

Phân tích phổ IR

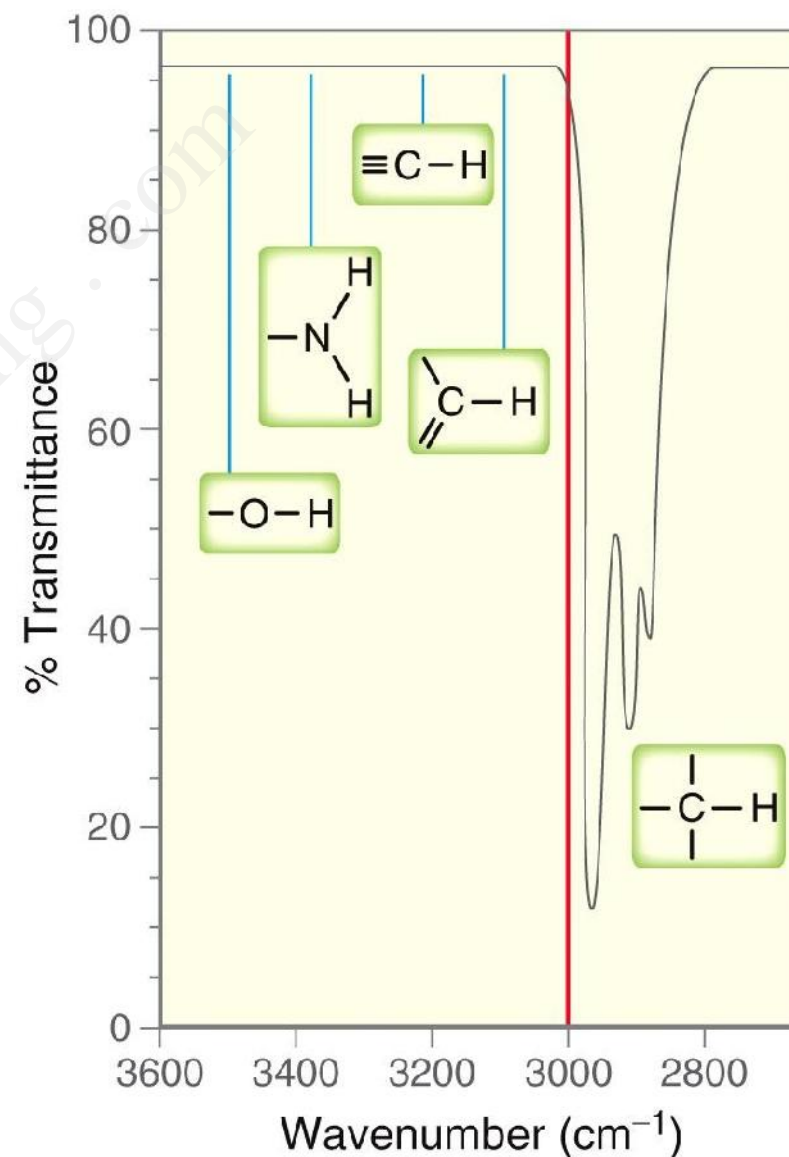
- Dựa vào bảng
 - Các cấu trúc thường gặp khi phân tích IR
1. Tập trung vào vùng nhóm chức ($> 1500 \text{ cm}^{-1}$)
 - a) $1600\text{-}1850 \text{ cm}^{-1}$ – vùng liên kết đôi
 - b) $2100\text{-}2300 \text{ cm}^{-1}$ – vùng liên kết ba
 - c) $2700\text{-}4000 \text{ cm}^{-1}$ – liên kết X-H
 - d) Phân tích số sóng, cường độ và hình dạng của các mũi
 2. Có nhóm C=O không
 - a) $1820 - 1660 \text{ cm}^{-1}$
 - b) Cường độ lớn
 - c) Độ rộng trung bình

Phân tích phổ IR

- Thông thường, cấu trúc phân tử có thể được xác định bằng phổ hồng ngoại.

2. Tập trung vào vùng 2700-4000 cm^{-1} (X-H) \longrightarrow

- Đưa ra kết luận:



Phân tích phổ IR

1. Tập trung vào vùng nhóm chức ($> 1500 \text{ cm}^{-1}$)
2. Có nhóm C=O không
 - a) $1820 - 1660 \text{ cm}^{-1}$
 - b) Cường độ lớn
 - c) Độ rộng trung bình
3. Có C=O

COOH	NH	COOR	(RCO) ₂ O	CHO	CO
Mũi rộng của OH 3400-2400	Mũi trung bình N-H 3400-3300 NH hay NH ₂	Mũi cao C-O 1300-1000	Mũi cao C=O 1810-1760 Hai mũi cách nhau 60cm ⁻¹	Mũi trung bình C-H 2850-2750	Còn lại

Phân tích phổ IR

1. Tập trung vào vùng nhóm chức ($> 1500 \text{ cm}^{-1}$)
2. Có nhóm C=O không
3. Không có C=O

ROH	C=C	ArOH
Mũi rộng của OH 3600-3300	Mũi thấp C=C 1650	Mũi TB-cao C=C 1650-
Mũi C-O 1300-1000	Các mũi C-H bên trái 3000	1450
		Các mũi C-H bên trái 3000

4. Có nổi ba không

C≡N	C≡C
Mũi nhọn TB của CN 2250	Mũi nhọn thấp C=C 2150
	Các mũi $\equiv\text{C-H} \sim$ 3300

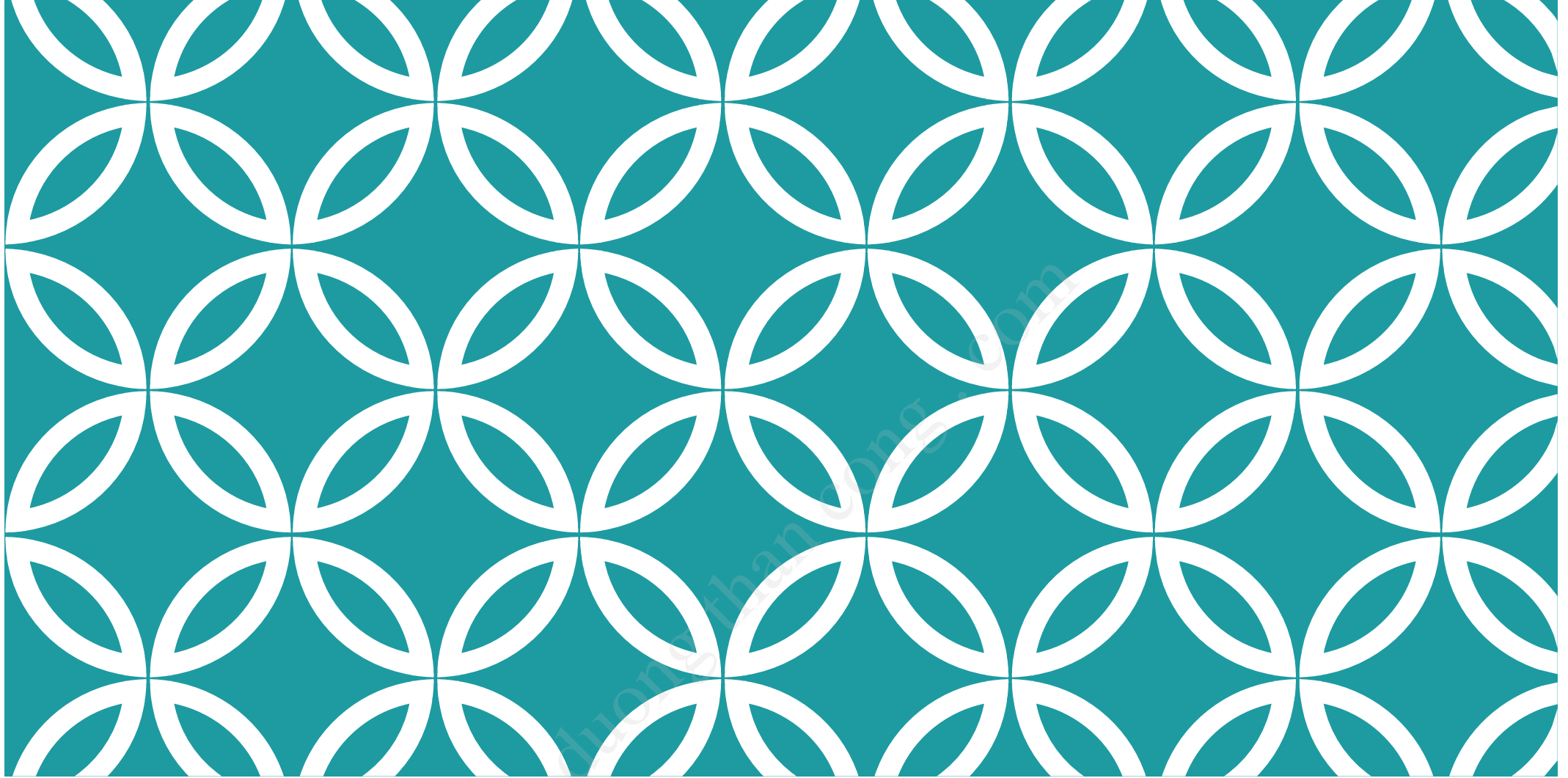
Phân tích phổ IR

1. Tập trung vào vùng nhóm chức ($> 1500 \text{ cm}^{-1}$)
2. Có nhóm C=O không
3. Không có C=O
4. Có nối ba không
5. Có nhóm NO_2 không

Hai mũi cao NO_2 **1600-1500** và **1390-1300**

6. Không có nhóm chức nào \Rightarrow alkane

Phổ đơn giản với mũi C-H bên phải **3000** và mũi khoảng **1450, 1375**



CÁC VÍ DỤ |

1. Alkanes – liên kết C-C và C-H

- Dao động kéo giãn và biến dạng C-C
1360-1470 cm^{-1}
 - LK $\text{CH}_2\text{-CH}_2$ 1450-1470 cm^{-1}
 - LK $\text{CH}_2\text{-CH}_3$ 1360-1390 cm^{-1}
- Dao động kéo giãn sp^3 C-H 2800-3000 cm^{-1}

