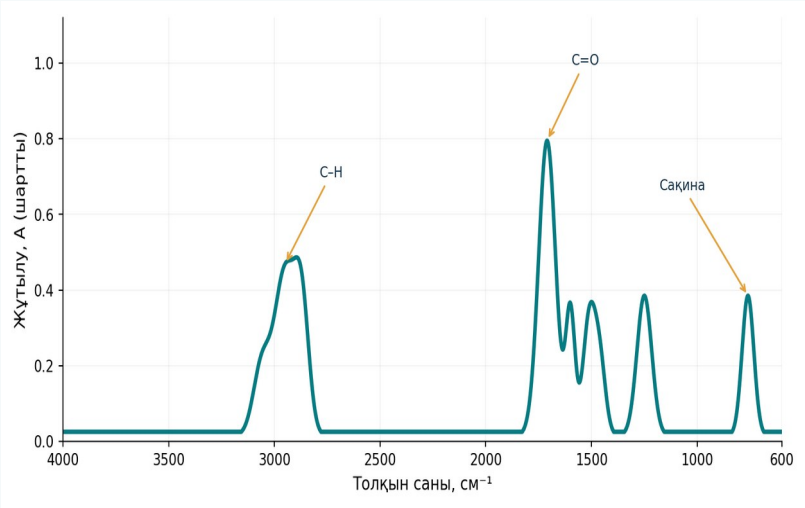
ДӘРІС №7

ДӘРІС ТАҚЫРЫБЫ

ИҚ-спектроскопияда негізгі тербеліс жиілігі облысындағы көмірсутектердің маңызды сипатталатын жұтылу сызықтары. Функционалдық топтарды анықтау.



Сипаттамалық жолақтар молекула құрылысын тануға көмектеседі

Дәріскер: PhD, Қауымдастырылған профессор
Кудайбергенова Батес Маликовна

Дәріс жоспары

01 **Тербеліс жиіліктері және спектр аймақтары**

02 **Алкандардың диагностикалық жолақтары**

03 **Алкендер, алкиндер және ароматты қосылыстар**

04 **Функционалдық топтарды анықтау кестесі**

05 **Спектрлерді интерпретациялау алгоритмі**

06 **Дәрілік заттар мысалындағы ИҚ-талдау**

Мақсаты: ИҚ-спектроскопияның негіздерін және көмірсутектердің сипаттамалық жұтылуын түсіндіру.

Міндеті: спектрлік жолақтарды салыстырып, функционалдық топтарды спектр бойынша анықтау.

Дәріскер: PhD, Қауымдастырылған профессор Кудайбергенова Батес Маликовна

Негізгі тербеліс жиіліктері және спектр аймақтары

Тербеліс жиілігі

Жиілік байланыс күшіне және атом массаларына тәуелді: берік әрі жеңіл байланыстар жоғарырақ ν аймағында жұтады.

ИҚ-белсенділік

Тербеліс кезінде диполь моменті өзгергенде ИҚ-жұтылу байқалады; кейбір симметриялы тербелістер әлсіз немесе көрінбейді.

