كلية : التربية للعلوم الصرفة

القسم او الفرع : الكيمياء

المرحلة : الرابعة

أستاذ المادة : أ.م.د. نبيل ياسين جمعة الهيتي

اسم المادة باللغة العربية : التشخيص العضوي

اسم المادة باللغة الإنكليزية : Organic Identification

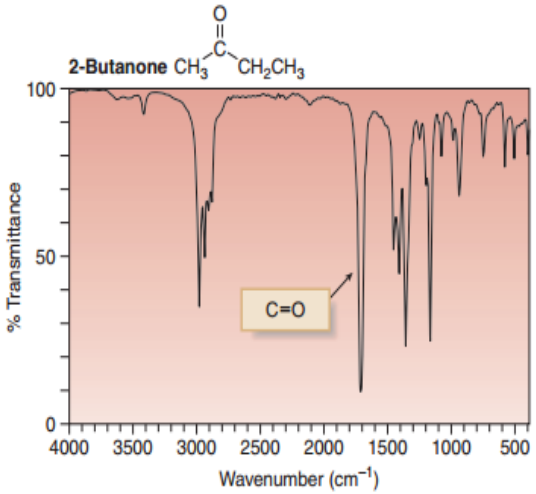
اسم المحاضرة الرابعة باللغة العربية : مركبات الكاربونيل

اسم المحاضرة الرابعة باللغة الإنكليزية : Carbonyl Compounds

المحاضرة الرابعة

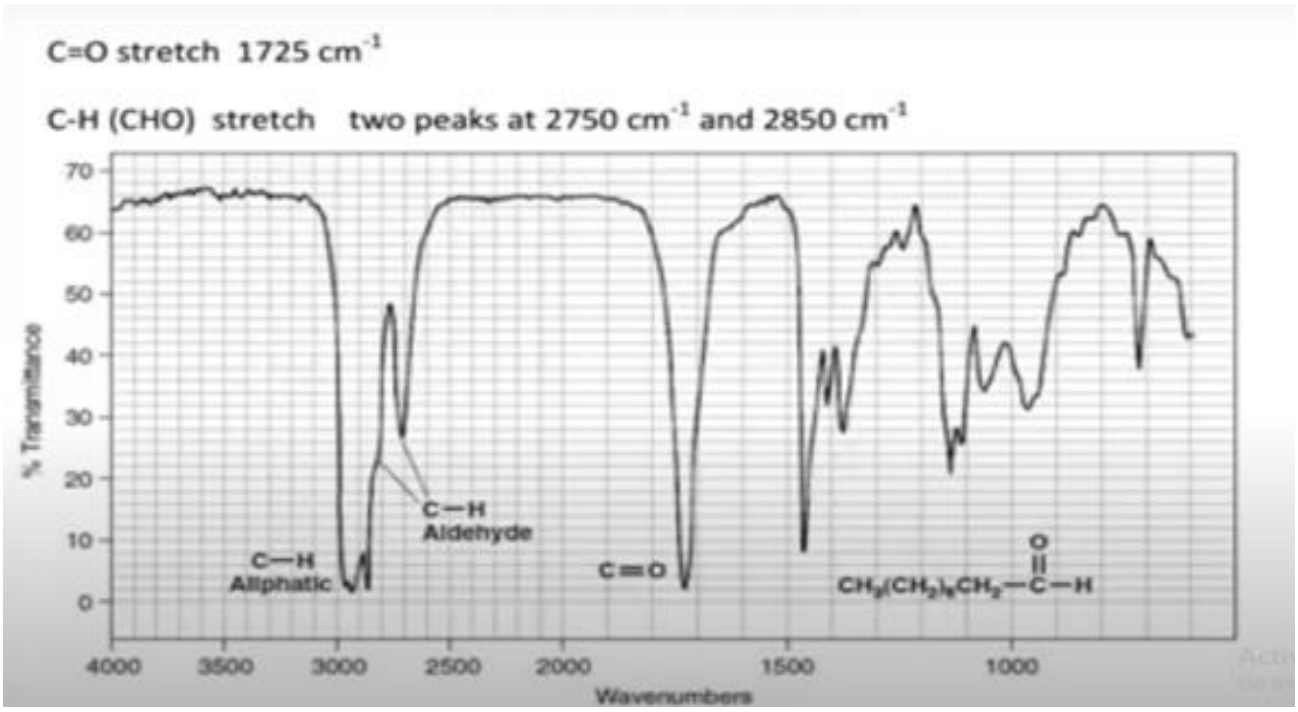
ومن الامثلة على مركبات الكاربونيل :

