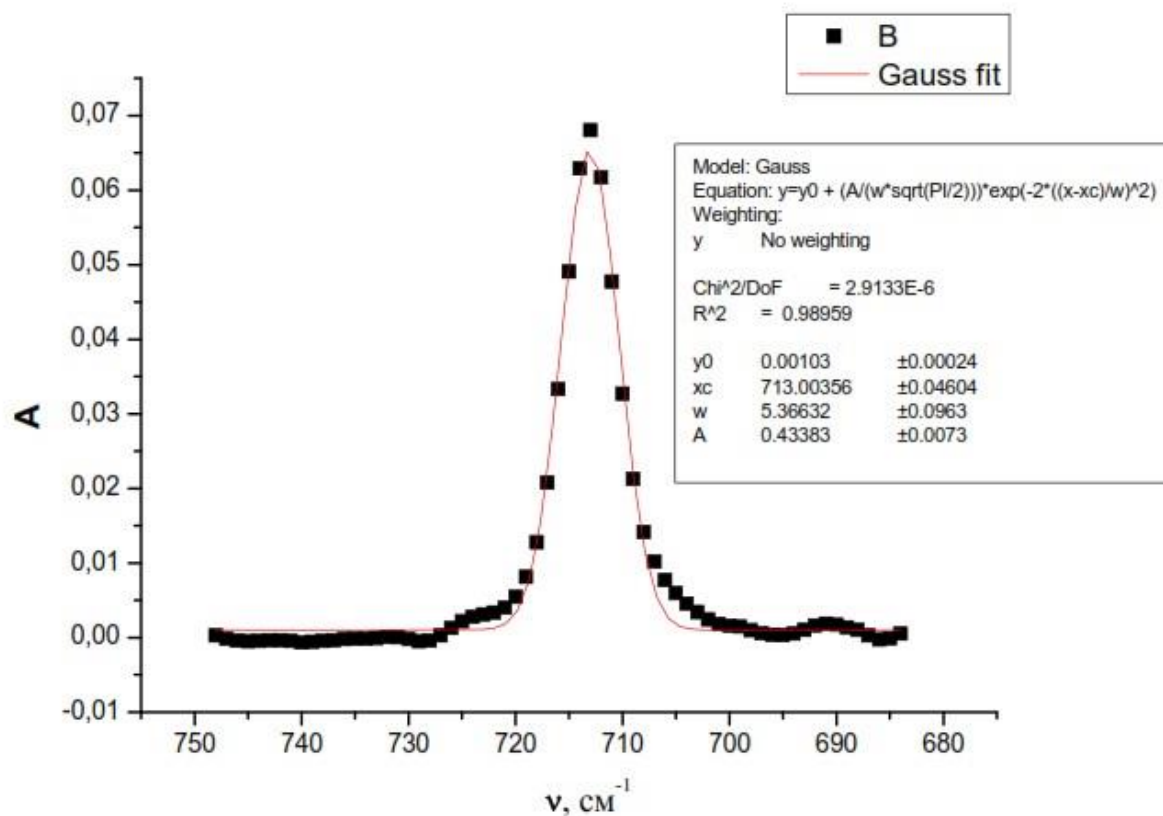
40 - rasm. Kalsiy karbonatning 1/1 nisbatdagi KBr bilan aralashmasi IQ spektri



41 - rasm. Turli xil karbonat tarkibidagi karbonat-HAP aralashmalari IQ spektrlari.

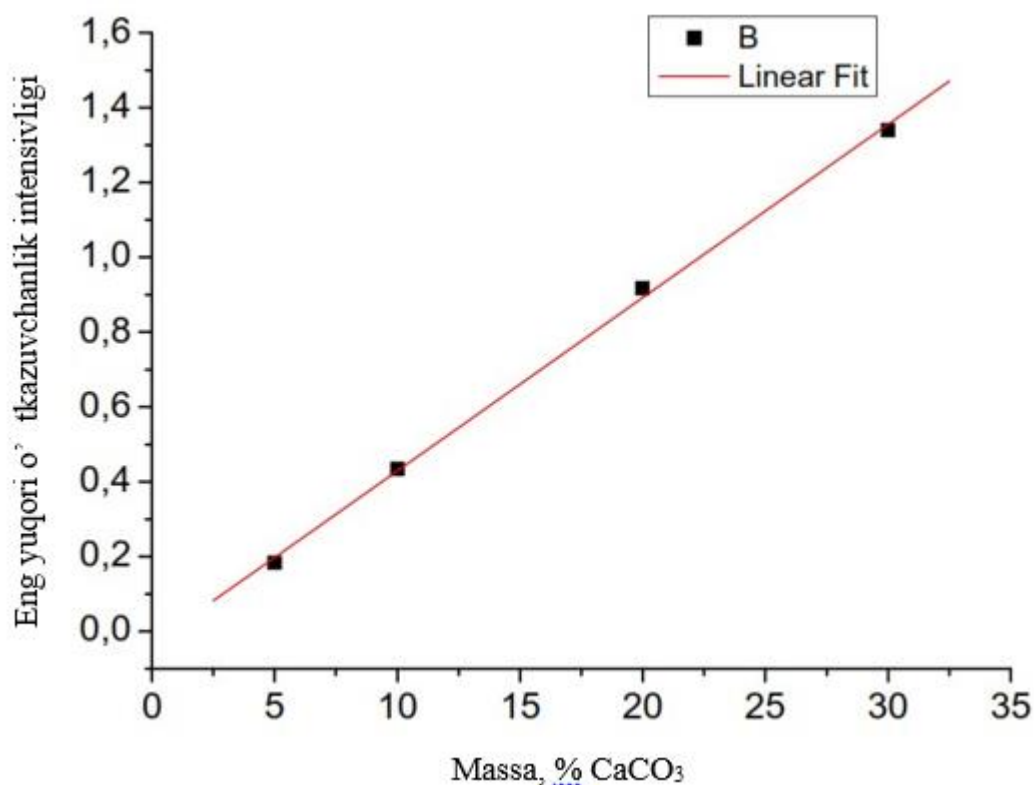
Darajalash grafigini tuzish uchun 713 cm^{-1} darajadagi karbonat analitik darajasi tanlangan, chunki u eng past darajada boshqa choʻqqilar bilan qoplanadi.

Karbonat-HAP aralashmalaridan olingan barcha spektrlar uchun 713 cm^{-1} choʻqqilari Origin 7.5 dasturiy taʼminotidagi Gauss funktsiyasi bilan tavsiflangan va ularning parametrlari aniqlangan: integral intensivligi, pozitsiyasi va fon intensivligi (42-rasm).



42 - rasm. Gauss funktsiyasining 713 cm^{-1} darajasidagi analitik choʻqqining tavsifi

Ushbu ma'lumotlardan foydalanib, darajalash grafigi tuzildi, bu 713 cm^{-1} analitik tepalikning integral intensivligining HAP bilan mexanik aralashmadagi karbonatning massa tarkibiga bogʻliqligi (43-rasm).



43 - rasm. HAP bilan aralashtirilgan kaltsiy karbonat uchun darajalash grafigi

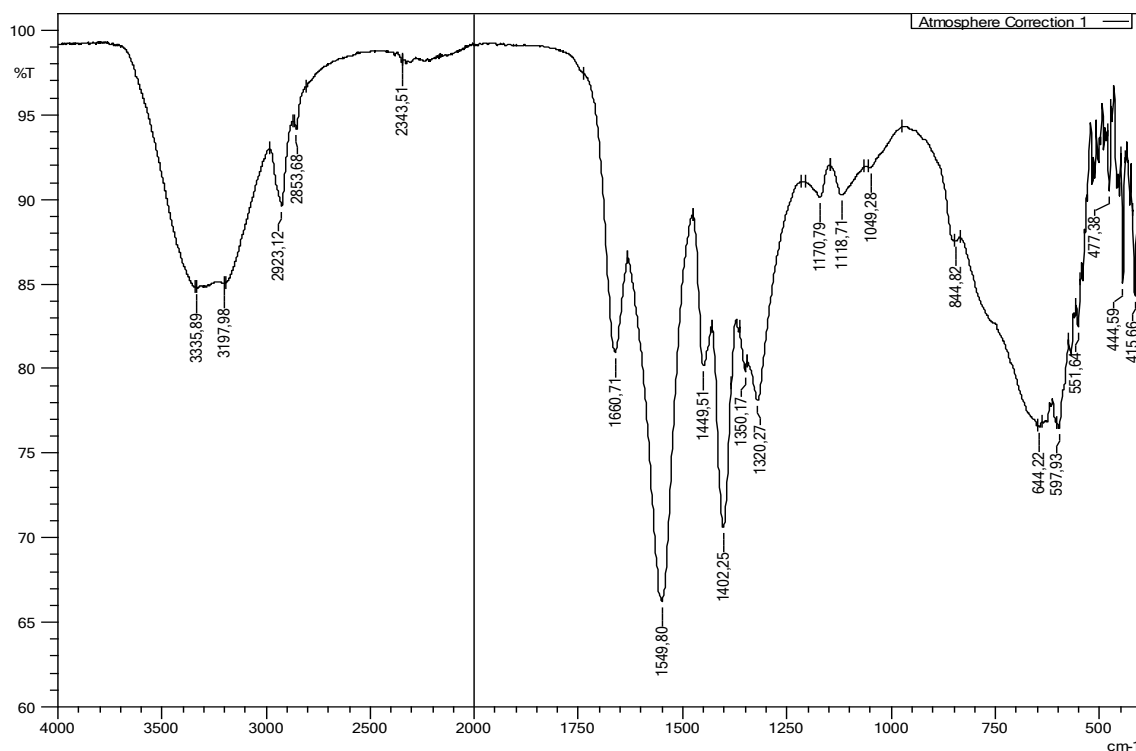
Olovbardosh polimerning strukturaviy tadqiqi

Moddaning agregat holatiga bogʻliq boʻlmagan infraqizil spektr tasvirlarida har bir chiziq moddaning intensivligini xarakterlaydi. IQ spektr moddaning identifikatsiyalashning eng qulay zamonaviy varianti hisoblanadi. U moddani identifikatsiyalashda ishlatiladigan suyuqlanish haroratini oʻlchash, nur sindirish koʻrsatgichini oʻlchash, zichligini oʻlchash kabi oddiy fizikaviy usullardan ishonchliligi bilan ajralib turadi. Shuningdek, har bir moddaning IQ spektrini tahlil qilganda ularning qanday atom yoki atomlar guruhini tutganligi va ularning oʻzaro deformatsion taʼsirini eʼtiborga olish lozim. Jumladan, organik birikmalarda molekula ichkarisida induktiv va mezomer effektlar ham taʼsir qiladi. Molekulalararo va ichkimolekulyar vodород bogʻlanishlar esa shu bogʻlanishga ishtirok etuvchi bogʻlarning spektr chiziqlarini siljishiga sababchi boʻladi. Shuning uchun spektrlar tahlilida yuqoridagilarni eʼtiborga olish zarur.

IQ spektr tahlillari barcha namunalar uchun $500-4500\text{ sm}^{-1}$ oraliqda keng diapozonda oʻtkazildi. Olingan polimerning tuzilishi IQ spektroskopiya usulida tahlil etildi.

Moddalarni identifikatsiyalashda spektr chiziqlari $4000-400\text{ sm}^{-1}$ soxasida yozib olindi. Hidrolizlangan poliakrilonitril va tetraetoksisilanning oʻzaro birikishi natijasida olingan polimerning IQ-spektroskopiya usulida indentifikatsiya qilinganda GIPAN tarkibidagi karboksil guruhlari tetraetoksisilandagi $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}$ -guruhlari bilan eterifikatsiya reaksiyasiga kirganligini spektr chiziqlaridagi xarakterli yutilish

chiziqlariga asoslanib xulosa chiqarish mumkin.



44-rasm. GIPAN va tetraetoksisilan asosida olingan polimerning IQ spektri.

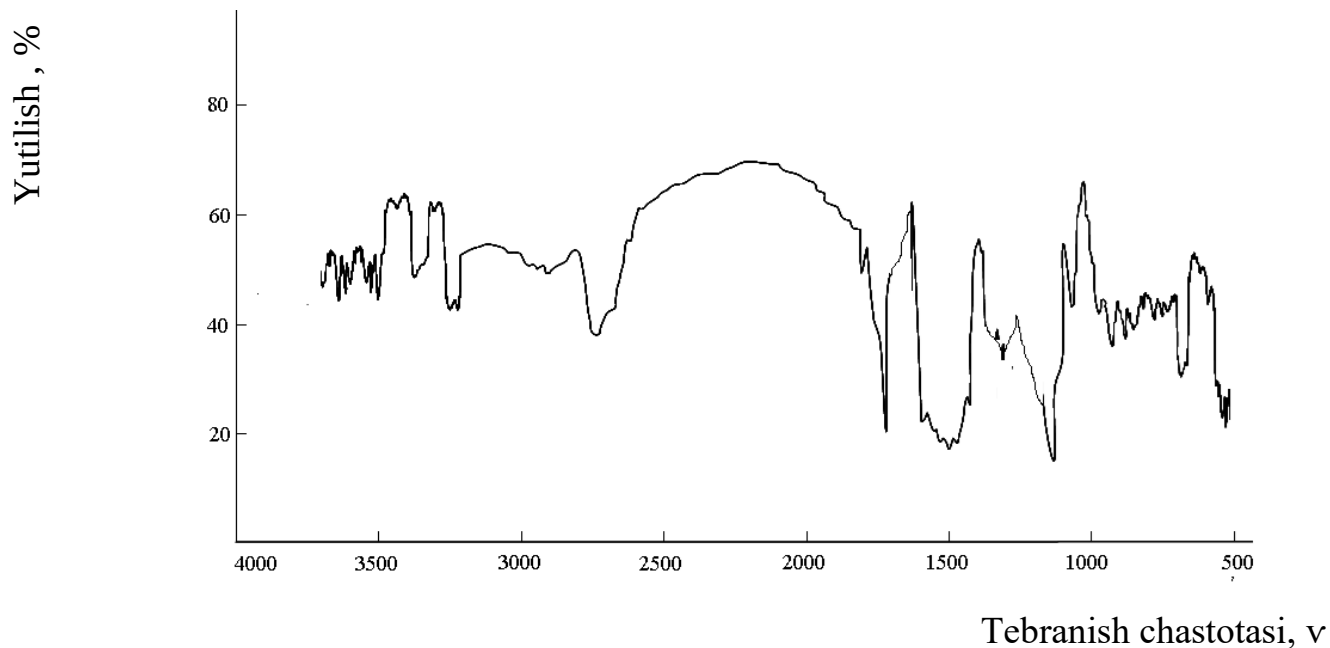
Spektr chiziqlari 1402 , 1449 , 1320 cm^{-1} sohadagi yutilish chiziqlar oddiy C-C bog'ga, $1650\text{--}1630\text{ cm}^{-1}$ sohada esa karbonil guruhga xos tebranish chastotalarini, 1049 , 1118 cm^{-1} va $1000\text{--}1100\text{ cm}^{-1}$ sohadagi yutilish chiziqlar esa Si-O ga, oraliqda esa 2930 va $3335\text{--}3197\text{ cm}^{-1}$ to'lqin uzunligi esa O-H bog'iga tegishli ekanligini ko'rish mumkin.

Gidrofob polimerning strukturaviy tadqiqi

Moddaning agregat holatiga bog'liq bo'lmagan infraqizil spektr tasvirlarida har bir chiziq moddaning intensivligini xarakterlaydi. IQ spektr moddaning identifikastiyalashning eng qulay zamonaviy varianti hisoblanadi. U moddani identifikastiyalashda ishlatiladigan suyuqlanish haroratini o'lchash, nur sindirish ko'rsatgichini o'lchash, zichligini o'lchash kabi oddiy fizikaviy usullardan ishonchliligi bilan ajralib turadi.

Strukturani aniqlash va olingan moddalarning identifikastiyalash uchun barcha namunalar uchun $500\text{--}3500\text{ cm}^{-1}$ oraliqda keng diapozonda IQ spektroskopiya usulida tahlil etildi.

51-rasmda birlamchi C-C bog'ning valent tebranishlarini tavsiflovchi 1400 , 1465 , va 1250 cm^{-1} sohadagi o'rtacha intensivlik yutilish chiziqlari qayd qilinadi. 1025 va 1095 cm^{-1} dagi tebranish chastotalarining yutilish chiziqlari mos ravishda Si-O va Si-C bog'larning mavjudligini ko'rsatadi.



45-rasm. Poliviniletiniltrietoksisilan IQ spektri

Strukturani aniqlash va olingan moddalarning identifikatsiyalash uchun keng spektr oraliqlarida – $500\text{-}4000\text{ cm}^{-1}$ maydonlarda IQ spektroskopiya usuli qo'llanildi.

Poliviniletiniltrietoksisilan IQ spektrida monomerda vinil guruhi ($\nu_{(C=S)}$) uchun ko'p bog'li valent tebranishlarning xarakteristik yutilish chiziqlari kuzatilmaydi.

ILOVALAR

Xarakterli chastotalarning qisqacha jadvallari

Organik birikmalardagi bog'lanishlarning xarakterli tebranishlar chastotasi

1 - jadval

Vodorod atomi ishtirokidagi xarakterli tebranishlar chastotasi

Guruhlar	ν , sm^{-1}	I_{nisb}	Tegishliligi va qo'llanilishi
R(OH)	3620±50	kuchli	0,01 m/l konsentratsiyali birikmagan molekulalardagi $\nu(\text{OH})$
	3500±50	kuchli	dimerlarda
	3300±100	kuchli	Poliassotsitlarda keng tarqaluvchi chiziq
	3500±100	kuchli	o-xlorfenol turidagi YuMB, keskin chiziqli, suyultirilganda o'garmaydi
	2950±250	kuchsiz	Salitsil aldegid turidagi YuMB, keng tarqalgan chiziqli, suyultirilganda o'zgarmaydi.
(R)NH ₂	~ 3500	kuchsiz	Odatda 2 chiziqli $\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$ va $\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2)$ nisbatli: $\nu_{\text{s}} = 0,876\nu_{\text{as}} + 345$
(R)NH ₂	~ 3400	O'rtacha	
	1600±40	O'rtacha	5(NH ₂)
(R) ₂ NH	3330±20	kuchsiz	$\nu(\text{NH})$
(R)NH ₃ ⁺	~ 3000	kuchli	ν_{as} va $\nu_{\text{s}}(\text{NH}_3)$ tipli keng chiziqli, keltirilgan sohada 2 ta chiziq
(R) ₃ NH ⁺	2500±200	kuchli	$\nu(\text{NH})$ keng chiziq bo'lib, oberton bilan Fermi rezonansini

			hosil qiladi.
$\equiv \text{CH}$	~ 3300	O'rtacha	$\nu(\text{CH})$
	650 ± 50	O'rtacha	$\delta(\text{CCH})$
$= \text{CH}_2$	~ 3085	O'rtacha	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_2)$
	~ 2975	O'rtacha	$\nu_{\text{s}}(\text{CH}_2)$
	~ 420		$\delta(\text{CH}_2)$
	~ 910	kuchli	$\pi(\text{CH}_2)$
$\text{R}-\text{CH}_3$	2960 va 2870	kuchli, O'rtacha	$\nu(\text{CH}_3)$, $\nu_{\text{s}}(\text{CH}_3)$
$\text{R}-\text{CH}_2-\text{H}$	~ 2925 va 2850	Kuchli, kuchli	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_2)$, $\nu_{\text{s}}(\text{CH}_2)$

2 - jadval

Uchlamchi va allen bog'lari ishtirokidagi xarakterli tebranish chastotalari

Guruhlar	ν , sm^{-1}	I_{nisb}	Tegishliligi va qo'llanilishi
$(\text{R})\text{C}\equiv\text{N}$	2235 ± 25	kuchli, O'rtacha	$\nu(\text{C}=\text{N})$ murakkablashganda kamayadi, kompleks hosil bo'lish jarayonida ortadi.
RN_2^+	2260 ± 20		Diazoni guruhining valent tebranishi
RN_3^+	2140 ± 20		N ning aziddagi valent tebranishi
$\text{C}\equiv\text{C}$	2120 ± 20	kuchsiz	$\nu(\text{C}=\text{C})$ ning oxirgi holati
	2130 ± 30	Juda kuchsiz	$\nu(\text{C}=\text{C})$ konsentral holati
$\text{C}=\text{C}=\text{C}$	~ 1950		Allen guruhining tebranishi.
$(\text{R})\text{N}=\text{C}=\text{O}$	2260	Juda kuchsiz	Izotsionat guruhi tebranishi
$(\text{R})\text{S}-\text{C}=\text{N}$	2260 ± 20	kuchli,	Tiosionat guruhi tebranishi
$(\text{R})_2\text{C}=\text{C}=\text{O}$	2150		Ketenlarda tebranish
$\text{RC}\equiv\text{O}^+$	2250 ± 50	Juda kuchli,	Kation atsillarda $\nu(\text{C}=\text{O})$

3 - jadval

Ikki tomonlama bog'lanish va aromatik halqalarni o'z ichiga olgan xarakterli tebranish chastotalari

Guruhlar	ν , sm^{-1}	I_{nisb}	Tegishliligi va qo'llanilishi
----------	--------------------------	-------------------	-------------------------------

RHC=CH ₂	~1645	O'rtacha	ν(C=C). Ikkilamchi bog'lanish to'g'ridan-to'g'ri O, Cl va shu kabi atomlar bilan bog'langan bo'lsa intensivlik ortadi. C = C, C = O hollarda 2 va undan ortiq chiziqlarga bo'linish kuzatiladi.
RC=CH ₂	~1655	O'rtacha	
sis-RHC=CHR	~1660		
trans-RHC=CHR	~1675	kuchsiz	
R ₂ C=CHR	~1670	kuchsiz	
R ₂ C=CR ₂	~1670	kuchsiz	
C=C aromatik halqa	~1600 ~1580 ~1500 ~1450	O'rtacha - kuchsiz	Aromatik halqaning har xil tebranishlari. O'rinbosar bilan murakkab bog' hosil bo'lganda intensivlik ortadi. 1580 sm ⁻¹ chiziq faqat murakkab bog' hosil bo'lish mavjud, ayniqsa p-almashtirishda kuchli. CH ₃ COC ₆ H ₄ OCH ₃ Misol bo'ladi.
R'R''C=O	1730± 80	kuchli	ν(C=O), bu intervalda karbonil guruhlariga nos keladi. Kompleks hosil bo'lish ν(C=O) 20-15 sm ⁻¹ da kamayadi. Ha 20-15 cm ⁻¹ . Almashinish ta'siri ν(C=O) turlicha kuzatiladi (4-tablitsa).
R'R''C=N-R	1660±30	O'rtacha - kuchli	Ochiq zanjirda ν(C=N). uyushganlik natijasida past chastotali tanqislik yuzaga keladi. Kompleks hosi bo'lish ham susayishi, ham kuchayishi mumkin ν(C=N).
-C=N- (sikl.)	1580±30	kuchsiz - O'rtacha	Halqada ν(C=N). ν(C=C) bilan kuchli ta'sir kuzatiladi. C=N bilan bir necha tebranish chiziqlar bo'ladi.
-N=N-	1600±30	kuchsiz - O'rtacha	Azobirikmalarda ν(N=N). Azotli geterohalqalda

			$\nu(\text{C}=\text{C})$ va $\nu(\text{C}=\text{N})$ halqa kabi bo`ladi.
$(\text{R})\text{N}=\text{O}$	1550 ± 50	kuchli	$\nu(\text{N}=\text{O})$ - chastota o`rinbosar xarakteriga bog`liq bo`ladi. Donor susytiradi, akseptor kuchaytiradi. Kompleks hosil bo`lbshi $\nu(\text{N}=\text{O})$ ni kamaytiradi
$(\text{RR}'\text{R}'')\text{N} \rightarrow \text{O}$	1275 ± 25	kuchli	$\nu(\text{N} \rightarrow \text{O})$ piridin va boshqalar. Donor o`rinbosarlar kamaytiradi, akseptorlar kuchaytiradi $\nu(\text{N} \rightarrow \text{O})$ . kompleks hosil bo`lish jarayonida kamayadi.
	1280 ± 30	kuchli	$\nu(\text{N} \rightarrow \text{O})$ alifatik aminlar okislarida.
$(\text{R})\text{O}-\text{N}=\text{O}$	1640 ± 40	Juda kuchli	$\nu(\text{N}=\text{O})$ nitratlarda, oberton 3300 cm^{-1}
	830 ± 20	kuchli	$\nu(\text{N}-\text{O})$
	620 ± 70	kuchli	$\sigma(\text{ONO})$
$(\text{R})-\text{NO}_2$	1555 ± 10	kuchli	$\nu_{\text{as}}(-\text{NO}_2)$ va $\nu_{\text{s}}(\text{NO}_2)$ alifatik nitrobirikmalarda.
	1370 ± 10		
	1540 ± 10 1350 ± 10	kuchli	Aromatik nitrobirikmalarda.
$(\text{R})\text{ONO}_2$	1630 ± 20	kuchli	ν_{as} va $\nu_{\text{s}}(\text{NO}_2)$ kovalent nitratlarda.
	1335 ± 75		
$(\text{R})_3\text{P}=\text{O}$	1335 ± 75	Juda kuchli	$\nu(\text{P}=\text{O})$ fosforilgalogenidlarda
	1255 ± 25	kuchli	Fosfatli, fosfonatli, fosfinatli efirlarda.
	1175 ± 25		Fosfioksidlar - R_3PO da.
	1175 ± 25	kuchli	Amid kislotasi va fosfin okislarida. Kompleks hosil bo`lish $\nu(\text{PO})$ ni $20-100 \text{ cm}^{-1}$ gacha pasaytiradi.
$(\text{R})_3\text{P}=\text{S}$	725 ± 25	O`rtacha - kuchsiz	$\nu(\text{P}=\text{S})$, past xususiyatli,
$(\text{R})_2\text{S}=\text{O}$	1050 ± 10		$\nu(\text{S}=\text{O})$ sulfoksidlarda, o`rinbosar xususiyatiga

			bog`liq bo`ladi. Kislorod bilan koordinatlansa pasayadi, oltingugurtda ortadi.
(R) ₂ SO ₂	1380± 70 1120± 10	kuchli	$\nu_{as}(\text{SO}_2)$ va $\nu_s(\text{SO}_2)$ sulfonlarda, sulfonamidlarda, sulfixloridlarda.
	1200± 50 1045±35	kuchli	Sulfokislotalarda.

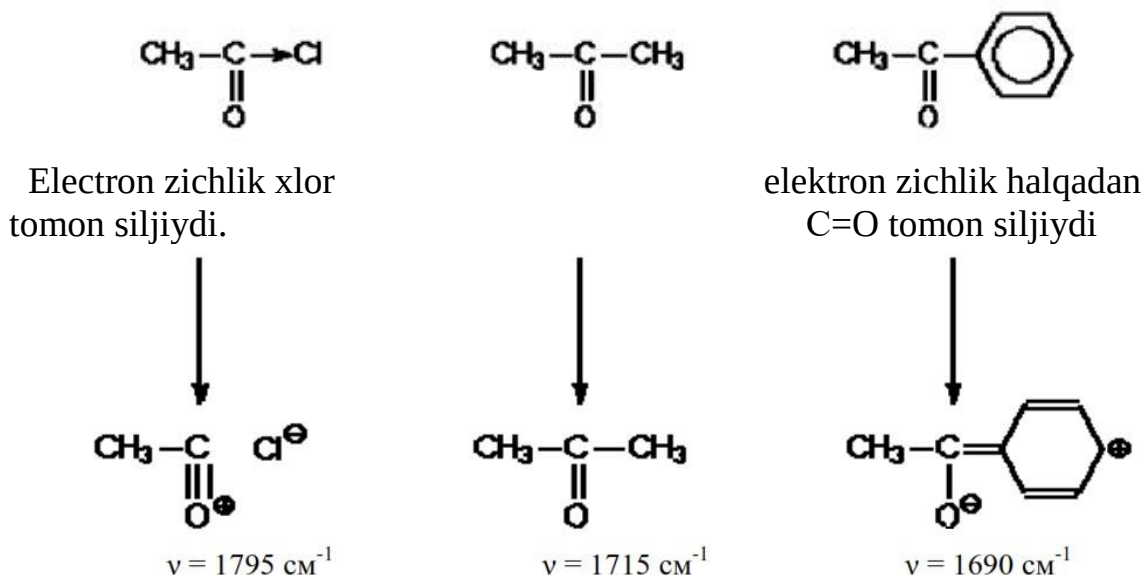
Karbonil guruhining tebranish chastotalari

Karbonil guruhining xarakterli tebranishlarining chastotalari yaxshi o'rganilgan. Spektrlarda ushbu tebranish 1650 dan 1800 sm^{-1} gacha bo'lgan kuchli assimilyatsiya zonasi sifatida namoyon qiladi.

Yutish chastotasi ν ($\text{C}=\text{O}$) guruhidagi substituentlarning elektron donorlik va akseptor xususiyatlariga juda bog'liq.

Boshlang'ich chastota sifatida to'yingan alifatik ketonlardagi chastotani tanlash qulay (masalan, aseton) - $1715 \pm 10 \text{ sm}^{-1}$.

Alkil guruhlari ko'proq akseptorlar bilan almashtirilganda, so'rilish chastotasi ko'payadi va ko'proq donorlar bilan u kamayadi. Bunday holda, ushbu ikki effekt - konjugatsiya va induksiyaning bir-birining ustiga chiqish natijasini hisobga olish kerak. Quyidagi tuzilmalar odatdagi holatlarda ν ($\text{C}=\text{O}$) siljish sababini sxematik tarzda ko'rsatadi.



4 - jadval

O`rinbosarning o`zgarishi bilan $\nu(\text{C}=\text{O})$ chizig`ining siljishi

Dastlabki birikmalar: dialkylketon $\nu_0 1715 \pm 10 \text{ sm}^{-1}$

CH ₃ COX da X	A, sm ⁻¹	CH ₃ COX da X	A, sm ⁻¹
CH=CHR	-48	CH ₂ Cl	0 ... +25
C ₆ H ₅	-20	CHCl ₂	0 ... +45
H	+10	RCO	+5 ... +10
Hal	+80	Siklo - C ₃ H ₅	-20
OR	+20	Siklo - C ₅ H ₉	+30
OH (monomerli)	+45	Siklo - C ₆ H ₁₁	0
OH (dimerli)	-5	Siklo -C ₇ H ₁₃	-10
NH ₂ (monomerli)	-25		

Yagona bog'lanishlar ishtirokidagi tebranishlar odatda unchalik xarakterli emas, bu funktsional guruhlarini aniqlashda e'tiborga olinishi kerak.