Орта инфрақызыл диапазон: 4000–400 $см^{-1}$

4000–1500 $см^{-1}$

Функционалдық топтар жиіліктерінің негізгі аймағы

1500–400 $см^{-1}$

«Саусақ ізі» аймағы

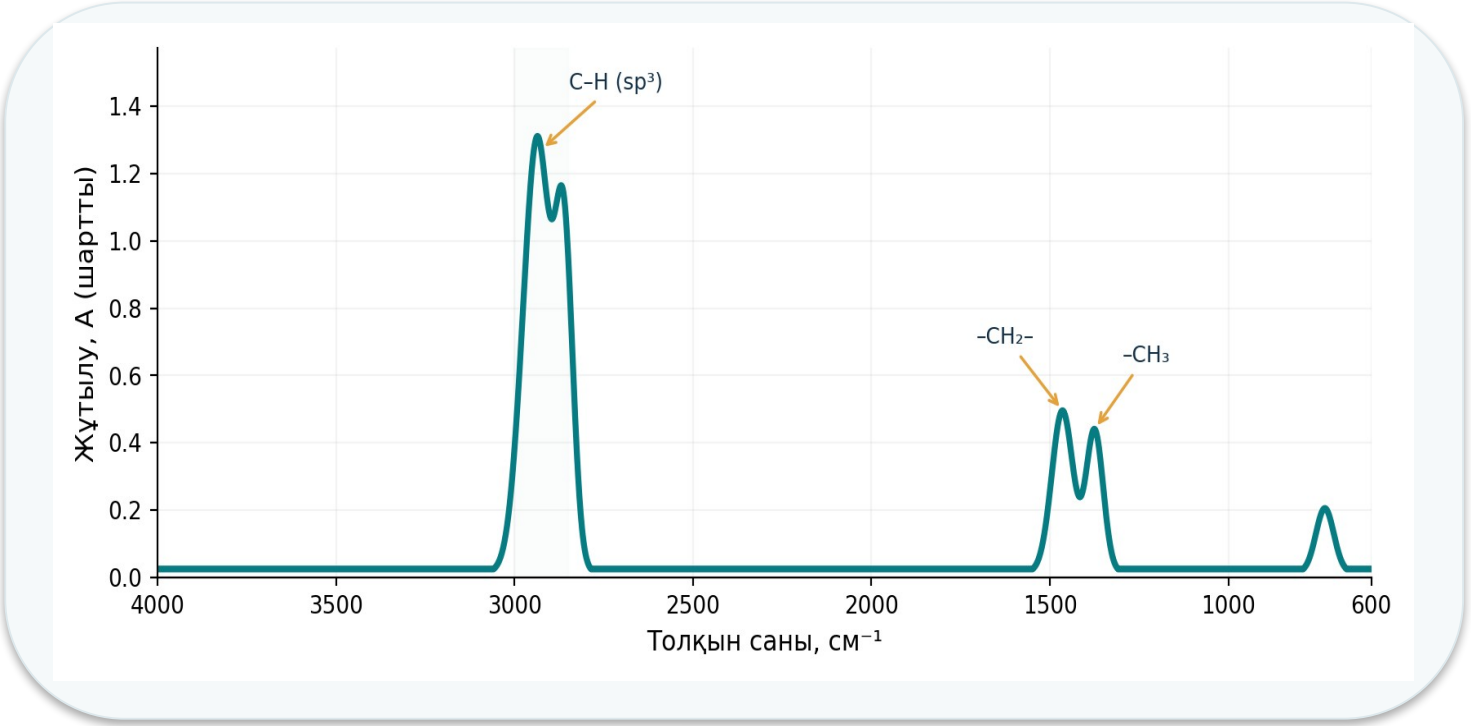
Сипаттамалық жиілік — функционалдық топқа тән шамамен тұрақты жұтылу аралығы, абсолютті «бір ғана сан» емес.

Көмірсутектердің диагностикалық жолақтары

Қосылыс класы	C–H созылуы, $см^{-1}$	Басқа маңызды жолақ	Анықтаушы белгі
Алкандар	3000–2850 (sp^3)	1465; 1375 $см^{-1}$	Қаныққан C–H, 3000-нан төмен
Алкендер	3100–3000 (=C–H)	1680–1620 (C=C)	Қос байланыс + иілу жолақтары
Алкиндер	≈3300 (≡C–H)	2260–2100 (C≡C)	Соңғы алкинде өткір C–H
Ароматты	3100–3000 (Ar–H)	1600–1450 (сақина)	900–690, орынбасуға тәуелді

Маңызды: бір ғана жолақ бойынша қорытынды жасалмайды. Әдетте 2–3 тәуелсіз белгі және толық спектр салыстырылады.