أ - الكيتونات : Ketones



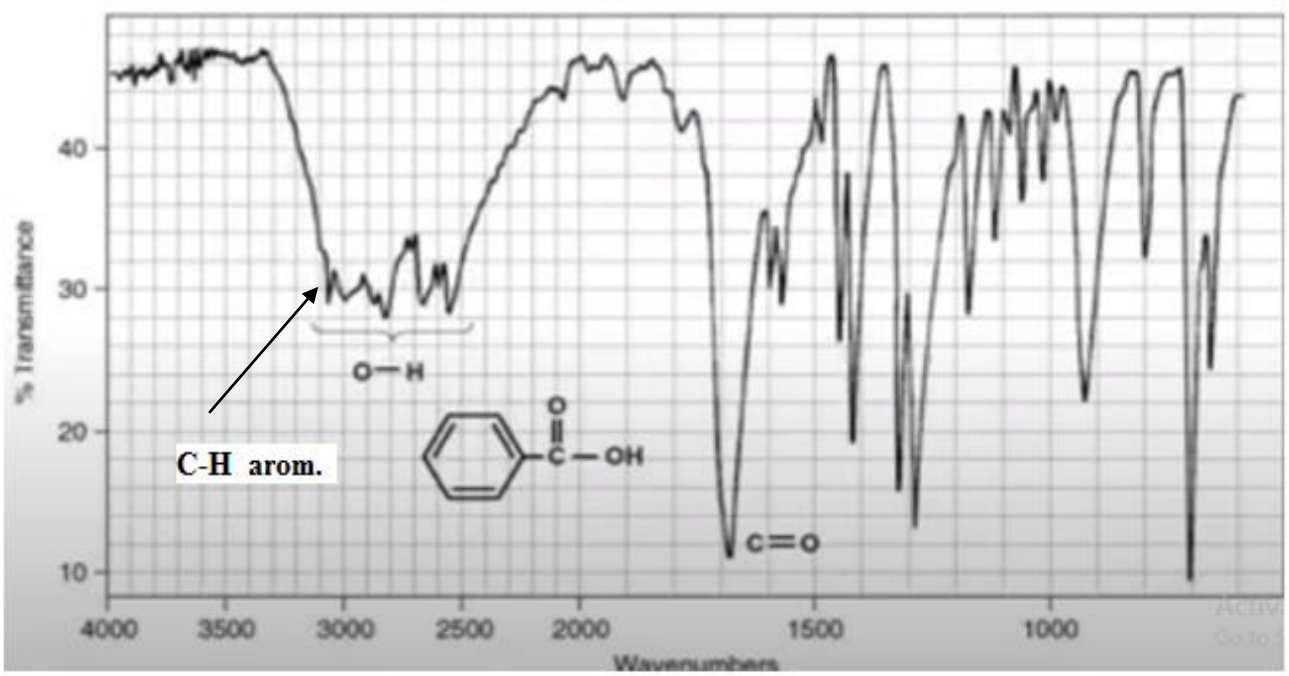
- The **C=O** group in the ketone $CH_3COCH_2CH_3$ shows a strong absorption at ~1700 cm^{-1}.
- The exact location of the C=O absorption depends on the particular type of carbonyl group, whether the carbonyl carbon is part of a ring, and whether there are nearby double bonds. These details are discussed in Chapters 21 and 22.