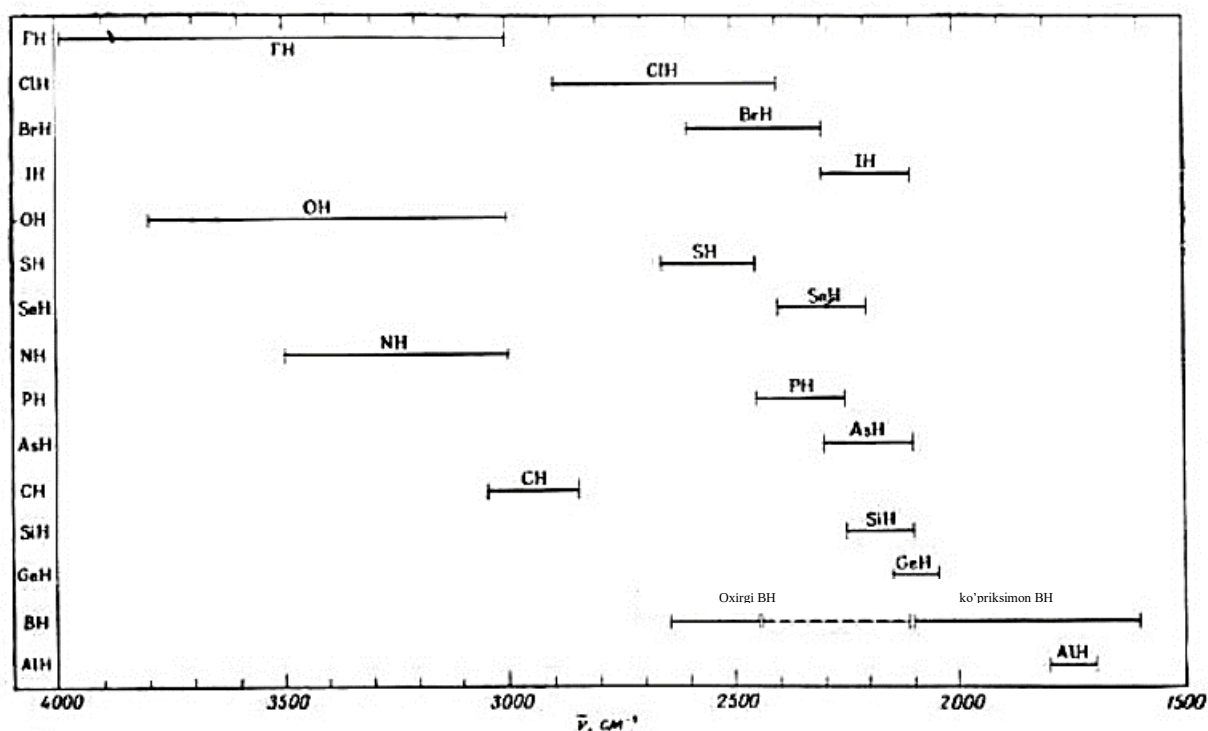
5 - jadval

Yagona bog'lanishlar ishtirokidagi xarakterli tebranish chastotalari

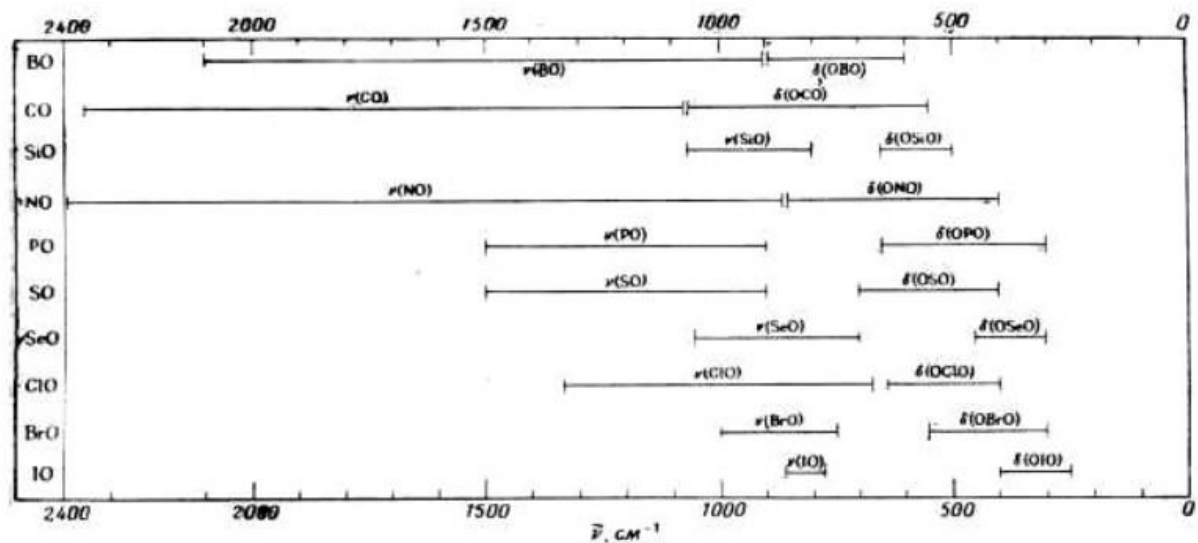
Guruhlar	ν , sm ⁻¹	I _{nisb}	Tegishliligi va qo'llanilishi
C-C	1050± 10	kuchli – O'rtacha	C-C bog'lar. Odatda bir necha chiziqli kuzatiladi. Identifikatsiya talab etilmaydi
C-O-C	1105 ±45	kuchli	ν_{as} C-O-C) alitsiklik efirlarda
C-O-C	1050± 10	kuchli	ν_{as} C-O-C) alkilaril va alkilvinil efirlarda
C-O(H)	~1050	O'rtacha	ν (C-O) mos ravishda birlamchi, ikkilamchi va uchlamchi spirtlarda
	~1100		
	~1150		
C-O(H)	1200 ± 20		ν (C-O) fenollarda
C-N	1305 ± 55	kuchli	ν (C-N) aromatik aminlar va amidlarda.
	1230± 50	O'rtacha	ν (C-N) alifatik aminlar va amidlarda
	870 ± 10	O'rtacha	ν (C-N) nitrobirikmalarda
C-F	1050± 50	kuchli	Monoftor almashgan moddalar
	1250± 150	Juda kuchli	di va poliftor almashgan moddalar. Almashinish darajasi qanchalik yuqori bo'lsa, chastota shunchalik yuqori

			bo`ladi.
C-Cl	725 ± 25	kuchli	Monoalmashganda. Polialmashganda 800 cm^{-1} gacha bo`ladi.
C-Br	650 ± 30	kuchli	
C-I	500	kuchli	
P-O	1000	O`rtacha	Aromatik birikmalarda.
Si-CH ₃	800 ± 50	Juda kuchli	1360 cm^{-1} da $\sigma(\text{CH}_3)$ da kuzatiladi.
Si-Ph	$1430 \text{ } 1115 \pm 25$	Juda kuchli Juda kuchli	Aniq tegishliligi noma`lum.
P-O-C	1040 ± 10	Juda kuchli	Alifatik efirlarda
	1215 ± 25	O`rtacha	Aromatik efirlarda

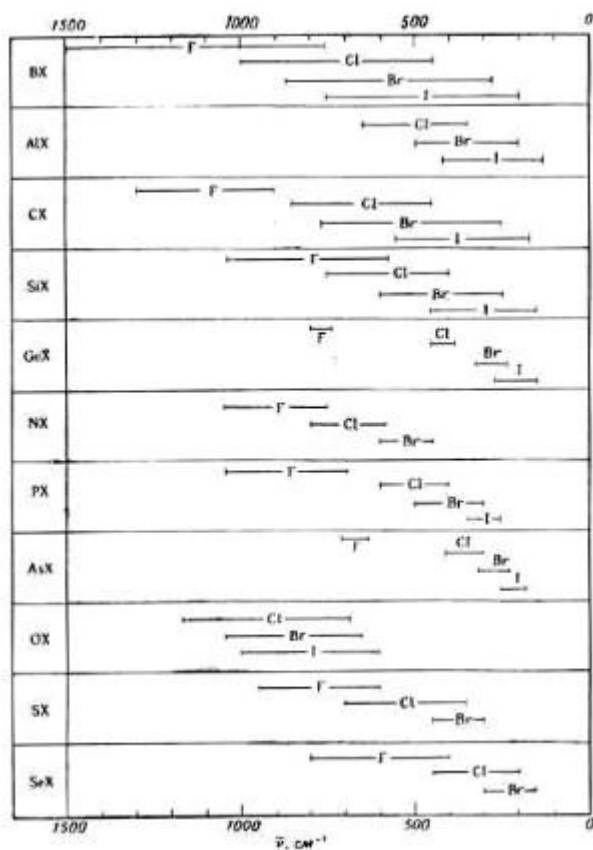
Anorganik birikmalardagi bog'lanishlarning xarakterli tebranishlari chastotasi



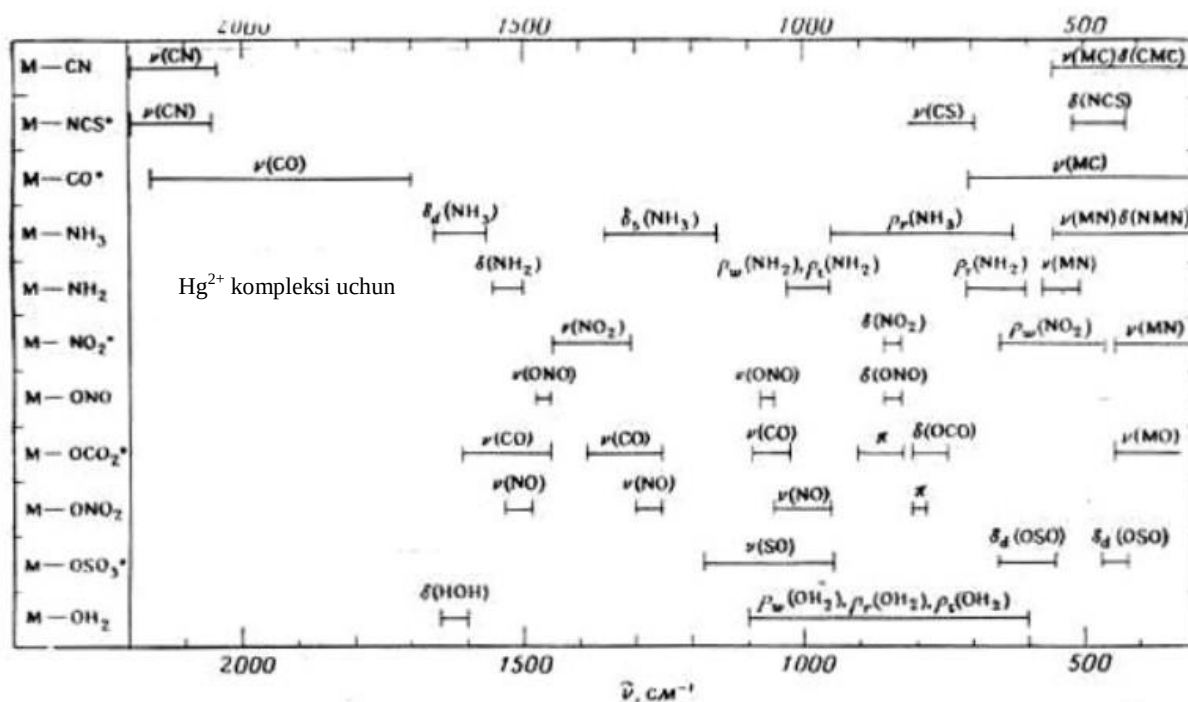
Vodorod atomlarini ishtirokida valent tebranish chastotalari



45-rasm. Kislorod atomlari ishtirokida deformatsiyali tebranishlar chastotalari

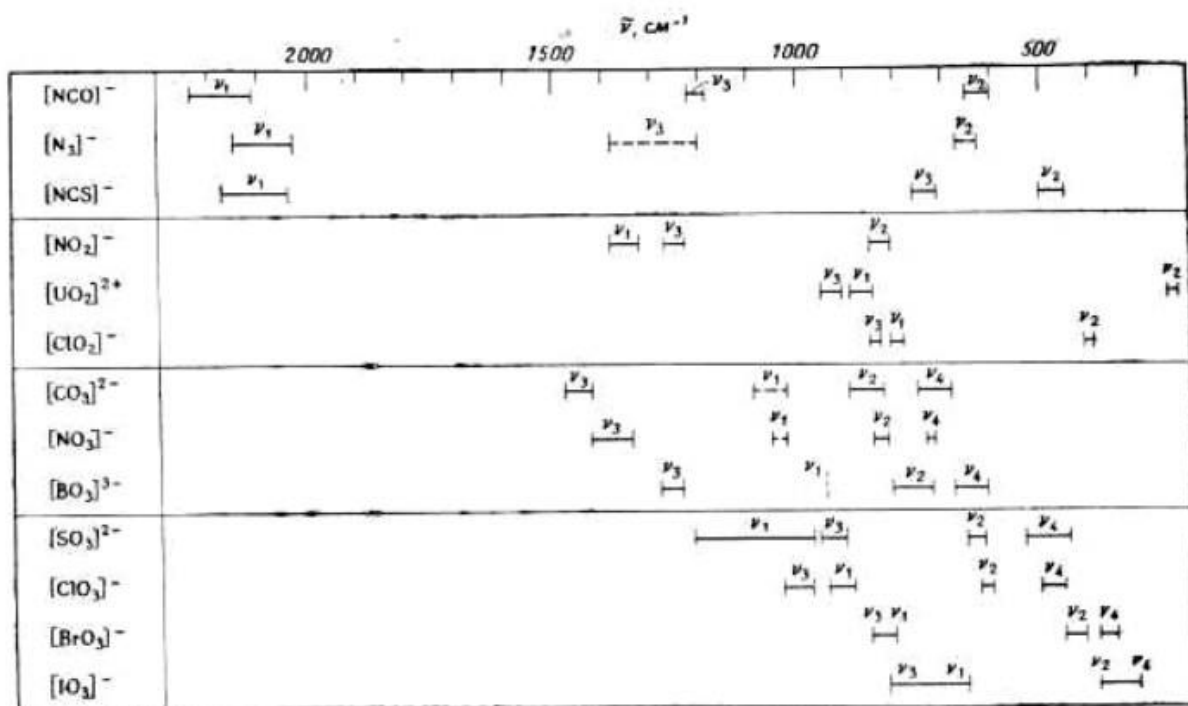


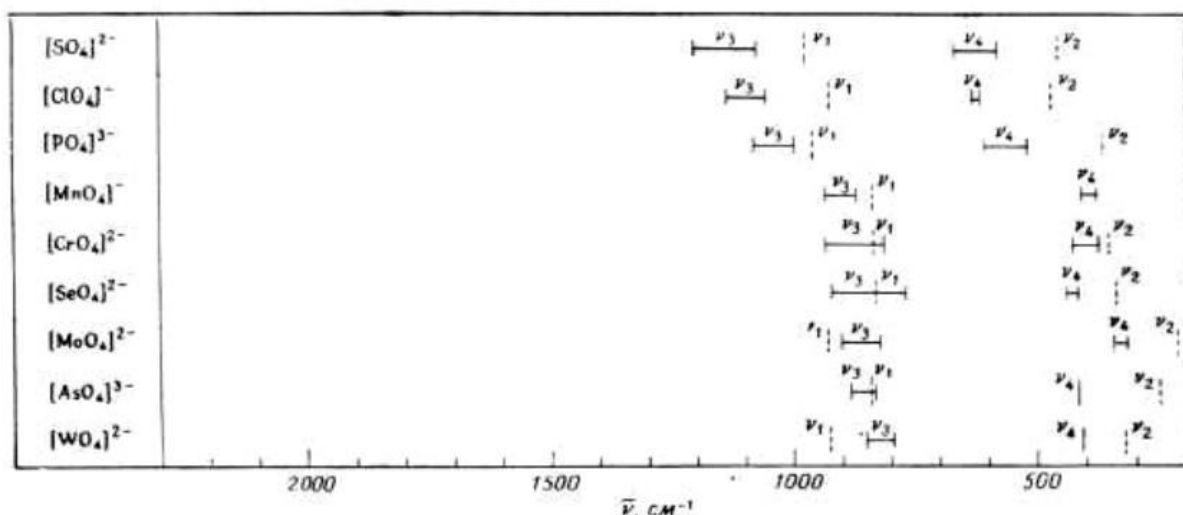
46-rasm. Galogen (X) atomlari ishtirokida balent tebranish chastotalari



47-rasm. Oddiy ligandlarga ega metall komplekslarining xarakterli tebranish chastotalari

Yulduzcha bilan belgilangan ligandlar holatida bidentat va ko'priksimon komplekslar uchun chastota diapazonlari ko'rsatilgan.

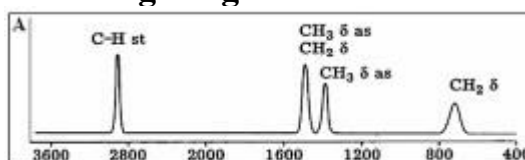




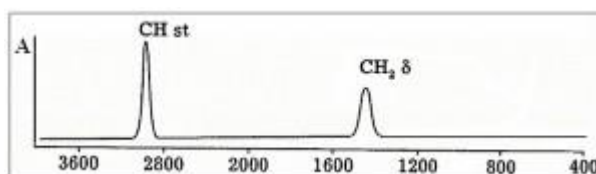
48-rasm Ba'zi noorganik ionlarning xarakterli tebranish chastotalari (Raman spektrida faol bo'lgan tebranishlar nuqta chiziq bilan belgilanadi)

Alkanlarda C-H bog'ning tebranishi

Alk



Alkanlarda yutilish

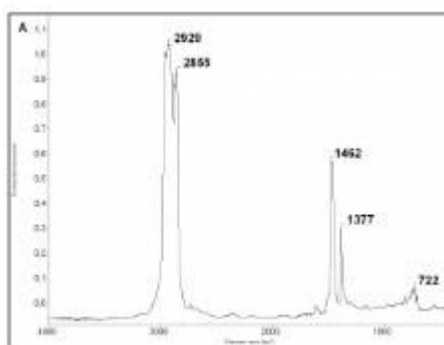


Siklik alkanlarda yutilish

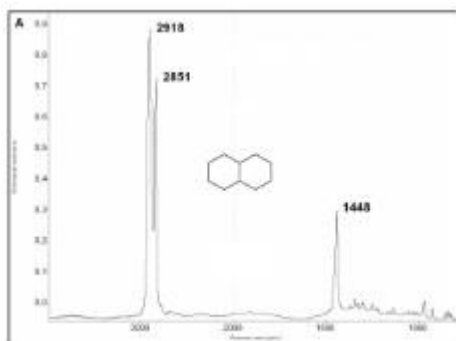
49-jadval

Tuzilishli fragmentlar	To'lqin sonlari sm^{-1} (to'lqin uzunliklari MKM)	Tebranish turlari (intensivlik)	Izoh
- CH ₃	2975-2950 (3,36-3,39) 2885-2860 (3,47-3,50) 1470-1435 (6,80-6,97) 1385-1370 (7,22-7,30)	ν_{as} (kuchli) ν_{s} (kuchli) σ_{as} (O'rtacha.) σ_{s} (kuchsiz .)	Geteroatomlarga birikkan CH ₃ guruhlar uchun: O-CH ₃ 2830-2815 sm^{-1} P-CH ₃ 1299 sm^{-1} , S-CH ₃ 1325 sm^{-1}
- CH ₂ -	2940-2915 (3,40-3,45) 2870-2845 (3,49-3,52) 1480-1440 (6,76-6,94)	ν_{as} (kuchli .) ν_{s} kuchli kuchsiz .) σ_{as} (O'rtacha.) CH ₂ qaychisimon	-CH ₂ -CO – holatda 1400-1440 sm^{-1} kuchli qisqa chiziq ko'rinishda namoyon bo'ladi
(CH ₂) _x	720-740 (13,89-13,50)	σ , (O'rtacha.), mayatniksimon	Qattiq holdagi dublet (polietilen)
Siklopropanda -	3080-3040 (3,25-3,29)	ν_{as} (O'rtacha)	Epoksibirikmalar uchun ham

$\text{CH}_2 -$	1020-1000 (9,80-10,0)	skeletsimon (O'rtacha)	xuddi shu ko'rinishda
$\text{C}(\text{CH}_3)_2$	1385-1370 (7,22-7,30) 1370-1365 (7,30-7,33) 1145 (8,73), 1179 (8,55)	σ , (O'rtacha), σ , (O'rtacha),	Intensivligi taxminan bir xil bo'lgan ikkita chiziqlik
$\text{C}(\text{CH}_3)_3$	1395-1385 (7,17-7,22) 1365 (7,33)		Intensivlik nisbati taxminan 1 : 2 bo'lgan ikkita chiziqlik

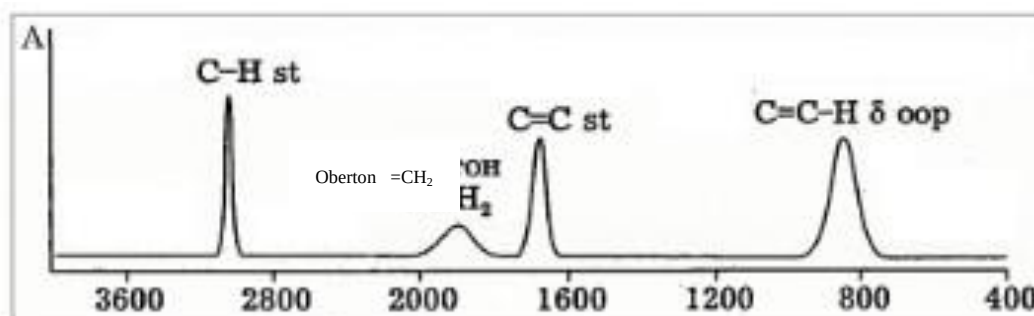


Misol. Dizel yoqilg'isining IQ spektri (uglevodorodlar aralashmasi)



Misol. Dekalinaning IQ spektri

ALKENLAR: $\text{C}=\text{C}$



Alkenlarda yutilish

50-jadval

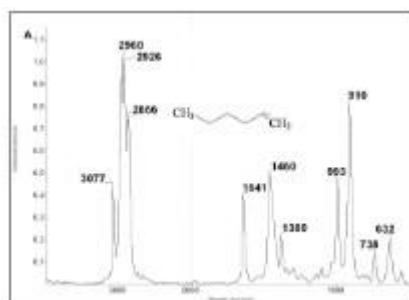
Alkenlarda C-H bog'ning valent tebranishlari			
HRC=CH ₂	3095-3010 (3,29-3,32) 2975 (3,37) 3040-3010 (3,29-3,32)	ν_{as} O'rtacha. ν_s O'rtacha ν_{C-H} O'rtacha	Bu sohada C-H aromatik, geteroaromatik, mayda halqalar, galogenlangan alkil guruhlarining valent tebranishlari kiradi.
RR'C=CH ₂	3095-3075 (3,23-3,25)	ν_{C-H} O'rtacha	
HRC=CHR'H stis-	3040-3010 (3,20-3,32)	ν_{C-H} O'rtacha	
HRC=CR'H trans-	3040-3010 (3,29-3,32)	ν_{C-H} O'rtacha	
Alkenlardagi C-H bog'lanishlarning deformastiyalangan tebranishlari va qo'shbog'lanishdagi almashinish turlari.			
HRC=CH ₂	1850-1800 (5,41-5,56) 1420-1410 (7,04-7,09) 1300-1290 (7,69-7,75) 995-985 (10,05-10,15) 915-905 (10,93-11,05)	Obertone δ_{CH} yassi δ_{CH} yassi δ_{CH} yassi bo'lmagan δ_{CH} yassi bo'lmagan	chekkadagi vinil guruhi. Yassi tebranishlarning chastotalari to'yingan birikmalarda ν_{C-C} va δ_{C-H} sohalariga to'g'ri keladi, ular yassi bo'lmagan tebranishlarga nisbatan kamroq intensivlikka ega.
RR'C=CH ₂	1800-1750 (5,56-5,62) 1420-1410 (7,04-7,09) 895-885 (11,17-11,30)	Obertone δ_{CH} yassi	Chekkadagi metilen guruhi.
HRC=CR'H stis-	1420-1400 (7,04-7,14) 730-665 (13,70-15,04)	δ_{CH} yassi δ_{CH} yassi bo'lmagan	
HRC=CR'H trans-	1310-1290 (7,63-7,75) 980-960 (10,20-10,42)	δ_{CH} yassi δ_{CH} yassi bo'lmagan	
HR'C=CR''H	850-790 (11,76-121,66)	δ_{CH} yassi bo'lmagan	Qo'shloq bog'lanishda uch almashinish, kuchsiz chiziq
Eng xarakterli - bu 1000-650 sm ⁻¹ oralig'idagi tekis bo'lmagan egilish tebranishlarining chiziqlari.			

51-jadval

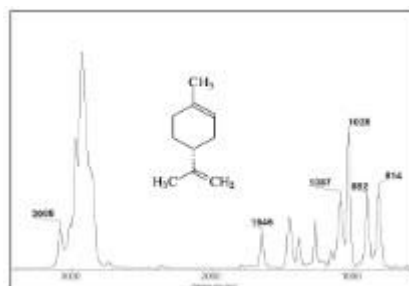
Alkenlarda C=C bog'lar valent tebranishlari: C=C

C=C uyg'unlashmagan	1680-1620 (5,95-6,17)	oralig	Odatda past intensiv chiziqlar
HRC=CH ₂	1645-1640 (6,08-6,10)	O'rtacha	chekkadani vinil guruhi.
RR'C=CH ₂	1660-1640 (6,02-6,10)	O'rtacha	chekkadagi metilen guruhi.
HRC=CR'H stis-	1665-1635 (6,01-6,12)	O'rtacha	Molekula simmetriyasi oshishi bilan intensivlik pasayadi; nosimmetrik tuzilmalarda polosalar yo'qolishi mumkin.
HRC=CR'H trans-	1675-1665 (5,97-6,00)	O'rtacha	
HR'C=CR''H	1675-1665 (5,97-6,00)	oralig	Qo'shbog' holatda uch almashinish
RR'C=CR''R'''	1690-1670 (5,92-5,99)	kuchsiz	Qo'shbog' holatda to'rt almashinish
Dienlar	1650-(6,06) 1600 (6,25)		Ikkita chiziq, ~1650 sm ⁻¹ diapozonda intensivlik oshadi. Transbutadien-1,3 da

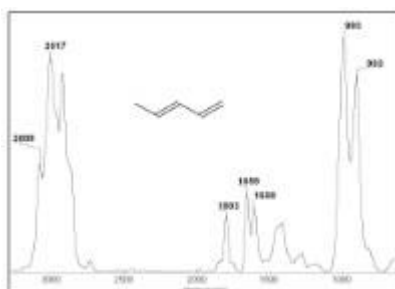
			bitta $\sim 1600 \text{ cm}^{-1}$ $\nu_{\text{C}=\text{C}}$ chiziq
Полиены	1650-1580 (6,06-6,33)		Keng chiziq
C=C, fenol bilan uyg'unlashgan	~ 1625 ($\sim 6,16$)	kuchli	Yuqori intensivlik, 1590 cm^{-1} chiziq paydo bo'lishi mumkin.
C=C, C=O bilan uyg'unlashgan	1660-1580 (6,02-6,33)	kuchli	Intensivlik yuqori.
$\text{F}_2\text{C}=\text{C}$	~ 1750 (5,71)	-	$-\text{HC}=\text{CH}-\text{CF}_3$ guruhida F ning ta'siri kuzatilmaydi. C=C Cl, Br, J bilan qo'shilishda $\nu_{\text{C}=\text{C}}$ chastotasi mos ravishda kamayadi: 1610, 1605, 1593 cm^{-1} .



Misol. Chiziqli alkenlarda IQ spektri

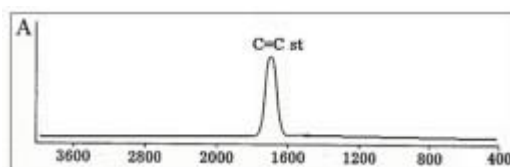


Misol. Kumullashmagan dien –(R)-limonenning IQ spektri

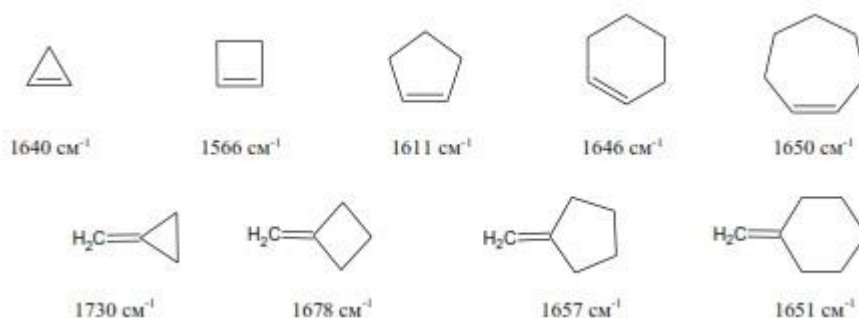


Misol. Kumullashgan dien –pentadien-1,3 IQ spektri.

Siklik olefinlarda C=C bog'lar valent tebranishlari: C=C



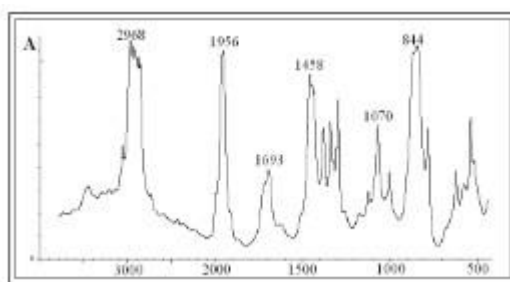
Siklik alkenlarda yutilish



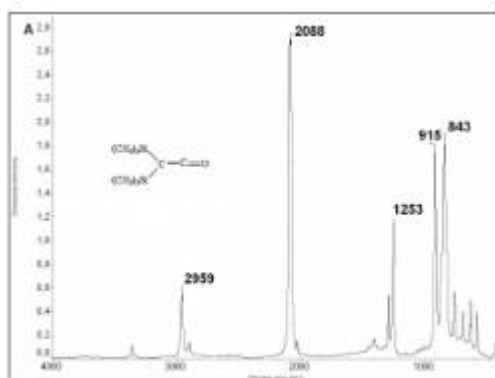
52-jadval

Kumullashgan (to'plangan) qo'shbo'g'lar: =C=CH, C=C=X

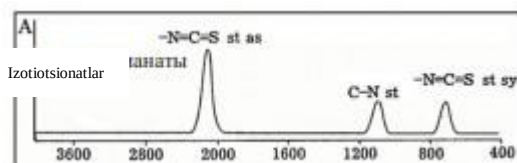
C=C=C C=C=CH ₂ (allenlar)	1970-1950 (5,08-5,13) 1060 (9,43) 850 (11,76)	ν_{as} O'rtacha. σ_{C-H} O'rtacha	Dublet 1930-1970 hollarda va elektromanfiy birikkanda =CH ₂ uchun aniq tebranishlar.
C=C-O (ketenlar)	2150 (4,65) 1120 (8,93)	ν (kuchli) (kuchli)	
O=C=O, CO ₂	2349,3 (4,256)	ν_{as} (kuchsiz.)	Graduirovkada foydalaniladigan atmosfera karbonat angidridi.
C=C=N (keteniminlar)	~2000 (~5,00)	ν (kuchli)	
N=C=N (karbodiimidlar)	2155-2130 (4,64-4,70) 2145 (4,66), 2115 (4,73)	ν (kuchsiz) ν (kuchsiz.)	Alifatik Alifatik
N=C=O (izostianatlar)	2275-2260 (4,39-4,42) 1390-1350 (7,19-7,41)	σ_{as} (kuchli.) ν_s (kuchsiz)	Holat oralatma bog'lanishga bog'liq emas. Amalda qo'llanilmaydi.
N=C=S (izotostianatlar)	2140-1990 (4,67-5,26) 2130-2140 (4,70-4,90)	ν (kuchli) ν (kuchli)	Alifatik Aromatik. Boshqa chiziqlar: 1090 sm ⁻¹ (s), 930 sm ⁻¹ (s)
-N ₃ (azidlar)	2169-2120 (4,63-4,72) 1350-1180 (7,41-8,48)	ν_{as} (kuchli) ν_s (sr.)	
RHC=N ⁺ =N ⁻ RR'C=N ⁺ =N ⁻ (diazobirikmalar)	2050-2035 (4,88-4,92) 2030-2000 (4,93-5,00)	ν (kuchli) ν (kuchli)	R karbonil guruh bo'lganda, 2100-2080 sm ⁻¹ R karbonil guruh bo'lganda, 2075-2050 sm ⁻¹



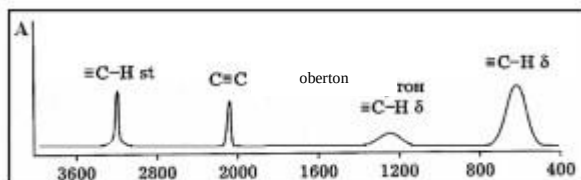
Misol. 1,2-pentadienning IQ spektri



Misol. Ketening IQ spektri



Alkinlar va uchlamchi bog'lar: $C\equiv N$ $C\equiv C$ $C\equiv N$

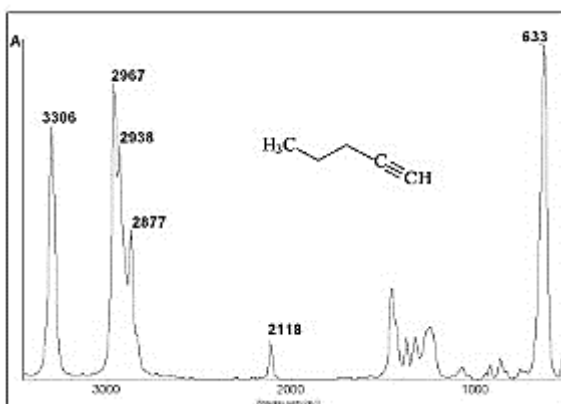


Alkinlarda yutilish

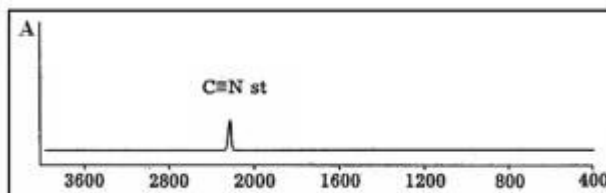
53-jadval

$\equiv C-H$ (alkinlar) $R-C\equiv C-H$ $R-C\equiv C-R'$	3310-3200 (3,02-3,12) 700-600 (14,29-16,67) 2140-2100 (4,67-4,76) 2260-2190 (4,42-4,57)	ν_{C-H} (O'rtacha. tor) δ_{C-H} (keng) ν_{S-S} (kuchsiz)	ν_{C-C} ning intensivligi $C=O$ ning oralatmaligi ortishi bilan ortadi. $R=R'$ bo'lganda simmetrik birikmalar hosil bo'lmaydi.
$R-CN$ (nitrillar)	2260-2240 (4,42-3,46) 2230-2220 (4,48-4,50) 2240-2200 (4,46-4,50)	ν_{CN} (O'rtacha.) ν_{CN} (kuchli.) ν_{CN} (O'rtacha.)	To'yingan nitrillar. α,β -to'yingan asiklik nitrillar. Arilnitrillar.
$R-N^+\equiv C^-$ (izonitrillar)	2185-2120 (4,58-4,72)	ν_{CN} (s kuchli)	

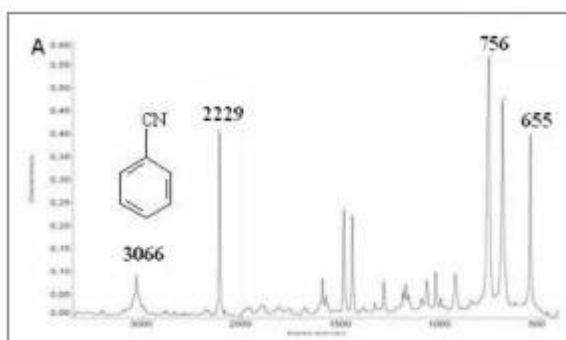
R-S-C $\equiv$ N (tiosianatlar)	2140- (4,90) 2175-2160 (4,60-4,63)	ν_{CN} (kuchli.) ν_{CN} (kuchli.)	Alifatik Alifatik
-N $_2^+$	2300-2230 (4,35-4,49)	ν (kuchli)	Anion turiga bog'liq emas.



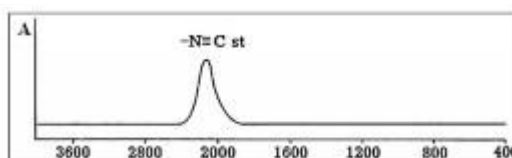
Misol. Pentin-1 ning IQ spektri



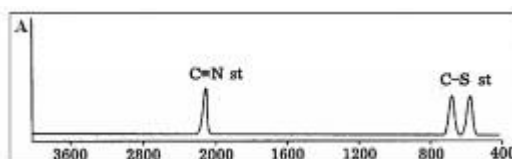
Nitrillar



Misol. Aromatik nitrilning IQ spektri



Izonitrillar

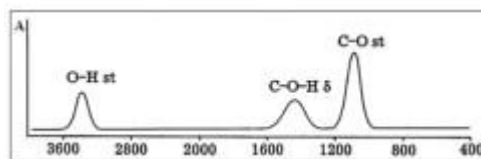


Tiosianatlar

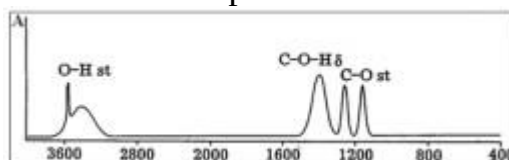
Aromatik birikmalar

C-H bog'lar valent tebranishlari			
C-H	3080-3030 (3,25-3,30)	ν_{C-H}	Odatda bir nechta kuchsiz yoki o'zgaruvchan intensiv chiziqlar.
Aromatik halqa valent tebranishlari			
	1600-1575 (6/16-6/35) 1525-1475 (6,56-7,78) 1590-1575 (6,29-6,36) 1465-1440 (6,38-6,94)	O'zgaruvchan intensiv chiziqlar.	Uglerod skeletining pulsastiyalanuvchi tebranishlari. $\sim 1500 \text{ sm}^{-1}$ polosa odatda 1600 sm^{-1} dan ko'ra iintensivroq bo'ladi. Oralatma o'rinbosarlar kiritilishi bilan bu polosalarning intensivligini oshiradi. 1450 sm^{-1} polosa CH_2 deformatsiya tebranish polosasi bilan qoplanadi.
C-H ning $1225-950 \text{ sm}^{-1}$ sohadagi yassi deformatsiyali tebranishlari			
Bir marta almashgan, 1,3-, 1,2,3- va 1,3,5-almashgangan.	1175-1125 (8,51-8,89) 1110-1070 (9,01-9,35) 1070-1000 (9,35-10,00)	Kuchsiz Kuchsiz kuchsiz.	1,3,5-almashinishda mavjud emas.
1,2-, 1,4- va 1,2,4-almashgan.	1225-1175 (8,17-8,51) 1125-1090 (8,89-9,17) 1070-1000 (9,35-10,00)	Kuchsiz Kuchsiz kuchsiz	
1,2-, 1,2,3- va 1,2,4-almashgan.	1000-960 (10,00-10,94)	kuchsiz	
C-H ning $1000-650 \text{ sm}^{-1}$ sohadagi yassi bo'lmagan deformatsiyali tebranishlari.			
Bir marta almashgan	770-730 (12,99-13,70) 710-690 (14,08-14,49)	Kuchli kuchli.	Alkil o'rinbosarlar uchun topshiriqlar ishonchli, qutbli o'rinbosarlar bo'lsa, topshiriqda ehtiyot bo'lish kerak.
1,2-almashgan	770-735 (12,99-13,61)	kuchli	
1,3-almashgan 1,3-almashgan	900-860 (11,11-11,63) 810-750 (12,35-13,33) 725-680 (13,74-14,71)	O'rtacha. kuchli O'rtacha.	
1,4- va 1,2,3,4-almashgan	800-770 (11,63-12,50)	Kuchli	
1,2,3-almashganlar	800-770 (12,50-12,99) 720-685 (13,89-14,60)	kuchli O'rtacha.	Alkil o'rinbosarlar uchun topshiriqlar ishonchli, qutbli o'rinbosarlar bo'lsa, topshiriqda ehtiyot bo'lish kerak.
1,2,4-almashganlar	860-800 (11,63-12,50) 900-860 (11,11-11,63)	kuchli O'rtacha.	
1,2,5-almashganlar	900-860 (11,11-11,63) 865-810 (11,56-12,35) 730-675 (13,70-14,81)	O'rtacha Kuchli kuchli	
1,2,3,5-, 1,2,4,5- va 1,2,3,4,5-almashganlar	900-860 (11,11-11,63)	O'rtacha.	800 sm^{-1} gacha siljishi mumkin.