Алкандар: sp³-гибридтенген C–H байланыстары



3000–2850 см⁻¹

C–H созылу тербелістері

≈1465 см⁻¹

–CH₂– деформациясы

≈1375 см⁻¹

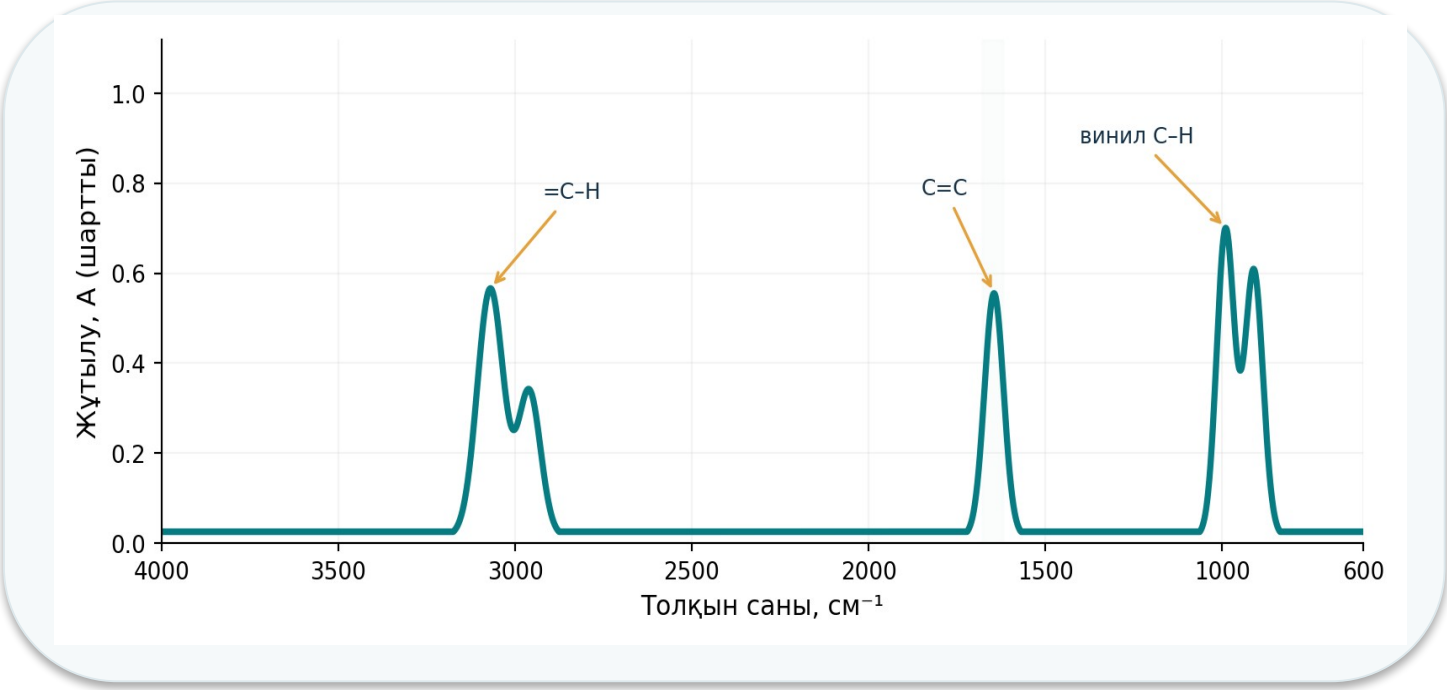
–CH₃ симметриялық иілуі



Мысал: гексан

Ұзын –(CH₂)n– тізбектерінде ≈720 см⁻¹ жолақ байқалуы мүмкін.