ب - الالديهايدات : Aldehydes



ج – الحوامض الكاربوكسيلية : Carboxylic acids

يمكن تميز الحوامض الكاربوكسيلة عن المركبات الكاربونيلية الاخرى بواسطة طيف (IR) حيث ان حزمة امتصاص مجموعة (C=O) تكون بشدة عالية عند المدى ($1730 - 1700\ cm^{-1}$) كما تعطي الحوامض الكاربوكسيلية حزمة امتصاص مجموعة (OH) عريضة جداً عند المدى ($3300-2500\ cm^{-1}$) وهناك ملاحظة اخرى وهي ان التأصر الهيدروجني الجزيئي البيني و الضمني يسبب امتصاص مجموعة الكاربونيل في تردد أوطأ فيما يخص الحوامض الكاربوكسيلية .



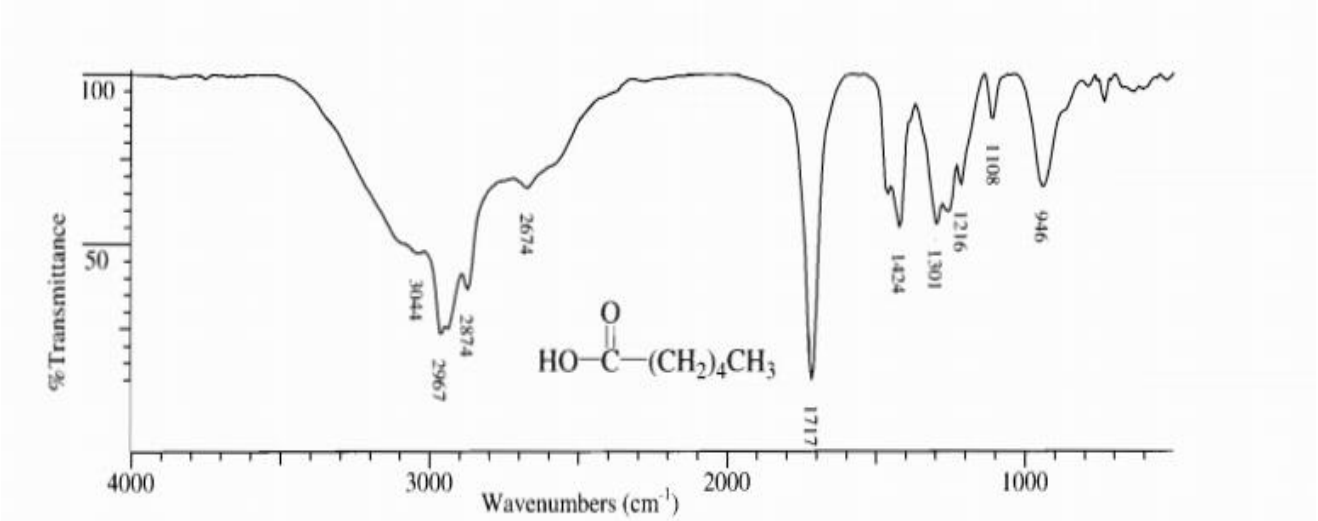
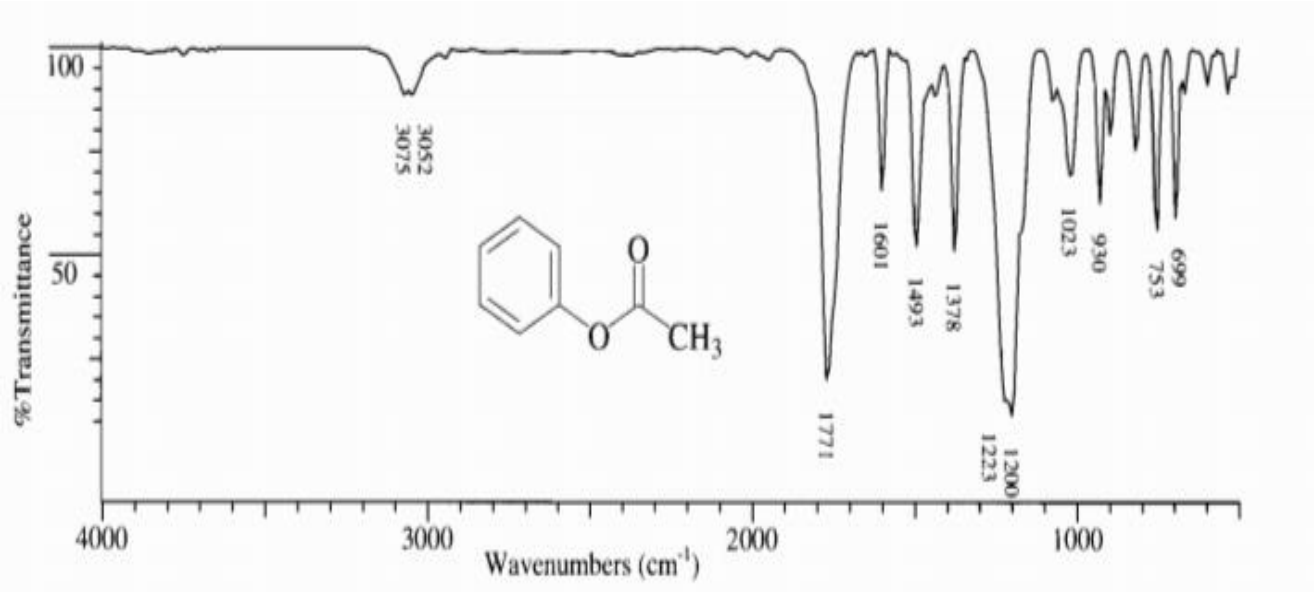