Spirtlar va fenollar: R-OH



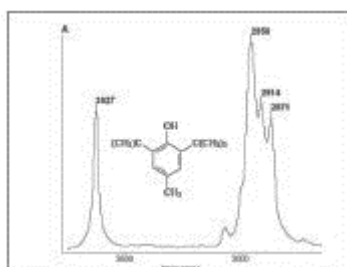
Spirtlar



Fenollar

55-jadval

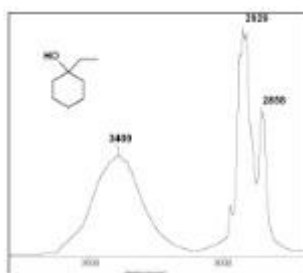
OH guruhining valent tebranishlari			
Erkin guruxlar O-H	3670-3580 (2,73-2,79)	ν_{OH} , (per.)	Inert erituvchilarda yoki gaz fazasida subltirilgan eritmalar spektrlarida tor soha sifatida namoyon bo'ladi.
Dimer va polimerlarda ichki va molekulyar H-bog'lanishlar.	3550-3400 (2,82-2,94) 3400-3200 (2,94-3,125)	Ba'zida murakkab konturga ega bo'lgan keng intensiv polosa.	Spirt yoki fenol eritmasi inert erituvchida suyultirilganda molekulalararo H – bog'lanishlarida assostilanmagan molekulalarning qisqa polosasi paydo bo'ladi, bu molekula ichidagi H – bog'lanishlar hosil bo'lganda sodir bo'lmaydi.
Uchlamchi spirtlarda va orto- almashingan fenollarda erkin gidroksil guruhlari polosasi paydo bo'lishi mumkin.			
C-O-H guruhi bilan bog'langan boshqa tebranishlar			
R-O-H R-O-H	1450-1250 (6,90-8,00) 750-650 (13,33-15,38)	σ_{OH} (keng) σ_{OH} (keng)	Keng qisqa ma'lumotli polosalar. Bog'langan OH guruhi tebranishlari.
Birlamchi spirtlar	1075-1000 (9,30-10,00) 1350-1260 (7,40-7,94)	Kuchli kuchli	Keng
Ikkilamchi spirtlar	1125-1030 (8,93-9,71) 1350-1260 (7,41-7,94)	Kuchli kuchli	Keng
Uchlamchi spirtlar	1170-1100 (8,55-9,09) 1410-1310 (7,09-7,63)	Kuchli kuchli.	Keng
Fenollar	1230-1140 (8,13-8,77) 1410-1310 (7,09-7,63)	Kuchli kuchli	Keng



Misol. Murakkab tuzilishli fenolning fazoviy tuzilishida erkin OH guruhning yutilishi

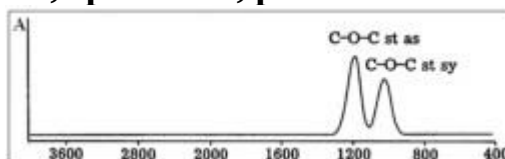


Misol. Aromatik aminofenollarda bog'langan OH guruhning yutilishi



Misol. Spirtlarda bog'langan OH guruhning yutilishi

Oddiy efirlar, epoksidlar, peroksidlar: R-O-R, -O-O-

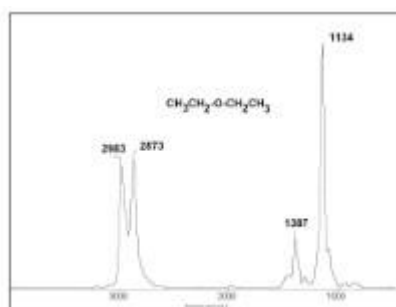


Oddiy efirlar

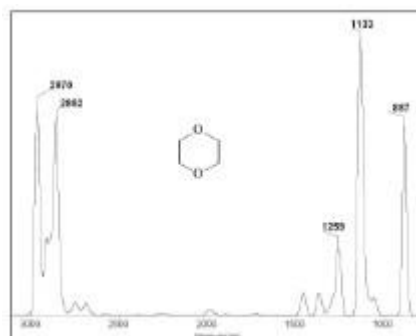
56-jadval

Alifatik -C-O-C- uchlamchi C ₃ C-O-	1150-1060 (8,70-9,43) 920-800 (10,87-12,50)	ν_{C-O-C} C. C.	Tizimli o'zgarishlarga sezgir bo'lgan juda keng va intensiv polosa. Bu sohada uglerod skeletining o'rtacha tebranish intensivligi to'g'ri keladi.
Aromatik va vinil guruh =C-O-C-	1270-1230 (7,87-8,13) 1075-1020 (9,30-9,80)	Kuchli kuchli	
Siklik efirlar Epoksi birikmalar Katta stiklli efirlar Ketallar, astetallar -C-O-C-O-C-	1260-1240 (7,94-8,07) 950-860 (10,53-11,63) 865-750 (11,56-13,32) 1140-1070 (8,77-9,35) 1200-1040 (8,34-9,62)	Kuchli oraliq O'rtacha. Kuchli	Halqaning simmetrik valent tebranishlari Halqaning antisimmetrik valent tebranishlari 4-5 chiziqli guruh
Perekislar R-O-O-R Alifatik	890-830 (11,24-12,05)	ν_{O-O}	Birlamchi gidroperekislar 1448(6,72),

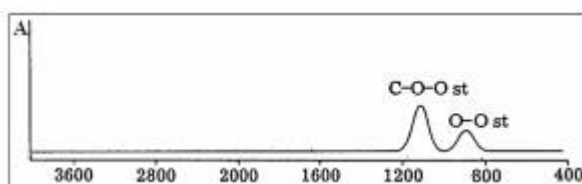
Aromatik	~1000 (~10)	kuchsiz	1435 (6,97) Ikkilamchi gidroperekislar 1352-1334 (7,40-7,50)
Ozonidlar	1060-1040 (9,43-9,62)		Ozonidlar parchalanish mahsulotlarining ν_{C-O} sohalarini kuzatish mumkin.
Metoksi guruhlar polosalari			
Alk-O-CH ₃	2830-2815 (3,53-3,55)	ν_{C-H} O'rtacha	$\nu_s CH_3$
Ar-O-CH ₃	~2850 (~3,51)	ν_{C-H} O'rtacha	$\nu_s CH_3$



Misol. Dietil efirining IQ efiri

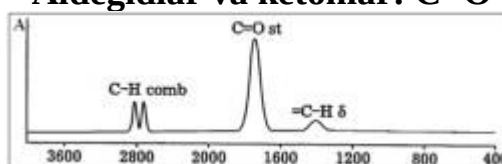


Misol. Dioksanning IQ spektri

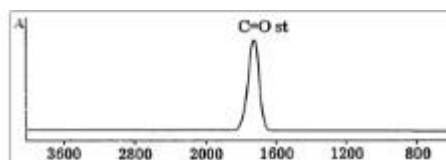


Peroksidlar

Aldegidlar va ketonlar: C=O



Aldegidlar

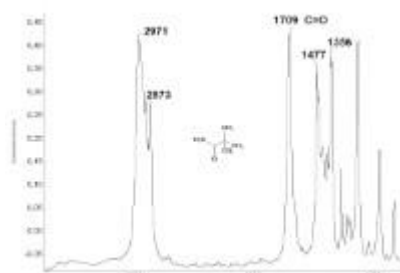


Ketonlar

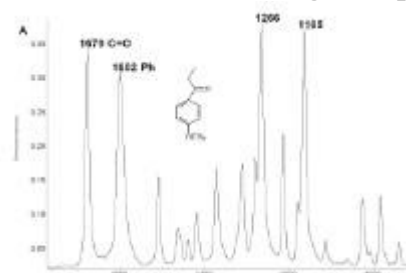
57-jadval

Aldegidlar			
To'yingan alifatik -CH ₂ -CHO	1740-1720 (5,75-5,81)	Kuchli	Vodorod bog'lanishning hosil bo'lishida ishtirok etish ν_{CO} chastotasini sezilarli darajada pasaytiradi (masalan, salistil aldegidi molekuladagi ichki molekulyar H - bog'lanishida 1666 sm ⁻¹ gacha).
α , β - to'yinmagan C=C-CHO	1705-1685 (5,78-5,93)	Kuchli	
Oralatma polienol guruh C=C-C=C-	1680-1660 (5,95-6,02)	Kuchli	
Aromatik	1715-1695 (5,83-5,90)	Kuchli	
Boshqa turdagi tebranishlar	2880-2650 (3,47-3,77) 975-780 (10,26-12,82)	ν_{CH} (O'rtacha) δ_{CH} (O'rtacha.)	Ikkita polosa paydo bo'lishi mumkin. 2720 sm ⁻¹ yaqinidagi o'rtacha zichlikdagi C=O polosaassimlyastiya bandi bilan birgalikda aldegid guruhining ishonchli ko'rsatgichidir.
Ketonlar. Ketonlardagi $\nu_{C=O}$ valent tebranishlari			
Alifatik -H ₂ C-CO-CH ₂ -	1725-1700 (5,80-5,88)	Kuchli	Polosaning $n_{C=O}$ holatiga quyidagi omillar ta'sir ko'rsatadi: 1. namunaning fizikaviy holati. 2. erituvchi (eritmalar). 3. yaqin turuvchi o'rinosarlar effekti. 4. qo'shbog'li va aromatik halqali oralmalar. 5. molekulalararo va molekula ichidagi H-bog'lar mavjudligi. 6. stiklik tuzilmalar paytida o'rinosarlarning kinematik effekti va stiklar ta'siri.
Siklobutanon	1780-1760 (5,62-5,68)	Kuchli	
Siklopentanon	1750-1740 (5,71-5,75)	Kuchli	
Siklogeksanon	1720-1700 (5,81-5,88)	Kuchli	
α , β - to'yinmagan C=C-CO	1695-1660 (5,90-6,02)	Kuchli	
C=C-CO-C=C	1670-1660 (5,99-6,02)	Kuchli	
Arilalkilketonlar Ar-CO-Alk	1700-1680 (5,88-5,92)	Kuchli	
Diarilketonlar Ar-CO-Ar k	1670-1660 (5,99-6,02)	Kuchli	
α -Galogenalmashgan CX-CO	1745-1725 (5,72-5,80)	Kuchli	
α , α' -Digalogenal- mashgan CX-CO-CX	1765-1745 (5,67-5,72)	Kuchli	
α -Diketonlar -CO-CO-	1730-1710 (5,78-5,85)	Kuchli	3200-2700 sm ⁻¹ da ν_{OH} polosa paydo bo'ladi. Keton shaklida, C=O guruhlarining qo'shma joylashuvi bilan, tebranishning o'zaro ta'siri natijasida 2 ta polosa kuzatiladi.
β -Diketonlar Enol formasi -CO-C=C-OH Keton formasi CO-CH ₂ -CO	1640-1535 (6,10-6,52)	Kuchli ~1720 (~5,81)	
-CO-CH ₂ -CH ₂ -CO-	1725-1705 (5,80-5,87)	O'rtacha	

1,2 va 1,4 Xinonlar			
6 a'zoli halqa	1690-1660 (5,92-6,02)	Kuchli	1,4-xinonlar uchun 1 tadan ko'p polosa kuzatilishi mumkin.
Turli halqadagi 2 ta C=O guruh	1655-1635 (6,04-6,12)	Kuchli	
Ketonlarning IQ spektridagi boshqa tebranishlar			
CH ₃ -CO-	1360-1355 (7,35-7,38)	Kuchli	δ_{CH_3}
-CH ₂ -CO-	1435-1405 (6,97-7,12)	Kuchli	δ_{CH_2}
Barcha ketonlar	3550-3200 (2,82-3,13)	O'rtacha	Oberton ν_{CO} , polosa OH guruhining tebranishlariga noto'g'ri kiritilishi mumkin.



Misol. Alifatik ketonning IQ spektri



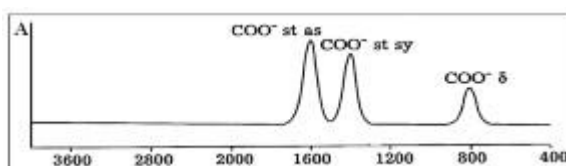
Misol. Aromatik ketonning IQ spektri

58-jadval

Ba'zi birikmalarda karbonil guruhining valent tebranishlar chastotalari
Alkan (CO)X.

X	Chastota, sm^{-1}	X	Chastota, sm^{-1}
Cl	1815-1785	NH ₂	1695-1650
F	~1870	S	1720-1690
Br	1812	SiR ₃	~1620
OR	1750-1735		

Karbon kislotalar COOH

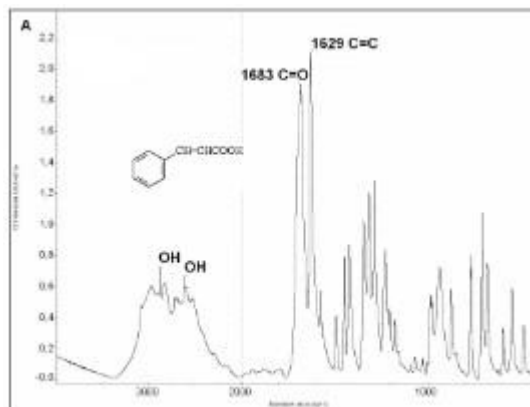


Karboksilat anioni

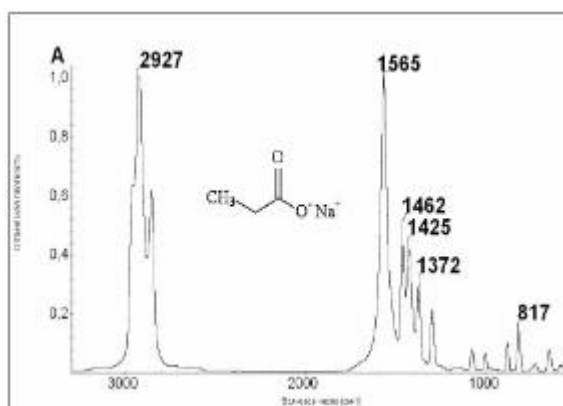
59-jadval

Karbonil guruhining valent tebranishlari			
To'yingan alifatik -CH ₂ -COOH	~ 1760 (~5,68) 1725-1700 (5,80-5,88)	Kuchli Kuchli	Monomerlar. Dimerlar.
α, β to'yinmagan C=C-COOH	~ 1720 (~5,81) 1715-1680 (5,83-5,95)	Kuchli Kuchli	Monomerlar. Dimerlar.
Aromatik Ar-COOH	~ 1720 (~5,81) 1700-1680 (5,88-5,95)	Kuchli Kuchli	Monomerlar. Dimerlar.
α-Galogenli CHX-COOH	1740-1715 (5,75-5,83)	Kuchli	Takrorlanishning siljishi + (10-20 ⁻¹ Br va Cl uchun); + 50 sm ⁻¹ CF ₃ uchun
H-bog'li kislotalar	1680-1650 (5,95-6,06)	Kuchli	

Gidroksil guruh tebranishi va C-O bog'lar			
Erkin guruh OH	3550-3500 (2,82-2,86)	ν _{OH} O'rtacha	
Bog'langan guruh OH	3300-2500 (3,00-4,00)	kuchsiz	Keng polosa yoki polosalar guruhi, ko'pincha C-H valent tebranishlar bilan qoplanadi.
Barcha guruh OH	955-890 (10,47-11,24)	δ _{OH} oraliq	OH uchun tekis bo'lmagan egilish tebranishlarining keng polosasi.
O – H	1440-1395	δ _{OH} oraliq	
C – O	1320-1210	ν _{C-O}	
Karboksilat-anionlari	1650-1550 ~1400-1300	ν ^{as} _{C-O} kuchli. ν ^s _{C-O} O'rtacha.	CCl ₄ da kislota eritmasiga trimetilamin qo'shilganda va n _{OH} ning yo'qolib qolishi ikkita polosaning paydo bo'lishi kislotalarni aniqlashda foydalaniladi.



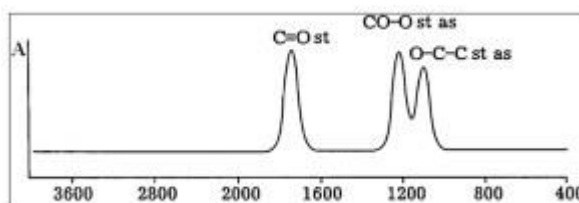
Misol. Korich kislota IQ spektri



Misol. Propion kislota natriyli tuzi

Murakkab efirlar va laktonlar

COOR



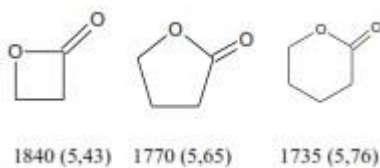
Murakkab efirlar va laktonlar

60-jadval

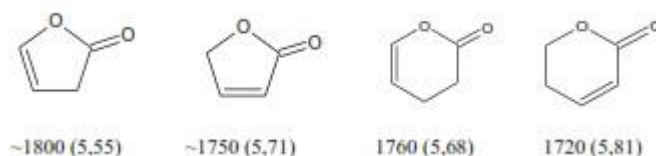
Murakkab efirlarda C = O tebranishlari			
-CH ₂ – COOR	1750-1735 (5,71-5,76)	Kuchli	To'yingan alifatik murakkab efirlar.
-C = C-COO-R	1730-1715 (5,78-5,53)	Kuchli	α,β-to'yinmagan murakkab efirlar.
Ar-COO-R	1730-1715 (5,78-5,53)	Kuchli	Aromatik murakkab efirlar.
-COO-C=C- -COO-Ar	1800-1770 (5,56-5,65)	Kuchli	Fenollarning vinilov efirlari. 1690-1650 sm ⁻¹ da kuchli polosaga ega.

β-Ketoefirlar: Enol forma -COH=CH- COOR Keton forma CO-CH ₂ -COOR	1655-1635 (6,04-6,12) ~1735 (~5,76)	Kuchli Kuchli	1630 sm ⁻¹ da yassi intensiv polosa ν _{S=S} 1750 sm ⁻¹ da β-ketonli ν _{C=O}
Murakkab efirlarda 1300 – 1000 sm ⁻¹ C-O-C tebranishlar			
HCOOR	1200-1180 (8,33-8,48)	Kenh kuchli.	Formiatlar.
CH ₃ COOR	1200-1180 (8,33-8,48)	Kenh kuchli.	Astetatlar.
R' -COOR	1200-1170 (8,33-8,55) 1250-1160 (8,00-8,62)	Kenh kuchli. Kenh kuchli.	Propionatlar. Yuqori efirlar.
α,β-efirlar. To'yinmagan alifatik kislota.	1310-1250 (7,63-8,00) 1180-1130 (8,48-8,85)	Kenh kuchli. Kenh kuchli.	Ikkita yassi polosalar.

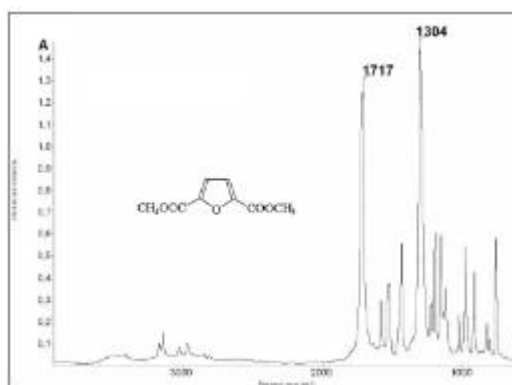
Aromatik kislotalar efirlari	1300-1250 (7,69-8,00) 1150-1100 (8,70-9,09)	Kuchli.,keng. Kuchli, keng.	
Birlamchi spirtlar efirlari	1064-1031 (9,40-9,70)	Kuchli, keng	
Ikkilamchi spirtlar efirlari	~1100 (~9,09)	Kuchli., keng	



To'yingan laktonlar



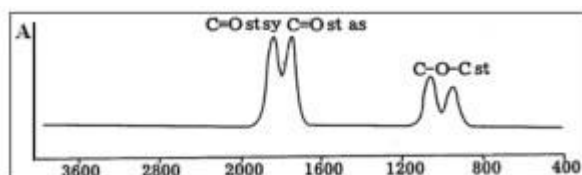
To'yinmagan laktonlar



Misol. Murakkab efirning IQ spektri

61-jadval

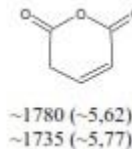
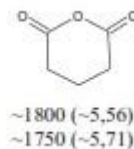
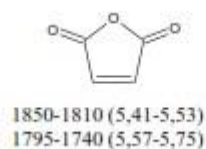
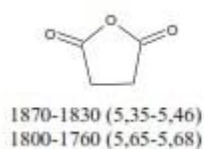
Karbon kislotalarning hosilalari			XC=O
Baʼzan kislota spektrlarida paydo boʻladigan boshqa tebranishlar			
Qattiq yogʻ kislotalari	1350-1180 (7,41-8,48)	kuchsiz	CH ₂ guruh tebranishlari. Bu sohada polosalar soni zanjirdagi C soni C ₁₆ – C ₂₁ .da bittaga ortganda ortib boradi. Tarkibiy chastotalar.
	1440-13950 (6,94-7,17)	δ kuchsiz.	
	1320-1210 (7,58-8,26)	δ kuchsiz.	
Galogen angidridli ы karbon kislotalar.			
Toʻyingan kislotalar Alk-COCI	1815-1785 (5,51-5,60)	ν _{CO} C.	C=O RCOBr > RCOCI > RCOI/ RCOF
Toʻyinmagan kislotalar C=C-COCI	1800-1770 (5,56-5,65) 1750-1700 (5,71-5,88)	ν _{CO} kuchsiz.	



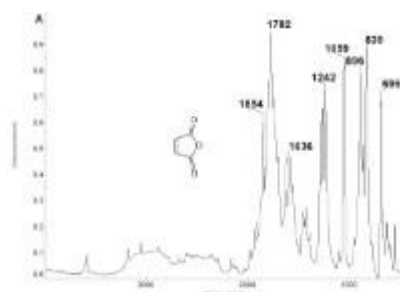
Karbon kislotalar angidridlari –CO-O-CO-ν_{C=O}

62-jadval

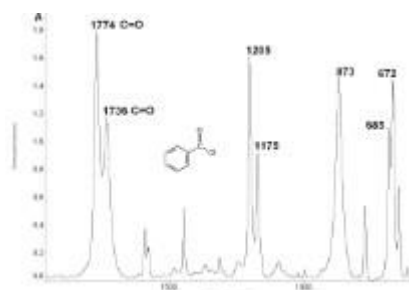
To'yinmagan astiklik	1840-1800 (5,44-5,56) 1780-1740 (5,62-5,75) 1175-1045 (8,51-9,57)	ν^s kuchli. ν^{as} kuchli δ kuchli	60 sm^{-1} masofa oralig'ida barcha angidridlar ikkita polosa beradi.
----------------------	---	---	--



Siklik angidridlardagi C=O guruh valent tebranishlari



Misol. Malein angidridining IQ spektri

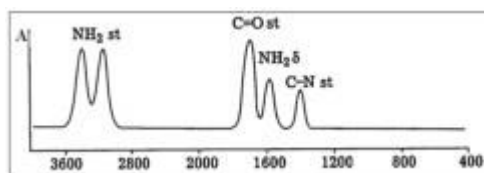
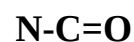


Misol. Benzoy kislotasining xlorangidridi IQ spektri

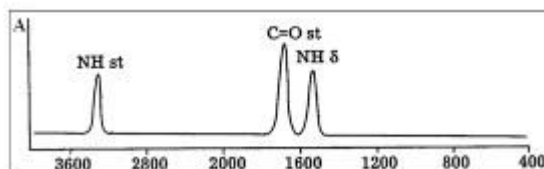
63-jadval

Aliftik poroksidlar $R-CO-O-O-CO-R$	1820-1810 (5,50-5,53) 1805-1780 (5,54-5,62)	ν^s kuchli. ν^{as} kuchli	$F-C(O)-O-O-C(O)-F$ uchun quyidagi polosalar mavjud: 1934, 1905, 1899 sm^{-1}
Aromaticheskieskie perekisi $Ar-CO-O-O-CO-Ar$	1805-1780 (5,54-5,62) 1785-1755 (5,60-5,70)	ν^s kuchli ν^{as} kuchli	

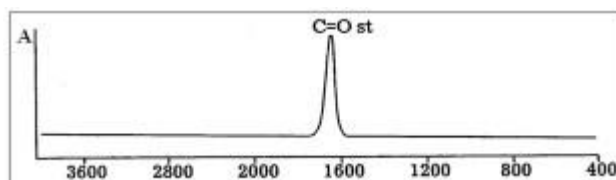
Kislota amidlari, laktamlar, urenatlar (karbamatlar)



Birlamchi amidlar



Ikkilamchi amidlar



Uchlamchi amidlar

64-jadval

N – H valent tebranishlari		
3540-3480 (2,83-2,88) 3420-3380 (2,92-2,96)	Kuchli Kuchli	NH ₂ erkin guruh, ikkita polosa (suyultirilgan eritmalar), ba'zi hollarda Amid A va Amid B deb yuritiladi.
3360-3320 (2,97-3,01) 3220-3180 (3,11-3,15)	O'tacha. O'tacha	Birlashtirilgan NH ₂ guruhlar, ikkita polosa, ν_{ON} bilan qoplanganda spektr ko'rinishi murakkablashadi.
3460-3420 (2,89-2,93)	Kuchli	NH ₂ erkin guruh, bitta polosa
3330-3070 (3,00-3,26)	O'tacha	Birlashtirilgan NH ₂ guruh, bitta polosa.
~ 3440 (~2,91) 3175-3070 (3,15-3,26)	O'tacha O'tacha	Erkin forma Birlashtirilgan forma

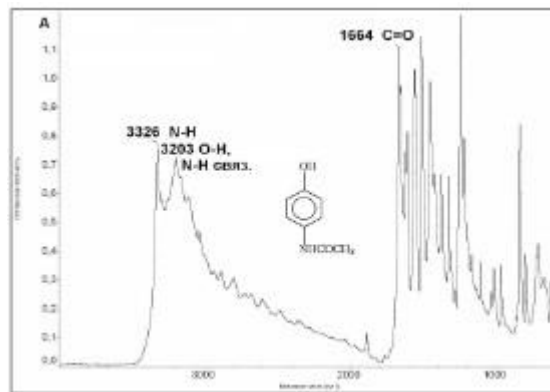
65-jadval

S = O valent tebranishlari (Amid I polosa)			
Birlamchi amidlar. Qattiq holat Suyultirilgan eritmalar.	~ 1650 (~6,06) ~ 1690 (~5,92)	Kuchli Kuchli	

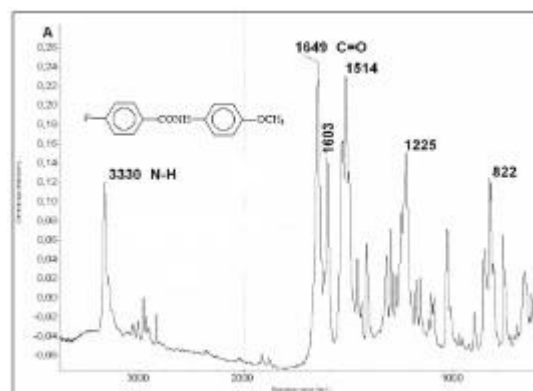
Ikkilamchi amidlar. Qattiq holat Suyultirilgan eritmalar.	1680-1630 (5,95-6,14) 1700-1665 (5,88-6,01)	Kuchli Kuchli	
uchlamchi amidlar. Qattiq holat, suyultirilgan eritmalar.	1670-1630 (5,99-6,14)	Kuchli	Namuna holatiga bog'liq emas.
Laktamlar: To'rt a'zoli, besh a'zoli, katta halqalar bilan	~ 1650 (~6,06) ~ 1690 (~5,92) ~ 1690 (~5,92)		Yassi bo'lmagan veerli N – H tebranishlar 800-700 sm^{-1} qiymatli keng polosalar hosil qiladi.
Peptidlar Amid II Amid III Amid IV Amid V	1655-1630 (6,04-6,13) 1630-1510 (6,13-6,62) 1260-1300 (7,94-7,69) ~ 620 (~16,13) ~ 750 (~13,33)	Kuchli $\delta_{\text{NH}+\text{v}_{\text{CN}}}$, O'tacha. $\delta_{\text{NH}+\text{v}_{\text{CN}}}$, kuchsiz. $\delta_{\text{O}=\text{C}-\text{N}}$, kuchsiz l. δ_{NH}	v_{CN} va v_{C} ta'sirlashishidan hosil bo'lgan polosa. Intensivlik konstentrastiyaga bog'liq. Kam ma'lumotli

66-jadval

Amid II polosasi (egiluvchan NH tebranishlarining tarkibiy qismlari va C - N tebranishlari)			
Birlamchi amidlar Qattiq Suyultirilgan eritmalar	1650-1620 (6,06-6,17) 1620-1590 (6,17-6,31)	O'tacha O'tacha	
Ikkilamchi amidlar: Qattiq Suyultirilgan eritmalar	1570-1515 (6,37-6,0) 1550-1510 (6,45-6,62)	O'tacha O'tacha	
Mochevinaning hosilalari RNH-CO-NHR	~ 1660 (6,02)		
Uretanlar (karbamatlar) RR'N-COOR	1735-1700 (5,76-5,88) 1710-1690 (5,85-5,92)		Xloroformdagi eritma

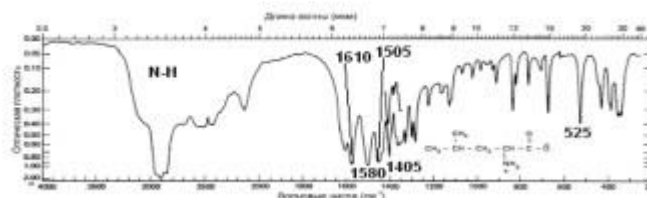


Misol. Hidroksil guruhli ikkilamchi amid (parasetamol, qattiq) IQ spektri



Misol. Ikkilamchi amidning IQ spektri

Aminokislotalar, oqsillar

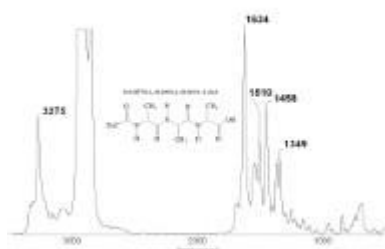


Leystin aminokislotalasining yutilishi

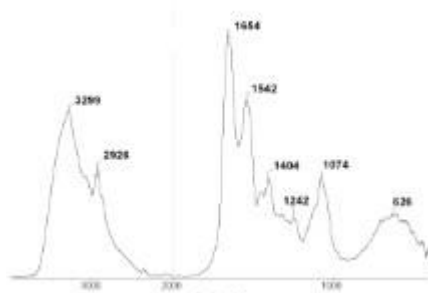
67-jadval

NH ₂ - guruh saqlagan aminoki slotalar	3130-3030 (3,20-3,30) 1660-1610 (6,02-6,21) 1550-1485 (6,45-6,73)	ν_{N-H} O'tacha . δ_{N-H} , kuchsiz. δ_{N-H} , O'tacha.	NH ₃ ⁺ ning valent tebranishlari NH ₃ ⁺ ningegiluvchan tebranishlari, Aminokislotali I polosa NH ₃ ⁺ ningegiluvchan tebranishlari, Aminokislotali II polosa
Dikarbo nli α -	1755-1720 (5,70-5,81)	Kuchli	SOON da C=O valent tebranishlari

aminoki slotalar			
Dikarbonyli aminoki slotalar	1730-1700 (5,78-5,88) 1230-1215 (8,13-8,23)	Kuchli Kuchli	SOON da C=O valent tebranishlari S-O-S bog'lar ishtirokidagi tebranishlar
Barcha aminoki slotalar	1600-1560 (6,25-6,41) 2760-2530 (3,62-3,95) 2140-2080 (4,67-4,81) 1335-1300 (7,49-7,70)	Kuchli kuchsiz kuchsiz O'tacha	SO ₂ tebranish
$H_2N-(CH_2)_n - CO_2^- M^+$ aminokislotalar tuzlari			
-NH ₂	3400-3200 (2,94-3,13)	ν_{N-H} C.	Ikkita polosa
-CO ₂ ⁻	1600-1560 (6,25-6,41)	Kuchli	
$[H_3N^+ -(CH_2)_n - CO_2H]$ Cl ⁻ aminokislotalarning xlorli tuzlari			
-NH ₃ ⁺	3130-3030 (3,20-3,30) 1610-1590 (6,21-6,29) 1550-1485 (6,45-6,73) 1335-1300 (7,49-7,70) 1230-1215 (8,13-8,23)	O'tacha. kuchsiz oraliq. O'tacha Kuchli	NH ₃ ⁺ dagi ν_{N-H} ning valent tebranishlari NH ₃ ⁺ ning egiluvchan tebranishlari NH ₃ ⁺ ning egiluvchan tebranishlari -S-O- bog' ishtirokidagi tebranishlar



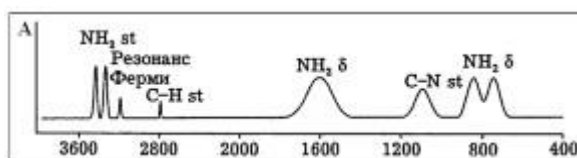
Misol. Oligopeptidning IQ spektri



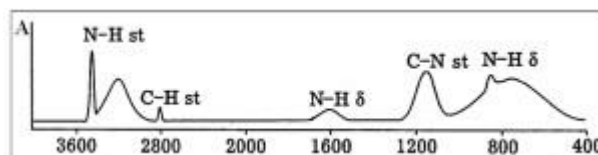
Misol. Sigir zardobi albumin oqsilining IQ spektrlari

Aminlar

N-H



Birlamchi aminlar

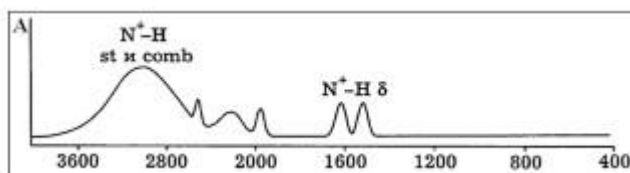


Ikkilamchi aminlar

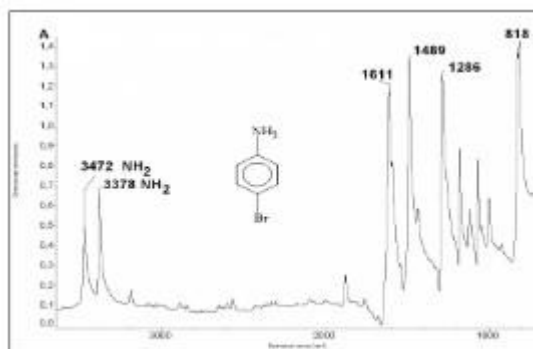
68-jadval

NH ning valent tebranishlari			
Birlamchi aminlar $R-NH_2$	3500-3300 (2,86-3,03)	kuchsiz	Ikkita polosa ν_{as} ν_s
Ikkilamchi aminlar R_2N-H	3500-3300 (2,86-3,03)	kuchsiz	Bitta polosa ν_{N-H}
Iminlar $C=NH$	3400-3200 (2,94-3,13)	O'tacha	Bitta polosa, 1690-1640 sm^{-1} da $\nu_{C=H}$ kuzatiladi
Birlashtirilgan NH guruh	3400-3100 (2,94-3,23)	O'tacha	
NH ning egiluvchan tebranishlari			
Birlamchi aminlar $-NH_2$	1650-1580 (6,06-6,33) 900-650 (11,2-15,4)	O'tacha O'tacha.	Yassi egiluvchan tebranishlar. Yassi bo'lmagan egiluvchan tebranishlar. Keng polosali tebranishlar.
ikkilamchi aminlar R_2NH	1650-1550 (6,06-6,45)	kuchsiz	Birlashtirilgan aminlar. Polosalar holatlari birlashganlik darajasiga bog'liq bo'ladi.
Boshqa turdagi tebranishlar.			
Alifatik aminlar	1220-1020 (8,2-9,8)	Kuchli	
Aromatik aminlar:			
Birlamchi	1340-1250 (7,46-8,00)	Kuchli	
Ikkilamchi	1350-1280 (7,41-7,81)	Kuchli	
Uchlamchi	1360-1310 (7,35-7,63)	Kuchli	

Aminlarning tuzlari			
NH_4^+	3300-3030 (3,03-3,30) 1430-1390 (7,00-7,20)	Kuchli Kuchli	$\nu_{\text{N-H}}$, keng., $\delta_{\text{N-H}}$, keng.,
RNH_3^+	~ 3000 (3,33) ~ 2500 (4,00) ~ 2000 (5,00) 1600-1575 (6,25-6,35) 1500 (6,67)	$\delta_{\text{N-H}}$, keng $\delta_{\text{N-H}}$, O'tacha. $\delta_{\text{N-H}}$, O'tacha. $\delta_{\text{N-H}}$, $\delta_{\text{N-H}}$,	Bir necha polosa
R_2NH_2^+	3400-3200 (2,94-3,13)	Kuchli	$\nu_{\text{N-H}}$ bitta polosa, 1690-1640 cm^{-1} da $\nu_{\text{C=H}}$ mavjud.
R_3NH_2^+	2700-2250 (3,70-4,44)	Kuchli	$\nu_{\text{N-H}}$ ba'zan polosalar guruhida namoyon bo'ladi.
R_3NH^+	2700-2250 (3,70-4,44)	Kuchli	$\nu_{\text{N-H}}$ ba'zan polosalar guruhida namoyon bo'ladi.
R_4N^+	-	-	Xarakterli polosalar yo'q.
$\text{R}_2\text{S=NH}^+$	2500-2300 (4,00-4,34) 2200-1800 (4,55-5,56)	Kuchli	Yassi polosa, ba'zan polosalar guruhida namoyon bo'ladi.