Алкендер: C=C және =C–H жолақтары



3100–3000 см⁻¹

=C–H созылу тербелісі

1680–1620 см⁻¹

C=C созылу тербелісі

1000–650 см⁻¹

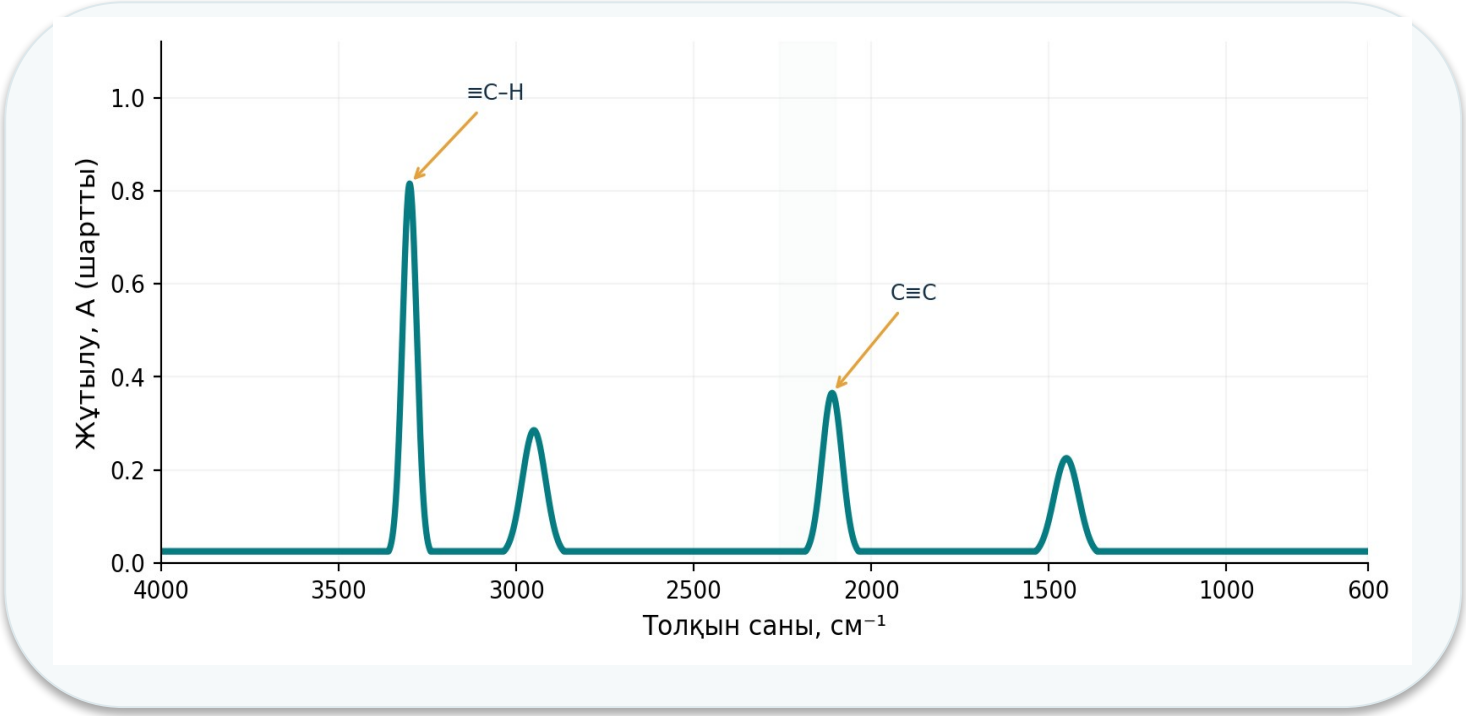
=C–H жазықтықтан тыс иілу



Мысал: гекс-1-ен

Соңғы CH_2=CH– топта ≈990 және 910 см⁻¹ қос жолақ тән.

Алкиндер: C≡C және соңғы ≡C–H жолақтары



≈3300 см⁻¹

Соңғы алкинде ≡C–H тар, өткір жолақ береді.