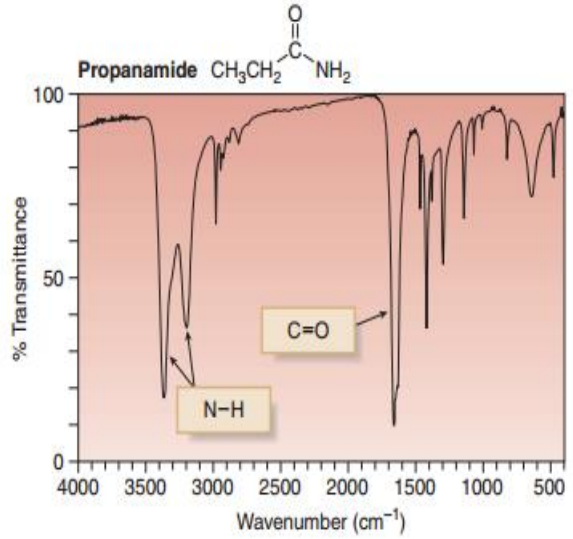
FIGURE 2.23. Hexanoic acid. Broad O—H stretch, 3300–2500 cm^{-1}. C—H stretch (see Figure 2.8), 2967, 2874, 2855 cm^{-1}. Superimposed upon O—H stretch. Normal, dimeric carboxylic C=O stretch, 1717 cm^{-1}. C—O—H in-plane bend, 1424 cm^{-1}. C—O stretch, dimer, 1301 cm^{-1}. F. O—H out-of-plane bend, 946 cm^{-1}.

د – الاسترات : Esters

يمكن تميز الاسترات عن المركبات الكاربونيلية الاخرى بواسطة طيف (IR) حيث انها تعطي بالاضافة الى امتصاص مجموعة الكاربونيل عند المدى ($1710 cm^{-1}$ -1780) حزمتين مهمتين في تشخيص الاسترات تعود للمجموعة (C-O-C) الاسترية الاولى عند المدى ($1300-1160 cm^{-1}$) و الحزمة الثانية عند المدى ($1150-1035 cm^{-1}$) و تعتبر هاتين الحزمتين من الحزم المهمة جدا في تشخيص الاسترات .