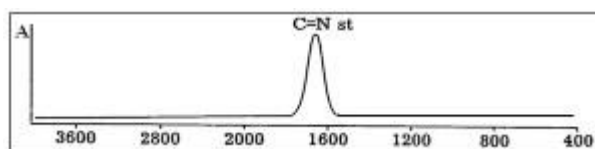


Ammoniy kationi

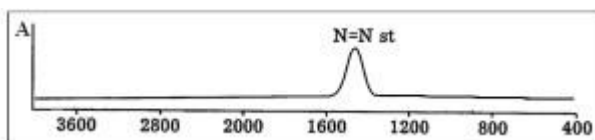


Misol. Birlamchi aminning IQ spektri

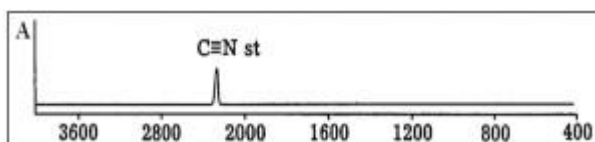
To'yinmagah azotsaqlagan birikmalar $C=N$, $C\equiv N$, $N=C=N$, $-N=N-$, $N=C=O$, $=N$, $\equiv N$.



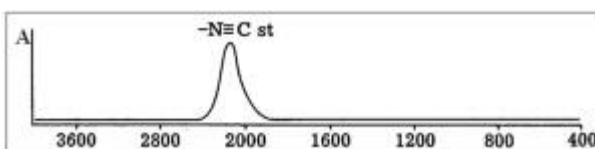
Iminlar



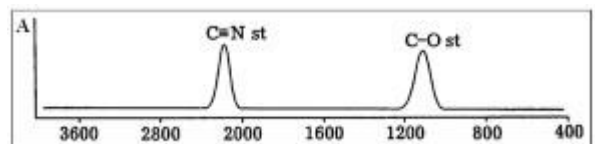
Azobirikmalar



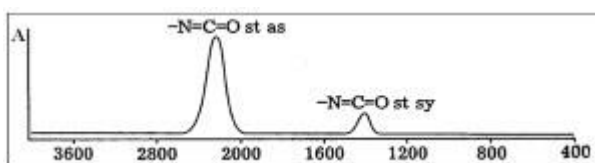
Nitrillar



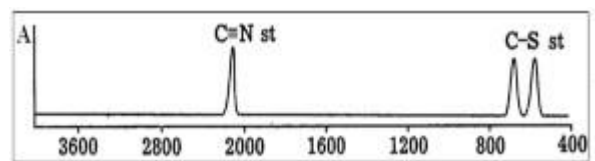
Izonitrillar



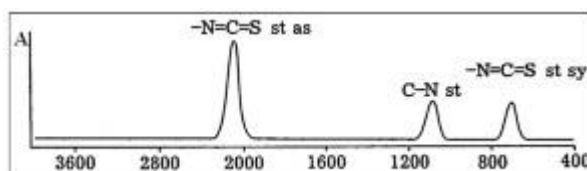
Sianatlar



Izostianatlar



Tiostianatlar



Izotiozianatlar

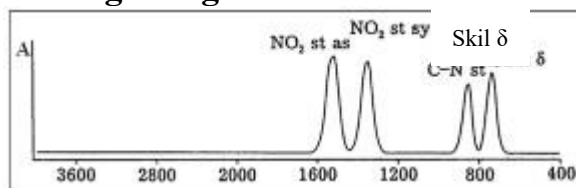
70-jadval

C=N			
C=N ochiq zanjir	1690-1635 (5,92-6,12)	oraliq	Oksazolinlar $-N=C-O-$, oksimlar $C=N-O-$, oksazinlar, azometinlar $C=N$ va boshqalar
C=N α,β -to'ynmagan	1665-1630 (6,01-6,14)	oraliq	
C=N halqada	1660-1480 (6,02-6,76)	oraliq	

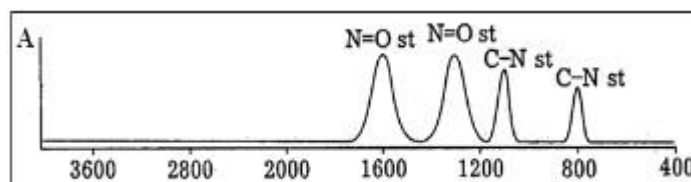
C $\equiv$ N (nitrillar)			
To'yingan nitrillar C $\equiv$ N	2260-2240 (4,43-4,46)	V_{CN} kuchsiz.	
α,β -to'ynmagan nitrillar C $\equiv$ N	2235-2215 (4,47-4,52)	V_{CN} Kuchli	Qisqa birlamchi polosa
Arilnitrillar	2240-2220 (4,46-4,51)	V_{CN} O'tacha., Kuchli	
Izonitrillar	2185-2120 (4,58-4,72)	V_{NC} Kuchli	$: S^- \equiv N^+$
X=C=Y turdagi tuzilishlar			
Karbodiimidlar	2155-2130 (4,64-4,70)	Kuchli	X=C=X
Izostianatlar	2275-2240 (4,40-4,46)	Kuchli	X=C=O
-N = N -			
-N = N -	1600-1400 (6,25-7,15)	V_{NN} oraliq	Azobirikmalar
Ar-N = N-Ar	1440-1410 (6,94-7,09) 1510 (6,62)	V_{NN} , trans- V_{NN} , stis-	Simmetrik ta'qiq tufayli simmetrik trans-azo birikmalarda kuzatilmaydi.
N $\equiv$ N			
Azidlar-N ₃	2160-2120 (4,63-4,72) 1350-1180 (7,41-8,48)	Kuchli kuchsiz	
diazoniy tuzlari-N ₂ ⁺	2300-2230 (4,35-4,49)	Kuchli	

Azot-kislorod bog'i tutgan birikmalar

N-O



Nitrobirikmalar

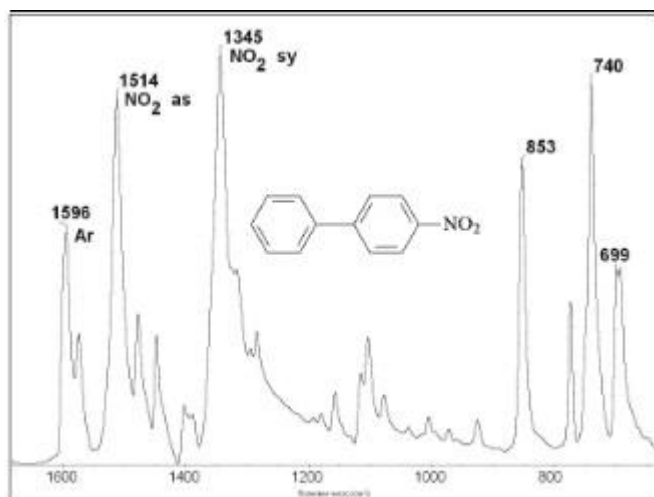


Nitrozobirikmalar

71-jadval

Nitrobirikmalar R-NO ₂			
Alkilli	1570-1550 (6,37-6,45) 1360-1320 (7,36-7,58)	V _{NO} ^{as} juda. Kuchli. V _{NO} ^s juda. Kuchli	Uchala turdagi birikmalarning oʻrtacha intensivligi 870-830 sm ⁻¹ (11.49-12.05 mkm) ga teng, ular aromatik yutilish bilan qoplanishi mumkin. NO ₂ guruhi birikish, rezonans effektlari va fazoviy taʼsirlarga sezgir. Assostiastiya effektlari paydo boʻladi.
Nitroparafinlar	920-830 (10,88-12,05)	oraliq	
Olefinli	1505-1500 (6,65-6,67) 1360-1330 (7,36-7,52)	V _{NO} ^{as} juda. Kuchli. V _{NO} ^s juda. Kuchli.	
Arilli	1560-1500 (6,41-6,57) 1356-1340 (7,37-7,46)	V _{NO} ^{as} juda Kuchli.. V _{NO} ^s juda Kuchli..	
Nitratlar R-O-NO ₂			
NO ₂ tebranish	1655-1610 (6,04-6,21) 1300-1255 (7,69-7,97)	V _{NO} ^{as} Kuchli V _{NO} ^s Kuchli	
Boshqa turdagi tebranishlar	870-690 (11,5-14,5)	oraliq	
Nitraminlar R –NH- NO ₂			
R –NH- NO ₂	1600-1530 (6,25-6,54) 1300-1260 (7,69-7,94) 790- 770 (12,66-12,99)	V _{NO} ^{as} Kuchli.. V _{NO} ^s Kuchli..	

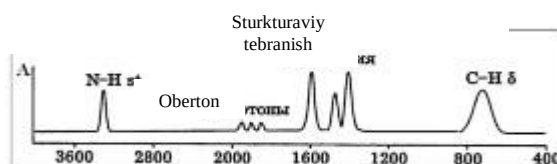
		O'rtacha	
Nitrozobirikmalar R-S –N=O			
Monomerlar	1600-1530(6,25-6,54)	V _{N-O} Kuchli.	CIN=O 1799 sm ⁻¹ , BrN=O 1801 sm ⁻¹ , FN=O 1844 sm ⁻¹ (gaz)
Alifatik dimerlar stis-trans-	1290-1175(7,75-8,51) 1290-1176(7,75-8,50)		
Aromatik dimerlar stis-trans-	1390 (7,20), 1410(7,69) 1300-1250(7,69-8,00)		
Nitritlar RO-N=O			
RO-N=O	3360-3220(2,98-3,11)	O'rtacha	Oberton n _{N=O}
Trans-forma	1680-1650(5,95-6,06) 815-750(12,27-13,33) 625-565(16,00-17,70)	V _{N-O} Kuchli.. Kuchli Kuchli	N-O bog' ishtirokidagi tebranishlar δ _{O=N-O} egiluvchan tebranishlar
Sis-forma	1625-1610(6,16-6,21) 850-810(11,76-12,35) 690-615(14,49-16,26)	V _{N-O} och.s. Kuchli Kuchli	N-O bog' ishtirokidagi tebranishlar δ _{O=N-O} egiluvchan tebranishlar
Nitrozaminlar R ₂ N-N=O			
N-N=O N-N=O	1500-1480(6,67-6,76) 1460-1440(6,85-6,94) ~1050 (-9,52) ~660 (-15,15)	V _{N=O} Kuchli V _{N=O} Kuchli Kuchli Kuchli.	Qattiq namunalar uchun Suyultirilgan eritmalar uchun.
Amin oksidlari R ₃ C-N→O			
N-Alifatik aminlar oksidlari	970-950(10,31-10,53)	V _{N→O} , Kuchli	
N-Piridin va pirimidin oksidlari	1300-1250(7,69-8,00)	V _{N→O} , oraliq	Qutbsiz erituvchilarda.
Azoksibirikmalar R-N=N→O	1310-1250(7,63-8,00)	V _{N→O} , Kuchli	



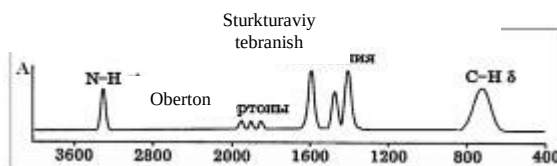
Misol. Aromatik nitrobirikmlarning IQ spektri

Geterostiklik birikmalar

heterocycl



Furanlar

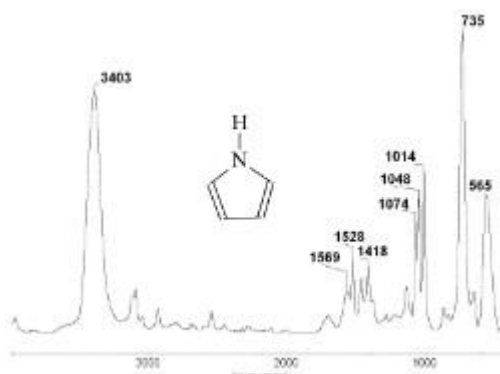


Pirrollar

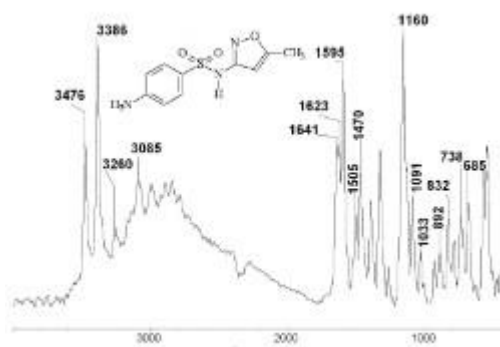
72-jadval

Furanlar	3165-3125(3,16-3,20) ~1565 (~6,39) ~1500 (~6,67) 1030-1015(9,70-9,85) 885-870(11,3-11,5) 800-740(12,5-13,5)	V _{S-N} halqaning tebranishi	Furanlarga xos.
Tiofenlar	3125-3050(3,20-3,28) ~1520 (~6,58) ~1040 (~9,60) 750-690(13,3-14,5)	V _{S-N} halqaning tebranishi	Tiofenlarning eng kuchli polosasi.
Pirrollar	3440-3400(2,91-2,94) ~1565 (~6,39) ~1500 (~6,67)	V _{S-N} o'rtacha oraliq. oraliq.	Eritmalarda. Mos ravishdagi halqa tebranishlari Poloslar indollarda

			uchraydi.
Piridinlar va xinolinlar	3070-3020(3,26-3,31) ~1200 (~8,33) 1100-1000(9,09-10,00) 900-670(11,11-14,93) 710(14,08) 1650-1580(6,06-6,33) 1580-1550(6,33-6,45) 1510-1480(6,62-6,76)	V_{S-N} o'rtacha Kuchli. δ_{S-N} Kuchli. δ_{S-N} Kuchli. δ_{S-N} Kuchli. o'rtacha kuchsiz o'rtacha	Faqat piridinlar uchun Faqat piridinlar uchun Faqat piridinlar uchun Halqaning tebranishi Halqaning tebranishi Halqaning tebranishi
Pirimidinlar va purinlar	3060-3010(3,27-3,32) 100-960 (10,00-960) 875-775 (12,12-12,90) 1580-1520(6,33-6,58)	V_{S-N} , Kuchli. Kuchli o'rtacha.	Egiluvchan tebranishlar S-N. Egiluvchan tebranishlar S-N. Halqaning tebranishi



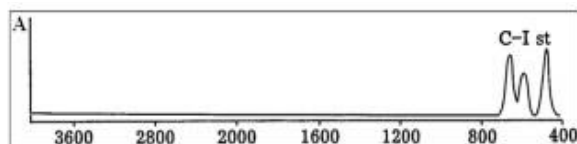
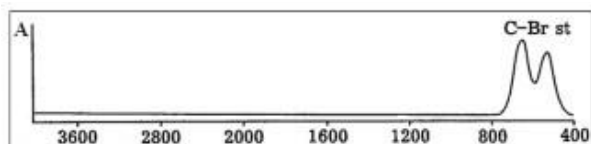
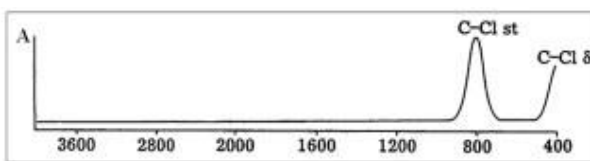
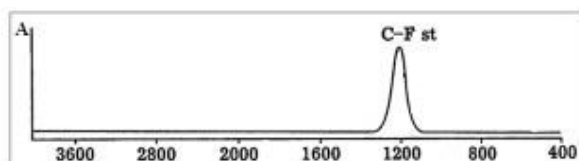
Misol. Pirrolning IQ spektri



Misol. Sulfametoksazol IQ spektri

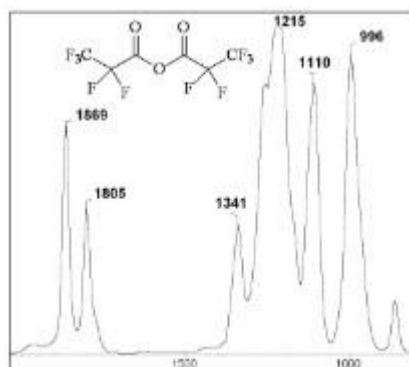
Organik birikmalarning galogenli hosilalari

Hal

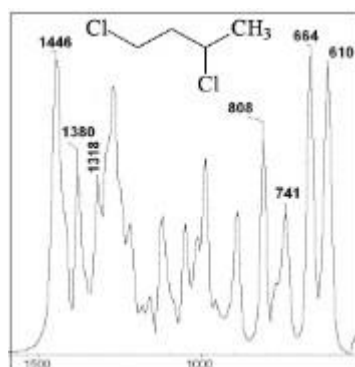


73-jadval

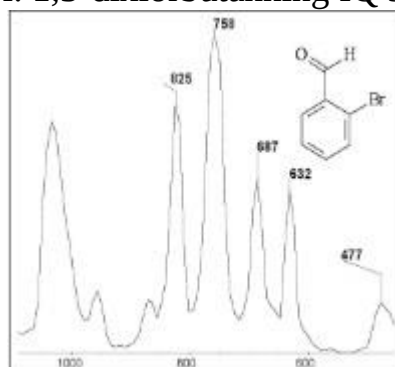
Valent tebranishlar S- Hal			
C-F monoformalmashgan	1110-1000(9,01-10,00)	Kuchli	
C-F difformalmashgan	1250-1050(8,00-9,50)	Juda kuchli.	Ikkita polosa
C-F ko'palmashgan	1400-1100(7,14-9,10)	Juda kuchli.	Qator polosalar
C-F ₃ – CF ₂ -	1365-1325(7,33-7,55)	Kuchli	
C-Cl monoxloralmashgan	750-700(13,23-14,30) 650(15,40)	Kuchli Kuchli .	Faqat eritmalar uchun
C-Cl ko'palmashgan	800-700(12,50-14,30)	Juda kuchli.	
C-Br	515-680(19,42-14,70) 560(17,87)	Kuchli	Faqat eritmalar uchun
C-I	485-610(20,62-16,39)	Kuchli	
Boshqa turdagi tebranishlar			
CF ₃ -Ar	1330-1310(4,10-4,26) 1185-1170 (8,44-8,55)	Kuchli Kuchli	
CF ₃ –CF ₂ -	1150-1130(8,70-8,85) 745-730 (13,42-13,70)	Kuchli Kuchli	



Misol. Pentaftorpropion angidridi IQ spektri



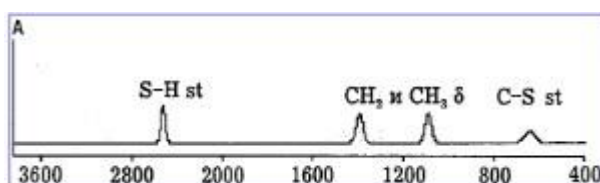
Misol. 1,3-dixlorbutanning IQ spektri



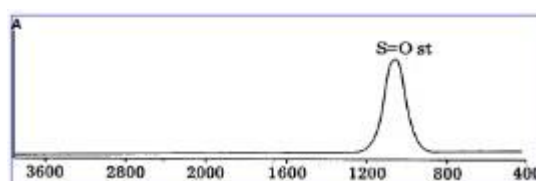
Misol. 2-brombenzaldegidning IQ spektri

Oltingugurt saqlagan funkstional guruhlar

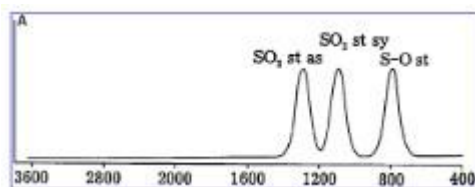
S



Tiollar va sulfidlar



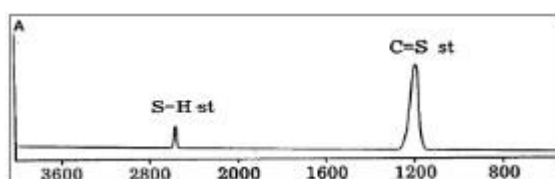
Sulfoksidlar



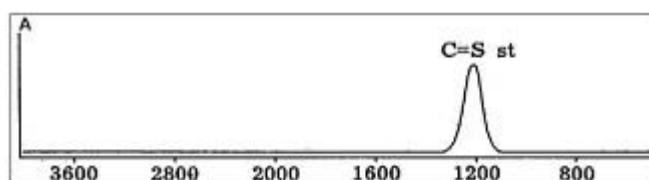
Sulfonlar

74-jadval

Tegishli	Diapazon	Izoh
S=O st	1225-980	Kuchli, ba'zida ko'p polosalar
R-SO-R	1060-1015	
R-SO-OH	~1100	S-O st, 870-810, OH s erkin guruh ~3700, vodorod bog'i orqali bog'langan ~2900, ~2500
R-SO-OR	~1135	S-O st 740-720, 710-690
RO-SO-OR	1225-1195	
R-SO-Cl	~1135	
SO ₂ ²⁻	1420-1000	Juda kuchli chiziq
R-SO ₂ -R	1370-1290 1170-1110	
R-SO ₂ -OR	1375-1350 1185-1165	



Tiokarbonil birikmalarning hosilalari

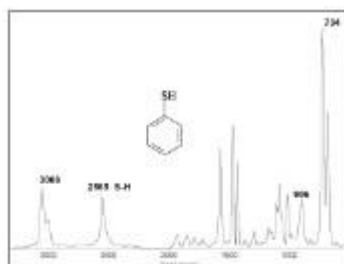


Tiokarbonatlar va tiomochevinalar

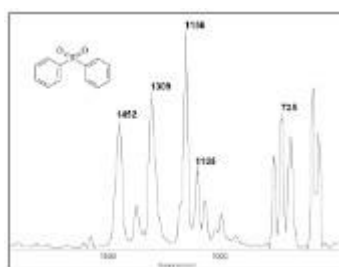
75-jadval

Tegishli	Diapazon	Izoh
----------	----------	------

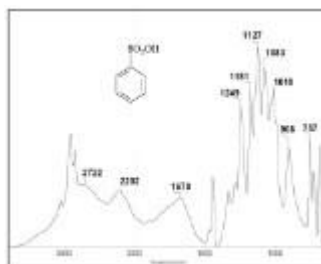
S-H st	2560-2510	Tritiokarbonatlarda yassi bo'lmagan, kuchsiz polosa.
	2600-2500	Ksantatlarda kuchsiz, qisqa polosa.
C= S st	1100-1020	Tritiokarbonatlarda kuchli polosa.
	1070-1000	Ksantatlarda kuchli polosa.
	1250-1180	Tiokarbonatlarda kuchli polosa.
	1400-1100	Tiomochevinalarda kuchli polosa.
COC st as	1260-1140	Ksantatlarda kuchli polosa.
COC st sy	1150-1090	Ksantatlarda kuchli intensivlikdan o'rtacha intensivlikka polosalar.



Misol. Tiofenolning IQ spektri



Misol. Difenilsulfonning IQ spektri



Misol. Benzolsulfokislotaaning IQ spektri

$V(CH_3)_n$ i $[M(CH_3)_n]^{m+}$ tipdagi metall-uglerodli birikmalar uchun strukturali tebranishlar (sm^{-1}) chastotasi

Birikma	Konfiguratsiya	$N^A(MC)$	$N^S(MC)$	D(CMC)
$Al(CH_3)_3$	Yassi	760	530	170
$As(CH_3)_3$	Piramidal	583	568	238,223
$[As(CH_3)_4]^+$	Tetraedrik	652	590	217
$B(CH_3)_3$	Yassi	1177	680	341,321
$Be(CH_3)_2$	Chiziqli	1081	-	-
$Bi(CH_3)_3$	Piramidal	460	460	171
$Cd(CH_3)_2$	Chiziqli	525	460	140
$Ga(CH_3)_3$	Yassi	577	521	162
$Ge(CH_3)_4$	Tetraedrik	595	558	195,175

Birikma	Konfigura- siya	$N^A(MC)$	$N^S(MC)$	D(CMC)
$Mg(CH_3)_2$	Chiziqli	538	515	160
$In(CH_3)_3$	Yassi	500	467	132
$[In(CH_3)_2]^+$	Chiziqli	566	502	-
$P(CH_3)_3$	Piramidal	703	653	305,263
$[P(CH_3)_4]^+$	Tetraedrik	783	649	285
$Pb(CH_3)_4$	Tetraedrik	476	459	120
$Sb(CH_3)_3$	Piramidal	513	513	188
$Sb(CH_3)_5$	Trigonal- bipiramidal	514 ekvatorial 456 aksial	493 ekvatorial 414 aksial	213 ekvatorial 199 aksial
$[Sb(CH_3)_4]^+$	Tetraedrik	574	535	178
$[Sb(CH_3)_3]^{2+}$	Yassi	582	536	166
$Se(CH_3)_2$	Chiziqsiz	604	589	233
$[Se(CH_3)_3]^+$	Yassi bo'lmagan	602	580	272
$Si(CH_3)_4$	Tetraedrik	696	598	239,202
$CH(CH_3)_4$	Tetraedrik	529	508	157
$[CH(CH_3)_2]^{2+}$		582	529	180
$[CH(CH_3)_3]^+$	Chiziqli Yassi	557	521	152
$Te(CH_3)_2$	Chiziqsiz	528	528	198
$[Te(CH_3)_3]^+$	Yassi bo'lmagan	534	-	-
$Ti(CH_3)_4$	Tetraedrik	577	489	180
$W(CH_3)_6$	Oktaedrik	482	-	-

$Zn(CH_3)_2$ $[Zn(CH_3)_2]^+$	Chiziqli -	604 -	503 557	157 -
----------------------------------	---------------	----------	------------	----------

Vinil va astetilen metallorganik birikmalarda uglerod va metall-uglerod bog'lar tebranma (sm^{-1}) valent chastotalari.

Birikma	N(C = C)	N(C $\equiv$ C)	N(M - C)
$Zn(CH=CH_2)_2$	1565	-	-
$Hg(CH=CH_2)_2$	1603	-	541; 513
$B(CH=CH_2)_2$	1604	-	1186
$P(CH=CH_2)_3$	1590	-	715; 667
$Si(CH=CH_2)_4$	1592	-	732; 583
$Ge(CH=CH_2)_4$	1595	-	600; 561
$Sn(CH=CH_2)_4$	1583	-	527; 513
$Pb(CH=CH_2)_4$	1580	-	495; 481
$Si(C \equiv CH)_4$	-	2053	534; 708 yoki 687
$Ge(C \equiv CH)_4$	-	2057	507; 523
$Sn(C \equiv CH)_4$	-	2043	504 yoki 447
$As(C \equiv CH)_3$	-	2053	517; 526
$Sb(C \equiv CH)_3$	-	-	474
$(CH_3)_2Si(C \equiv CH)_2$	-	2041	V(Si - C $\equiv$ C) 595
$(CH_3)_2Ge(C \equiv CH)_2$	-	2041	V(Ge - C $\equiv$ C) 538; 52195
$(CH_3)_2Sn(C \equiv CH)_2$	-	2016	V(Sn - C $\equiv$ C) 454; 445

77-jadval

Metallgalogenli birikmalarda metall-uglerod N(MC) va metall-galogen N(MX) bog'lar valent tebranishlar (sm^{-1}) chastotalari.

Birikma	N(MC)	N(MX)	Birikma	N(MC)	N(MX)
CHN_3CdCl	476	247	$(CH_3)_3SbF_2$	591; 546	484; 465
CH_3CdBr	475	206	$(CH_3)_3SbCl_2$	577; 538	282; 272
CH_3SdI	482	167	$(CH_3)_3SbBr_2$	569; 526	215; 168
$(CH_3)_3SiF$	704; 635	898	$[(CH_3)_2AuCl]_2$	571; 561	273
$(CH_3)_3SiCl$	704; 635	472	$[(CH_3)_2AuBr]_2$	561; 550	181
$(CH_3)_3GeF$	623; 576	623	$[(CH_3)_2AuI]_2$	550; 545	141; 131
$(CH_3)_3GeCl$	612; 569	378			

78-jadval

VCp₂ (D_{5d} yoki D_{5h}) stiklopentadienli komplekslarda metall-halqa v(MK) tebranishlar (sm^{-1}) chastotalari.

Kompleks	$FeCp_2$	$FeCp_2^+$	$RuCp_2$	$OsCp_2$	$CoCp_2$	$CoCp_2^+$	$NiCp_2$
v(MK)	476	423	385	353	355	455	355
Kompleks	$CrCp_2$	$CrCp_2^+$	VCp_2	VCp_2^+	$MgCp_2^+$	$CaCp_2^+$	

v(MK)	408	479	380	354	524	284	
-------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	--

MPh₂ dibenzol komplekslarda metall-halqa v(MK) tebranishlar (sm⁻¹) chastotalari.

Kompleks	<i>MoPh₂</i>	<i>WPh₂⁺</i>	<i>CrPh₂</i>	<i>CrPh₂⁺</i>	<i>VCp₂</i>
v(MK)	424	331	490	466	424

79-jadval

Monoyadroli metall karbonillarda C = O va M – C tebranishlar (sm⁻¹) chastotalari.

Birikma	<i>Ni(CO)₄</i>	<i>[Co(CO)₄]⁻</i>	<i>[Fe(CO)₄]²⁻</i>	<i>Fe(CO)₅</i>	<i>Cr(CO)₆</i>	<i>Mo(CO)₆</i>	<i>W(CO)₆</i>	<i>[V(CO)₆]⁻</i>	<i>[Re(CO)₆]⁺</i>	<i>[Mn(CO)₆]⁺</i>
Holat	gaz	DMF dagi eritma	Suvli eritma	suyuqlik	gaz					
Simmetriya	T _d	T _d	T _d	D _{3h}	O _h	O _h	O _h	O _h	O _h	O _h
V(C=O)	2131 2057,6	2002 2890	1788 1788	2116 2020 1989	2118,7 2026,7 2000,4	2120,7 2024,8 2000,3	2126,2 2021,1 1997,6	2020 1894 1858	2197 2122 2085	2192 2125
V(V-CO)	367,5 421	431 556	464 644	418 381 482	379,1 390 440,5	391,2 381 467,2	426 410 374,4	374 393 460	441 426 356	384 390

MPh₂ dibenzol komplekslarda metall-halqa v(MK) tebranishlar (sm⁻¹) chastotalari.

Kompleks	<i>MoPh₂</i>	<i>WPh₂⁺</i>	<i>CrPh₂</i>	<i>CrPh₂⁺</i>	<i>VCp₂</i>
v(MK)	424	331	490	466	424

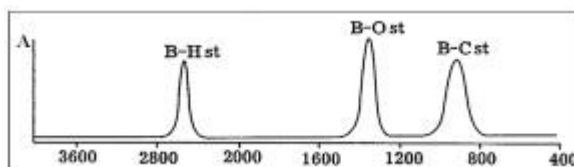
80-jadval

Monoyadroli metall karbonillarda C = O va M – S tebranishlar (sm⁻¹) chastotalari.

Soedineniya	<i>Ni(CO)₄</i>	<i>[Co(CO)₄]⁻</i>	<i>[Fe(CO)₄]²⁻</i>	<i>Fe(CO)₅</i>	<i>Cr(CO)₆</i>	<i>Mo(CO)₆</i>	<i>W(CO)₆</i>	<i>[V(CO)₆]⁻</i>	<i>[Re(CO)₆]⁺</i>	<i>[Mn(CO)₆]⁺</i>
Sostoyanie	gaz	R-r v DMF	R-r v vode	jidkost	gaz					
Simmetriya	T _d	T _d	T _d	D _{3h}	O _h	O _h	O _h	O _h	O _h	O _h
V(C=O)	2131 2057,6	2002 2890	1788 1788	2116 2020 1989	2118,7 2026,7 2000,4	2120,7 2024,8 2000,3	2126,2 2021,1 1997,6	2020 1894 1858	2197 2122 2085	2192 2125
V(V-CO)	367,5 421	431 556	464 644	418 381 482	379,1 390 440,5	391,2 381 467,2	426 410 374,4	374 393 460	441 426 356	384 390

Borning birikmalari

B

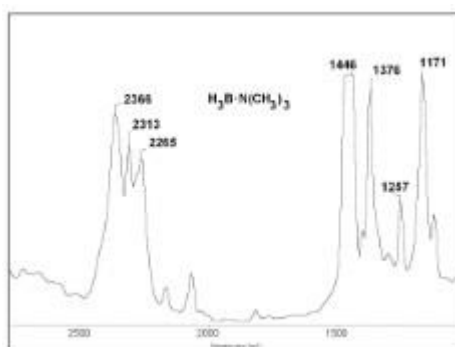


81-jadval

Bor efirlari			¹⁰ V i ¹¹ V izotoplar ishtiroki sababli
--------------	--	--	---

B(OR) ₃ RB(OR) ₂ R ₂ B(OR)	~1380(~7,25) ~1350(~7,41)	V _{BO} Kuchli V _{BO} Kuchli	polosa bo'linadi. Azot bilan muvofiqlashtirilganda v _{BO} polosa yo'qoladi.
RBH ₂	2640-2350 (3,79-4,26) 2220-1540 (4,50-6,49)	V _{BH} Kuchli V _{BHB} Kuchli	Normal boranlar Vodorod ko'priksimon bog'lar: V....N....V
Borazinlar	3505-3425 (2,85-2,92) 1470-1330 (6,80-7,52) 700-680 (14,29-14,71)	V _{NH} cp. V _{BN} Kuchli δ _{BN}	Ikkita polosa.

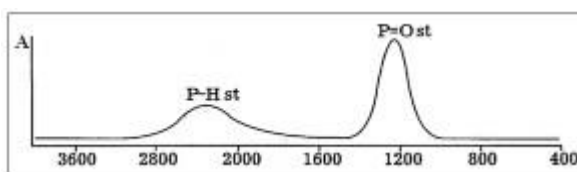
BSN ₃ V - Ar	1460-1405 (6,85-7,12) 1330-1280 (7,52-7,81) 1440-1430 (6,94-6,99)	δ _{CH₃} δ _{CH₃} c.	Halqaning tebranishi.
BOH B...H-B	3300-3200 (3,03-3,12) 2000-1600 (5,00-6,25)	V _{OH} c. per.	Qattiq namunalarda keng polosalar Bir nechta polosa bo'lishi mumkin.
BCI	1000-900 (10,00-11,11)	Kuchli	B-CI bog' saqlagan birikmalar.