Octane

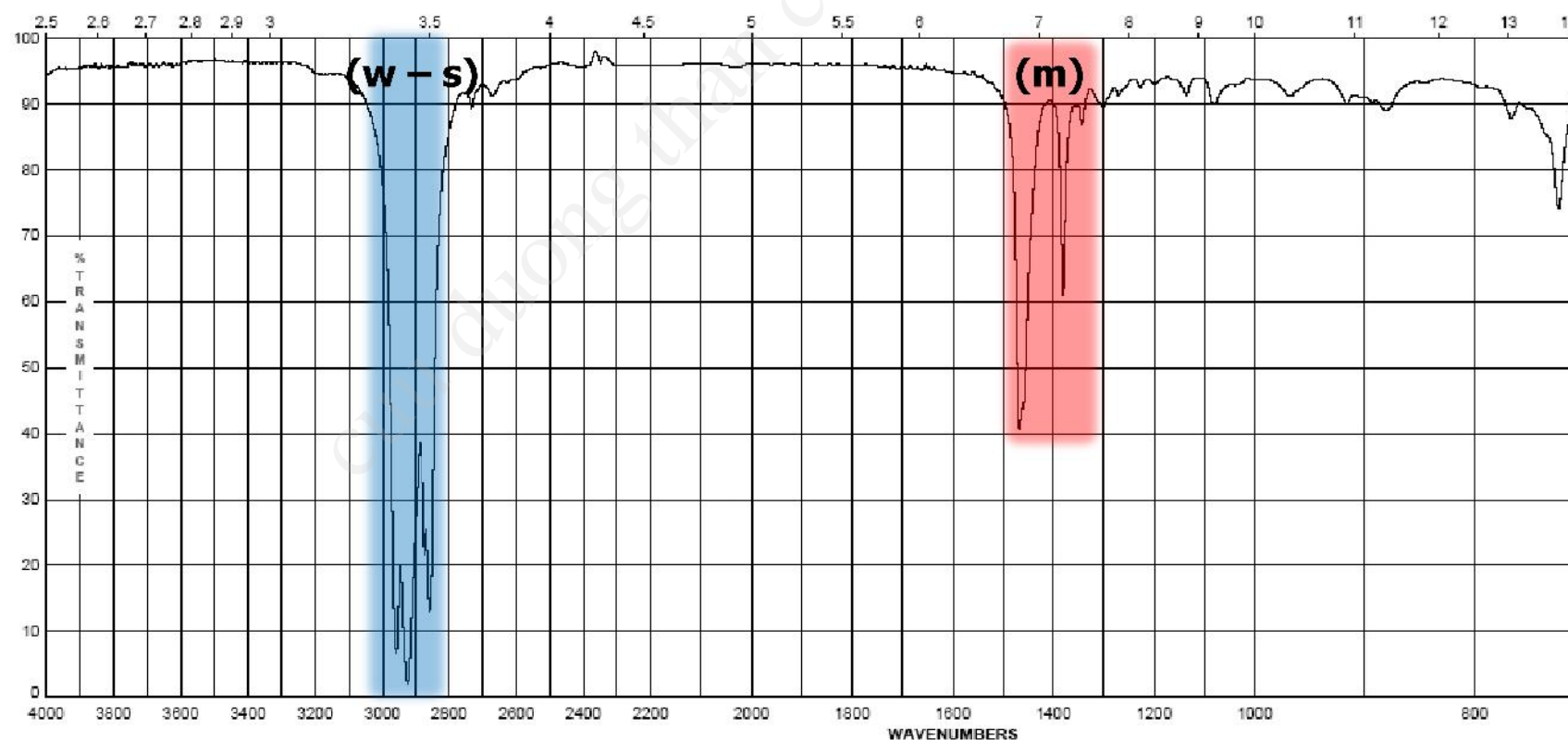
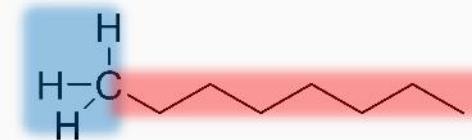


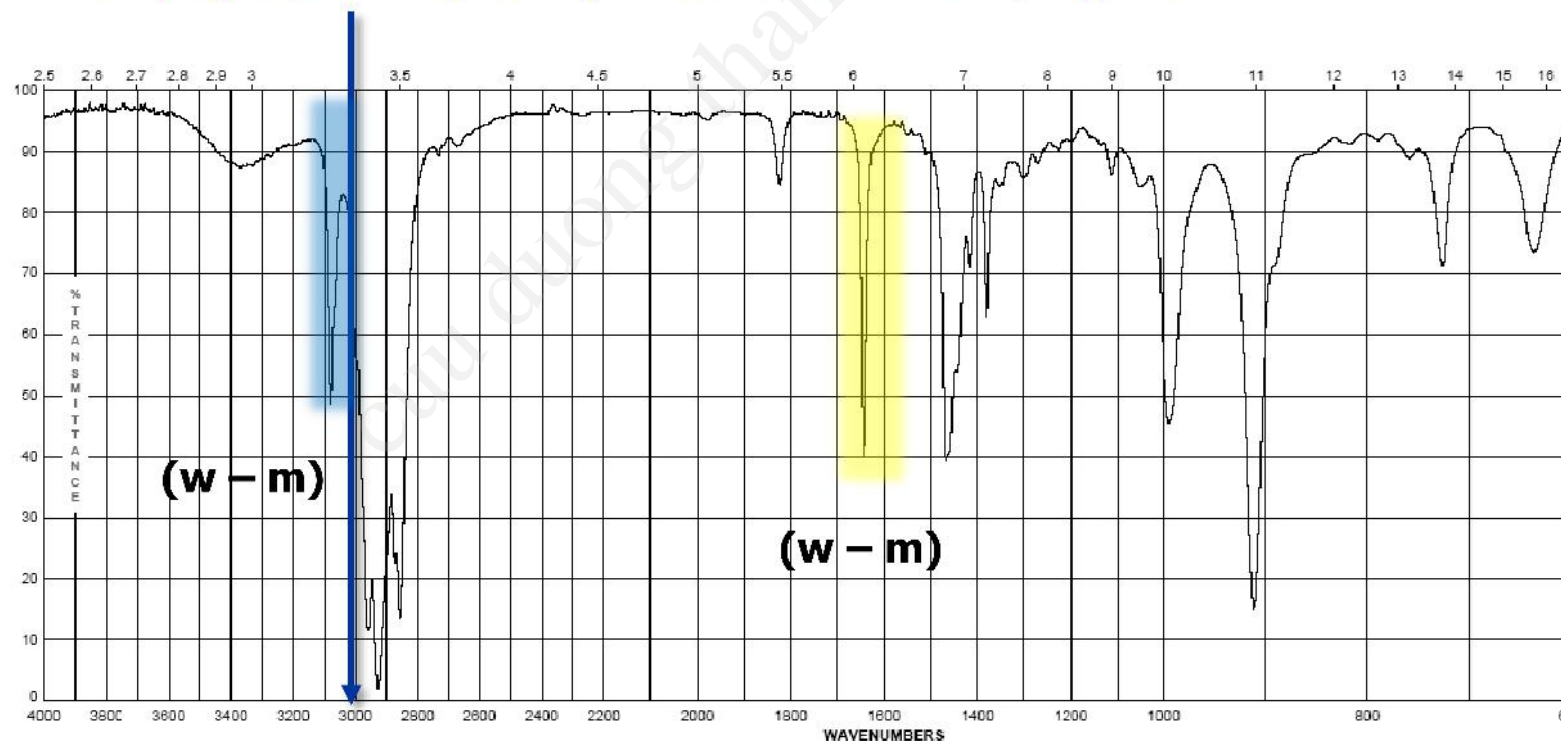
Table 4.1 Characteristic infrared bands of aliphatic hydrocarbons

Wavenumber (cm^{-1})	Assignment
<i>Alkanes</i>	
2960	Methyl symmetric C–H stretching
2930	Methylene asymmetric C–H stretching
2870	Methyl asymmetric C–H stretching
2850	Methylene symmetric C–H stretching
1470	Methyl asymmetrical C–H bending
1465	Methylene scissoring
1380	Methyl symmetrical C–H bending
1305	Methylene wagging
1300	Methylene twisting
720	Methylene rocking

2 Alkenes – LK **C=C** và C-H



- Giãn C=C $1620-1680\text{ cm}^{-1}$ và yếu dần khi tăng số nhóm thế
- Giãn vinyl C-H **$3000-3100\text{ cm}^{-1}$**
- Sự khác biệt giữa alkane, alkene và alkyne được nhận biết qua dao động C-H. Nếu có mũi $> 3000 \rightarrow$ vinyl sp^2 C-H ($=\text{C-H}$) hoặc alkynyl sp C-H ($\equiv\text{C-H}$). $< 3000\text{ cm}^{-1}$: alkyl sp^3 C-H



Alkenes

3100–3000

=C–H stretching

1680–1600

C=C stretching

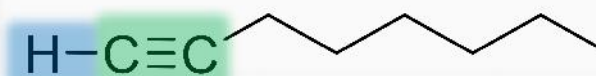
1400

=C–H in-plane bending

1000–600

=C–H out-of-plane bending

Group	Stretching Frequency (cm ⁻¹)	Intensity
RCH=CH ₂	1645	Medium
R ₂ C=CH ₂	1655	
<i>cis</i> -RCH=CHR	1660	
<i>trans</i> -RCH=CHR	1675	
Tri and tetra substituted	1670	Weak



3. Alkynes – LK C≡C và vinyl C-H

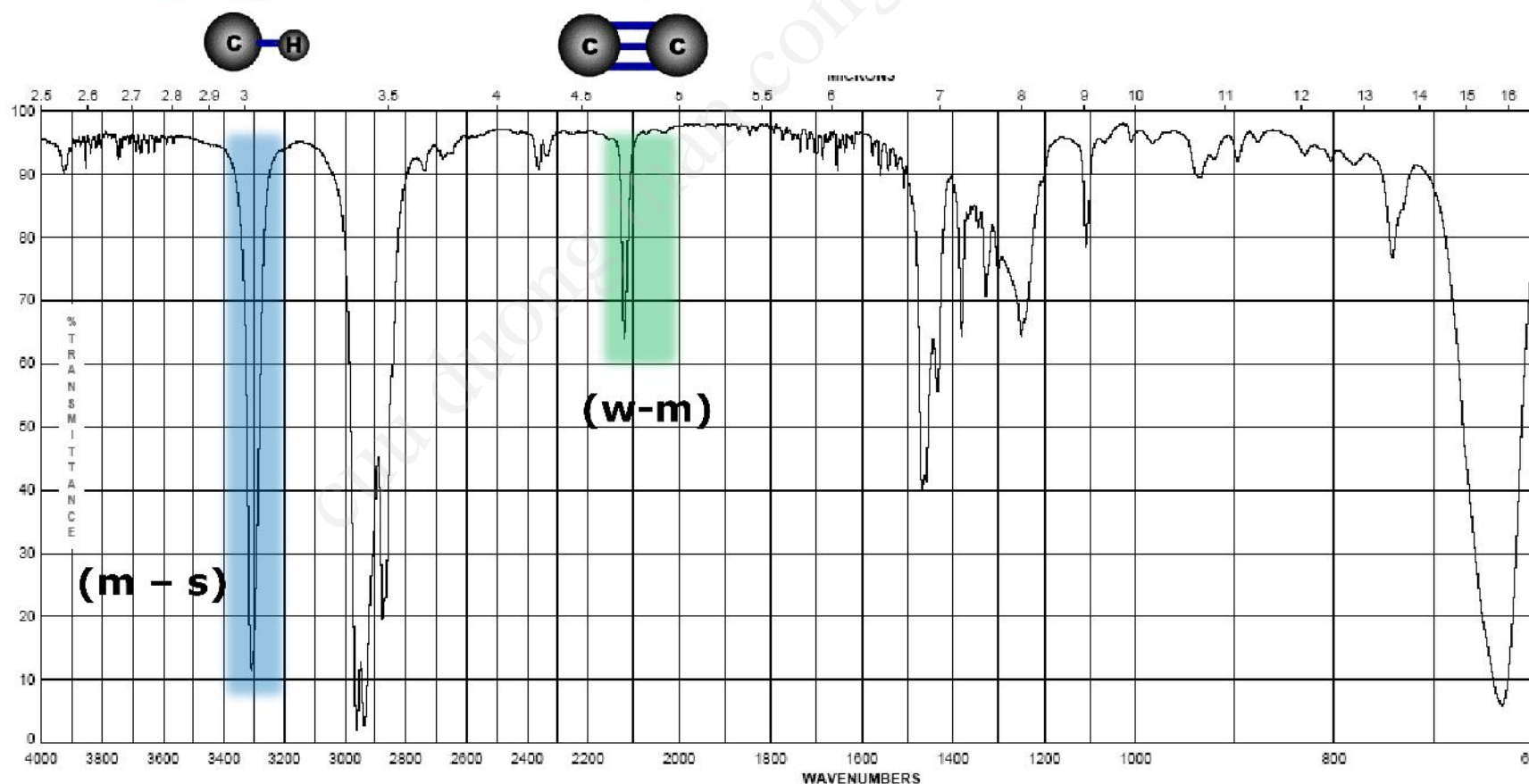
- **Giãn C≡C: 2100-2260 cm⁻¹**; cường độ mũi tùy vào độ phân cực của LK