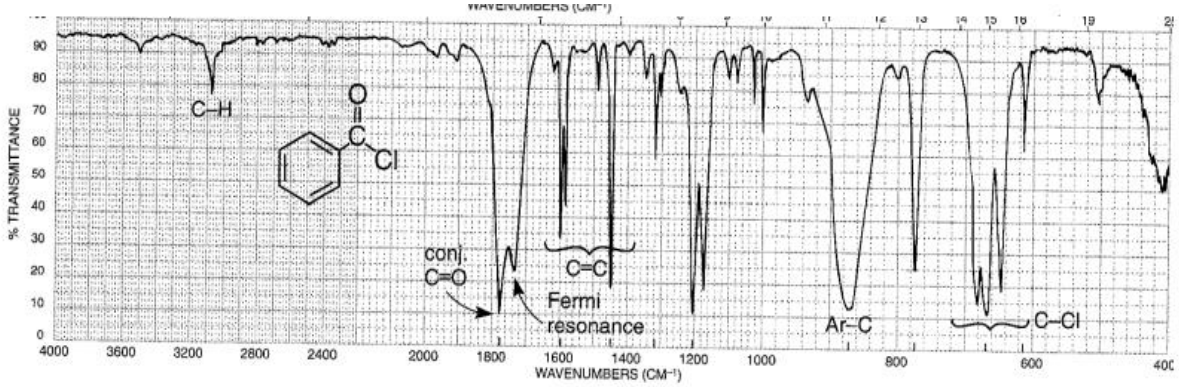


هـ - الاميدات : Amides

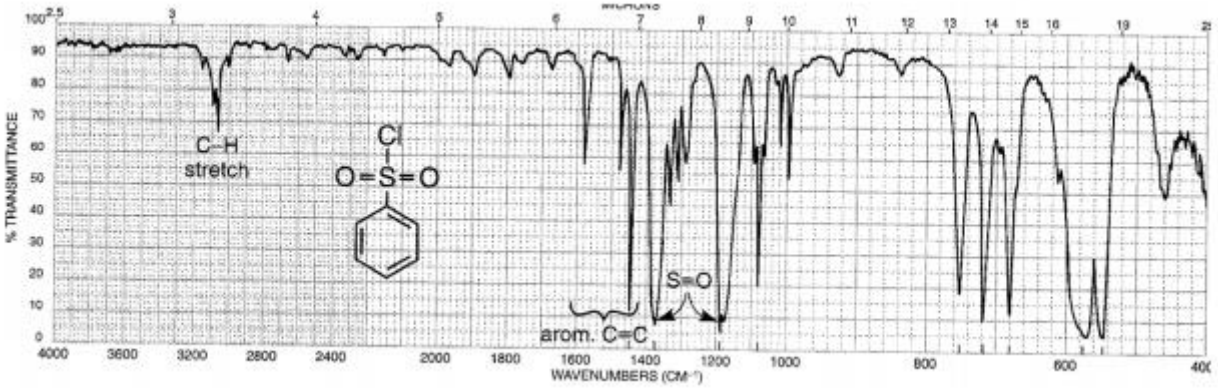


- The **amide** $CH_3CH_2CONH_2$ exhibits absorptions above 1500 cm^{-1} for both its **N–H** and **C=O** groups:
  - N–H (two peaks) at 3200 and 3400 cm^{-1}
  - C=O at 1660 cm^{-1}