2260–2100 см⁻¹

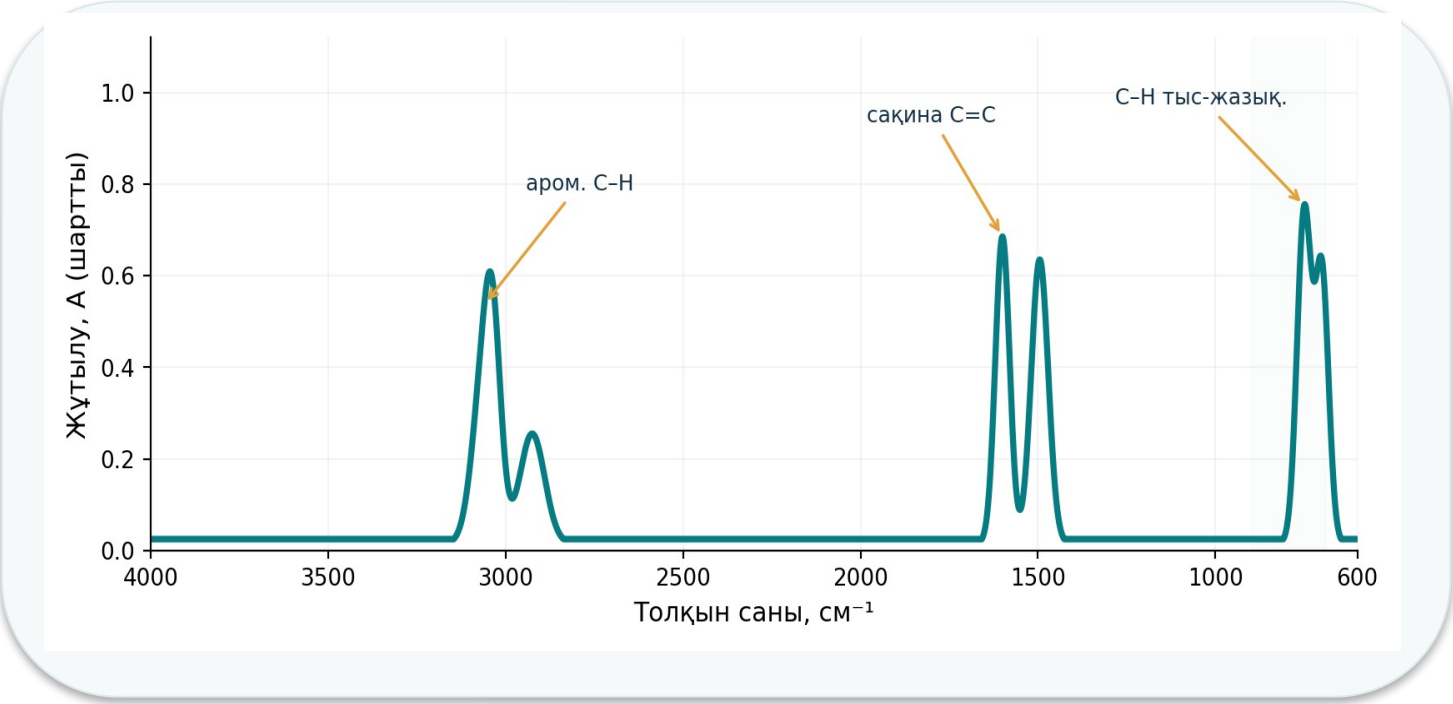
C≡C созылуы: қарқындылығы өзгермелі, көбіне әлсіз.



Мысал: гекс-1-ин

Симметриялы ішкі алкиндерде C≡C жолағы өте әлсіз немесе байқалмауы мүмкін.

Ароматты көмірсутектердің тән жұтылуы



3100–3000 см⁻¹

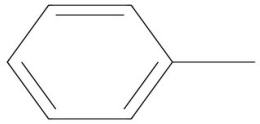
Ароматты C–H созылуы

1600 және 1500 см⁻¹

Сақинадағы C=C тербелістері

900–690 см⁻¹

C–H жазықтықтан тыс иілуі



Мысал: толуол

Сақинадағы орынбасу үлгісін 900–690 см⁻¹ жолақтарының жиынтығы көрсетеді.

Ароматты сақинадағы орынбасу типтері

Ароматты C–H жазықтықтан тыс деформациясының жиілігі бензол сақинасындағы орынбасушылардың орналасуына байланысты өзгереді.