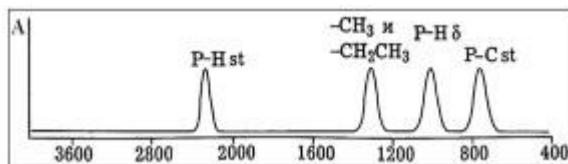
Misol. Boran-trimetilamin kompleksining IQ spektri

Fosfororganik birikmalar

P



Fosfor birikmalari

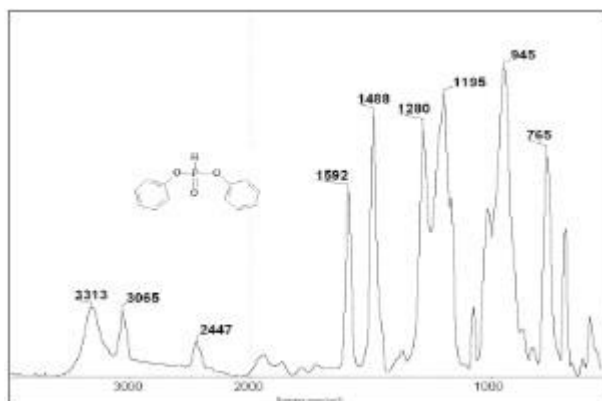


Fosfinlar

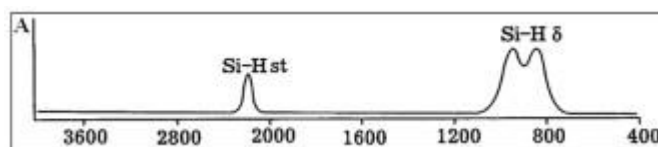
82-jadval

Fosfinlar R_nPH_{3-n}	2275-2440 (4,40-4,01) 1080-1090 (9,26-9,17) 910-940 (10,99-10,64) 1405-1440 (7,12-6,94)	V_{PH} o'rtacha. δ_{PH_2} o'rtacha δ_{PH_2} δ_{PH_2p}	
Fosfin oksidlari $R_3P^+ \rightarrow O^-$	1140-1300 (8,77-7,69) ~1150(~8,70) ~1190(~8,40)	Kuchli Kuchli Kuchli	Elektromanfiylik o'rinbosarlar chastotasiga ta'sir etadi. Alifatik. Aromatik
Fosfor kislotalari $R_n(HO)_{3-n}PO$	2550-2700 (3,92-3,70) 2100-2350 (4,76-4,26)	V_{NH} o'rtacha. V_{OH} o'rtacha V_{OH} o'rtacha.	Keng polosa
P = O P = O	1350-1175 (7,41-8,51) 1250-1150 (8,00-8,70)	V_{PO} Kuchli V_{PO} juda kuchli	Erkin molekulalar. Biriktirilgan molekulalar (vodorod bog')
Fosfor kislotasining efirlari $(RO)_3P^+ \rightarrow O^-$ $(ArO)_3P^+ \rightarrow O^-$	~1280(~7,81) 970-1050 (10,31-9,52) 740-830 (13,51-12,05) 1160-1260 (8,62-7,94) 914-994 (10,94-10,06)	V_{PO} Kuchli V_{SOR} Kuchli Kuchli V_{PO} Kuchli V_{PO} Kuchli	Faqat metoksi- va etoksi hosilalar uchun.
Fosfitlar $(RO)_3P$	855-875 (11,70-11,43)	V_{PO}	

Boshqa turdagi chastotalar			
PF	815-890 (12,27-11,24)	Kuchli	
PCI	440-580 (22,73-17,24)	Kuchli	
PBr	400-485 (25,00-20,43)		
POP	870-1000 (11,49-10,00)		
PO_3^{2-}	970-1030 (10,31-9,71)		
PO_4^{3-}	1000-1100 (10,00-9,09)		
$P - O - CH_3$	1190-1170 (8,40-8,55) ~ 1460 (6,85)	kuchsiz	
$P - O - C_2H_5$	1170-11400 (8,55-8,77) ~ 1485 (6,73)	kuchsiz	
P-O-Alk	1050-990 (9,52-10,10)		
P-O-Ar	1240-1180 (8,07-8,48)	Kuchli	
P-N	930-1110 (10,75-9,01)		
P=N (halqasimon)	1100-1320 (9,01-7,58)		
P = S	840-600 (11,90-16,65)	Kuchli	

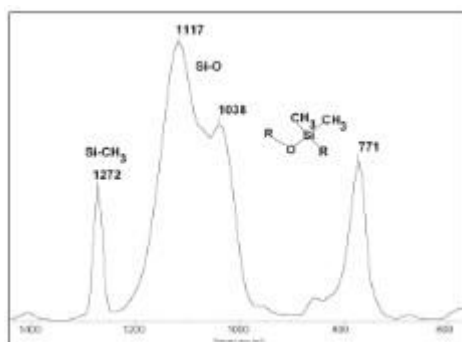


Misol. Difenilfosfitning IQ spektri

Kremniyorganik birikmalar**Si**

Kremniy birikmalari

Silanlar			
P_nSiH_{4-n}	2250-2100 (4,44-4,76) 840-800 (11,90-12,50) 940-920 (10,64-10,87) 930-910 (10,75-10,99) 945-930 (10,58-10,75)	V_{SH} kuchli. δ_{SiH_2} kuchli δ_{SH_3} kuchli	Aniq holatlar o'rinsizlar (R) tipiga bog'liq bo'ladi.
Siloksanlar			
Si-O-Si	1100-1000	V_{SiOSi} kuchli	Juda intensiv keng polosa.
$(R_2SiO)_3$	~ 1020 ($\sim 9,80$)	V_{SiOSi} kuchli	
$(R_2SiO)_4$	~ 1080 ($\sim 9,26$)	V_{SiOSi} kuchli	
$(R_2SiO)_5$	~ 1080 ($\sim 9,26$)	V_{SiOSi} kuchli	
Boshqa turdagi o'zaro bog'liqliklar			
$SiCH_3$	1280-1250 (7,81-8,00) 860-760 (11,63-13,16)	δ_{CH_3} kuchli c.	
SiC_2H_5	1250-1220 (8,00-8,20) 1020-1000 (9,80-10,00) 970-945 (10,31-10,58)	O'rtacha O'rtacha O'rtacha.	
SiC_6H_5	~ 1430 ($\sim 6,99$) 1125-1100 (8,89-9,09) ~ 730 ($\sim 13,70$) 700-690 (14,29-14,49)	O'rtacha Kuchli O'rtacha O'rtacha	
$SiOCH_3$	~ 2840 ($\sim 3,52$) ~ 1190 ($\sim 8,40$) ~ 1090 ($\sim 9,17$) 850-800 (11,76-12,50)	Kuchli O'rtacha Kuchli O'rtacha	Guruh gidroliza nisbatan sezgir bo'ladi.



Misol. Polidimetilsiloksaning IQ spektri

Noorganik ionlar va molekularlar

Inorg

AsO_4^{3-}	~ 800 (~12,50)	Kuchli	
AsF_6^-	750-690 (14,18-14,49)	Juda kuchli	
BH_4^-	2400-2200 (4,17-4,55); 1130-1040 (8,85-9,62)	Kuchli	
BF_4^-	~ 1060 (~9,43); ~ 1030 (~9,71)	Juda kuchli	Bir yoki bir nechta polosa.
BrO_3^-	810-790 (12,35-12,66)	Juda kuchli	
CO_3^{2-}	1450-1410 (6,90-7,09); 880-800 (11,36-12,50)	O'rtach a	
HCO_3^-	1420-1400 (7,04-7,14); 1000-990 (10,00-10,10) 840-830 (11,90-12,05); 705-695 (14,18-14,39)	Kuchl kuchl	
ClO_3^-	980-930 (10,20-10,75)	Juda kuchli	
ClO_4^-	1140-1060 (8,77-9,43)	Juda kuchli	Keng polosa
CrO_4^{2-}	950-800 (10,53-12,50)	kuchl	Bir nechta polosa.
$Cr_2O_7^{2-}$	950-900 (10,53-11,11)	kuchl	
$CN^-; CNO^-; CNS^-$	2200-2000 (4,55-5,00)	kuchl	
CO	2100-2000 (4,76-5,00); ~ 1830 (~5,46)	kuchl	Metall karbonillari.
HF_2^-	~ 1450 (6,90); ~ 1230 (8,13)	kuchl	
JO_3^-	800-700 (12,50-14,29)	kuchl	Bir nechta polosa.
MnO_4^-	920-890 (10,87-11,24); 850-840 (11,76-11,90)	Juda kuchli O'rtach a.	
NH_4^+	3335-3030 (3,00-3,30); 1485-1390 (6,73-7,19)	Juda kuchli kuchli	
N_3^-	2170-2080 (4,61-4,81); 1375-1175 (7,27-8,51)	Kuchl-kuchsiz	
NO_2^-	1400-1300 (7,14-7,69); 1250-1230 (8,00-8,13); 840-800 (11,90-12,50)	kuchlJu da kuchli	Nitritlar komplekslarida ikkita polosa kuzatiladi.
NO_3^-	1410-1340 (7,09-7,46); 860-800 (11,63-12,50)	Juda kuchli	

NO_2^+	1410-1370 (7,09-7,30)	kuchl	
NO^+	2370-2230 (4,22-4,48)	kuchl	
NO^+	1940-1630 (5,16-6,14)	kuchl	Koordinasion birikmalar.
NO	1170-1045 (8,55-9,57)	kuchl	Koordinasion birikmalar.
PF_6^-	1850-1790 (5,41-5,59)	Juda kuchli	Nitrozilgalogeni dlar.
$PO_4^{3-}; HPO_4^{2-}; H_2PO_4^-$	1100-950 (9,09-10,53)	kuchl	
$S_2O_3^{2-}$	1660-1620 (6,02-6,17); 1000-990 (10,00-10,10)	O'rtach a kuchl	
SO_4^{2-}	1130-1080 (8,85-9,26); 680-610 (14,71-16,40)	Juda kuchli O'rtach a	
HSO_4^-	1180-1160 (8,84-8,62); 1080-1000 (9,26-10,00)	Kuchl-kuchl	
SO_3^{2-}	~ 1100 (~9,09); 880-840 (11,36-11,90)	kuchl	
SeO_4^{2-}	~ 830 (~12,05)	kuchl	
SiF_6^{2-}	~ 725 (~13,79)	kuchl	
	1100-900 (9,09-11,11)	kuchl	
UO_2^{2+}	940-900 (10,64-11,11)	kuchl	

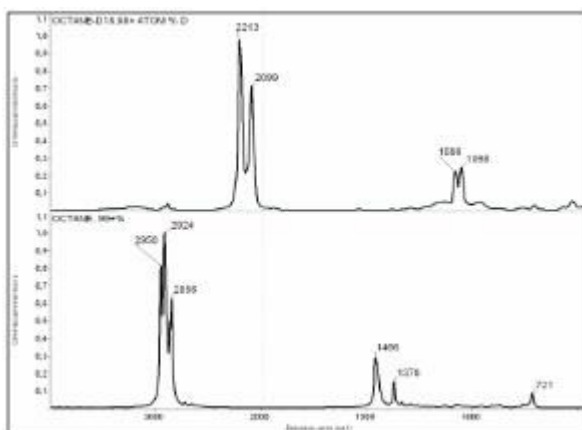
Asl gazlarning ba'zi bir birikmalari.			
XeO_3	780, 344, 833, 317		Piramidal molekula.
XeO_4	775,5 , 267, 879,2, 3005,9		Tetraedrik molekula.
O_2XeF_2	490, 845, 198, 333, 578, 313, 902		Tetraedrik molekula
XeF_4	554,3 , 218, 291, 524		Yassi kvadrat molekula..
$OXeF_4$	920, 567, 285, 527, 233, 608, 365, 161		Tetragonal-piramidal molekula

Izotopik almashinishning tebranish chastotalariga ta'siri Izotop

Molekulaning tebranish spektri uni hosil qiluvchi atomlarning massalariga bevosita bog'liq bo'lgani uchun izotopik almashtirish spektrning o'zgarishiga olib keladi. Geometrik parametrlar va kuch konstantalari bu holda o'zgarmaydi. Izotopik turlarning tebranish chastotalarining farqi ahamiyatli bo'lishi kerak, izotoplar massalarining nisbati m / m (m - og'ir izotopning massasi). Eng katta izotopik ta'sir vodorod (protiy) atomini deyteriy va tritiy bilan almashtirish natijasida hosil bo'ladi.

Izotop bilan almashtirilgan X-H diatomik molekulasida pi (yoki taxminan ko'p atomli molekuladagi bunday bog'lanish uchun) cho'zilgan tebranishlarning chastotasi,

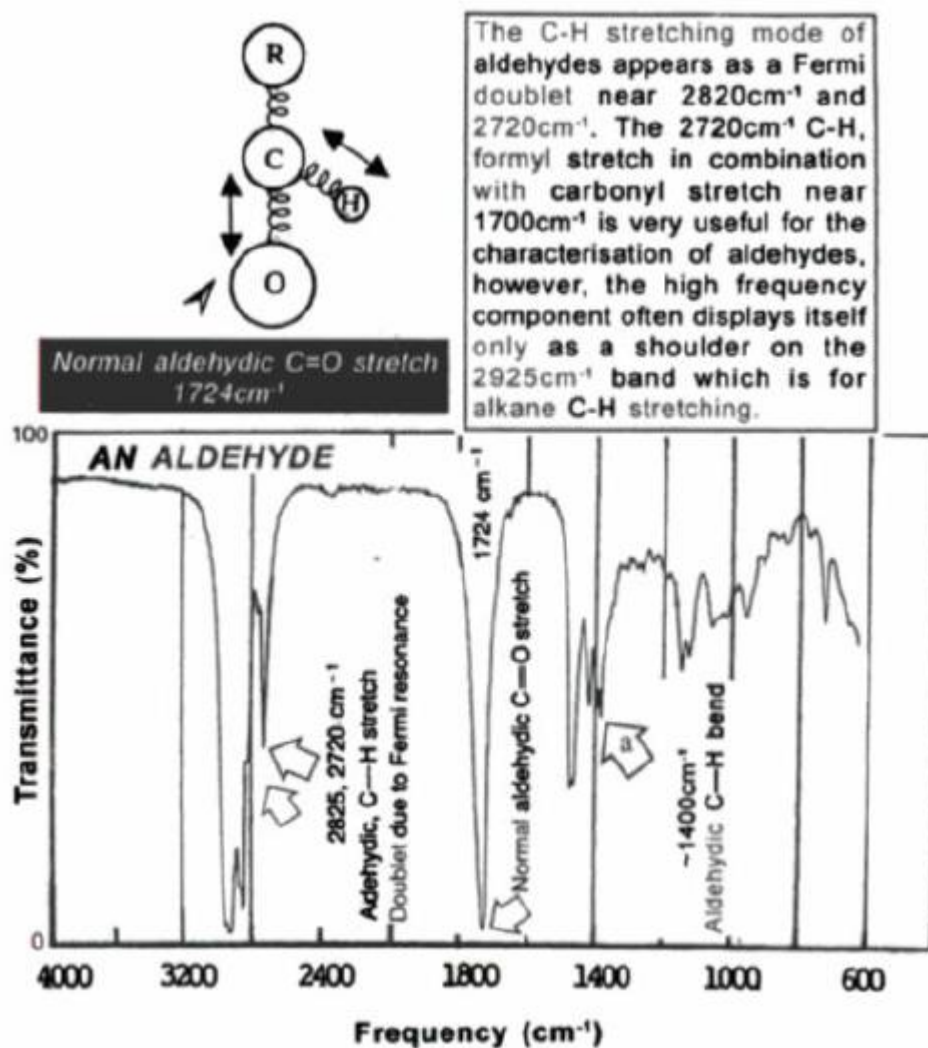
garmonik yaqinlashishda:

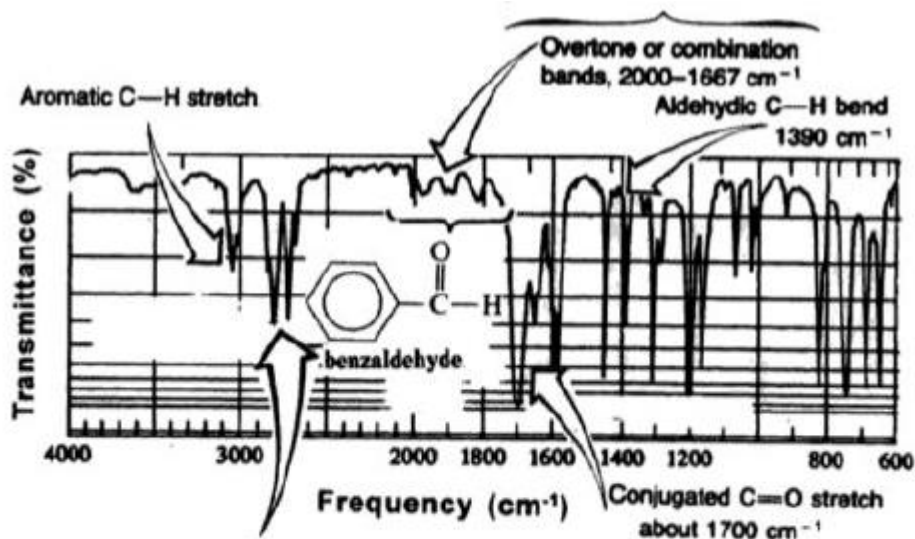


Misol. n-oktan va deyterooktan-d₁₈ ning IQ spektri

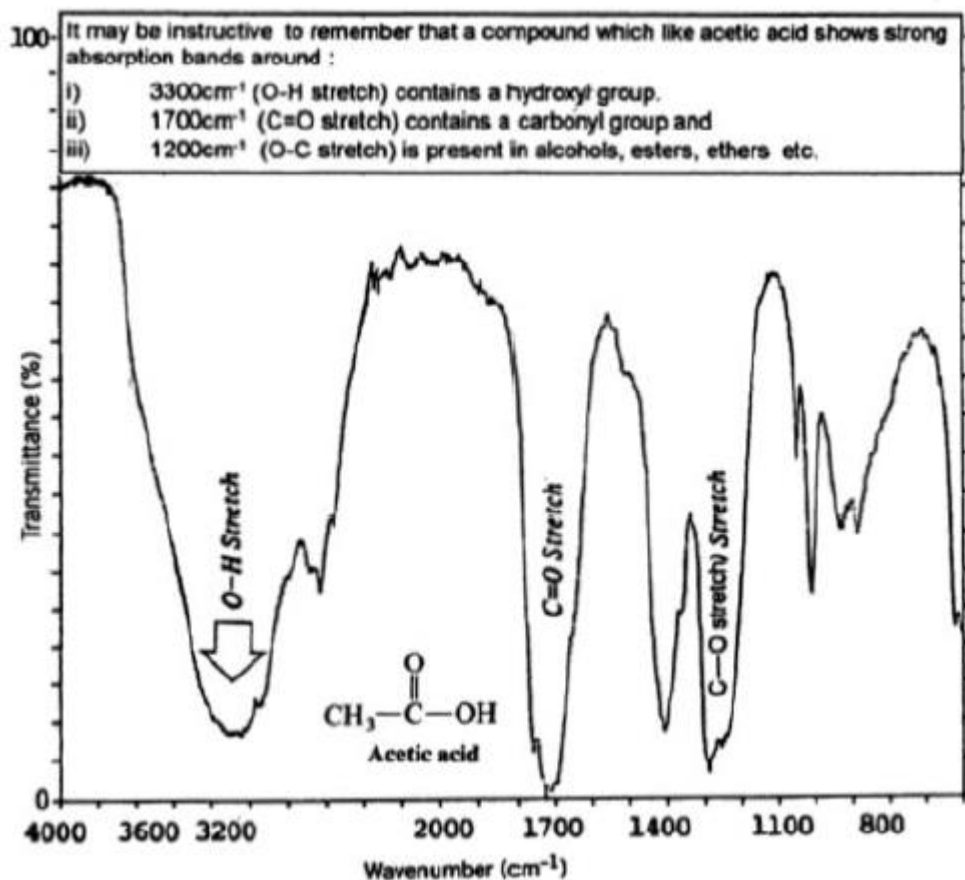
Molekula	V qarama-qarshi fazada	v fazada	δ valent burchagining o'zgarishi
$H_2^{16}O$	3755,79	3656,65	1594,59
$HD_2^{16}O$	3707,47	2726,73	1402,20
$D_2^{16}O$	2788,05	2671,46	1178,33
$D_2^{18}O$	2764±5	2657±5	1169±2
$DT^{16}O$	2735±5	-	-
$T_2^{16}O$	2370±5	-	995±5

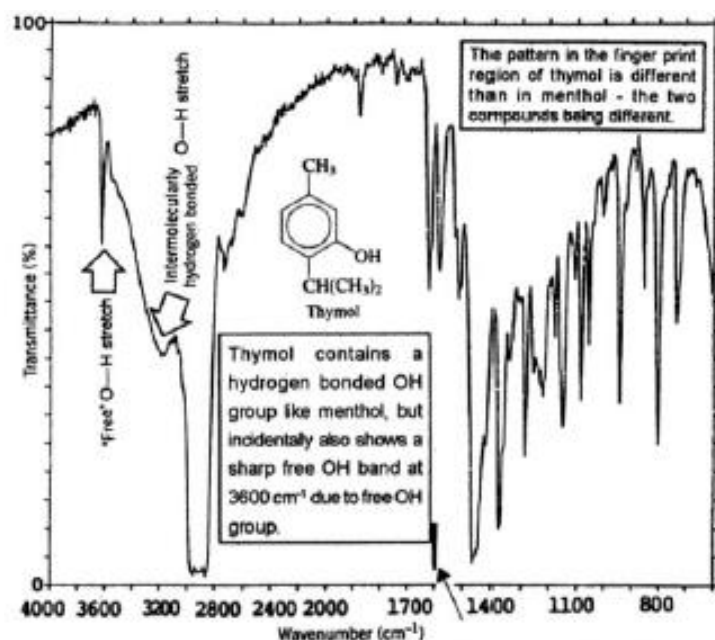
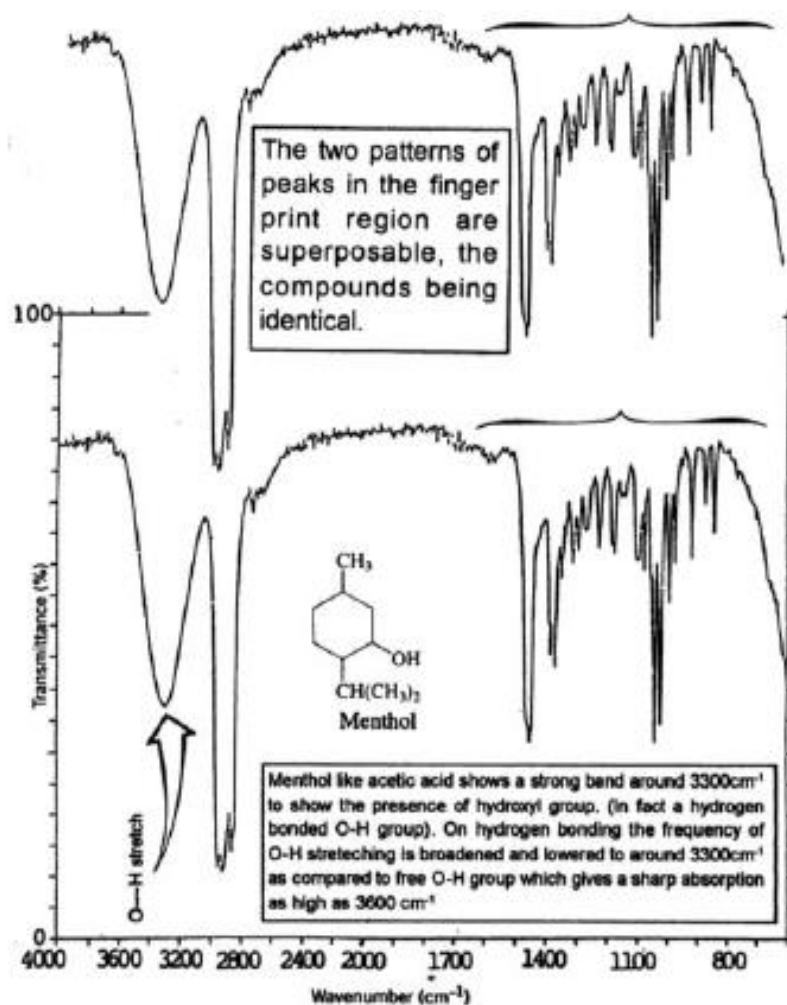
Xorijiy adabiyotlarda IQ spektrlarni tahlili



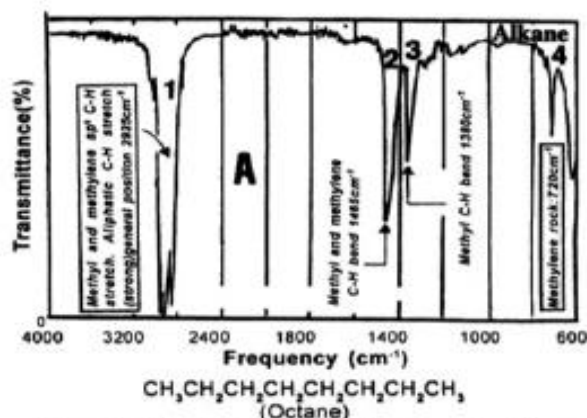
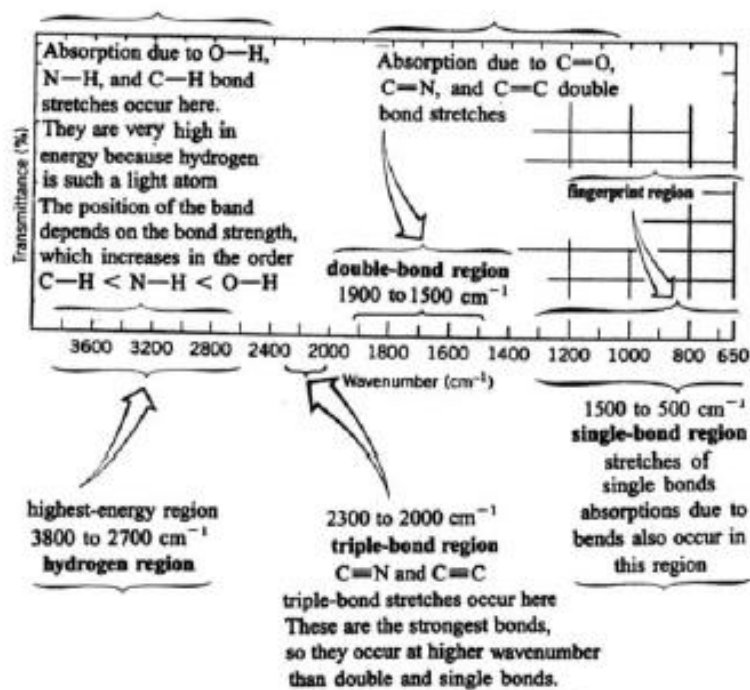


Aldehydic C—H stretch as a Fermi doublet 2825cm^{-1} and 2720cm^{-1} . In this purely aromatic aldehyde, the 2825cm^{-1} band is clearly seen (and is not as a shoulder see Fig 3.5), since now there is no overlap with other CH stretching band around 2925cm^{-1}). The doublet is due to Fermi resonance between the overtone of the aldehydic C—H bending which would have a frequency near $2 \times 1400\text{cm}^{-1}$ and the aldehydic C—H mode near 2720cm^{-1} .





The 1601 cm⁻¹ peak of polystyrene, marked as a check of frequency accuracy.

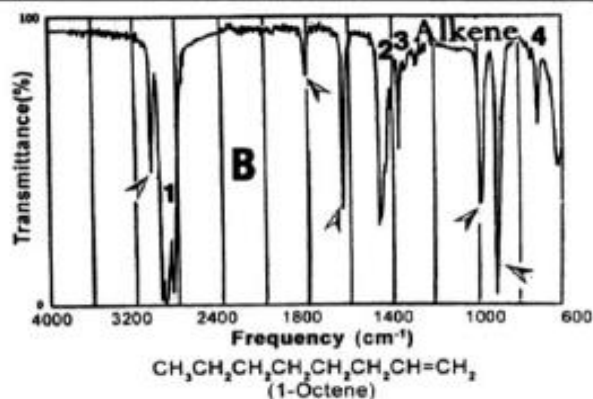


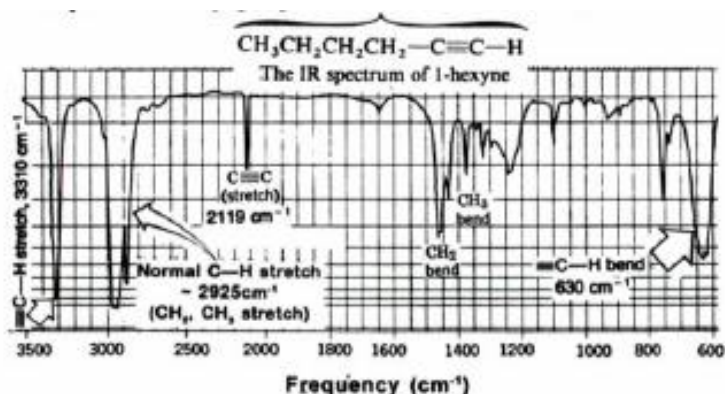
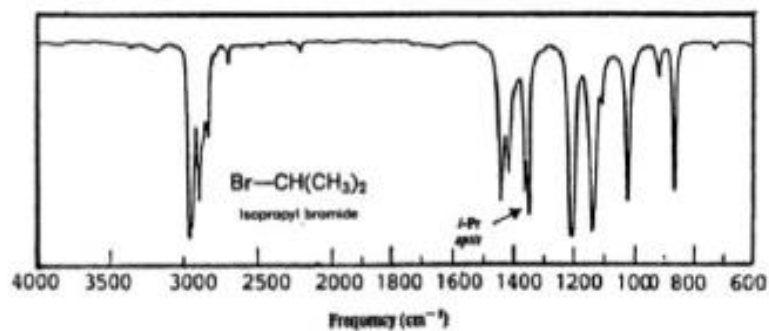
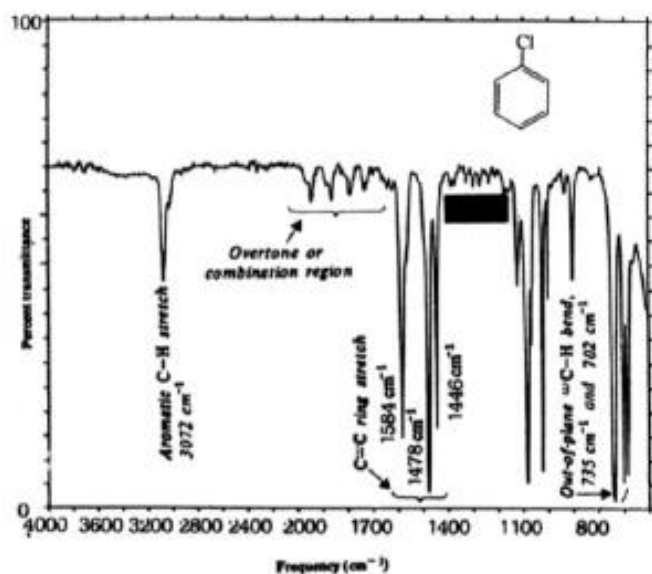
Characteristic infrared group frequencies alkanes

Four major absorption bands are apparent, ~ 2925, 1465, 1380 and 720 cm^{-1}

Band No.	1	2	3	4
----------	---	---	---	---

C—H stretch [Band 1, strong (typical value 2925 cm^{-1})]
CH_2 and CH_3 bend [Bands 2, strong (~1465 cm^{-1}) and 3, strong (~1380 cm^{-1}) respectively]
CH_2 rocking [Band 4, medium (~720 cm^{-1})]

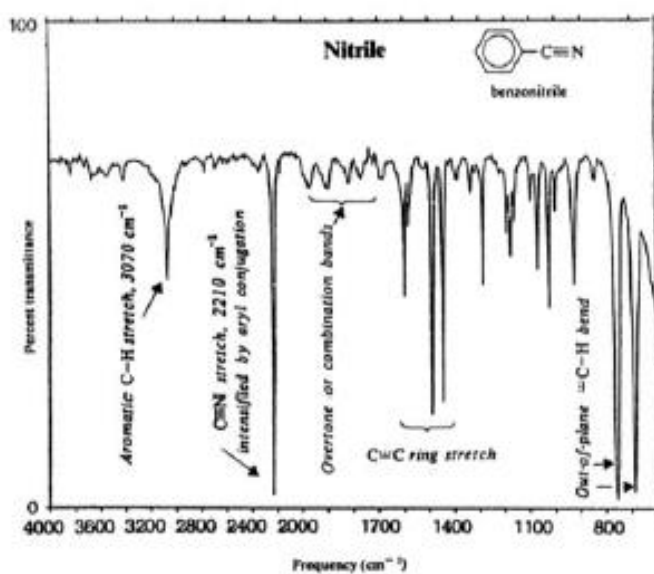
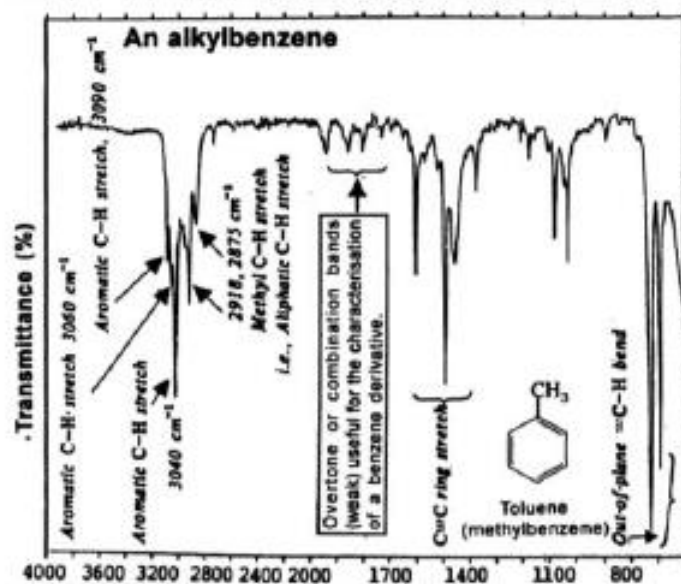
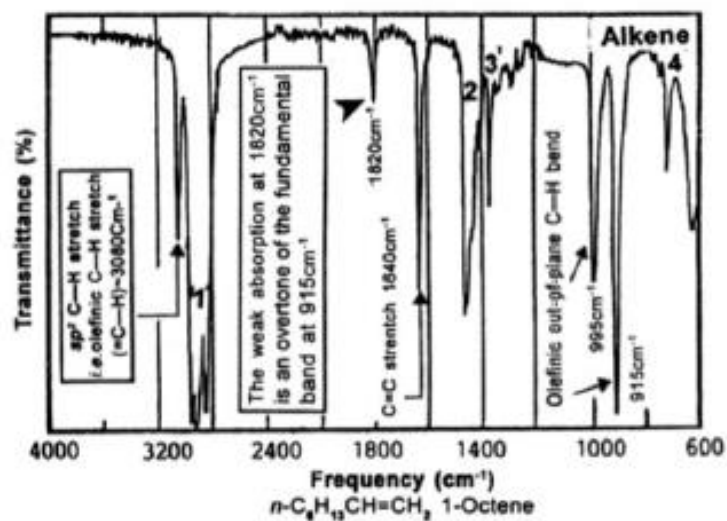