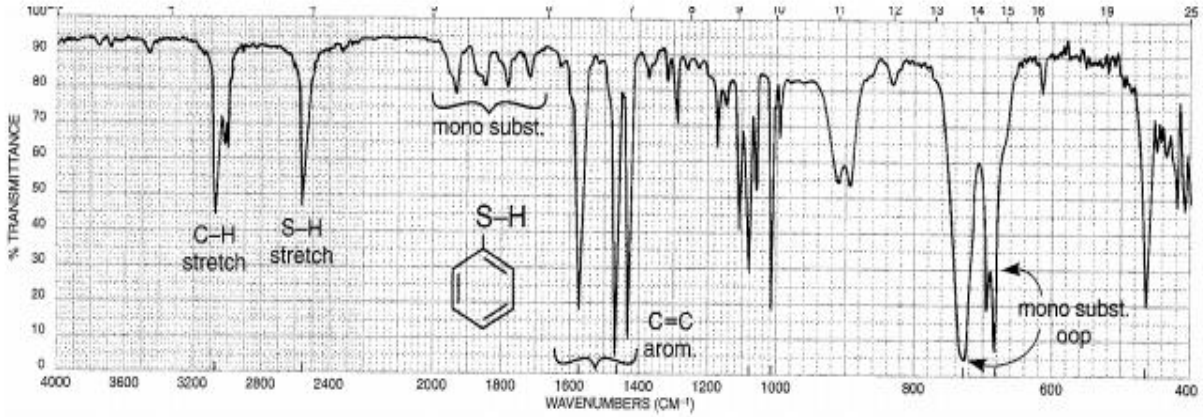
و- هاليدات الحوامض : Acids halides



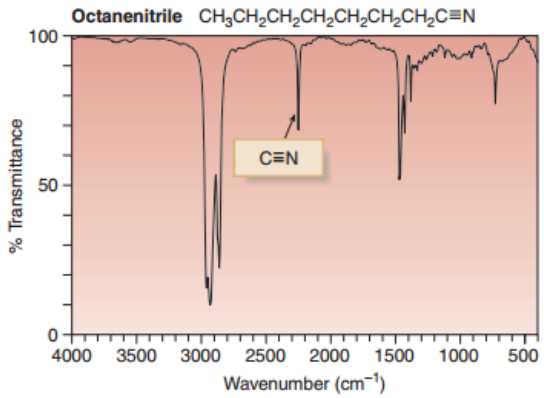
11 - مركبات السلفونيل : Sulfonyl Compounds



12 - المركبتان : Mercaptan or Thiol



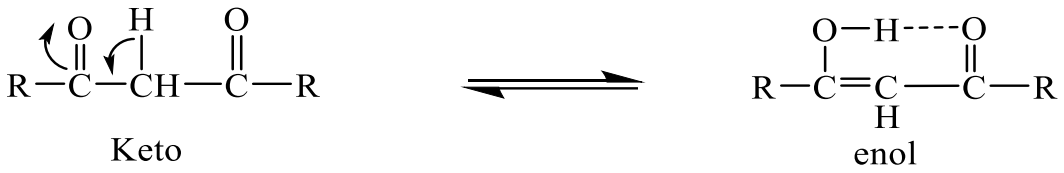
13 - النتريلات : Nitrile



- The **C≡N** group of the **nitrile** $CH_3(CH_2)_6CN$ absorbs in the triple bond region at ~2250 cm^{-1}.

14 – الانظمة التوتومرية :

تعتبر مطيافية الاشعة تحت الحمراء (IR) تقنية مهمة في دراسة الانظمة التوتومرية (الظاهرة التوتومرية) (Toutomerism) وهي المركبات التي لها القابلية على تكوين شكل الاينول و الكيتون وتحصل هذه الظاهرة في المركبات ثنائية الكيتون- بيتا (3,1- ثنائي الكيتون). ويمكن توضيح الظاهرة التوتومرية في مثل هذه المركبات بالشكل التالي :



ويمكن تشخيص هذه الظاهرة بطيف (IR) فاذا اعطى المركب ثنائي الكيتون حزمة امتصاص مجموعة الكاربونيل عند المدى (1700 cm^{-1}) (الكيتونية) مع حزمة امتصاص مجموعة الكاربونيل دون (1700 cm^{-1}) اي بحدود (1690 - 1640 cm^{-1}) (الاينولية) مع حزمة امتصاص مجموعة الهيدروكسيل الاينولية عند المدى (3200-2500 cm^{-1}) يدل على ان هذا المركب يمتلك ظاهرة توتومرية . اما اذا لم يعطي المركب ثنائي الكيتون - بيتا جميع هذه الحزم اعلاه و اعطى فقط حزمة مجموعة الكاربونيل الكيتونية عند المدى (1700 cm^{-1}) فان ذلك يدل على ان هذا المركب لايمتلك الظاهرة التوتومرية .

