- حساب ε (من معطيات الطيف)

$$Ln\frac{I_o}{I} = \varepsilon\, c\ell$$

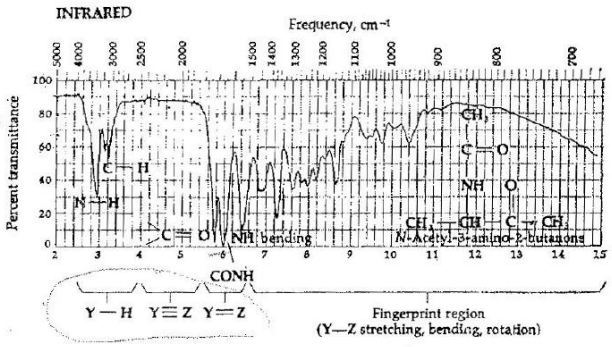
$$\varepsilon = \frac{Ln\frac{I_o}{I}}{c\ell} = \frac{0.57}{2.32\times10^{-4}\times0.2}$$

$$= \frac{0.57\times10^{4}}{0.464} = 12.3\times10^{3}$$

مثال على طيف الأشعة تحت الحمراء

تكون فيه حزم الامتصاص على هيئة نهايات صغرى (تشبه النوازل)

ويسجل في هذا الطيف النفوذية الضوئية Transmittance



شكل 4-6 طيوف امتصاص نموذجية

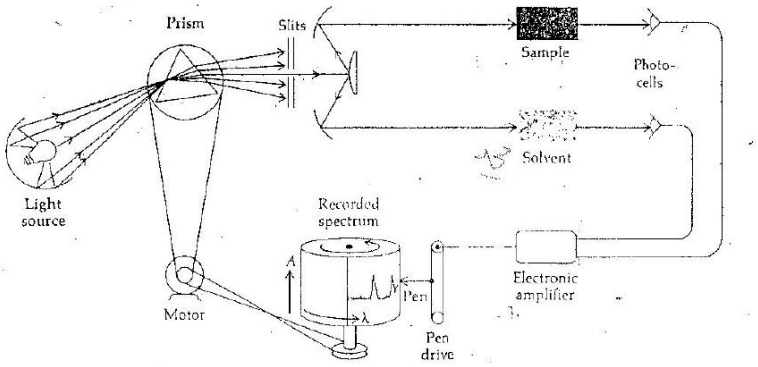
N-أسيتيل-3-أمينو-2-بوتانون

$CH_3-CH(NH-C(=O)CH_3)-C(=O)-CH_3$

جهاز المطياف الضوئي:

- يولد المنبع الضوئي حزمة من الأطوال الموجية
- تفرق الحزمة الضوئية بواسطة موشور ثم تسقط على شق ضيق يسمح بمرور حزمة ضوئية مونوكروماتية (وحيدة اللون)

- تفرق الحزمة الضوئية وحيدة اللون إلى حزمتين تمر إحداها في العينة المنحلة في المذيب والثانية في المذيب (المحل) النقي.
- تقاس شدة كل من الحزمتين بخلايا كهرضوئية وتطرح الأخيرة من الأولى إلكترونياً.
- نحصل على شدة الامتصاص أو النفوذية على شكل إشارة تميز كل مركب عن غيره.
- تسجل الشدة أوتوماتيكياً بدلالة الطول الموجي المستخدم.
- يجب أن يولد المنبع الضوئي أطوال موجية مستمرة تتناسب مع المنطقة الطيفية.



شكل 7-4 جهاز سبكتروفوتومتر ـ مطياف ضوئي لتسجيل طيوف الامتصاص.

- يجب أن تكون مادة الموشور ومادة خلية العينة السائلة شفافة تجاه الأطوال الموجية، وفيما يلي بعض المتطلبات العملية.

المنطقة الطيفية	المنبع الضوئي	المادة المصنوع منها خلايا المحلول والموشور
فوق البنفسجي (UV)	مصباح الهيدروجين	الكوارتز
المرئي (Vis)	مصباح التنغستين	الزجاج أو الكوارتز
تحت الأحمر (IR)	توهج الآجر	$Nacl$ أو KBr

الواحدات المستخدمة في طيوف UV وIR

آ- طيوف UV: الميكرون μ أو الميللي ميكرون μm = النانومتر (nm)

وهي وحدات متفق عليها من قبل الكيميائيين.

ب- طيوف IR: لا يوجد إجماع عليها والواحدات الشائعة هي cm^{-1}

(واحدة العدد الموجي) على أساس أنها تتناسب طرداً مع الطاقة.

العدد الموجي $(\bar{\vartheta})$ هو عدد الموجات في اسم وهو مقلوب العدد الموجي

$$c = \vartheta\lambda \Rightarrow \vartheta = \frac{c}{\lambda}$$

$$E = h\vartheta = \frac{hc}{\lambda}$$

يتناسب الطول الموجي عكساً مع الطاقة $\lambda = \frac{h\vartheta}{E}$

يتناسب العدد الموجي طرداً مع الطاقة $\bar{\vartheta} = \frac{1}{\lambda} = \frac{E}{hc}$

واحدة العدد الموجي $\bar{\vartheta}$ (في المجال $25\mu - 2\mu$)

$$\bar{\vartheta} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2\Gamma} = \frac{1}{2} \times \frac{1}{10^{-4}} = \frac{1}{2} \times 10^4 = \frac{10000}{2} = 5000\, cm^{-1}$$

$$= \frac{1}{25\mu} = \frac{1}{25} \times \frac{1}{10^{-4}} = \frac{1}{25} \times 10^4 = \frac{10000}{25} = 400\, cm^{-1}$$

- الوحدة الأخرى التي يستعملها الكيميائيون هي الميكرون (من $\mu 25 - \mu 2$)
- تستعمل واحدة الميكرون في طيوف (UV و Vis و IR) ولكنها تتناسب عكساً من الطاقة.

ملاحظة:

- عندما يمر ضوء ذو طول موجة معينة من العينة فإن الإلكترونات في حالة UV تمتص جزءاً من الطاقة فيخرج الضوء بشدة أقل يمكن تسجيلها بالأجهزة.
- لكي ينتقل إلكترون من مدار إلى آخر أعلى طاقة فإنه يمتص طاقة من الضوء عند طول موجة معين (أي ذي طاقة معينة)، لذا يتم تدوير الموشور كي يكون الضوء الذي يمر في العينة ذا طاقة معينة وهي الطاقة المرغوبة.

وفيما يلي ترتيب مستويات طاقة المدارات:

$$\sigma_{15} \langle \sigma^*_{15} \langle \sigma_{25} \langle \sigma^{*1}_{25} \langle \sigma_{2p_x} \langle \pi_{2p_y} = \pi_{2p_z} \langle \pi^*_{2p_y} = \pi^*_{2p_z} \langle \sigma^*_{2p_x}$$