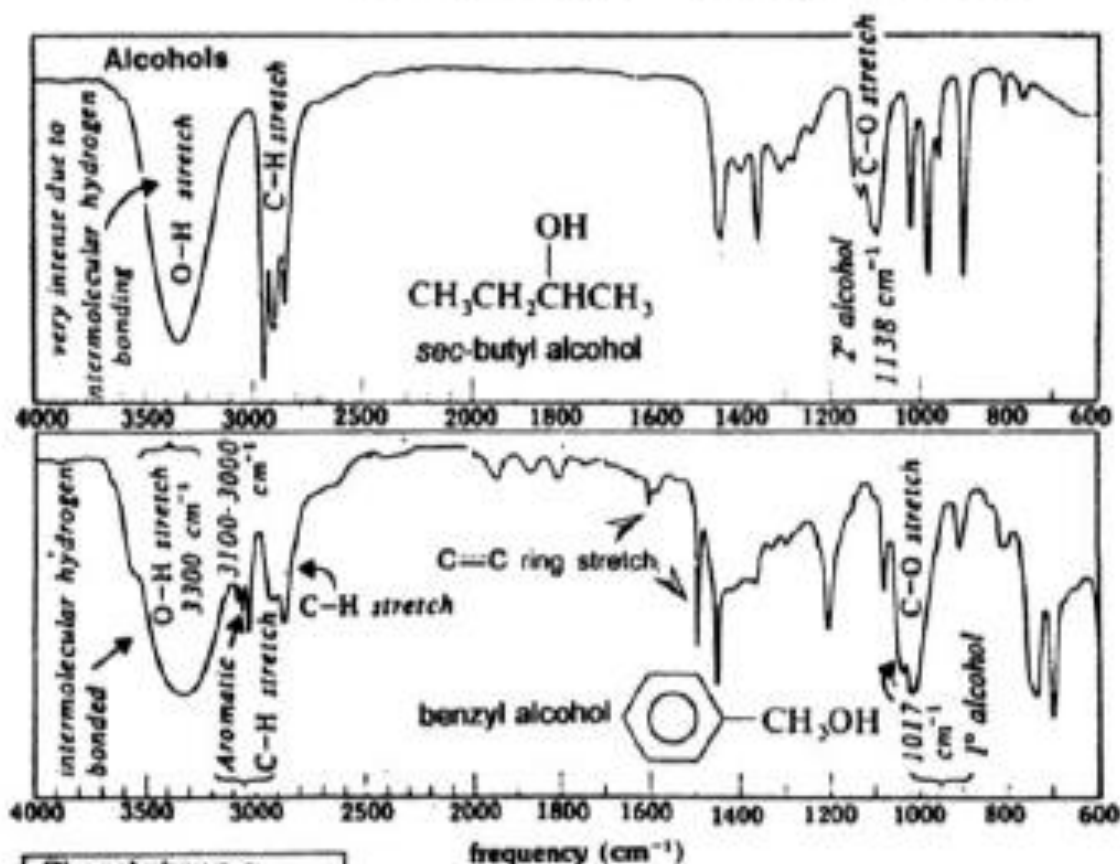
Typical Infrared (IR) Absorption Bands for Alkynes

$\text{RC}\equiv\text{CH}$	3300 cm^{-1}	Strong	$\equiv\text{C}-\text{H}$ stretch
	$2100-2140 \text{ cm}^{-1}$	Medium	C $\equiv$ C stretch
	$600-700 \text{ cm}^{-1}$	Strong	$\equiv\text{C}-\text{H}$ bend
$\text{RC}\equiv\text{CR}$	$2190-2260 \text{ cm}^{-1}$	Very weak	C $\equiv$ C stretch

μ



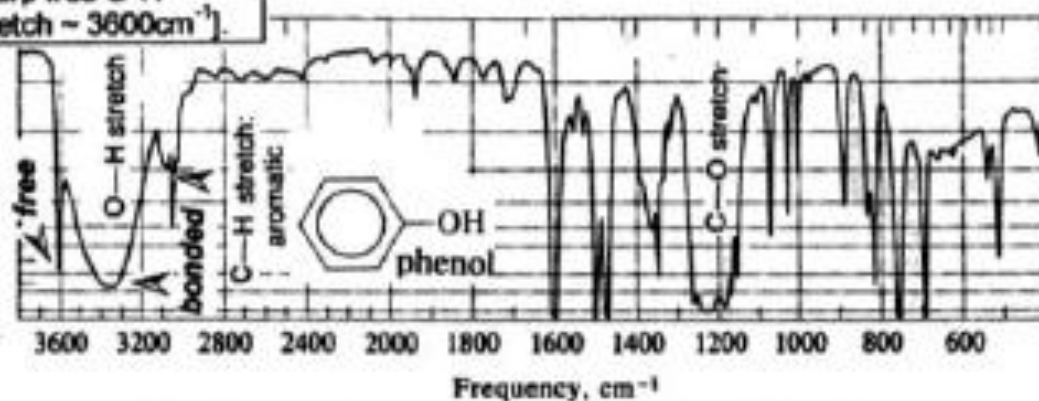
O-H stretching, strong, broad
Alcohols, ROH (or phenols, ArOH) $3200\text{--}3600\text{ cm}^{-1}$



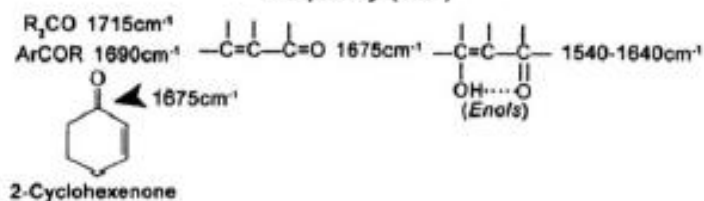
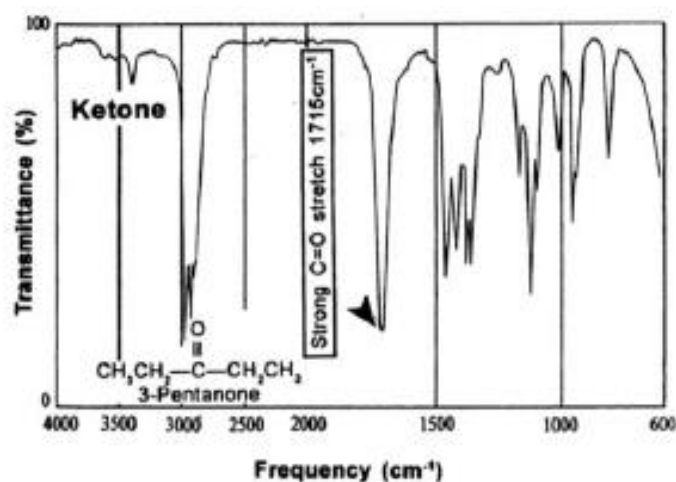
Phenol shows a broad O-H stretch [intermolecular hydrogen bonded- 3400cm^{-1}] and a sharp free O-H stretch $\sim 3600\text{cm}^{-1}$].

C-O stretching, strong, broad

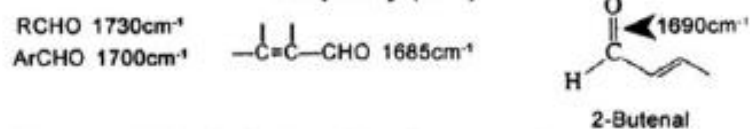
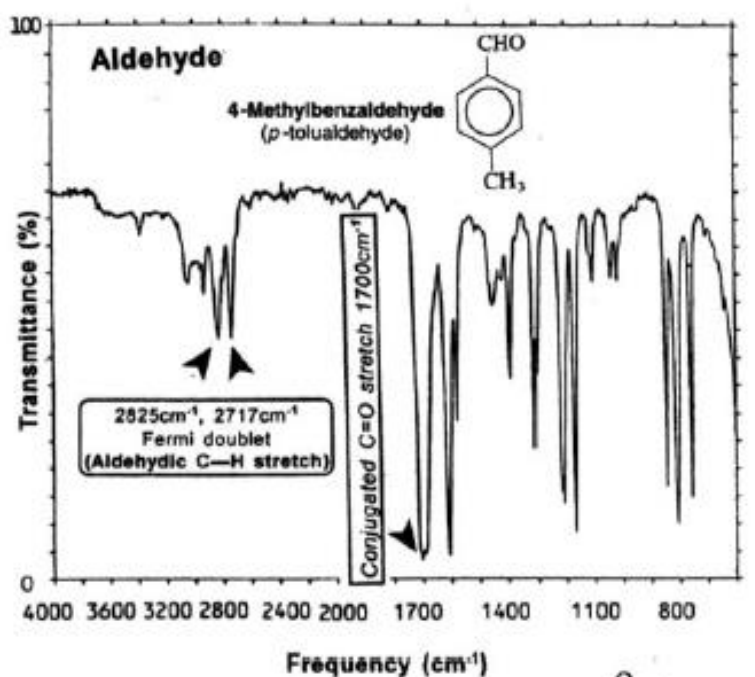
1° ROH about 1050 cm^{-1} 3° ROH about 1150 cm^{-1}
2° ROH about 1100 cm^{-1} ArOH about 1230 cm^{-1}



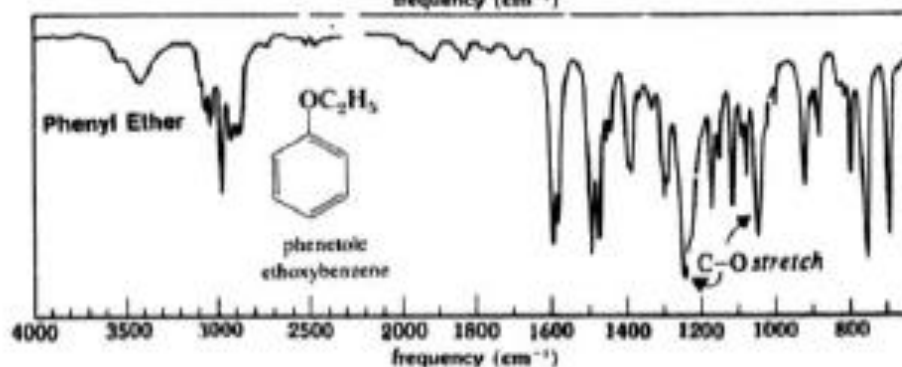
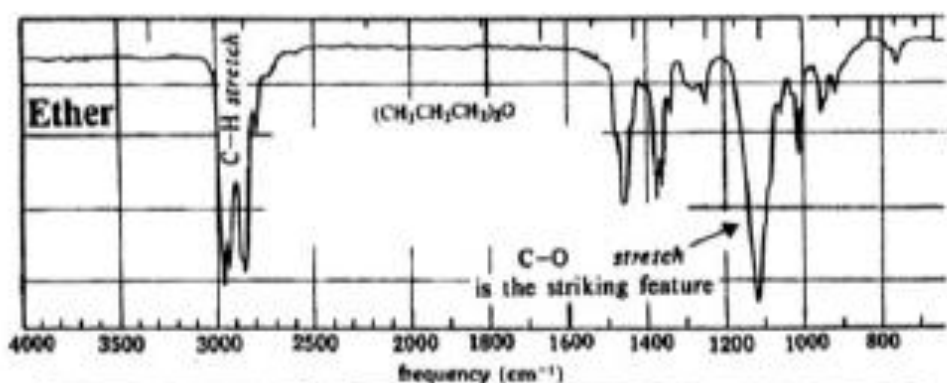
Infrared spectra of sec-butyl alcohol and benzyl alcohol.
© Sadtler Research Laboratories, Division of Bio-Rad Laboratories, Inc. 1978.



Characteristic C=O stretching frequencies of ketones



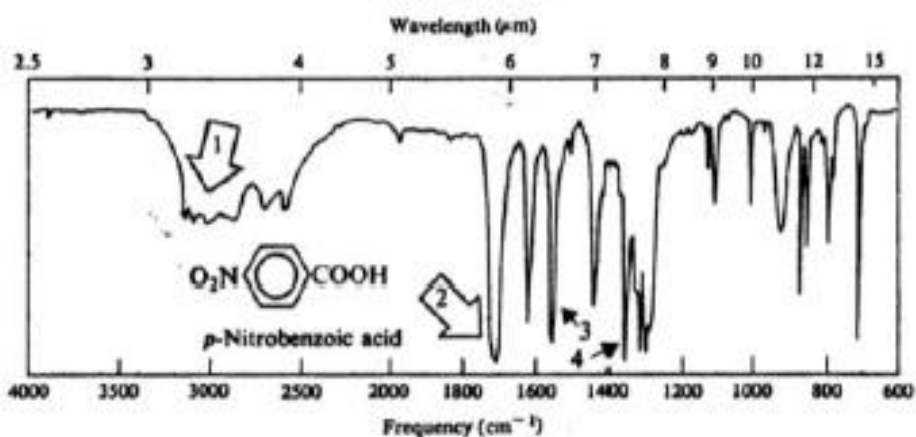
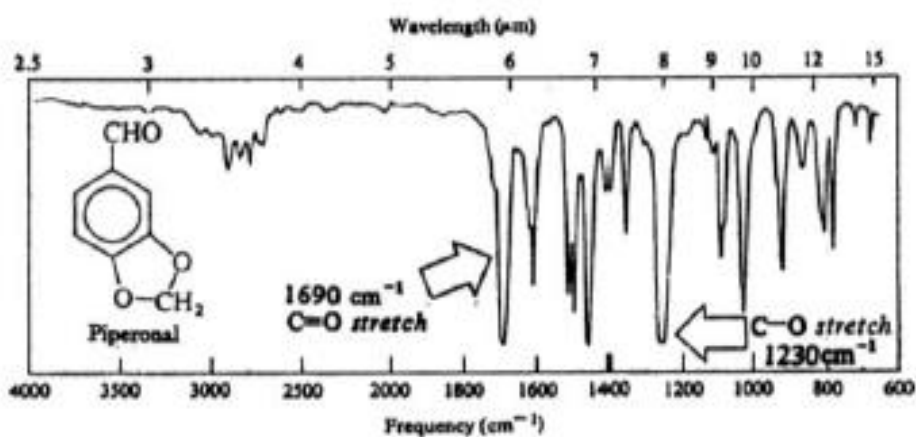
Characteristic C=O stretching frequencies of aldehydes

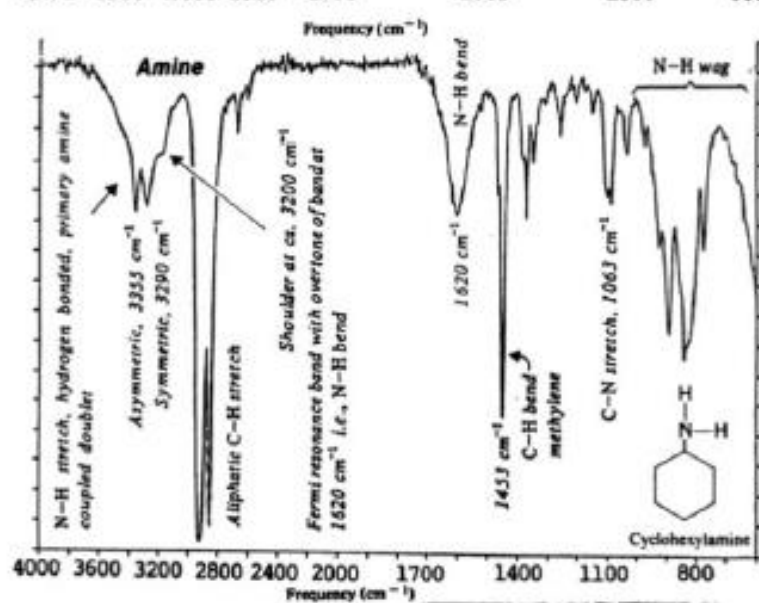
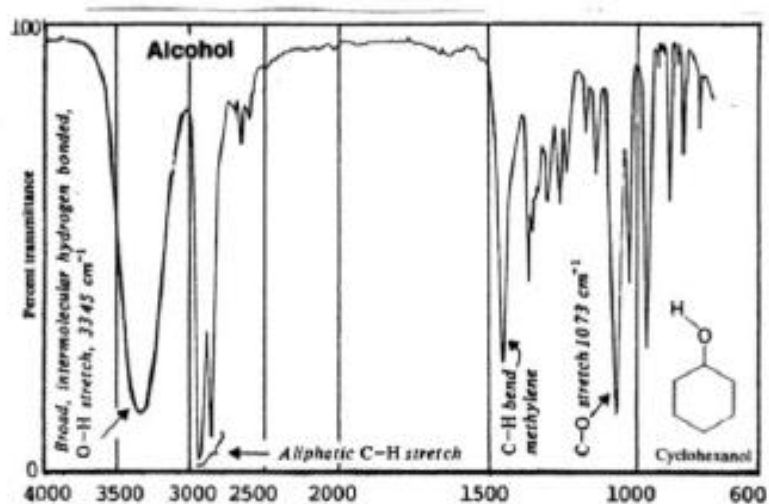


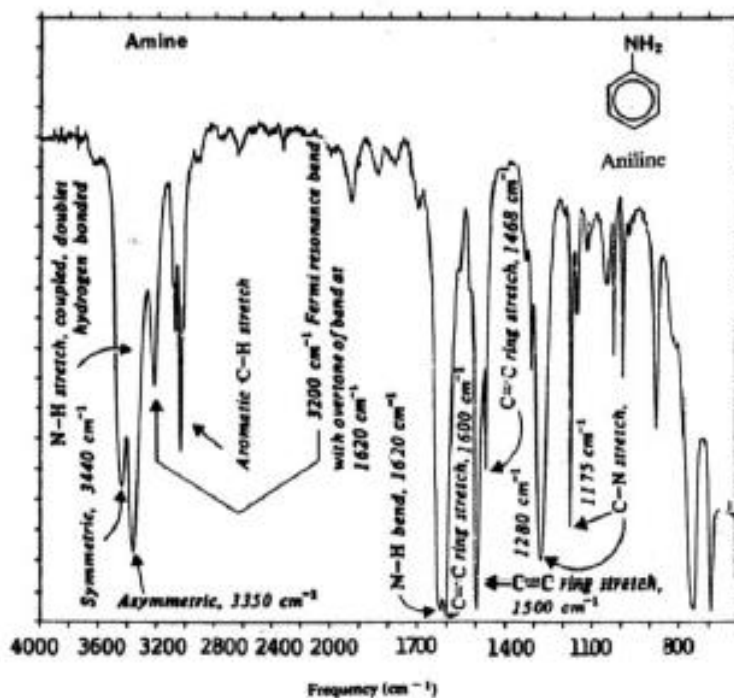
C-O stretching, strong, broad cm^{-1}

Alkyl ethers 1060–1150

Aryl and vinyl ethers 1200–1275
and, weaker, at 1020–1075







N-H stretching $3200\text{--}3500\text{ cm}^{-1}$

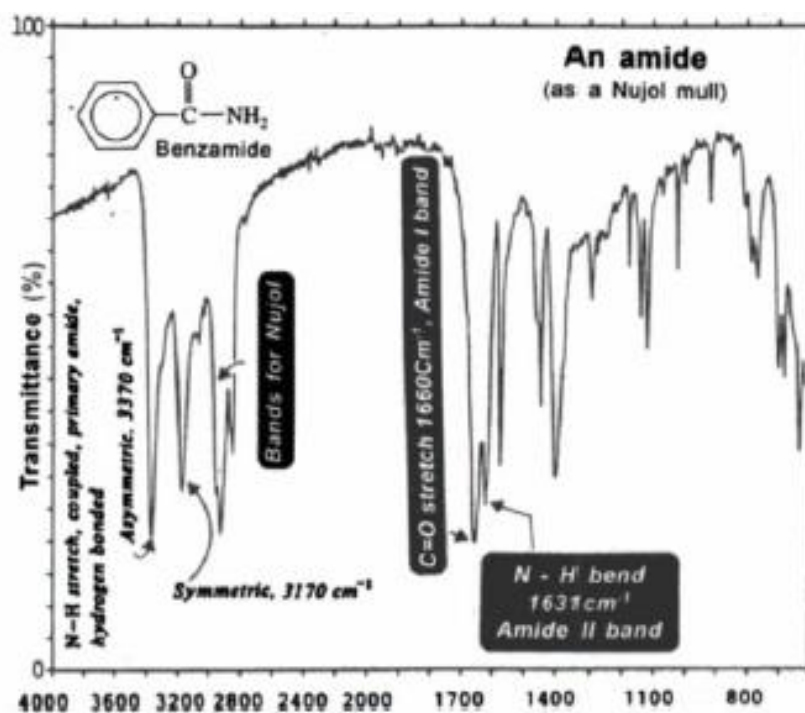
1° Amines	2° Amines	3° Amines
Often two bands	One band	No band

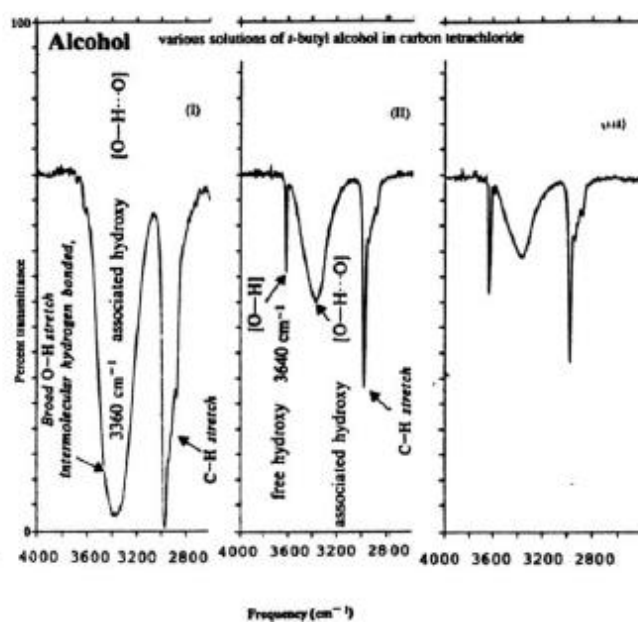
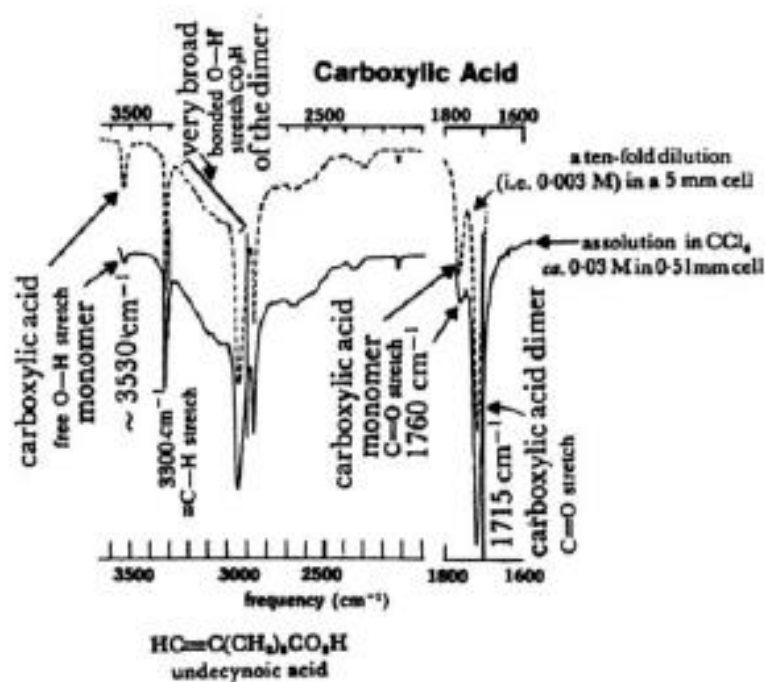
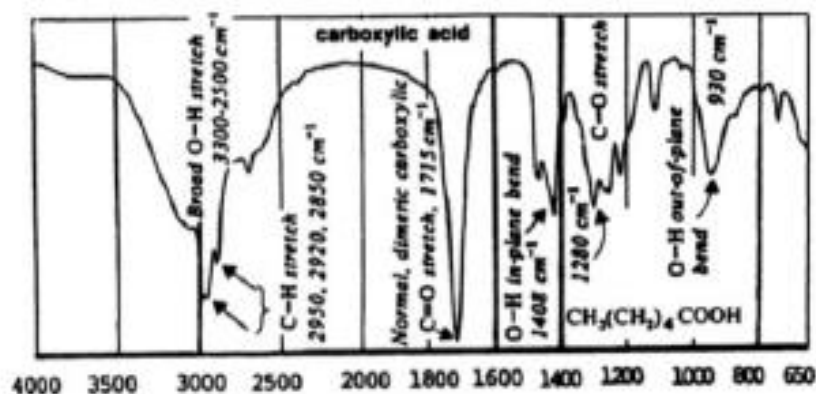
N-H bending

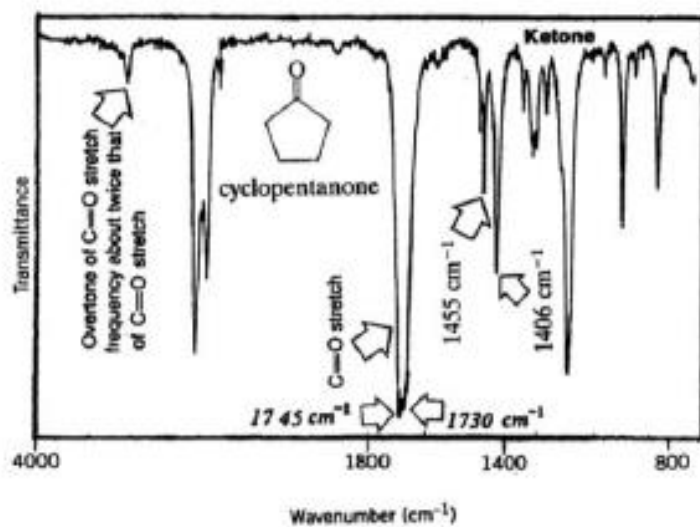
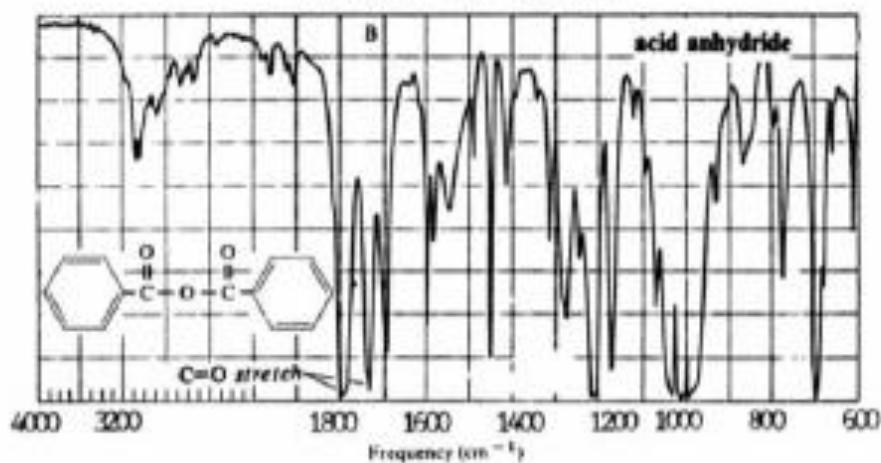
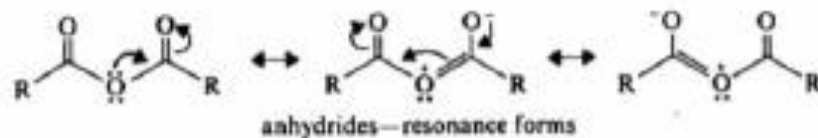
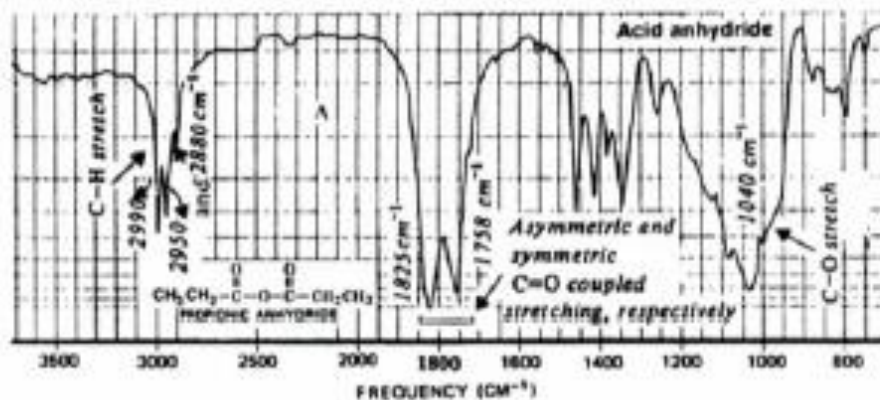
1° Amines Strong bands $650\text{--}900\text{ cm}^{-1}$ (broad) and $1560\text{--}1650\text{ cm}^{-1}$

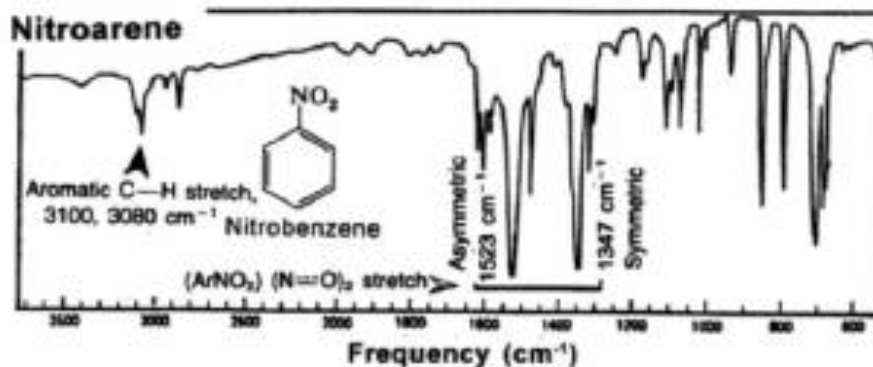
C-N stretching

Aliphatic	$1030\text{--}1230\text{ cm}^{-1}$ (weak)	Aromatic	$1180\text{--}1360\text{ cm}^{-1}$ (strong)
	(3°: usually a doublet)		Two bands

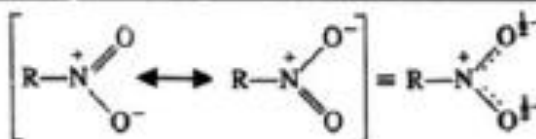






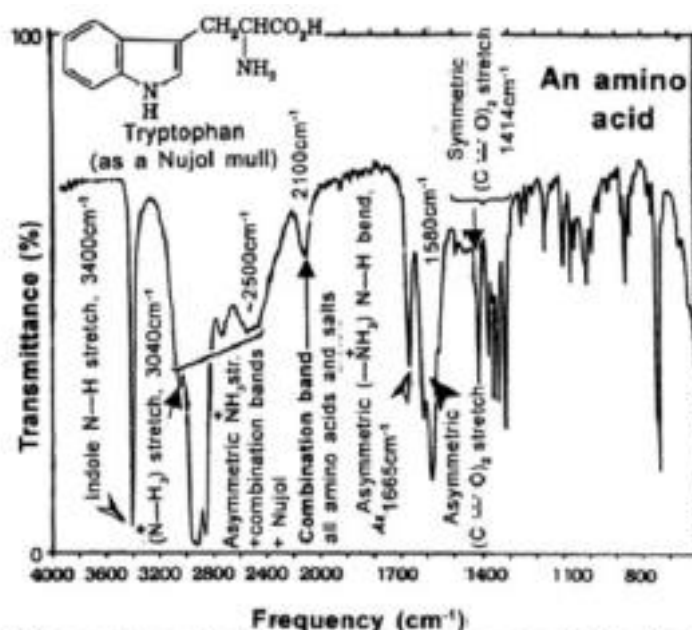


The nitro group ($-\text{NO}_2$), like the carboxylate anion, is well formulated as a hybrid of two equivalent resonance structures.