15 – ملاحظات اخرى :

أ - يجب ان يعطي الطيف حزم حادة وقوية .
ب - يجب ان يكون المركب العضوي الذي تاخذ منه العينة جاف ونقي لان الشوائب قد تعطي حزم امتصاص تتداخل مع حزم امتصاص المركب العضوي وبالتالي يحدث خطأ في التشخيص .
ج - يجب معايرة الجهاز وتصفيره قبل اخذ الطيف وذلك للحصول على حزم في موقعها الصحيح .
د - يجب تهيئة وتحضير النموذج بشكل جيد .
هـ- يجب ان يكون مؤشر النفاذية(Transmittance) فوق 60 % على الاقل للحصول على حزم واضحة.

(المجاميع الفعالة واماكن ظهورها في طيف IR)

العدد الموجي بـ (cm^{-1}) Wave number	المجموعة الفعالة Functional Group	المركبات العضوية Organic Compounds
3000 - 2850	str. C-H	الالكانات Alkanes
1480 - 1350	ben. C-H	
1500 - 800	C-C	
2960	$-CH_3$	
3100 - 3010	=C-H	الالكينات Alkenes
1680 - 1620	C=C	
3300 - 3200	≡C-H	الالكاينات Alkynes
2300 - 2100	C≡C	
3100 - 3000	str. C-H	المركبات الاروماتية Aromatic compounds
900 - 700	ben. C-H	
1600 - 1400	C=C	
3700 - 3200	OH	الكحولات والفينولات Alcohols and phenols
1230 -1000	C-O	
1230-1000	C-O-C	الايثرات Ethers
1850 - 1550	**C=O**	مركبات الكاربونيل
1740 -1690	C=O	الالديهايدات Aldehydes
2830 - 2650	C-H	
1730 -1650	C=O	الكيتونات Ketones
1720	C=O	Acetone
1780 -1710	C=O	الاسترات Esters
(1300-1160),(1150-1035)	C-O	
1730 -1700	C=O	الحوامض الكاربوكسيلية Carboxylic acids
3300 - 2500	O-H عريضة	
1570 - 1540	C=O	ايونات و املاح الحوامض

كلوريدات الحوامض Acid chlorides	C=O	1810 - 1790
انهدريدات الحوامض Anhydrides	C=O	1820 - 1760
الاميدات Amides	C=O اولي	1700 - 1640
	C=O ثانوي	1650 - 1520
	N-H	3500 - 3200
	C-N	1640 - 1500
الامينات Amines	N-H	3500 - 3200
مركبات α,β-diketone	C=O الكيتونية	1700
كاربونيل الاينول	C=O الاينولية	1690 - 1640
النتريلات Nitriles	C≡N	2260 - 2220
قواعد شف ,البريدينات,الكوينولينات,البرميدينات	C=N	1690 - 1630
مركبات الازو Azo Com.	N=N	~ 1500
المركبتان Mercaptan	S-H	2600 - 2500
مركبات السلفونيل Sulfones Com.	S=O	1300 - 1100
مركبات النترو Nitro Com.	NO_2	1550 - 1300
هاليدات الالكيل Alkyl Halides	C-F	1400 - 1000
	C-Cl	800 - 600
	C-Br	600 - 500
	C-I	500

ملاحظة : تم التركيز في هذا الجدول على حزم الامتصاص الامتطاطية (Stretching) لكل مجموعة فعالة في الطوائف العضوية (لانها الاساس في التشخيص) دون التركيز على حزم الامتصاص الانحنائية وذلك لتسهيل الحفظ والسيطرة على معرفة مواقع حزم الامتصاص للمجاميع الفعالة وتشخيصها .