Giãn C≡C đầu mạch-bất đối xứng: 2100-2140cm⁻¹, mạnh

Giãn C≡C giữa mạch: 2210-2260 cm⁻¹, yếu

Dao động **R-C≡C-R** **không** xuất hiện trên phổ

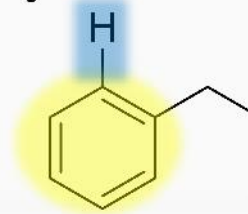
- **Dao động C_{sp}-H** alkyne **cuối mạch: 3200-3300 cm⁻¹**



4. Hydrocarbon thơm (Aromatic)

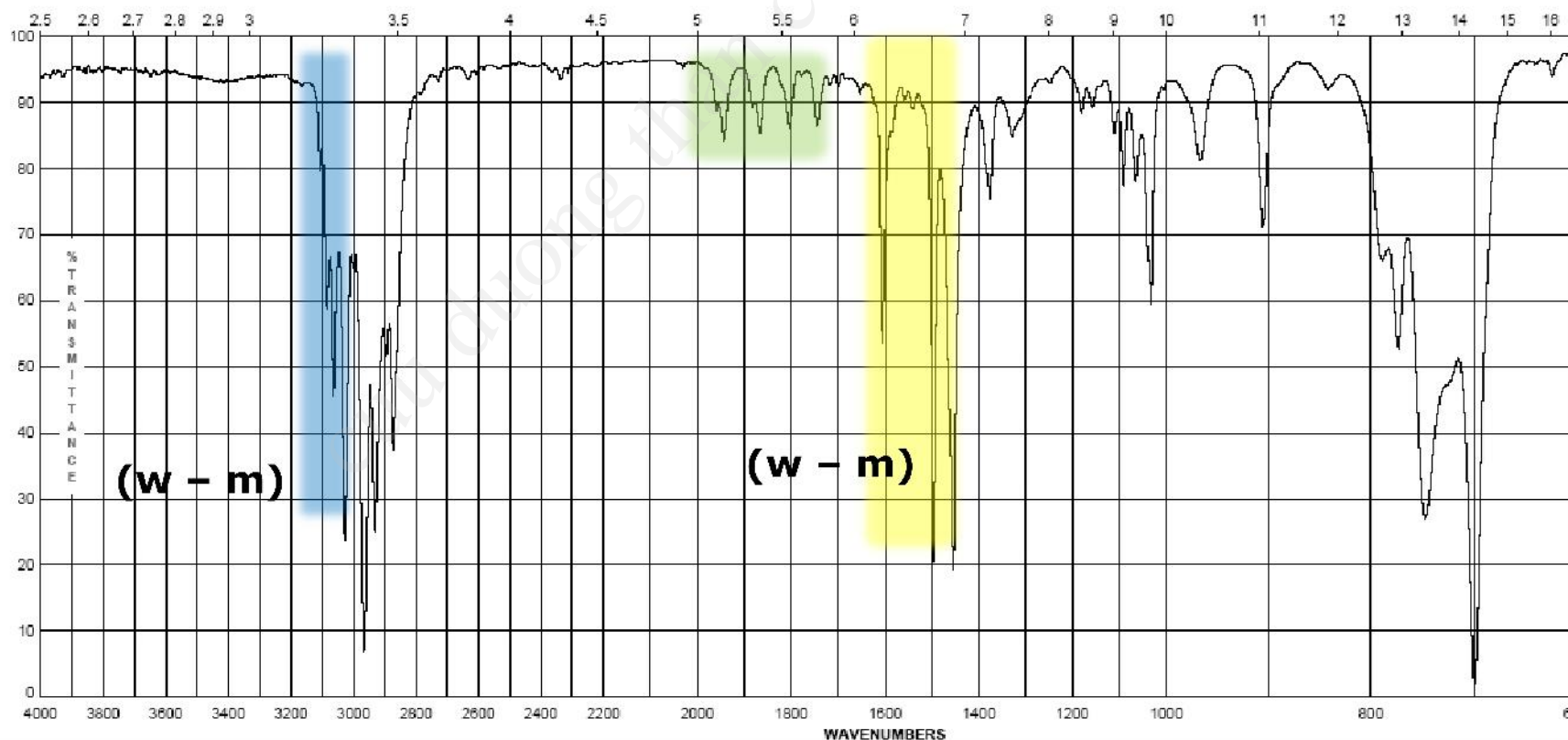
- *Giãn bất đối xứng và đối xứng C-H ở 3000-3100 cm^{-1} (Dải không no).*
- *Dao động uốn ngoài mặt phẳng C-H ở 900-675 cm^{-1} với cường độ mạnh (Vùng đặc trưng của Hydrocarbon thơm).*
- *Giãn C=C ở 1430-1600 cm^{-1} , thường là peak đôi.*

Wavenumber (cm^{-1})	Assignment
3100–3000	C–H stretching
2000–1700	Overtone and combination bands
1600–1430	C=C stretching
1275–1000	In-plane C–H bending
900–690	Out-of-plane C–H bending



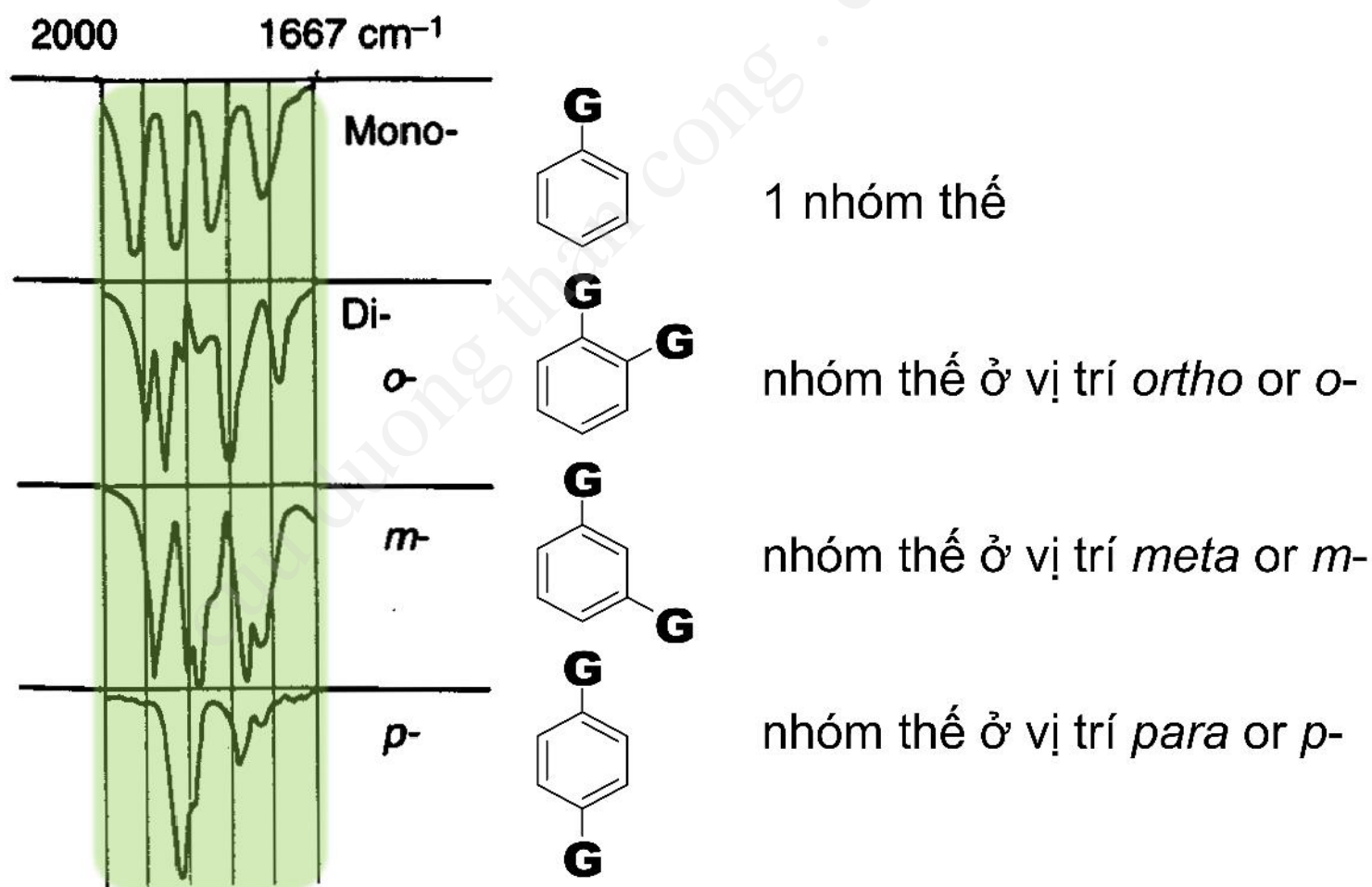
4. Aromatics

- e⁻ liên hợp trên vòng, bậc LK C-C ~ 1.5, tần số dao động kéo giãn của LK này thấp hơn LK C=C
- Xuất hiện mũi **đôi**, nhọn: 1500 & 1600 cm⁻¹
- LK C-H của vòng tương tự vinyl C-H: 3000-3100 cm⁻¹