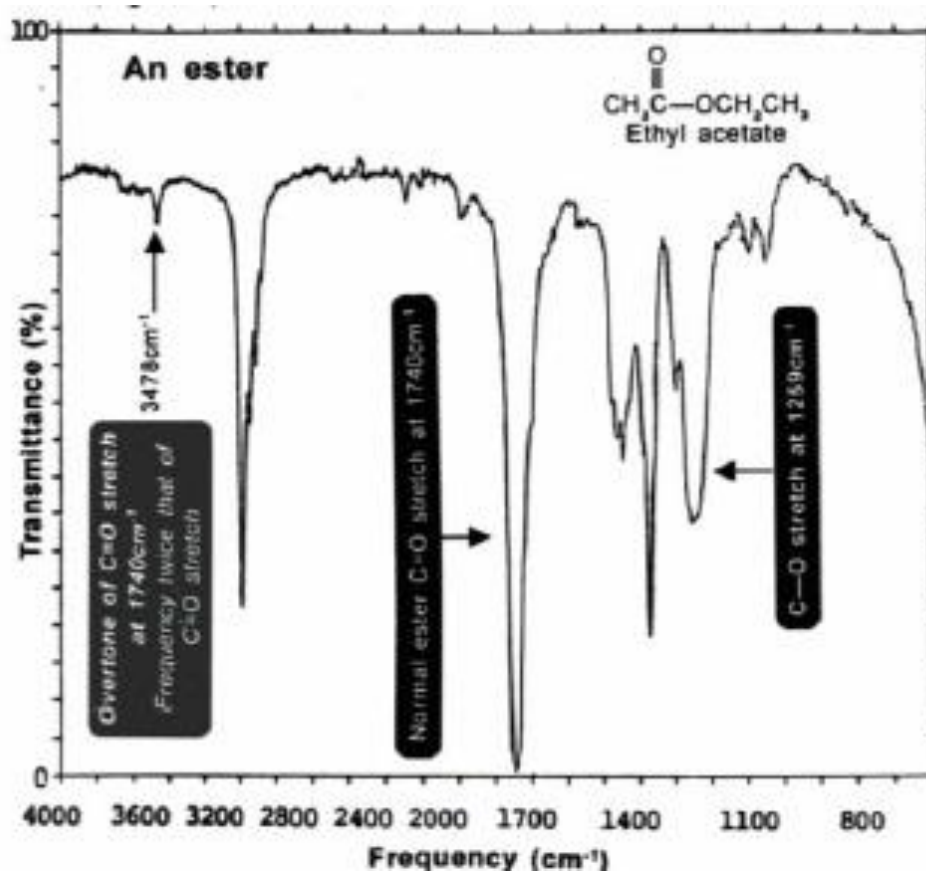
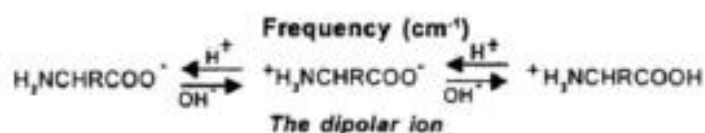
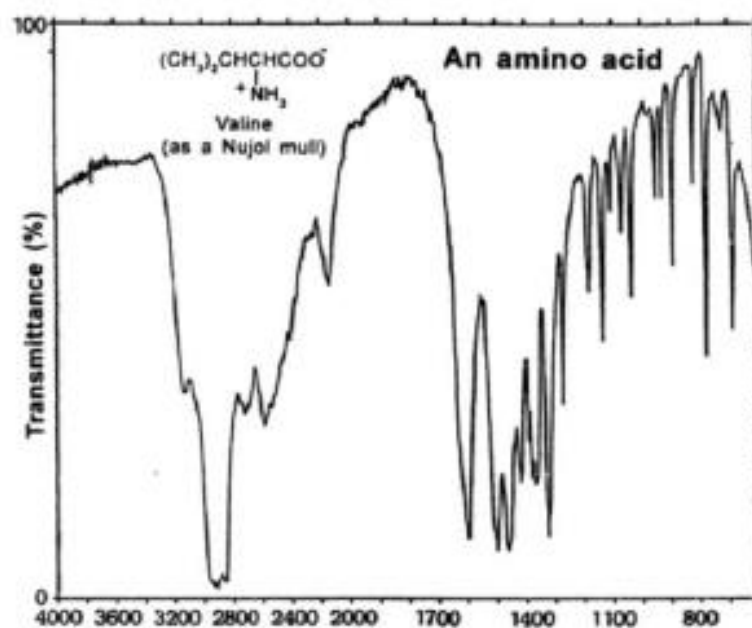


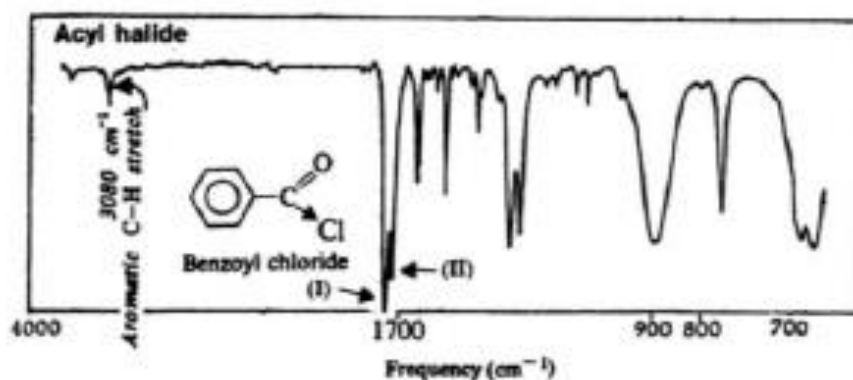
N=O Stretching Vibrations

Group	Intensity	Range cm^{-1}
O—NO ₂ , Nitrates	(s)	1650–1600
	and (s)	1300–1250
C—NO, Nitroso compounds	(s)	1600–1500
O—NO, Nitrites	(s)	1680–1650
	and (s)	1625–1610



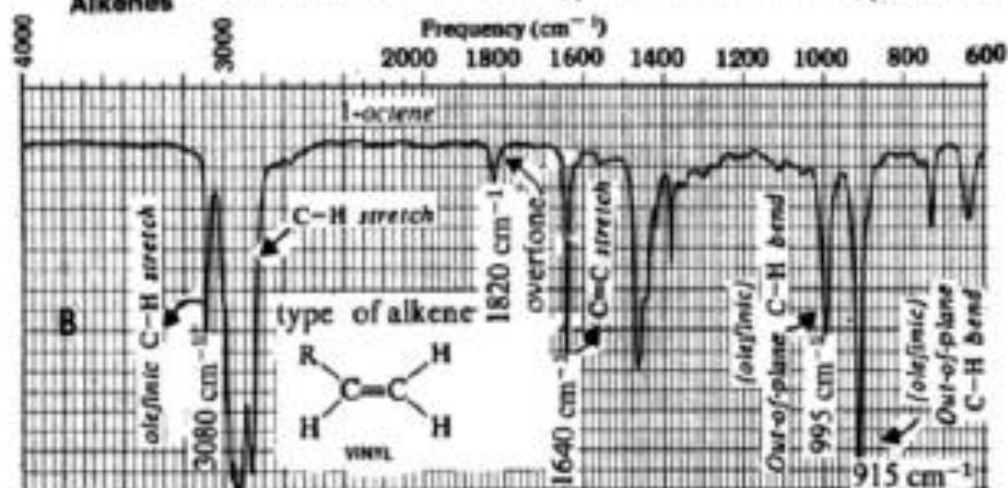
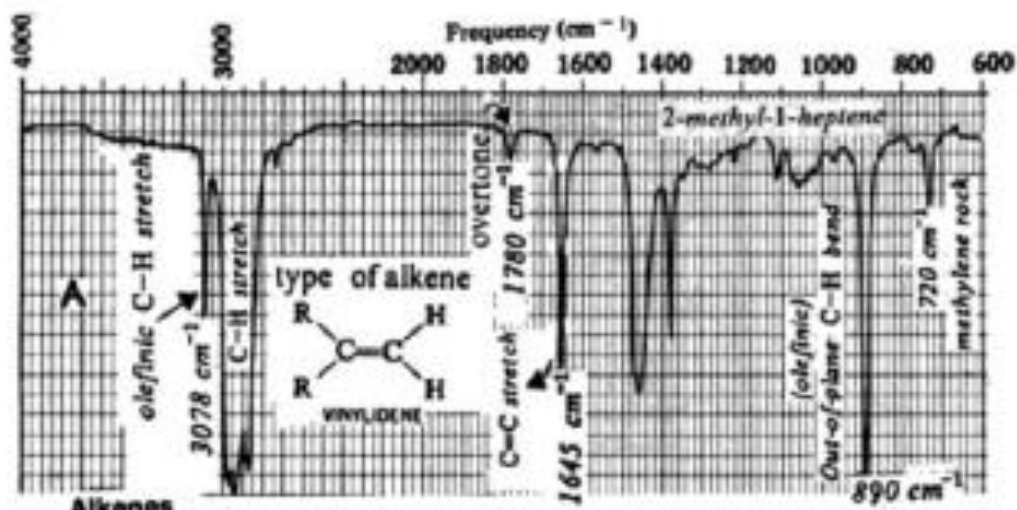
Since amino acids contain both a basic group ($-\text{NH}_2$) and an acidic group ($-\text{COOH}$), they are amphoteric compounds. In the dry solid state, amino acids exist as dipolar ions, a form in which the carboxyl group is present as a carboxylate ion.

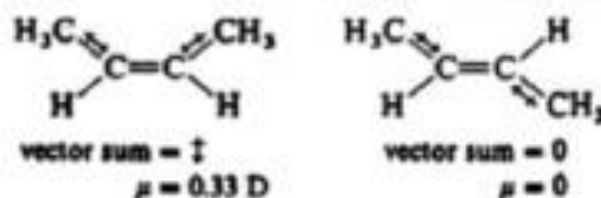
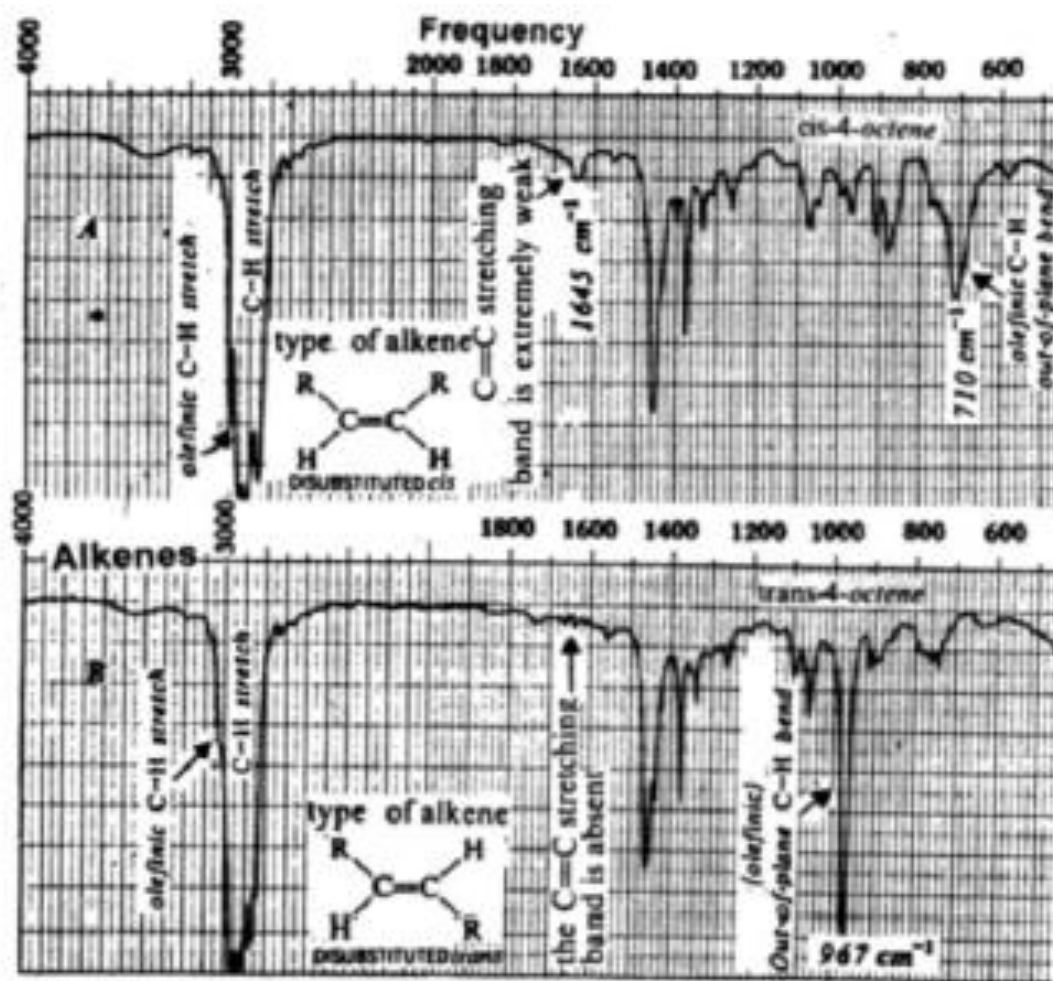




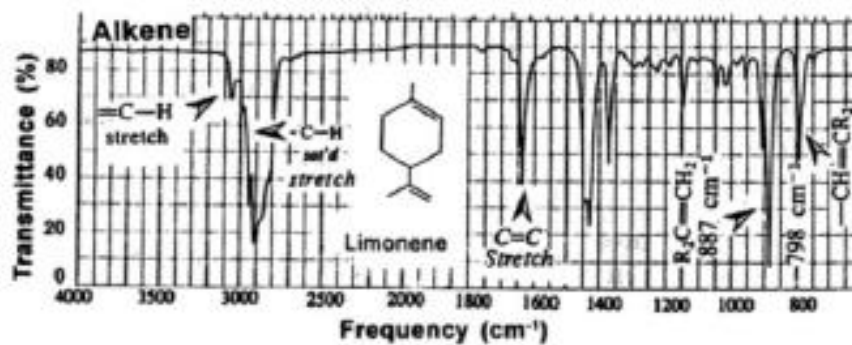
(I) C=O stretch, 1790 cm^{-1}

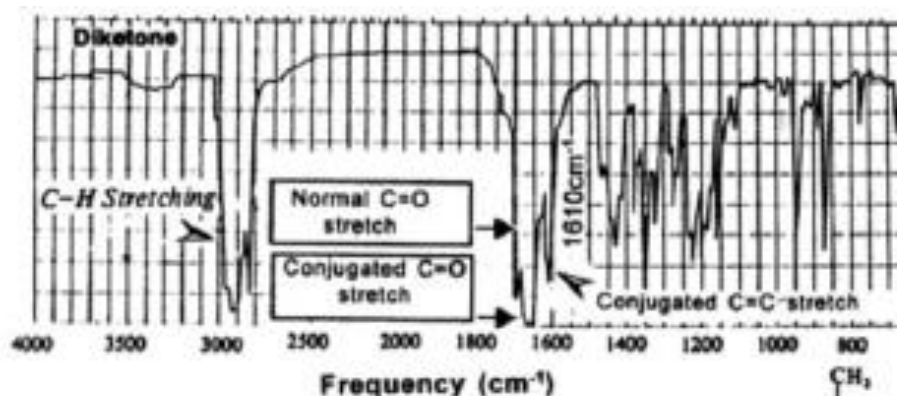
(II) { Fermi resonance band 1745 cm^{-1}
(of C=O stretch and overtone of
875 cm^{-1} band)



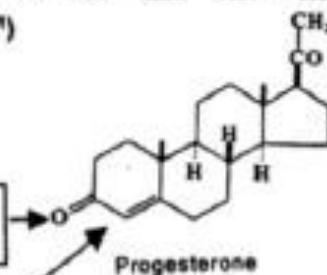


In a *cis*-disubstituted alkene, the vector sum of the two dipole moments is directed perpendicular to the double bond. In a *trans*-disubstituted alkene, however, the two dipole moments tend to cancel out. If the alkene is symmetrically *trans*-disubstituted, the dipole moment will be exactly zero. For example, *cis*-2-butene has a nonzero dipole moment, while the *trans*-isomer has no measurable dipole moment.

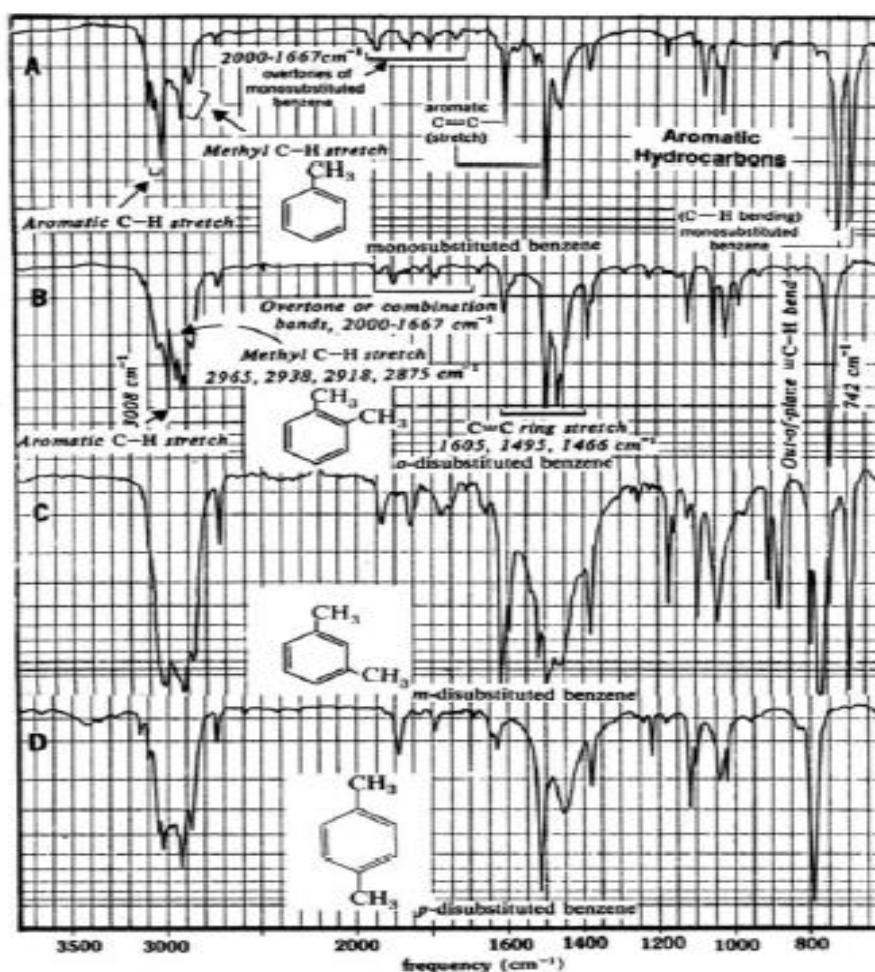


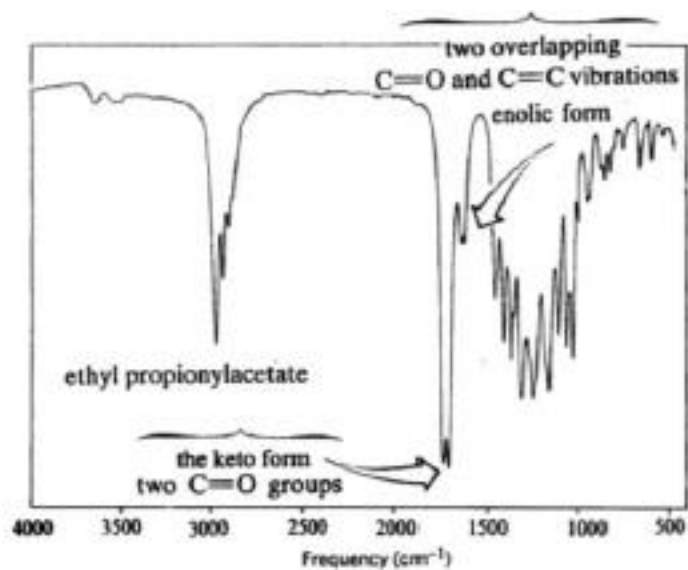
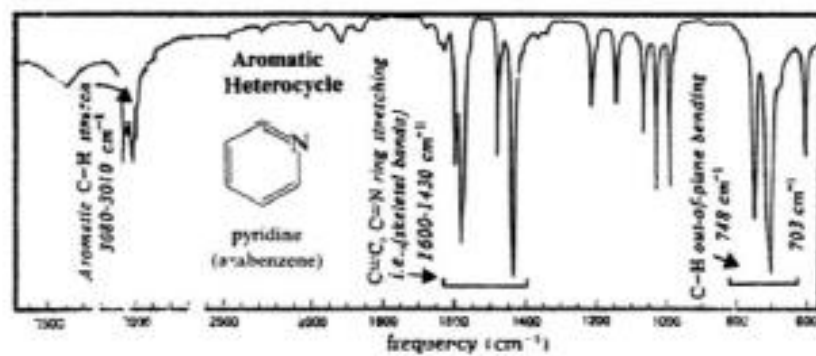


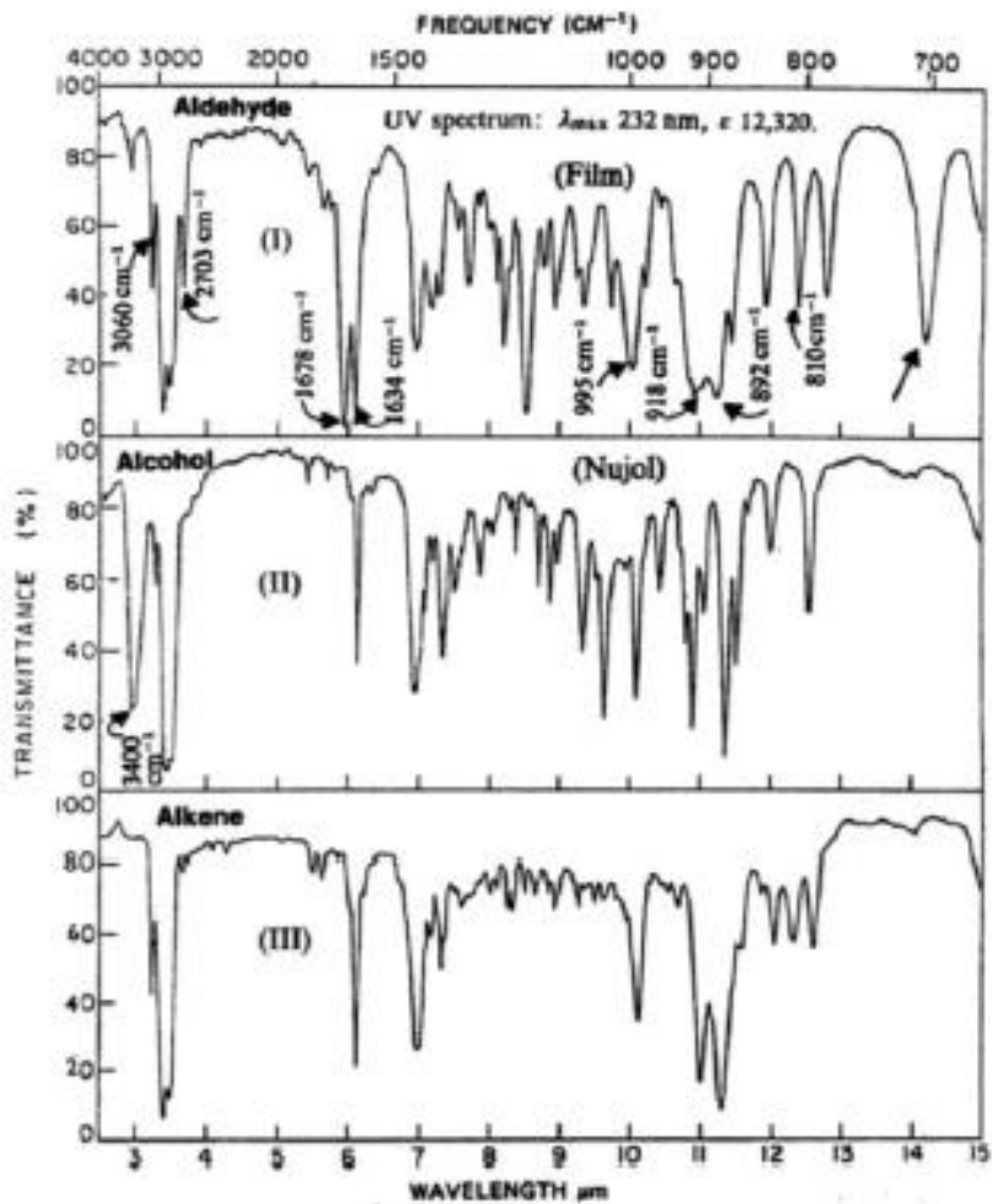
Conjugation causes this C=O stretch to be at lower than normal frequency.

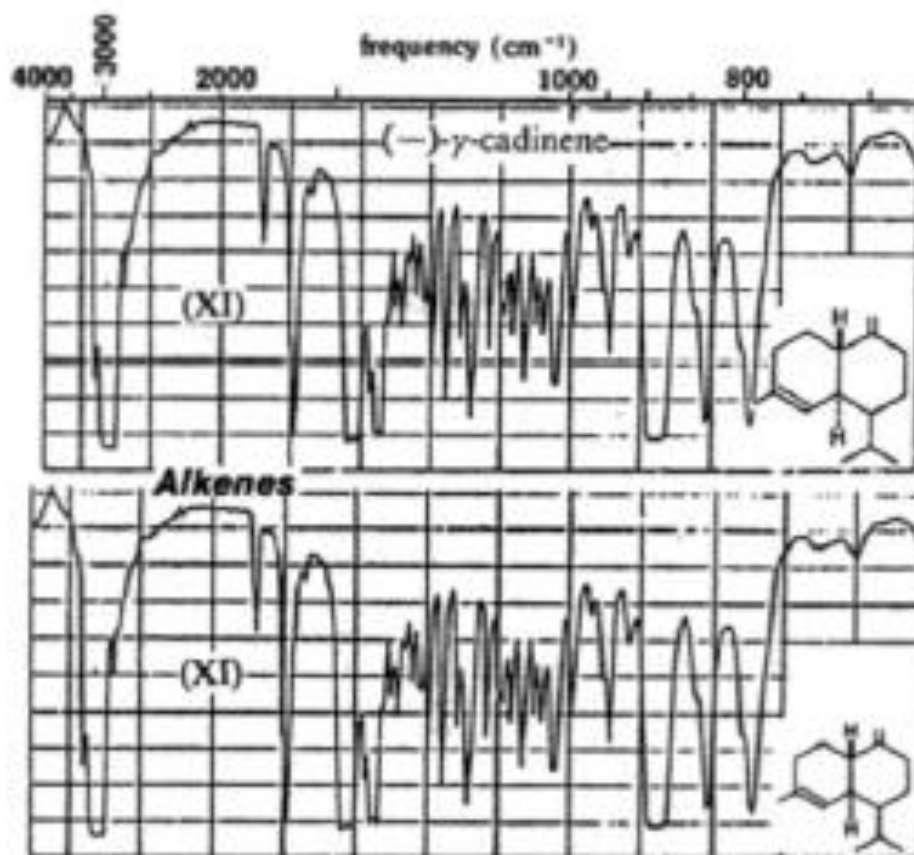
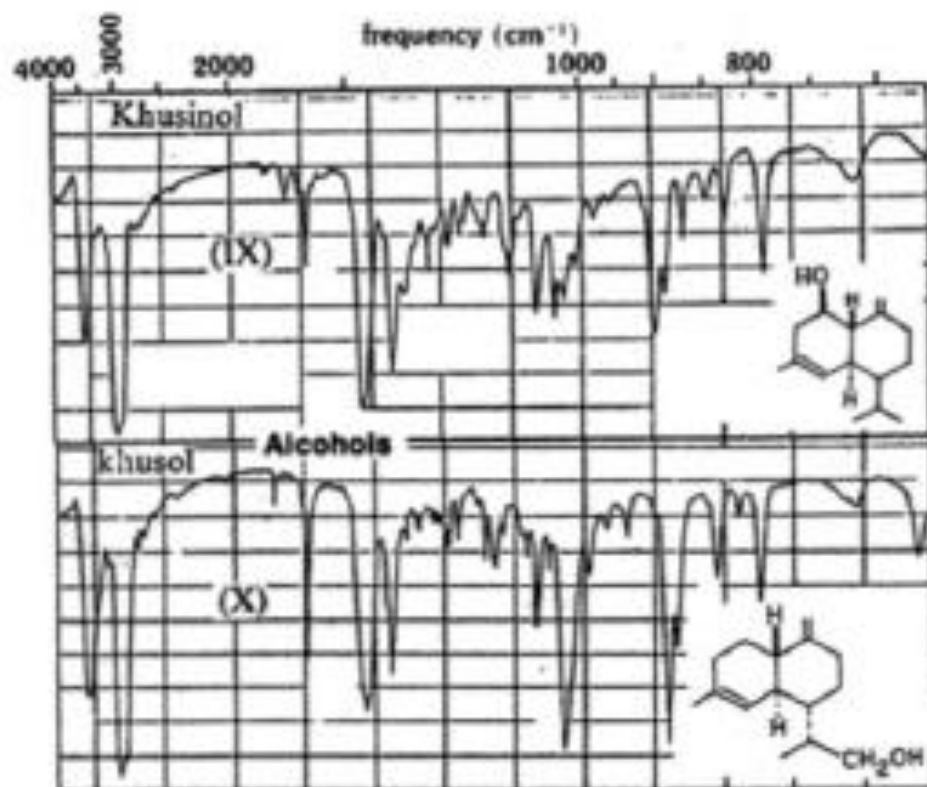


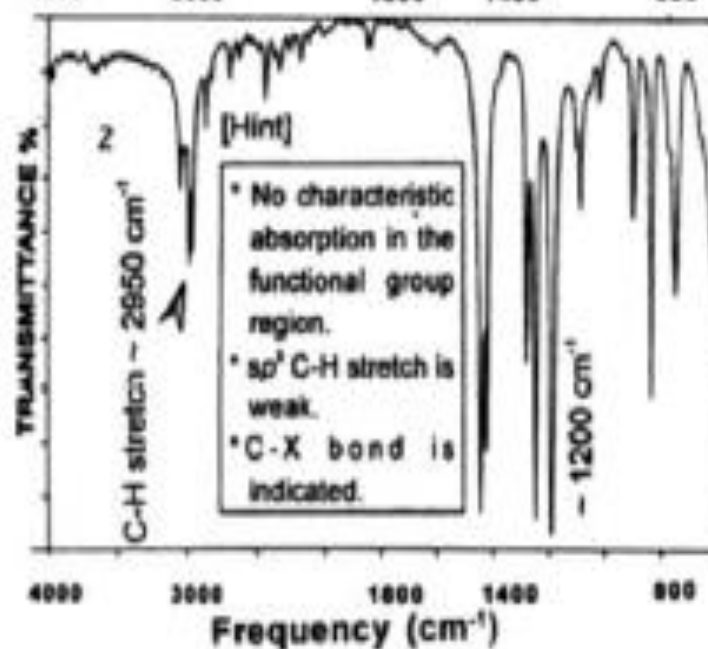
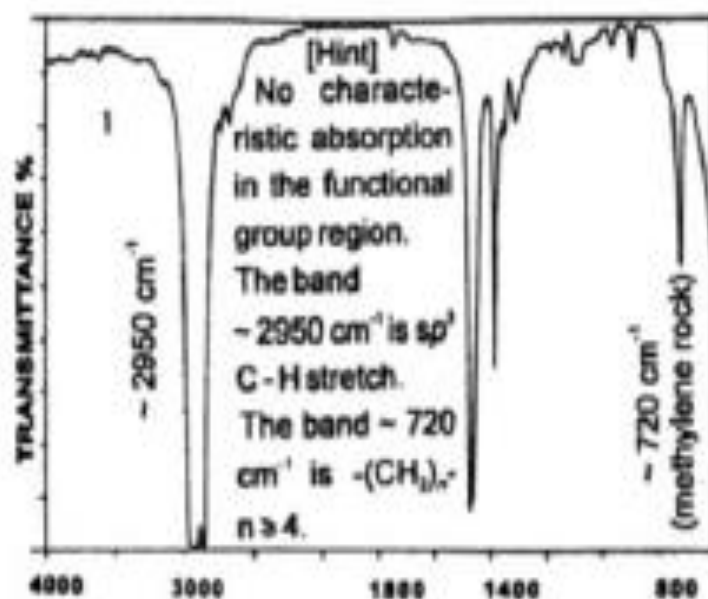
The absorption frequency of the olefinic bond in conjugation with a carbonyl group is also lowered by about 30cm⁻¹ ≈ 1610cm⁻¹ the intensity of absorption is increased.