Орынбасу түрі	Шамамен, $см^{-1}$	Интерпретация
Моноорынбасқан	770–730 және 710–690	Көбіне екі айқын жолақ
1,2- (орто-)	770–735	Жиі бір күшті жолақ
1,3- (мета-)	900–860; 810–750; 725–680	Бірнеше жолақ болуы мүмкін
1,4- (пара-)	860–800	Көбіне бір басым жолақ

Бұл аралықтар бағдарлық қана: сақинаның басқа тербелістерімен және стандарттық спектрмен бірге қарастырылады.

C–H байланыстарын салыстыру: sp^3, sp^2, sp

3000 $см^{-1}$ шекарасы алкил C–H және қос байланыс/ароматты C–H жолақтарын ажыратуда пайдалы.

≡C–H (sp)	=C–H, Ar–H (sp^2)	–C–H (sp^3)
≈3300 $см^{-1}$	3100–3000 $см^{-1}$	3000–2850 $см^{-1}$

Назар аударыңыз: ≡C–H жолағы тар және өткір; сутектік байланысы бар O–H аймағы әдетте кеңірек болады.

Нақты затта CH_3, CH_2, ароматты сақина бір мезгілде кездесуі мүмкін: спектрде бірнеше белгі қабаттасады.

Көмірсутектерден тыс функционалдық топтар

Топ	Негізгі жолақ, $см^{-1}$	Сипаты	Қосымша белгі
O–H (спирт/фенол)	3600–3200	Көбіне кең	C–O: 1300–1000
O–H (қышқыл)	3300–2500	Өте кең	C=O: ≈1750–1680
N–H	3500–3300	1–2 жолақ	Амин/амид ортасына тәуелді
C=O	1850–1650	Әдетте күшті	Қышқыл, эфир, амид, кетон
C≡N	2260–2210	Тар	Нитрил жолағы
NO_2	1550 және 1350	Екі күшті жолақ	Нитротопқа тән жиынтық
C–O	1300–1000	Жиі күшті	Спирт, эфир, күрделі эфир

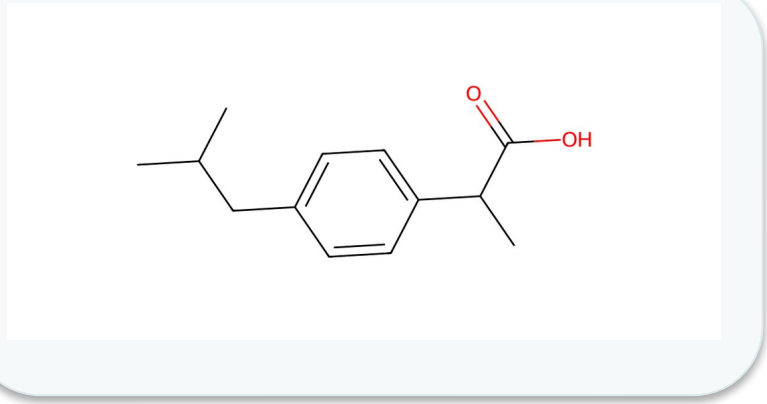
Қышқылдардың O–H жолағы C–H облысымен айтарлықтай қабаттасуы мүмкін.