4. Aromatics

- Nếu không có nhóm C=O, trong vùng 1667-2000 cm^{-1} (w) xuất hiện nhóm mũi với cường độ yếu của vòng thơm
- Vùng này được gọi là dải hoạ âm hay dải bội âm (*overtone*) có số sóng bằng bội số của dải cơ bản

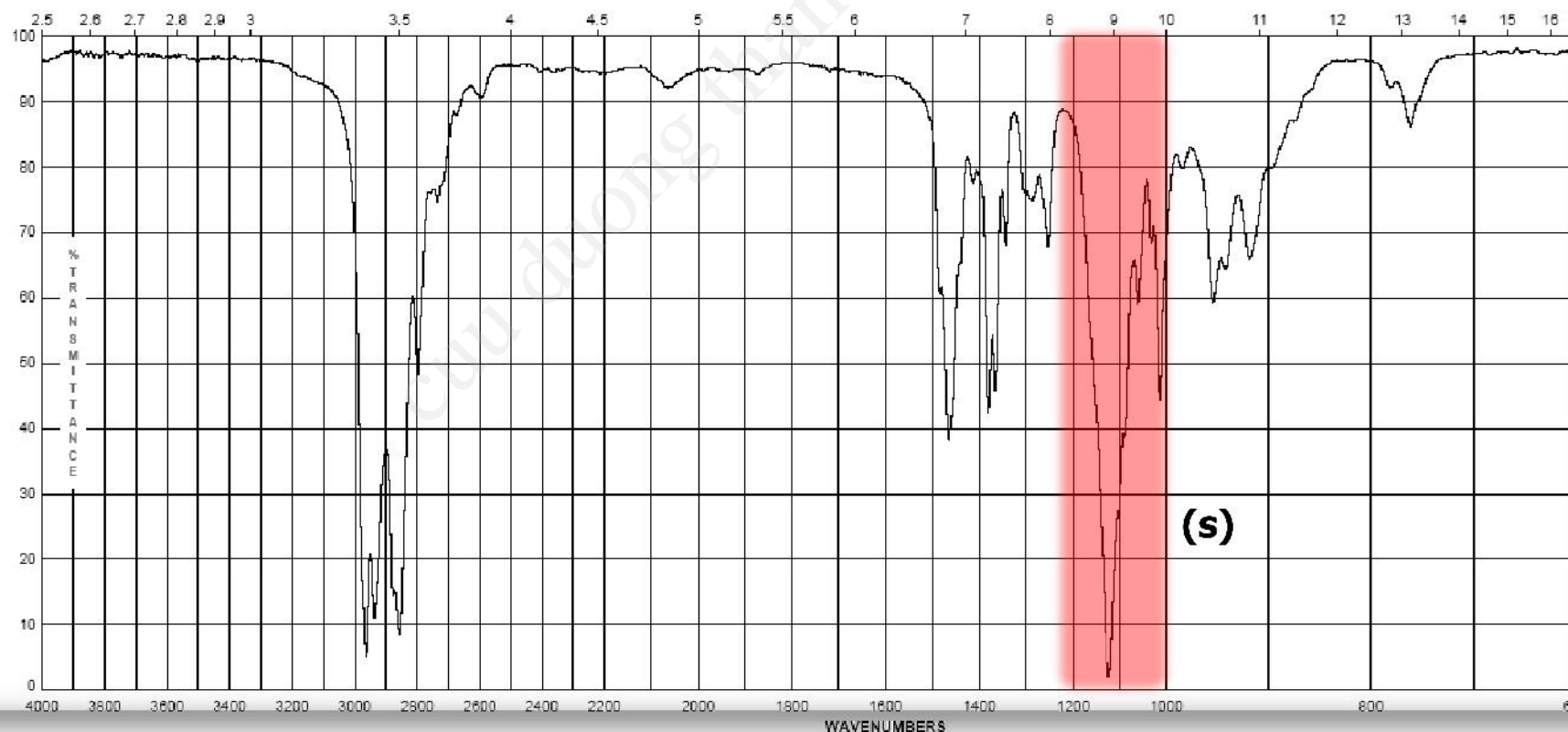
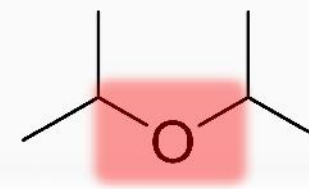


6. Ethers

– dao động LK **C-O-C** bất đối xứng và LK vinyl C-H

- Giãn C-O-C bất đối xứng: **1050-1150 cm^{-1}** , mạnh
- Aliphatic C-O-C: **1150-1085 cm^{-1}**
- Aryl C-O-C bất đối xứng **1275-1200 cm^{-1}**
- Aryl C-O-C đối xứng: **1075-1020 cm^{-1}**
- Hoặc là bị che phủ bởi dao động của các hydrocarbon khác

Diisopropyl ether



7. Alcohols

- **Giãn O-H: $3200-3400\text{ cm}^{-1}$** ; mũi rộng, mạnh

- Như ether: giãn C-O $1050-1260\text{ cm}^{-1}$

alcohols bậc 1: $1075-1000$;

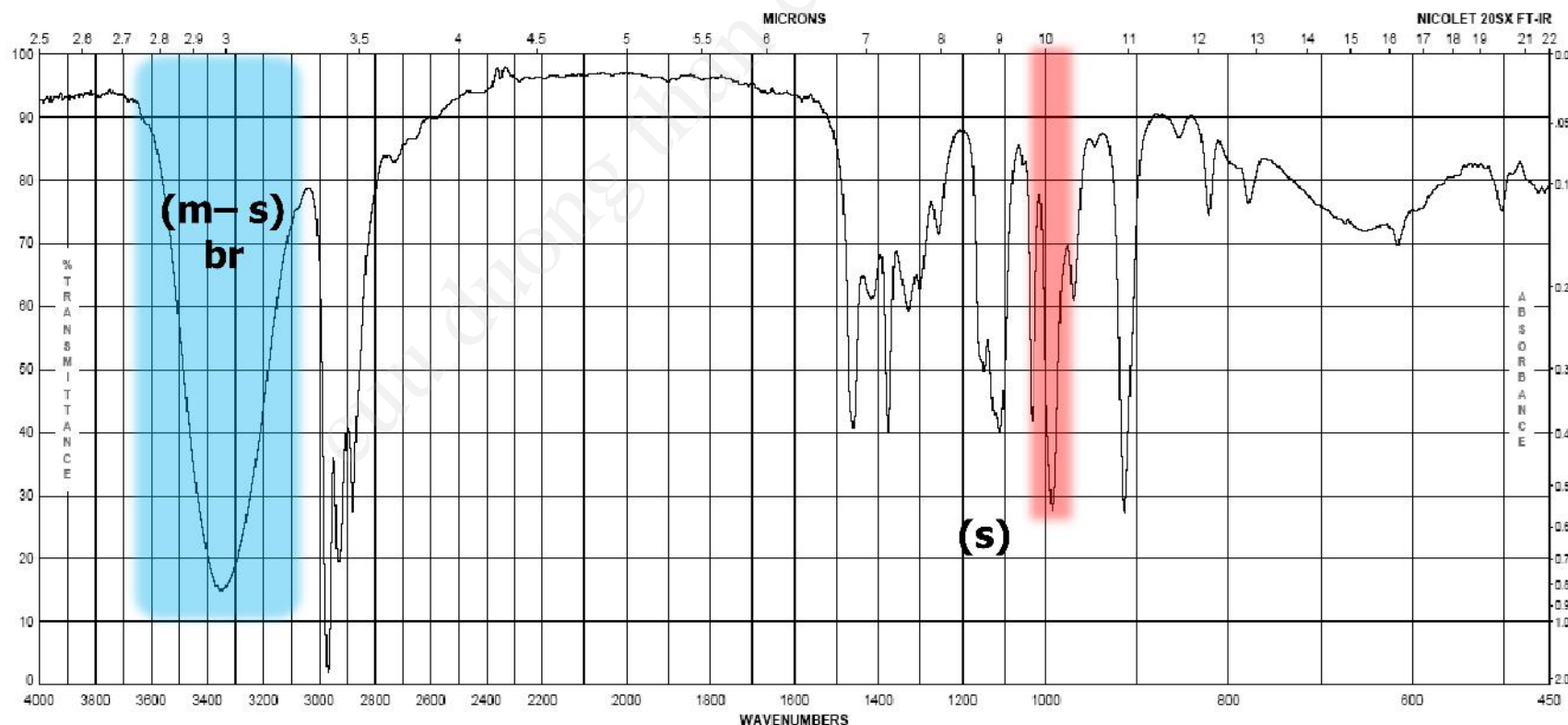
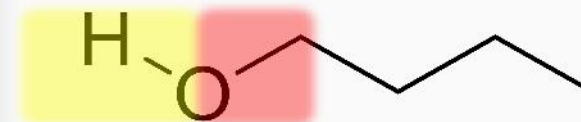
alcohols bậc 2: $1075-1150$;

alcohols bậc 3: $1100-1200$;

phenol: $1180-1260$

- **Hình dạng mũi tùy thuộc vào LK hydro**

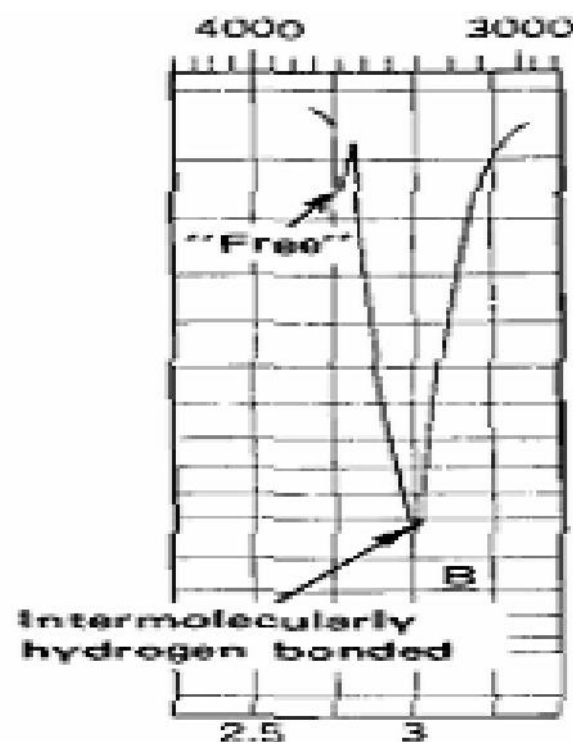
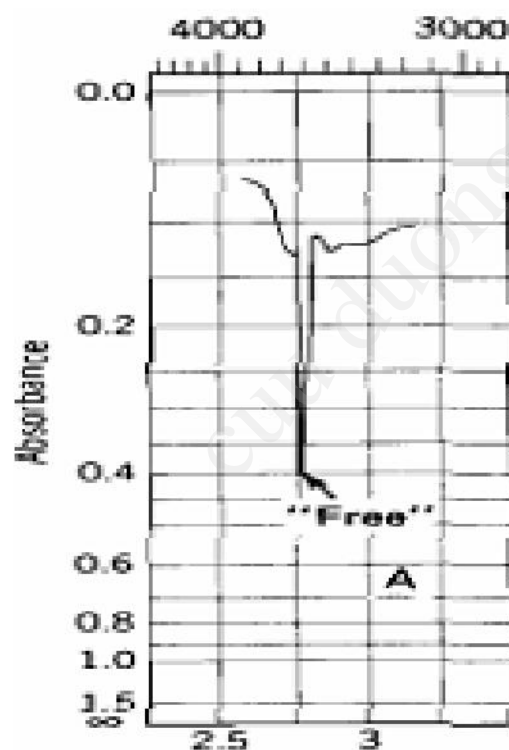
1-butanol



7. Alcohols

❖ *Giãn O-H (O-H stretching):*

- *Khi không có liên kết Hydrogen (Nhóm -OH tự do), giãn O-H của Alcohol và Phenol hấp thụ mạnh ở 3700-3500 cm^{-1} .*
- *Khi có liên kết Hydrogen ngoại phân tử, giãn O-H của Alcohol và Phenol hấp thụ mạnh ở 3550-3200 cm^{-1} .*



8. Amine

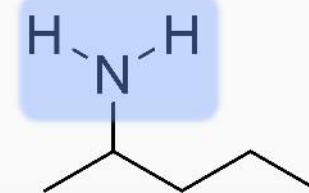
❖ Đặc trưng nhất của Amine là giãn N-H của Amine bậc 1 và bậc 2.