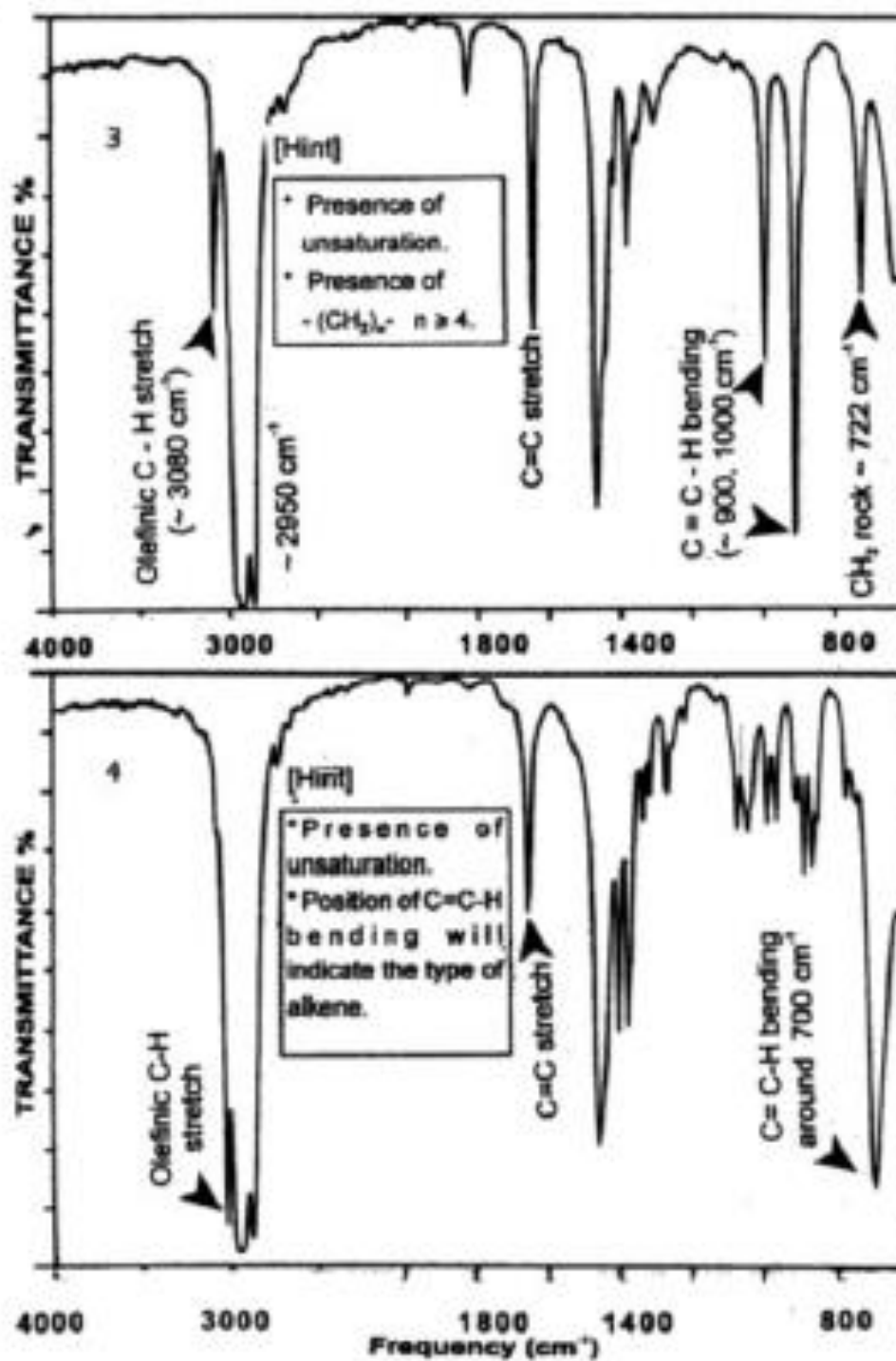


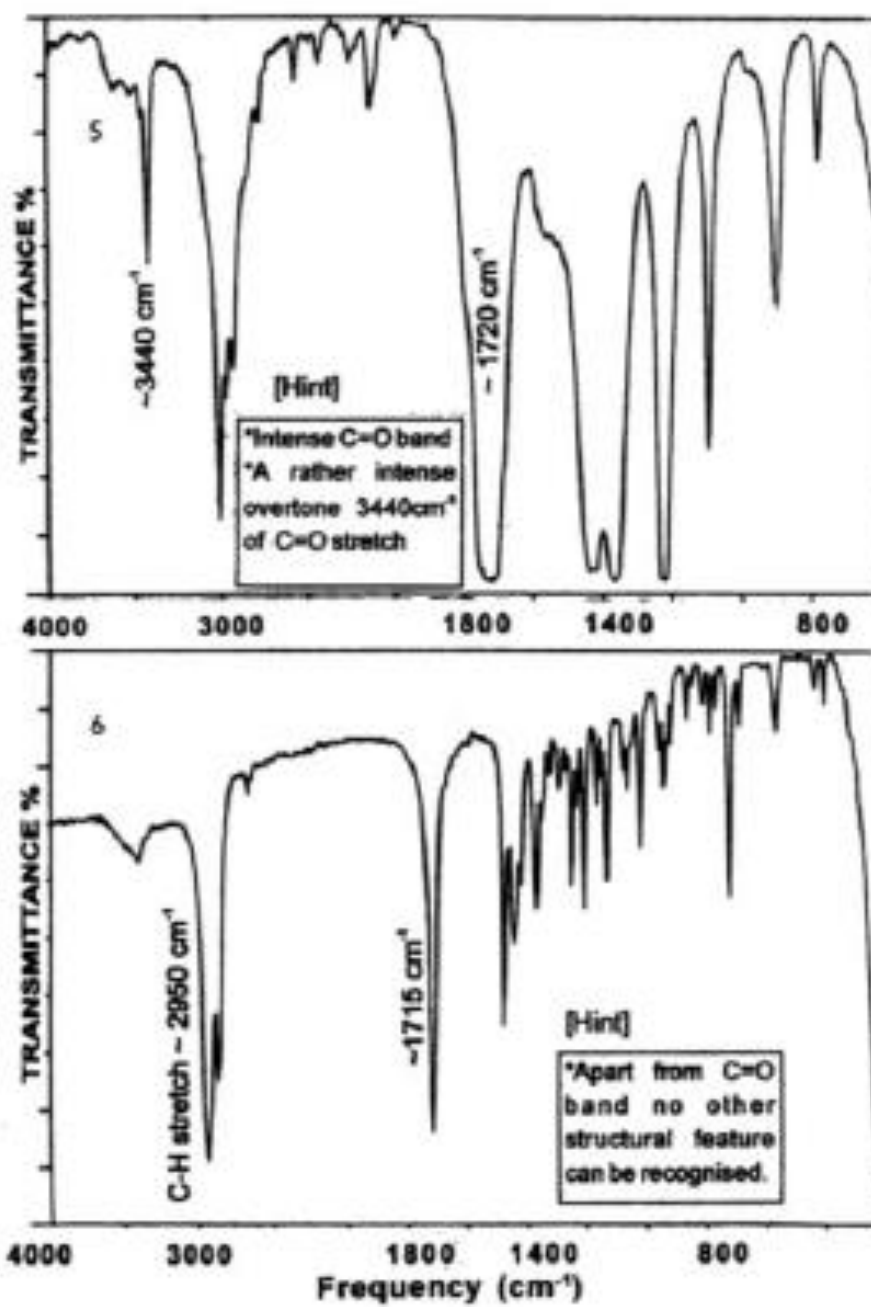


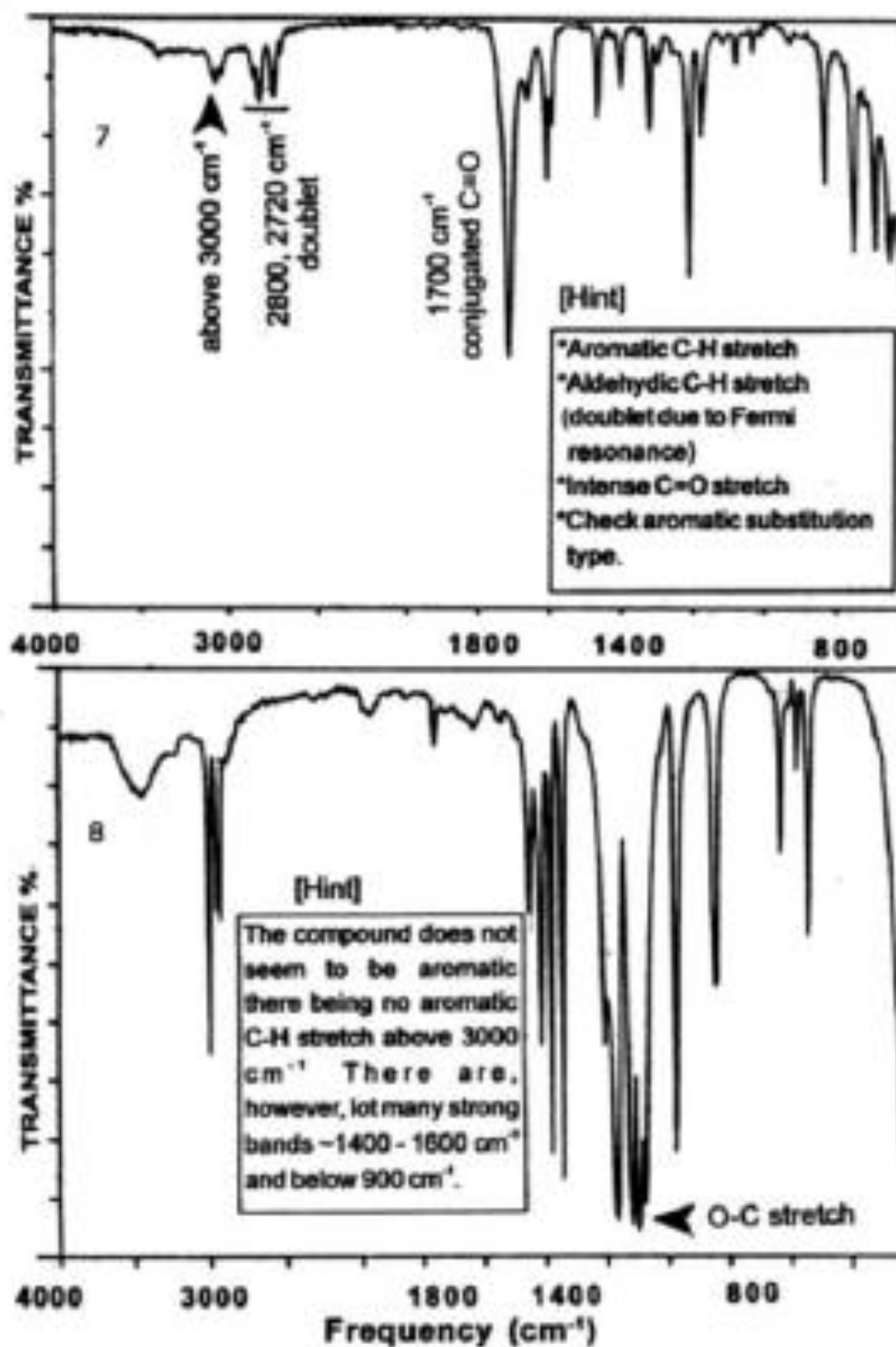


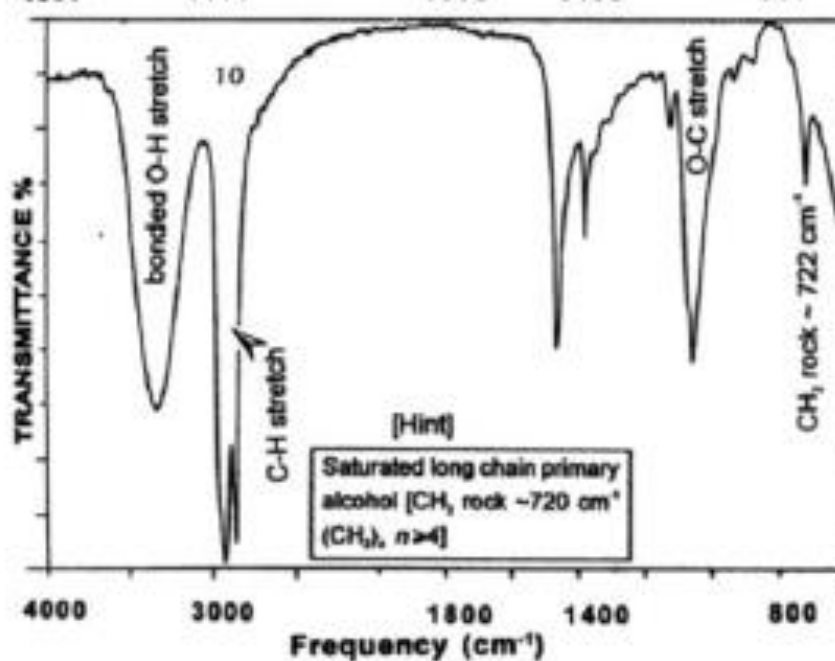
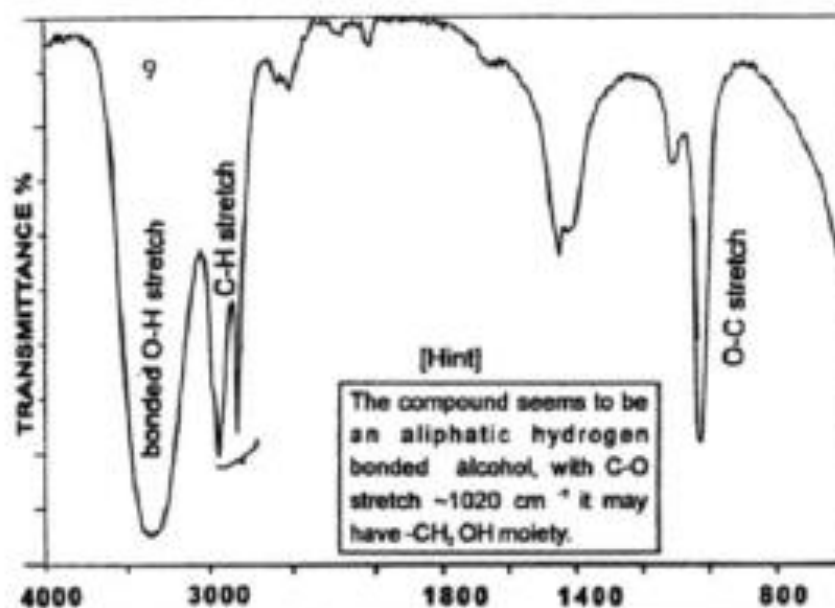


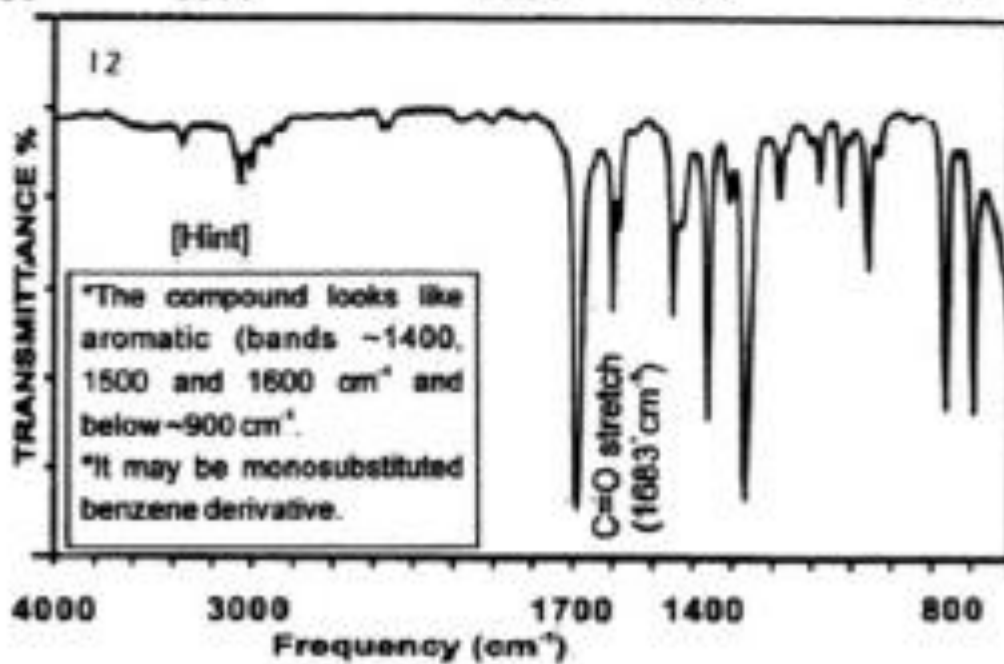
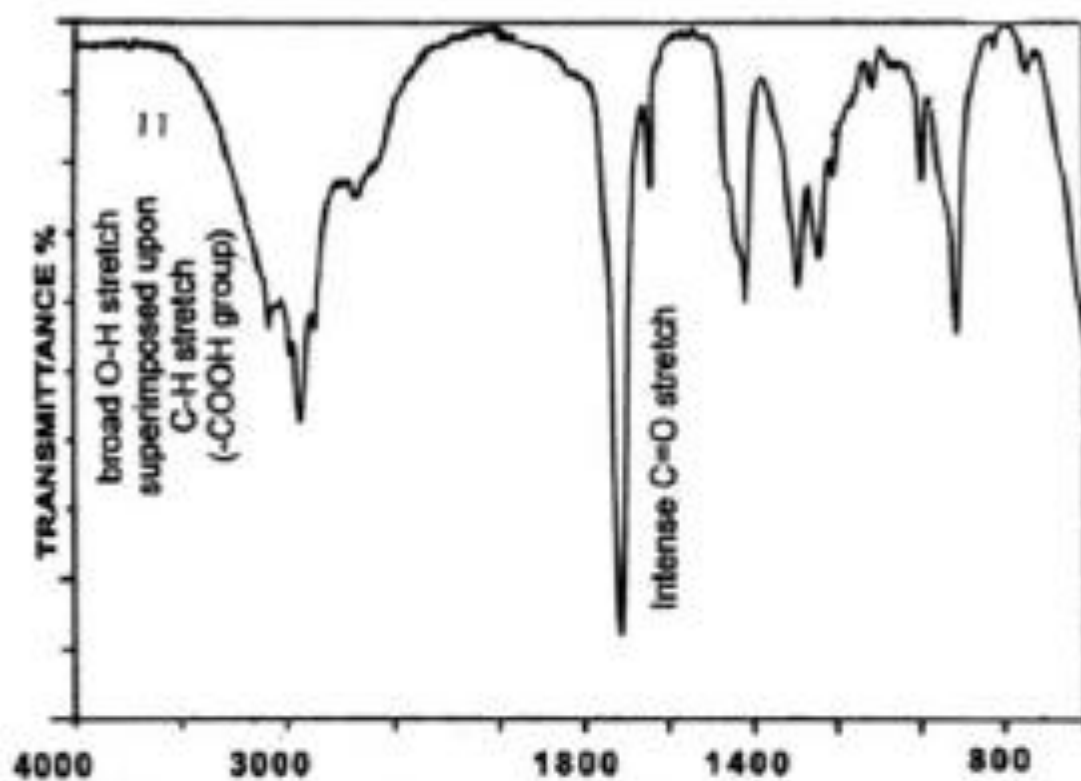












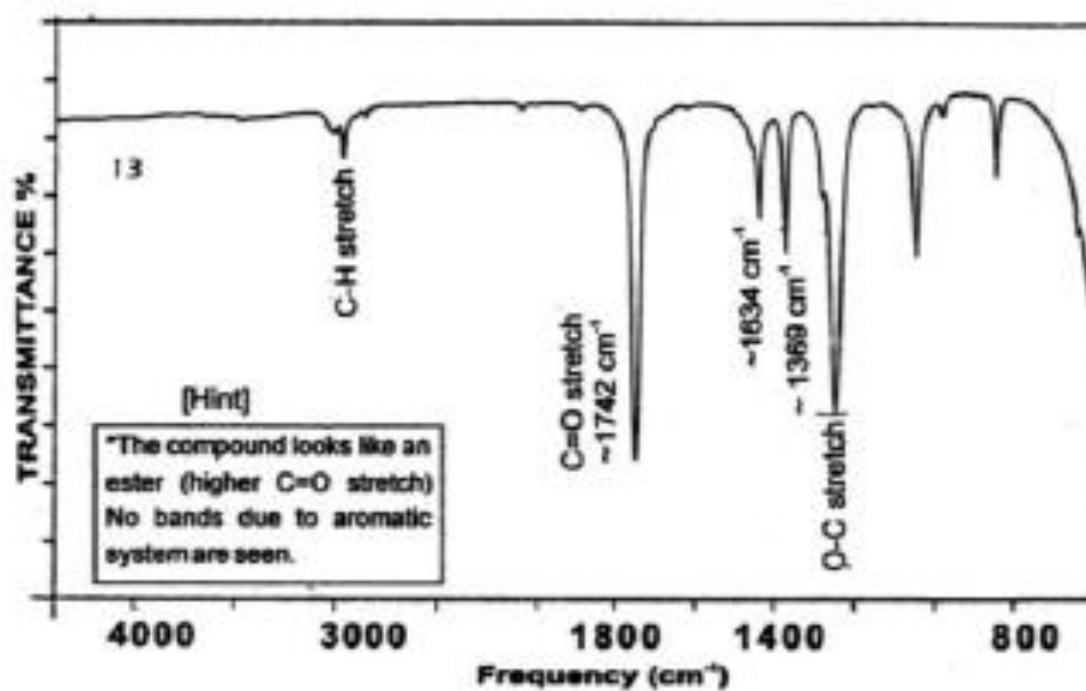
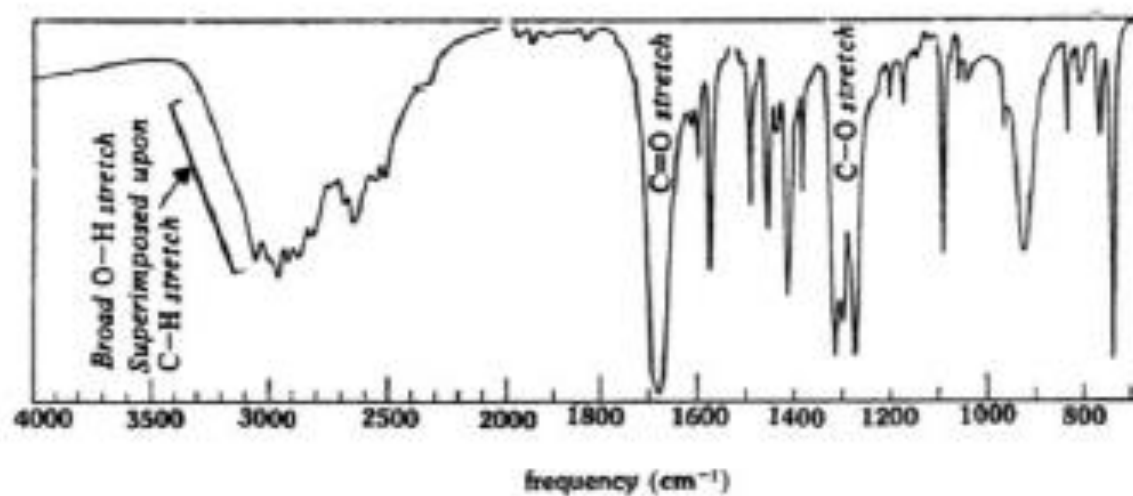
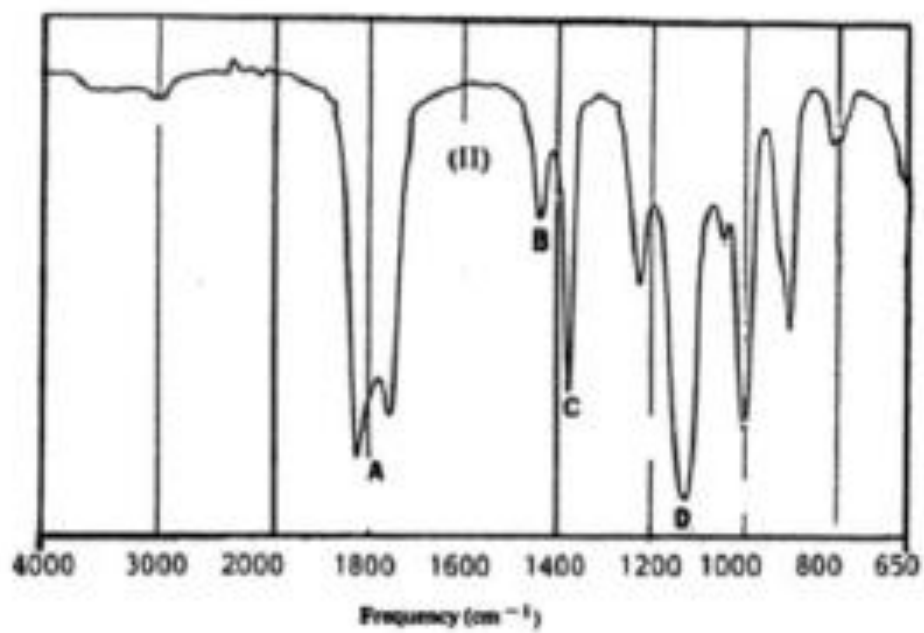
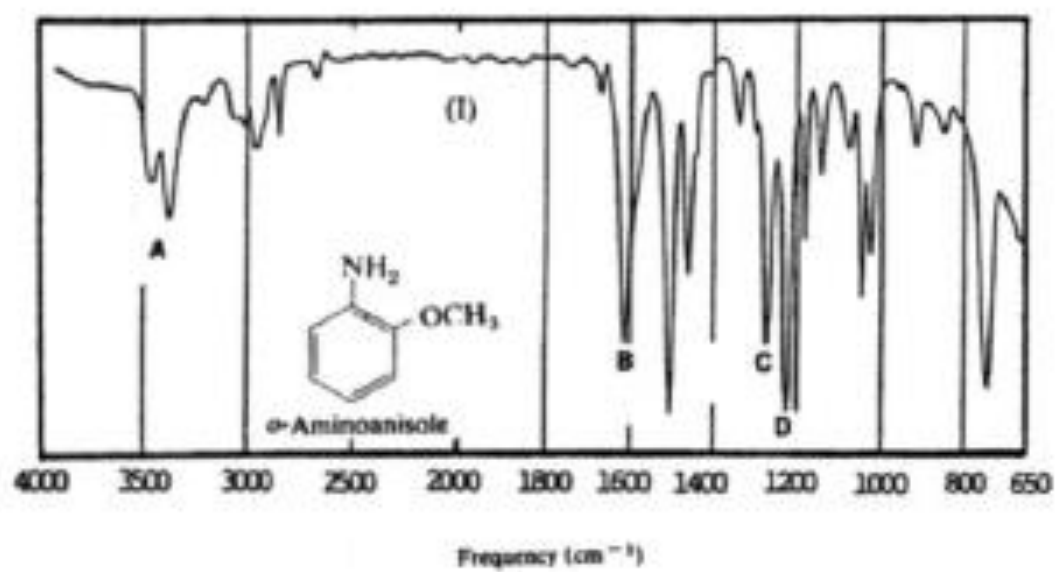


Fig. 3.49





ADABIYOTLAR

1. М. Отто “Современные методы аналитической химии”, изд. Техносфера, 2003, 1 том, стр.151-153, 225-239.
2. А.А. Мальцев “Молекулярная спектроскопия”, изд. Московского Университета, 1980, стр.7-13.
3. Ю.А. Зотов “Основы аналитической химии. Методы химического анализа”, том 2, изд. Высшая школа, 2004, стр.206-207.
4. Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков, “Физические методы исследования в химии”, изд. Мир, 2003.
5. Д. Канделл, Прикладная инфракрасная спектроскопия, Мир, Москва, 1970.
6. А.И. Григорьев, Введение в колебательную спектроскопию неорганических соединений, Издательство МГУ, 1997.
7. <http://www.chem.msu.ru/rus/journals/chemlife/teeth.html>
8. http://www.physchem.chimfak.rsu.ru/Source/special/ir_spectr_3.html
9. К. Накамото, “Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений”, изд. Мир, 1966.
10. Свердлова О.В. Электронные спектры в органической химии. Л. Химия, 1973.
11. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических молекул. Л.: Изд-во Ленинградского ун-та, 1976.
12. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии - Структурные методы и оптическая спектроскопия. М.: Высшая школа, 1987
13. Jackman L.M., Cotton F.A. (eds.): Dynamic Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, part I, p. 660. New York: Academic Press 1975.
14. Ernst R.R., Bodenhausen B., Wokaun A.: Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions, Oxford: Oxford University Press 1987. – 610 p.
15. Van der Ven, F.J.M.: Multidimensional NMR in Liquids: Basic Principles and Experimental Methods, New York: Wiley-VCH 1995. – 399 p.
16. Friebolin H. Basic One- and Two Dimensional NMR Spectroscopy. Weinheim; Basel; New York: Wiley-VCH 1991. – 344 p.
17. Berger S., Braun S. 200 and More NMR Experiments. Wiley-VCH, Weinheim, 2004. – 834 p.
18. Потапов В.М. Стереохимия. – М.: - Химия, 1998. – 464 с.
19. O.C. Mullins, “Optical Interrogation of Aromatic Moieties in Crude Oils and Asphaltenes” in Structures and Dynamics of Asphaltenes, O. C. Mullins and E. Y. Sheu, Eds. (Springer, New York, 1999), Chap. II, pp.21-78.
20. A. Crombie, F. Halford, M. Hashem, R. McNeil, E. C. Thomas, G. Melbourne, and O. C. Mullins, Oilfield Review 10, 3, 26 (1998).
21. R. J. Andrews, G. Beck, K. Castelijns, A. Chen, M. E. Cribbs, F. H.

- Fadnes, J. Irvine-Fortescue, S. Williams, M. Hashem, A.(J) Jamaluddin, A. Kurkjian, B. Sass, O.C. Mullins, E. Rylander, and A. Van Dusen, *Oilfield Review* 13, 3, 24 (2001).
22. R. Schroeder, *SPIE oe magazine* 3, 5, 18 (2003).
 23. Seigo Yamazoe and Tsuje Hiroshi, U. S. Patent 4,843,247 (1989).
 24. T. Yokota, F. Scriven, D. S. Montgomery, and O. P. Strausz, *Fuel* 65, 1142 (1986).
 25. J. Castillo, J. Hung, A. Fernandez, and V. Mujica, *Fuel* 80, 1239 (2001).
 26. O. P. Strausz, P. Peng, and J. Murgich, *Energy Fuels* 16, 809 (2002).
 27. I. N. Evdokimov, N. Yu. Eliseev, and B. R. Akhmetov, *J. Petr. Sci. Eng.* 37, 3-4, 145 (2003).
 28. I. N. Evdokimov, N. Yu. Eliseev, and B. R. Akhmetov, *J. Petr. Sci. Eng.* 37, 3-4, 135 (2003).
 29. S. Goncalves, J. Castillo, A. Fernandez, and J. Hung, *Fuel* 83, 1823 (2004).
 30. I. N. Evdokimov and A. P. Losev, "On the Nature of UV/Vis Absorption Spectra of Asphaltenes", *Petr. Sci. Technol.* (in press)
 31. H. Alboudwarej, R. K. Jakher, W. Y. Svrcek, and H. W. Yarranton, *Petr. Sci. Technol.* 22, 647 (2004).
 32. A. Barbaro, G. Cecchi, and P. Mazzinghi, *Appl. Opt.* 30, 852 (1991).
 33. F. E. Hoge, *Appl. Opt.* 21, 1725 (1982).
 34. *Modern Instrumental Methods of Analysis of Petroleum Products and Lubricants*, R. A. Nadkarni, Ed., (ASTM STP 1109, ASTM, 1991).
 35. "ASTM D1500-98. Standard Test Method for Color of Petroleum Products", in *Annual Book of ASTM Standards; Part 05 01*. (ASTM, Philadelphia, 1999, pp. 547-551).
 36. I. N. Evdokimov, N. Yu. Eliseev, and B. R. Akhmetov, *Fuel* 82, 817 (2003).
 37. A. Hammami, C. H. Phelps, T. Monger-McClure, and T. M. Little, *Energy Fuels* 14, 14 (2000).
 38. A. Cosultchi, P. Bosch, and V. H. Lara, *Coll. Polym. Sci.* 281, 325 (2003)
 39. Y. Chen, N. Senesi, and M. Schnitzer,. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 41, 352 (1977)
 40. K. H. Tan, *Humic matter in soil and the environment, principles and controversies*. (Marcel Dekker Inc., New York, 2003).
 41. A. Doukkali, A. Saoiabi, A. Zrineh, M. Hamad, M. Ferhat, J. M. Barbe, and R. Guillard, *Fuel* 81, 467 (2001).
 42. *Catalogue of Optical Spectra of Oils*. University of Oldenburg, Institute of Physics, Section Marine Physics, January 2005. Internet publication: <http://las.physik.uni-oldenburg.de/data/spectra/index.htm>
 43. *25 Techniques in Visible and Ultraviolet Spectrometry Volume1 - Standards in Absorption Spectrometry*; C. Burgess, A. Knowles, Eds. (Chapman and Hall Ltd., London, 1981).
 44. H. Mark and J. Workman, *Spectroscopy* 19, 44(2004).
 45. R. N. Clark, "Spectroscopy of Rocks and Minerals, and Principles of

Spectroscopy”, in *Manual of Remote Sensing*, A. Rencz, Ed. (John Wiley and Sons, New York, 1999). Chap. 1.

46. R. S. Czernuszewicz, *Journal of Porphyrins and Phthalocyanines* 4, 4, 426 (2000).

47. E. Steinle, S. Amemiya, P. Buhlmann, and M. Meyerhoff, *Anal. Chem.* 72, 5766 (2000).

48. A. Colmsjo, GRAND - PAH Spectrum Database. (Department of Analytical Chemistry, Stockholm University. 2000). Available at: <http://www.anchem.su.se/grand/>

49. B. L. Diffey, P. M. Farr, and S. J. Adams, *Br. J. Dermatol.* 118, 679 (1988).

50. H. Al-Shahristani and M. J. Al-Atyia, *Geochim. Cosmochim. Acta* 36, 929 (1972).

51. Z. V. Driatskaja, M. A. Mkhchijan, and N. M. Zhmikhova, *M. Oils of the USSR. Reference book*, vol. 1–4 (Khimija, Moscow, 1971). [In Russian].

52. B. R. Akhmetov, I. N. Evdokimov, and N. Yu. Eliseev, *Chem. Technol. Fuels Oils* 38, 266 (2002).

53. G. Andreatta, N. Bostrom, and O. C. Mullins, *Langmuir* 21, 2728 (2005).

54. G. Andreatta, C. C. Goncalves, G. Buffin, N. Bostrom, C. M. Quintella, F. Arteaga-Larios, E. Perez, and O. C. Mullins, *Energy Fuels* 19, 1282 (2005).

55. I. N. Evdokimov and N. Yu. Eliseev, *Energy Fuels* 20, 682 (2006).

56. A. D. McNaught and A. Wilkinson, *A. IUPAC Compendium of Chemical Terminology. “The Gold Book”*, 2nd Edition (Blackwell Science, N.Y., 1997).

57. H. Wijnja, J. J. Pignatello, and K. Malekani, *J. Environ. Qual.* 33, 265 (2004).

58. G. Jones II, L. N. Lu, H. Fu, C. W. Farahat, C. Oh, S. R. Greenfield, D. J. Gosztola, and M. R. Wasielewski, *J. Phys. Chem. B* 103, 572 (1999).

59. S. C. M. Gandini, E. L. Gelamo, R. Itri, and M. Tabak, *Biophys. J.* 85, 1259 (2003).

60. K. L. Gawrys, G. A. Blankenship, and P. K. Kilpatrick, *Energy Fuels* 20, 705 (2006).

61. L. B. Gutierrez, M. A. Ranaudo, B. Mendez, and S. Acevedo, *Energy Fuels* 15, 624 (2001).

62. I. N. Evdokimov, N. Yu. Eliseev, and B. R. Akhmetov, *Fuel* 85, 1465 (2006).

63. U. Bergmann, H. Groenzin, O. C. Mullins, P. Glatzel, J. Fetzner, and S. P. Cramer, *Petr. Sci. Technol.* 22, 863 (2004).

64. M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and P. C. Eklund, *Science of Fullerenes and Nanotubes*. (Academic Press, New York, 1996).

65. R. Czerw, Z. Guo, P. M. Ajayan, Y.-P. Sun, and D. L. Carroll, *Nano Letters* 1, 423 (2001).

66. J. Singh and K. Shimakawa, *Advances in Amorphous Semiconductors*, (Taylor & Francis, New York, 2003).

67. D. Wasserfallen, M. Kastler, W. Pisula, W. A. Hofer, Y. Fogel, Z. Wang,

and K. Mullen, *J. Am. Chem. Soc.* 128, 1334 (2006).

68. M. S. Twardowski, E. Boss, J. M. Sullivan, and P. L. Donaghay, *Marine Chemistry* 89, 69 (2004).

69. B. P. Tissot and D. H. Welte, *Petroleum Formation and Occurrence: A new approach to oil and gas exploration* (Springer, New York, 1984).

70. E. H. Novotny, W. E. H. Blum, M. H. Gerzabeck, and A. S. Mangrich, *Geoderma* 92, 87 (1999).

71. B. Wozniak, S. B. Wozniak, K. Tyszka, M. Ostrowska, R. Majchrowski, D. Ficek, and J. Dera, *Oceanologia* 47, 621 (2005).

72. T. Sarna and H. M. Swartz, "The physical properties of melanins", in *The Pigmentary System*, Nordlund, J.J. et al., Eds. (Oxford University Press, 1988).

73. J. McGinness, P. Corry, and P. Proctor, *Science* 183, 853 (1974).

74. K. C. Littrell, J. M. Gallas, G. W. Zajac, and P. Thiyagarajan, *Photochem. Photobiol.* 77, 115 (2003).

75. B. J. Powell, T. Baruah, N. Bernstein, K. Brake, R. H. McKenzie, P. Meredith, and M. Pederson, *J. Chem. Phys.* 120, 8608 (2004).

76. A. G. Maldonado, J. P. Doucet, M. Petitjean, and B.-T. Fan, *Molecular Diversity* 10, 39 (2006).

77. P. Ehrenfreund, L. d'Hendecourt, C. Joblin, and A. Leger, *Astronomy and Astrophysics* 266, 429 (1992).

78. Казин В.Н., Урванцева Г.А. Физико-химические методы исследования в экологии и биологии. Ярославль : Изд-во Яросл. гос. ун-т, 2002. 172 с.

79. Арзамасцев А.П., Яскина Д.С. Ультрафиолетовые и инфракрасные спектры лекарственных веществ. М. : Изд-во Медицина, 1975. 151 с.

80. Казицина Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и масс-спектропии в органической химии. М. : Изд-во МГУ, 1979. 240 с.

81. Колесник И.В., Саполетова Н.А. Инфракрасная спектроскопия: методическая разработка факультета наук о материалах. – М. : Изд-во МГУ, 2011. 88 с.

82. Бранд Дж., Эглинтон Г. Применение спектроскопии в органической химии : учебное пособие для студентов химических вузов / под ред. Ю. Н. Шейнкера. М. : Мир, 1967. 279 с.

83. Беккер Ю. Мир химии : Спектроскопия / под ред. А. А. Пупышева. М. В. Поляковой. Москва : Техносфера, 2009. 528 с.

84. Кросс А.Д. Введение в практическую инфракрасную спектроскопию. М. : Иностранная литература, 1961. 110 с.

85. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия. М. : Мир, 1982. 328 с.

86. Сайдов Г.В., Свердлова О.В., Практическое руководство по молекулярной спектроскопии : учебное пособие / под ред. Н. Г. Бахшиева. – Л. : Изд-во Ленингр. Ун-та, 1980. 136 с.

87. Мальцев А.А. Молекулярная спектроскопия. М. : Изд-во МГУ, 1980. 272 с.

88. Тыжигирова В.В., Филиппова С.Ю. Применение ИК и УФ-

спектроскопических методов в фармацевтическом анализе : учебное пособие /

89. под ред. Федосеевой Г.М., Шаглаева Н.С. Иркутск : Изд-во ИГМУ, 2010. 73 с.

90. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. Москва: Изд-во Мир, 2003. 683 с.

91. Штерн Э., Тиммонс К. Электронная абсорбционная спектроскопия в органической химии / под ред. Ю. А. Пентина. М. : Изд-во Мир, 1974. 295 с.

92. Алов Н.А., Василенко И.А., Гольдштрах М.А. и др. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа. В 2 т. Т. 2 / под ред. А. А.Ищенко. – М. : Изд-во Академия, 2010. 416 с.43

93. Вершинин В.И., Власов И.В., Никифорова И.А. Аналитическая химия.М. : Изд-во Академия, 2011. 448 с.

94. Беллами Л. Инфракрасные спектры сложных молекул: учебное издание / под ред. Н.А. Оганджанова, В.В. Арнольдова. Москва: Изд-во иностранной литературы, 1963. 444 с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	5
Физико-химические основы ИК – спектроскопии.....	7
Колебание многоатомных молекул.....	10
Виды установок, схемы.....	11
Установка ИК – спектрометров и принципы работы.....	12
Дисперсионные спектрометры.....	12
Единая и двухлучевая схемы.....	13
Монохроматоры.....	14
Недисперсионные установки.....	14
Источники инфракрасных лучей.....	16
Инфракрасные приематели.....	17
Технические основы эксперимента: спектры пропускания, полный искаженный спектр полного внутреннего отражения и диффузионного отражения	17
Спектры поглощения.....	17
Газы.....	18
Жидкости и растворы.....	18
Твердые вещества.....	19
Количественный анализ.....	19
Внутренние стандарты.....	19
Дифференциальный метод.....	20
Значение первоначальных операций по разделению.....	20
Методика разрушения внутреннего отражения.....	21
Установки для получения спектров IAEBU.....	22
Выбор образцов.....	22
Работа с растворами и жидкостями.....	23
Техника приготовления образцов.....	23
Приготовление таблеток.....	23
Регистрация спектров.....	25
Методика приготовления и измерения спектров проницаемости для проб в суспензиях (НСВ, жидкий керосин).	25