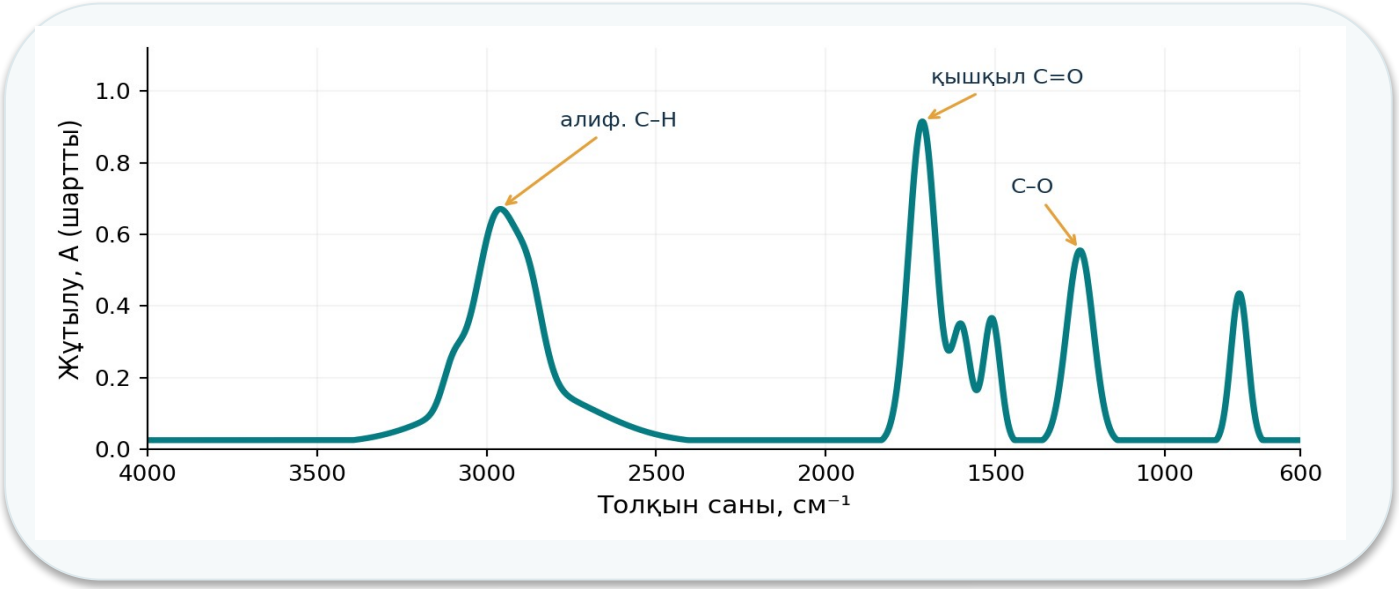
Белгісіз заттың ИҚ-спектрін интерпретациялау

1	**3700–2500 см⁻¹**	O–H, N–H және sp / sp^2 / sp^3 C–H белгілерін бағалау.
2	**2500–2000 см⁻¹**	C≡C және C≡N жұтылуын іздеу; өте әлсіз жолақтар болуы мүмкін.
3	**2000–1500 см⁻¹**	Карбонил C=O, алкен C=C және ароматты сақина жолақтарын анықтау.
4	**1500–600 см⁻¹**	C–O, CH_3/CH_2 иілуі, ароматты және алкен C–H ерекшеліктері.
5	**Қорытынды**	Бірнеше жолақты өзара тексеру, толық спектрді эталонмен салыстыру.

Жолақтың орны + қарқындылығы + пішіні + басқа топтармен сәйкестігі = негізделген тұжырым.