➤ *Amine bậc 1 (Primary Amines): 3300-3500 cm^{-1} (Peak đôi).*

➤ *Amine bậc 2 (Secondary Amines): 3310-3500 cm^{-1} (Peak đơn).*

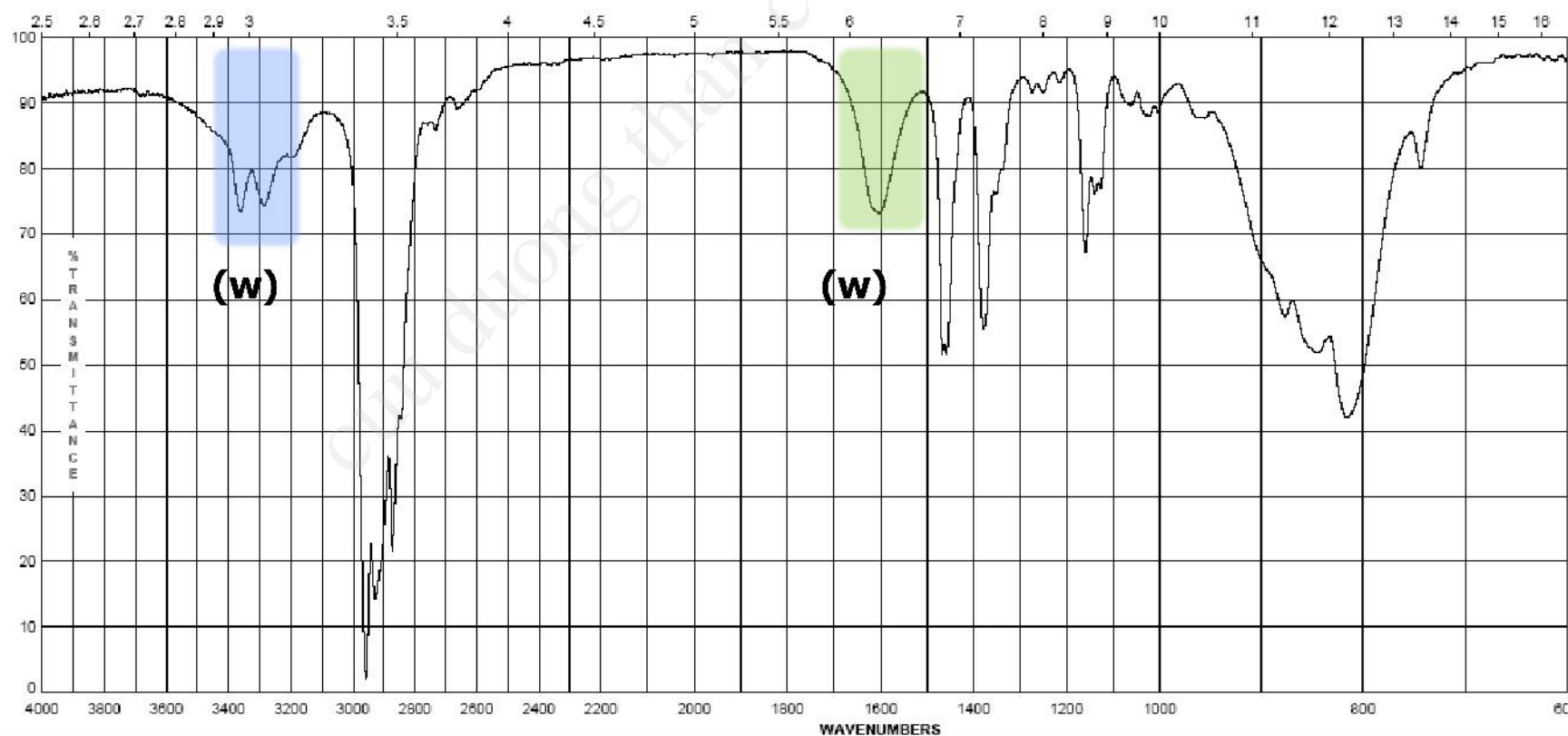
➤ *Giãn N-H tự do đối xứng và bất đối xứng ở: 3400-3500 cm^{-1} . Nếu có liên kết Hydrogene thì dao động giãn ở bước sóng dài hơn ($<3400 \text{ cm}^{-1}$).*

2-aminopentane

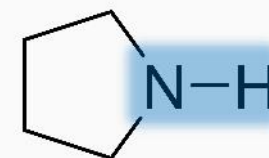


8. Amines – bậc 1

- giãn-N-H của NH_2 **mũi đôi:** $3200\text{--}3500\text{ cm}^{-1}$
(symmetric and anti-symmetric modes)
- Biến dạng -NH_2 $1590\text{--}1650\text{ cm}^{-1}$
- Dãy dao động biến dạng $780\text{--}820\text{ cm}^{-1}$