Дәрілік зат мысалы: ибупрофен



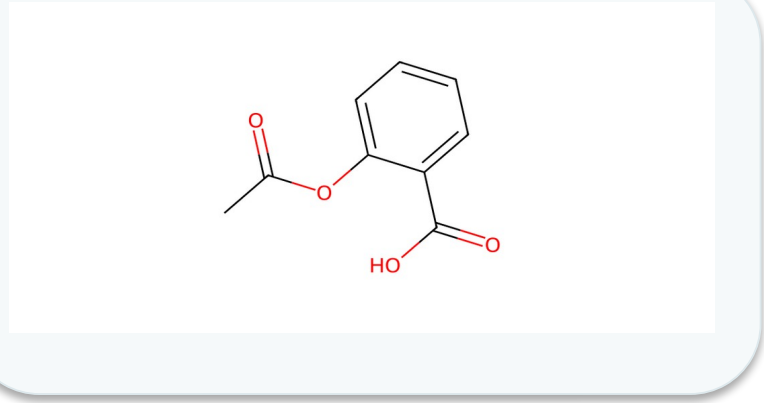


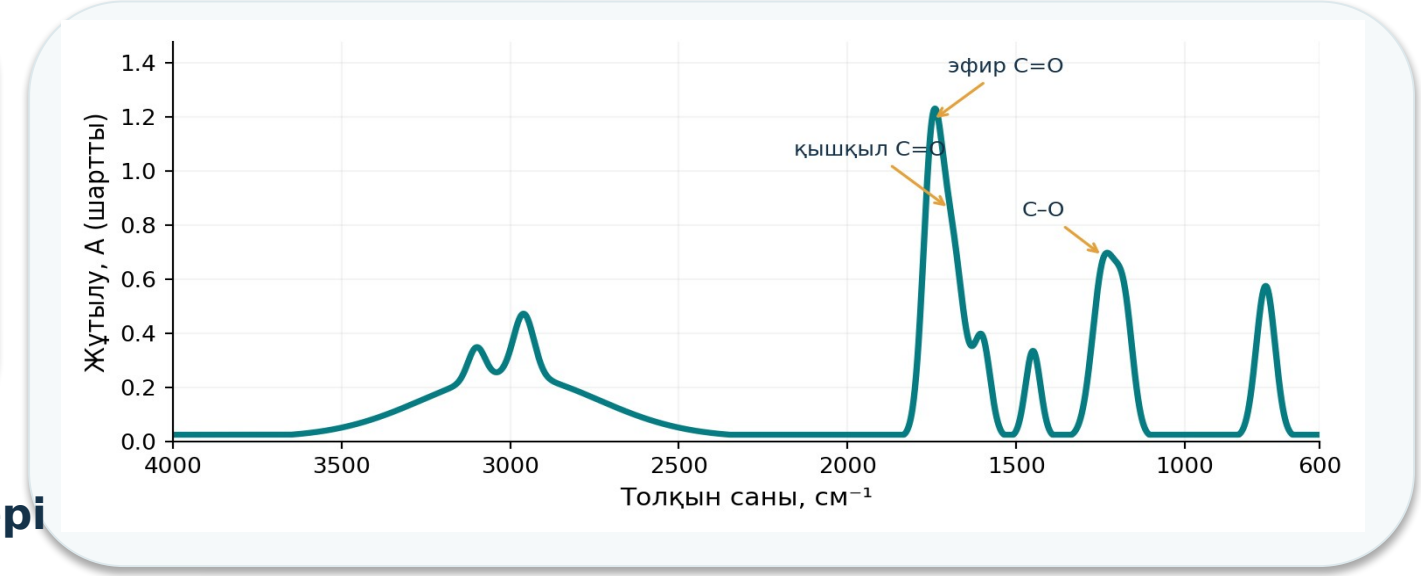
Құрылымдағы топтар

- Ароматты сақина: ≈1600, 1500 см⁻¹
- Алкил C–H: 3000–2850 см⁻¹
- Карбон қышқылы: C=O және кең O–H

Спектр — оқу үшін модельденген сызба. Заттың нақты ИҚ-спектрін эталонмен тексеру керек.

Дәрілік зат мысалы: ацетилсалицил қышқылы





Қосылыстың спектрлік белгілері

- Екі карбонил тобы: эфир және карбон қышқылы.
- Ароматты сақина: ≈1600 және ≈1500 см⁻¹.
- Қышқылдың кең O–H жолағы; C–O аймағы.

Екі C=O жолағының орны ортаға және қатты күйдегі өзара әсерге тәуелді. Сызба — иллюстрация.

Қорытынды және пайдаланылған әдебиеттер

1. **Алкан, алкен, алкин және ароматты жүйелердің C–H / C=C / C≡C жиіліктері ерекшеленеді.**
2. **Функционалдық топтар бірнеше диагностикалық жолақтың жиынтығымен анықталады.**
3. **ИҚ-талдау нәтижесін эталон спектрімен, үлгі күйімен және өлшеу шарттарымен бірге бағалау қажет.**

Пайдаланылған әдебиеттер

1. NIST. Middle-Range Infrared Absorption Correlation Charts (2012).
2. Northern Illinois University. Typical IR Absorption Frequencies for Common Functional Groups.
3. Michigan State University. Infrared (IR) Spectroscopy — Organic Chemistry Lab Manual.