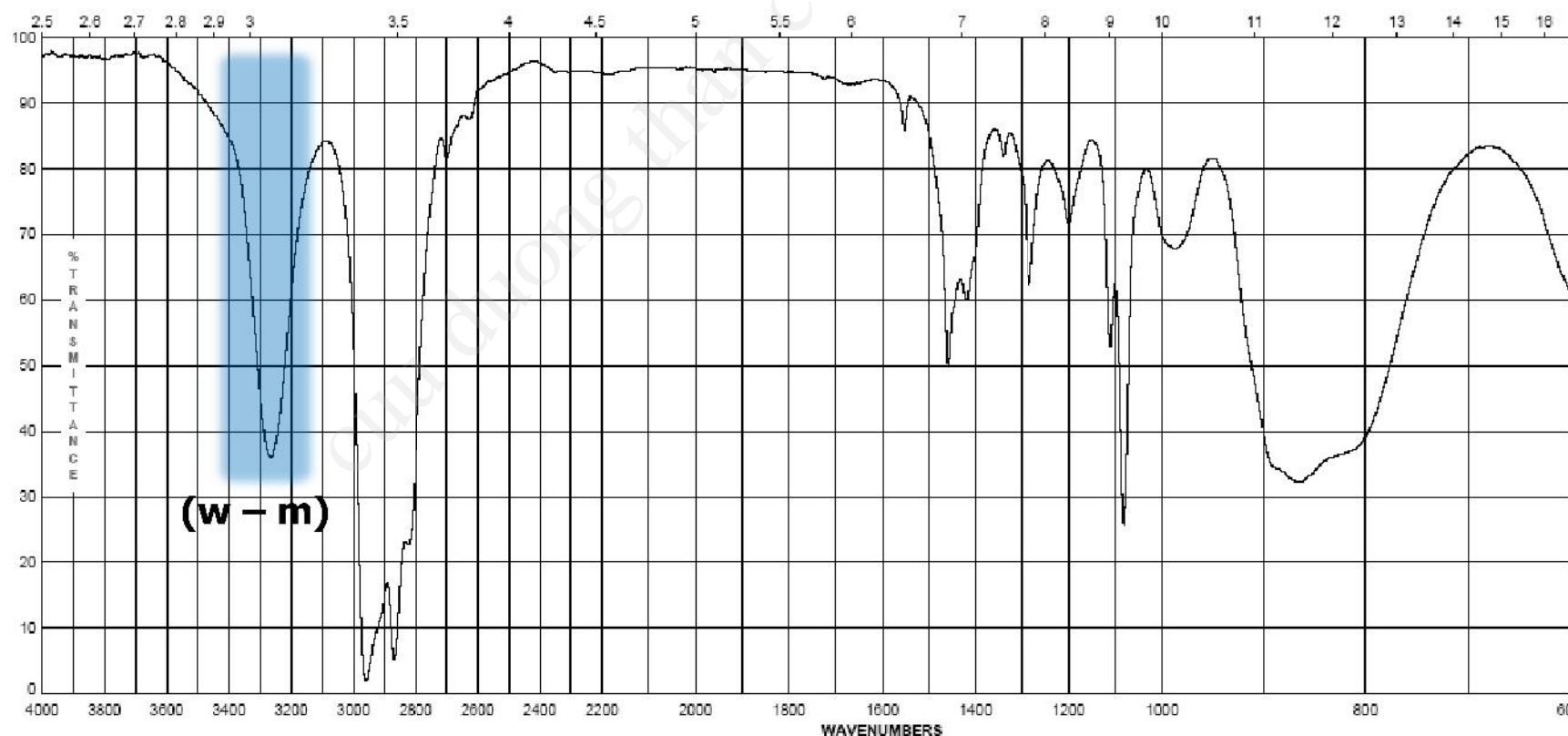


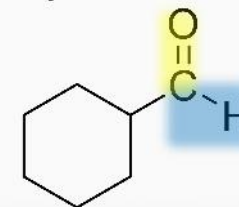
pyrrolidine



9. Amines – Bậc 2

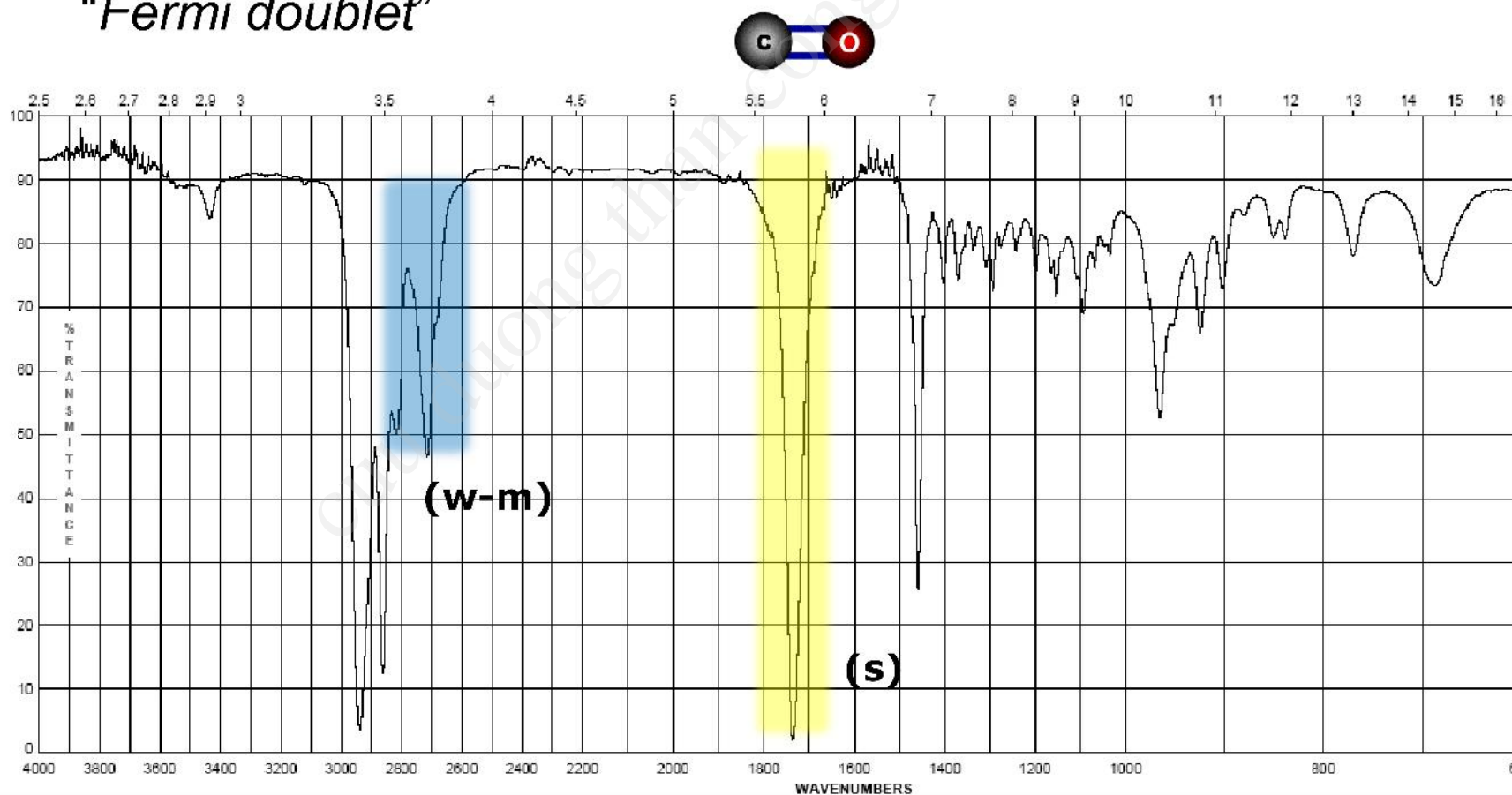
- Dãy N-H của R_2N-H 3200-3500 cm^{-1} mũi đơn, nhọn, yếu hơn O-H
- Amine bậc 4 (R_3N) không có LK N-H không có mũi trong vùng này





10. Aldehydes

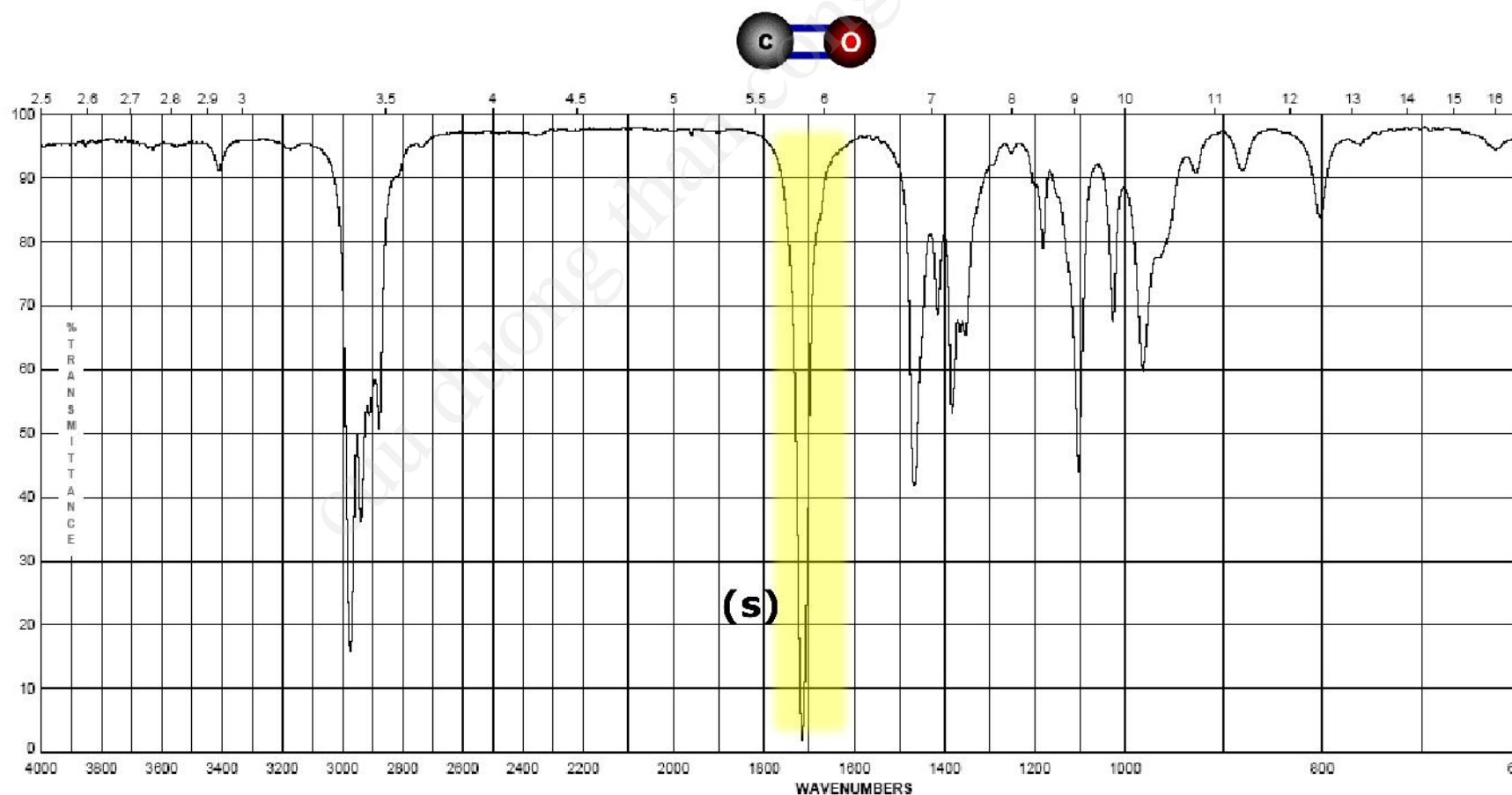
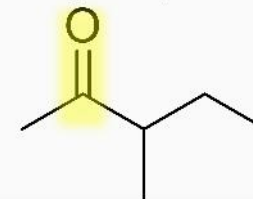
- Giãn C=O (carbonyl) $1720\text{-}1740\text{ cm}^{-1}$
- Aldehyde liên hợp & benzaldehyde $\nu_{\text{C=O}} 1710\text{-}1685\text{ cm}^{-1}$
- Giãn sp^2 C-H đặc trưng, mũi đôi $2720\text{ \& } 2820\text{ cm}^{-1}$ gọi là “*Fermi doublet*”



11. Ketones

- Tương tự dao động nhóm carbonyl
- Giãn C=O 1705-1725 cm⁻¹

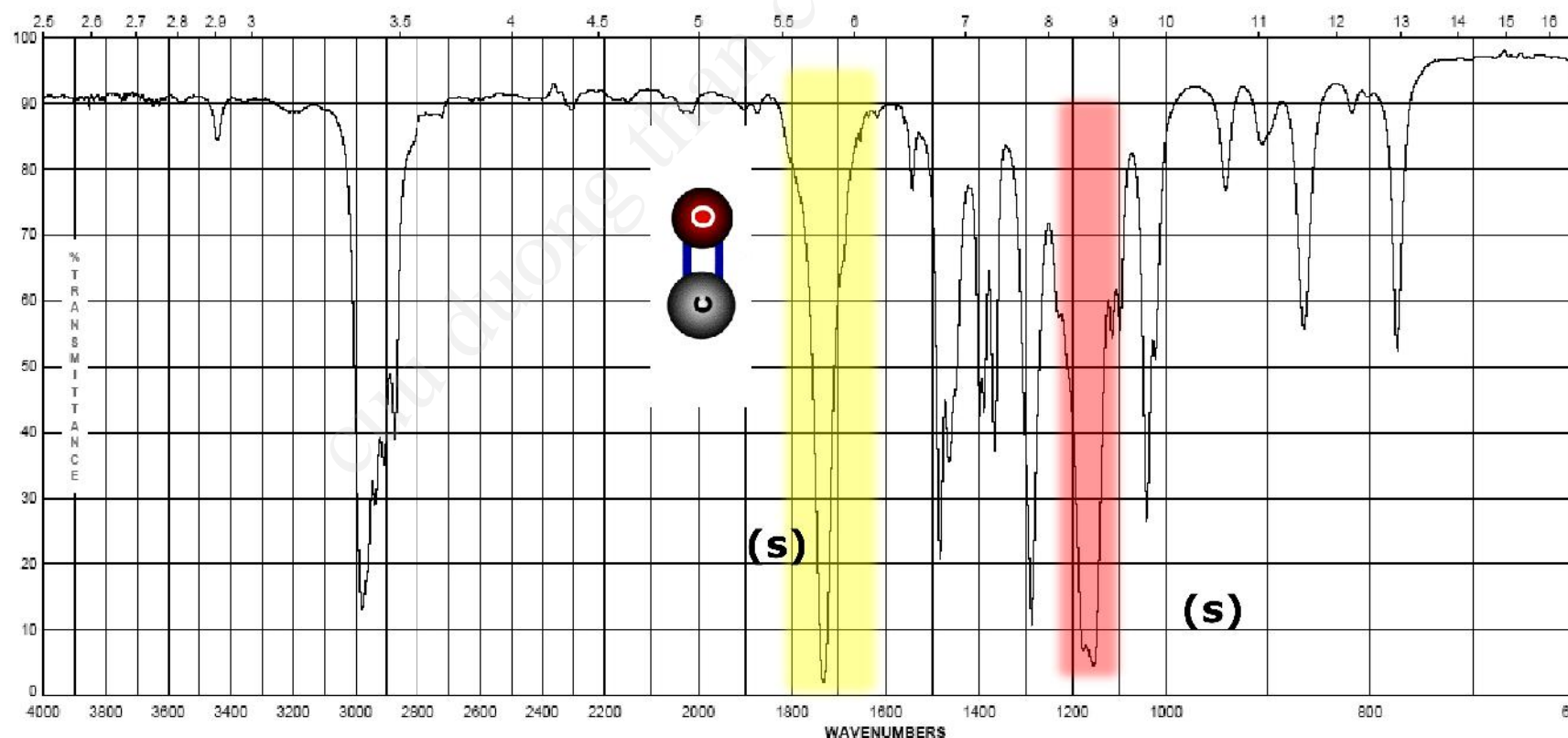
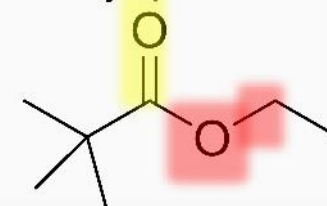
3-methyl-2-pentanone



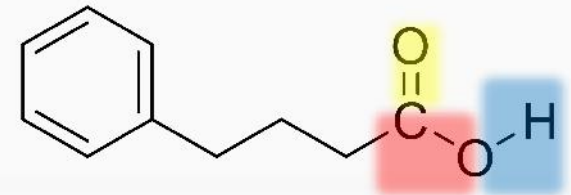
12. Esters

- Giãn C=O 1735-1750 cm^{-1}
 - Aliphatic ester 1750-1735
 - Ester α , β không no 1730-1715
- Mũi C-O mạnh ở tần số cao hơn ethers hay alcohol 150-1250 cm^{-1}

Ethyl pivalate

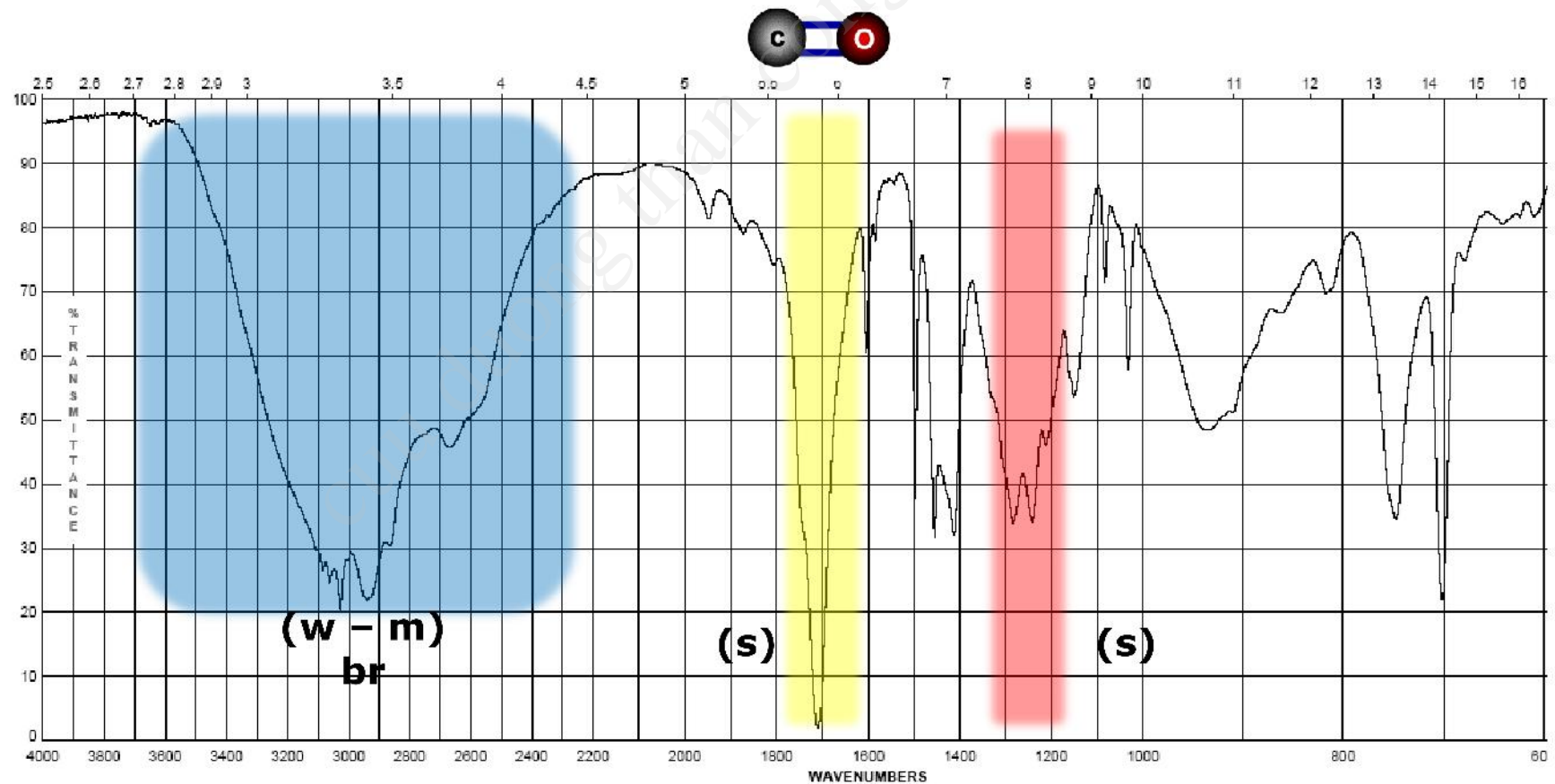


4-phenylbutyric acid



13. Carboxylic Acids:

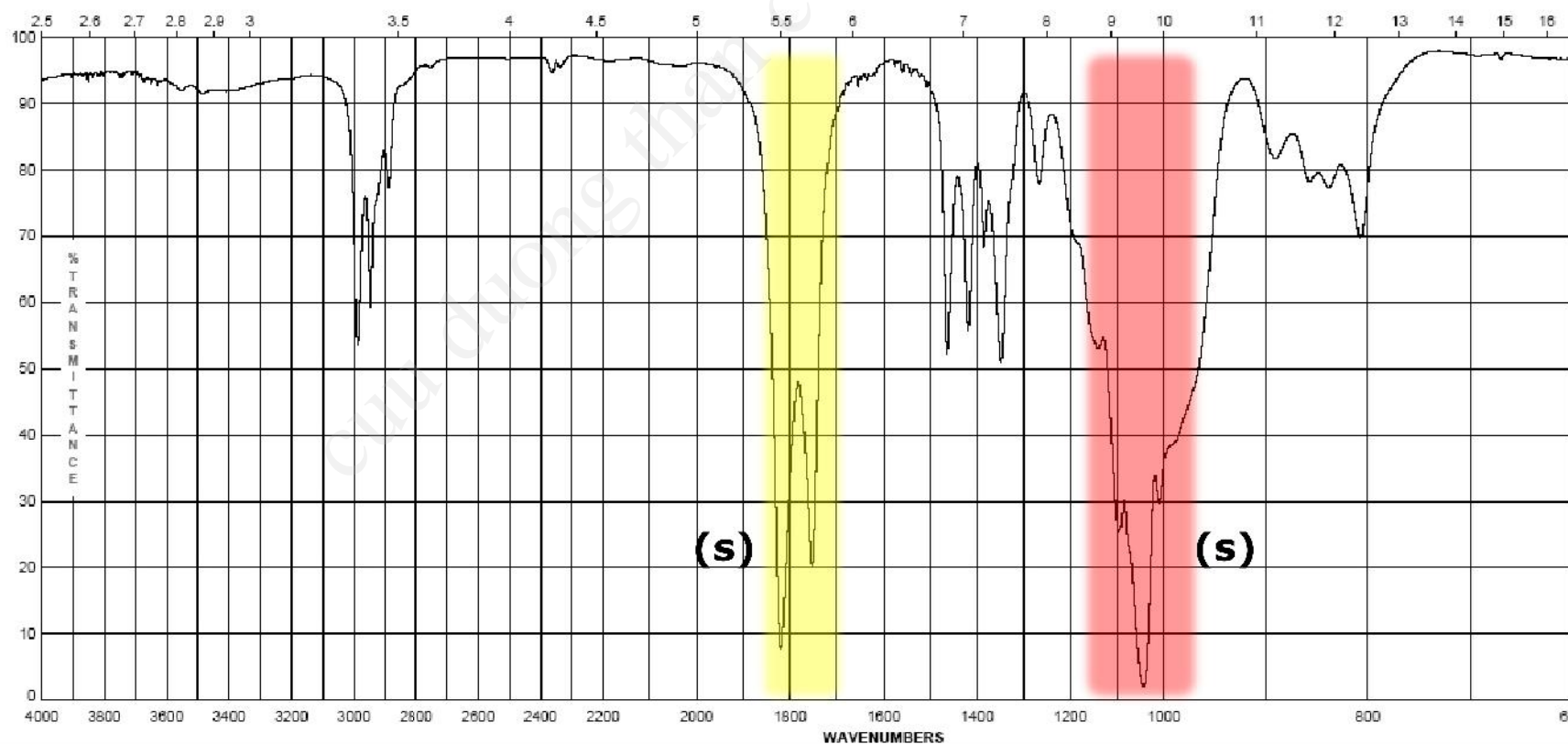
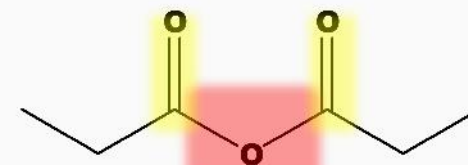
- Dễ đọc phổ sai qua các nhóm khác
- Dao động C=O 1700-1725 cm^{-1}
- Dao động O-H 2400-3500 cm^{-1} rộng



14. Acid anhydrides

- Mũi đôi đặc trưng C=O cách nhau 70 cm^{-1} tại $1740\text{--}1770\text{ cm}^{-1}$ và $1810\text{--}1840\text{ cm}^{-1}$
- Nhiều loại dao động C-O $1000\text{--}1100\text{ cm}^{-1}$

Propionic anhydride



Hạn chế

- Mặc dù phương pháp phổ dao động là một trong những phương pháp hữu hiệu nhất để xác định các chất về định tính cũng như định lượng, được ứng dụng rộng rãi trong nghiên cứu khoa học cũng như trong kiểm tra công nghiệp, phương pháp này cũng có những hạn chế nhất định:
- Bằng phương pháp phổ hồng ngoại KHÔNG cho biết phân tử lượng (trừ trường hợp đặc biệt).
- Nói chung phổ hồng ngoại KHÔNG cung cấp thông tin về các vị trí tương đối của các nhóm chức khác nhau trên một phân tử.
- Chỉ riêng phổ hồng ngoại thì đôi khi chưa thể biết đó là chất nguyên chất hay chất hỗn hợp vì có trường hợp 2 chất có phổ hồng ngoại giống nhau.

Ứng dụng :

1. Nhận biết các chất

- Trước khi ghi phổ hồng ngoại, nói chung ta đã có thể có nhiều thông tin về hợp chất hoặc hỗn hợp cần nghiên cứu, như: trạng thái vật lý, dạng bên ngoài, độ tan, điểm nóng chảy, điểm cháy. Nếu có thể thì cần biết chắc mẫu là chất nguyên chất hay hỗn hợp.
- Sau khi ghi phổ hồng ngoại, nếu chất nghiên cứu là hợp chất hữu cơ thì trước tiên nghiên cứu **vùng dao động co giãn của H** để xác định xem mẫu thuộc loại hợp **chất vòng thơm hay mạch thẳng** hoặc cả hai.

Ứng dụng :

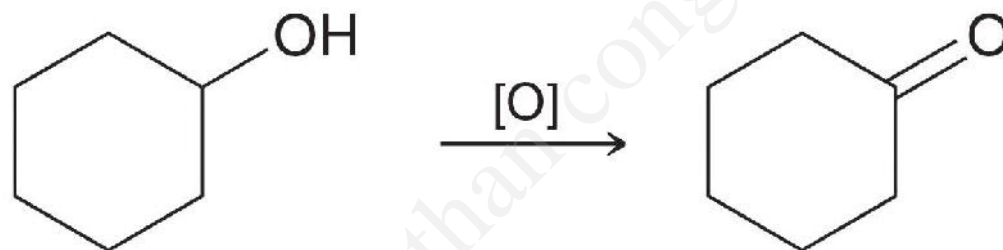
- Sau đó nghiên cứu các **vùng tần số nhóm** để xác định có hay không có các nhóm chức.
- Trong nhiều trường hợp việc đọc phổ (giải phổ) và tìm các tần số đặc trưng không đủ để nhận biết một cách toàn diện về chất nghiên cứu, nhưng có lẽ là có thể suy đoán được kiểu hoặc loại hợp chất.

2. Xác định độ tinh khiết.

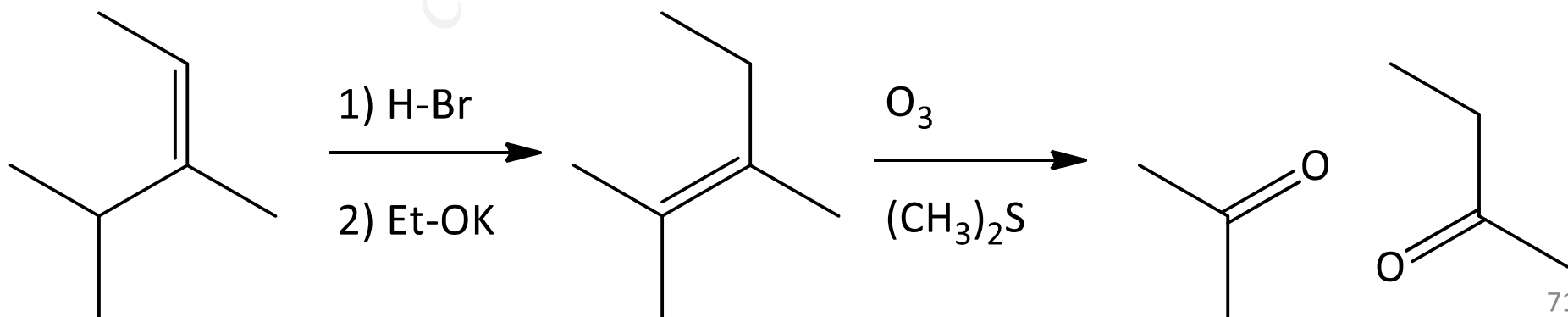
3. Phân tích định lượng.

Sử dụng phổ IR để phân biệt hợp chất

- Phổ IR có thể được dùng để nhận biết các phản ứng chuyển nhóm chức. VD



- Xác định nhóm chức và mô tả cách sử dụng IR để xác định thành phần sản phẩm phản ứng



➤ **Liên kết $C_{sp^3}H$:** Giãn C-H (Stretching C-H) và uốn C-H (Bending C-H) của nhóm Methyl ($-CH_3$) và nhóm Methylene ($-CH_2-$)

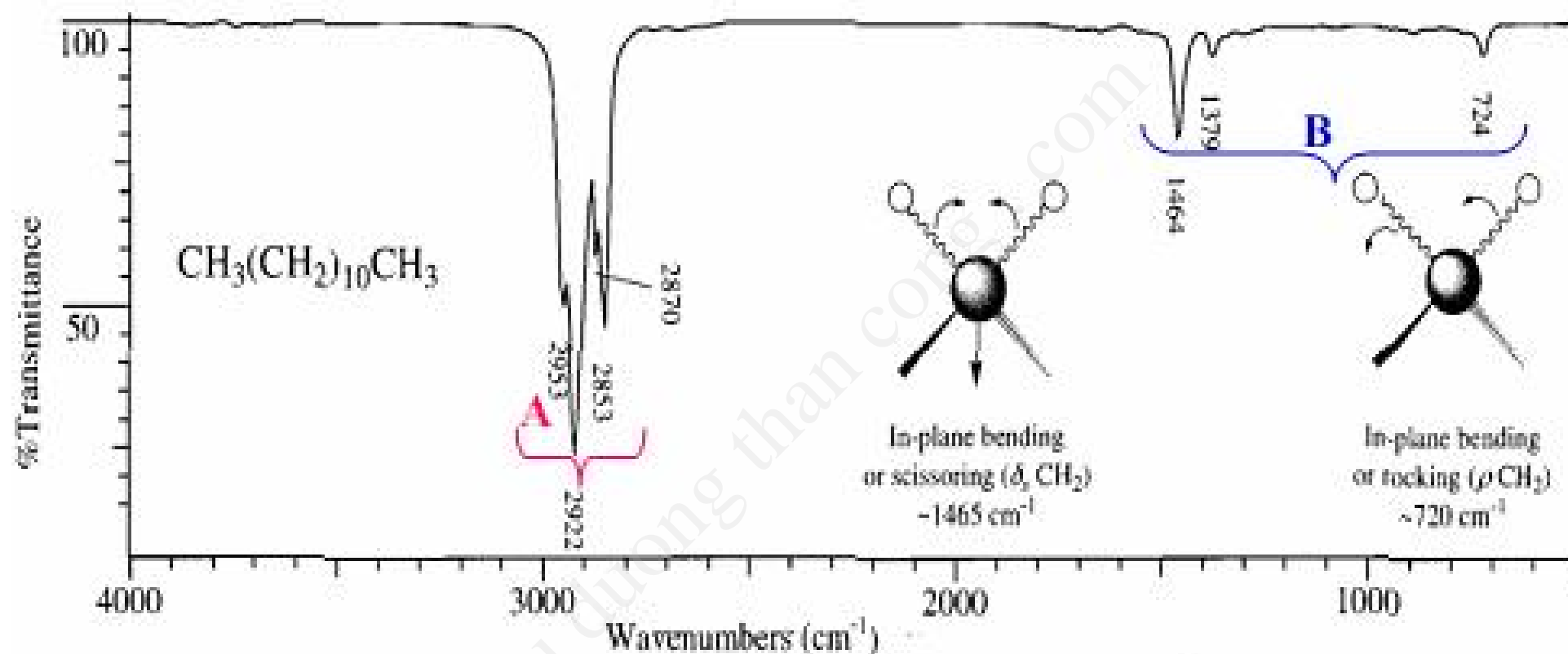
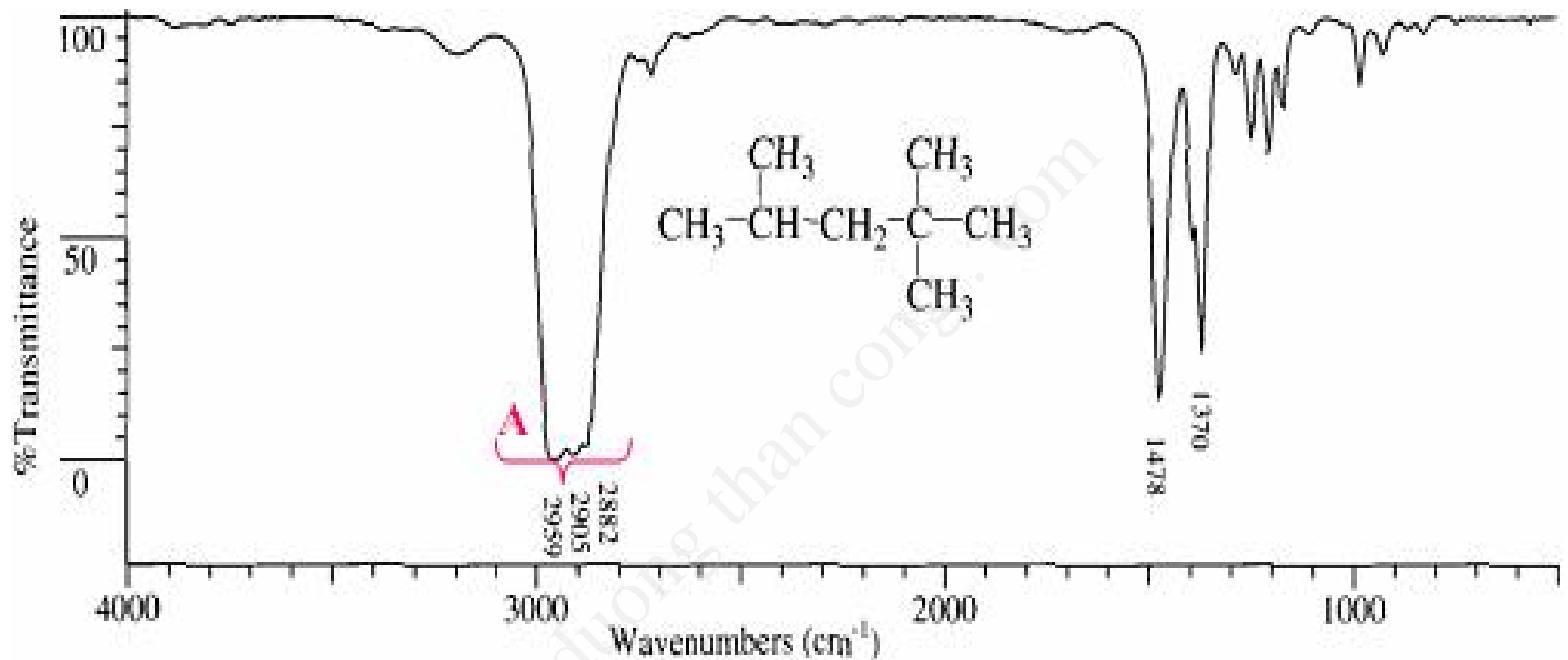
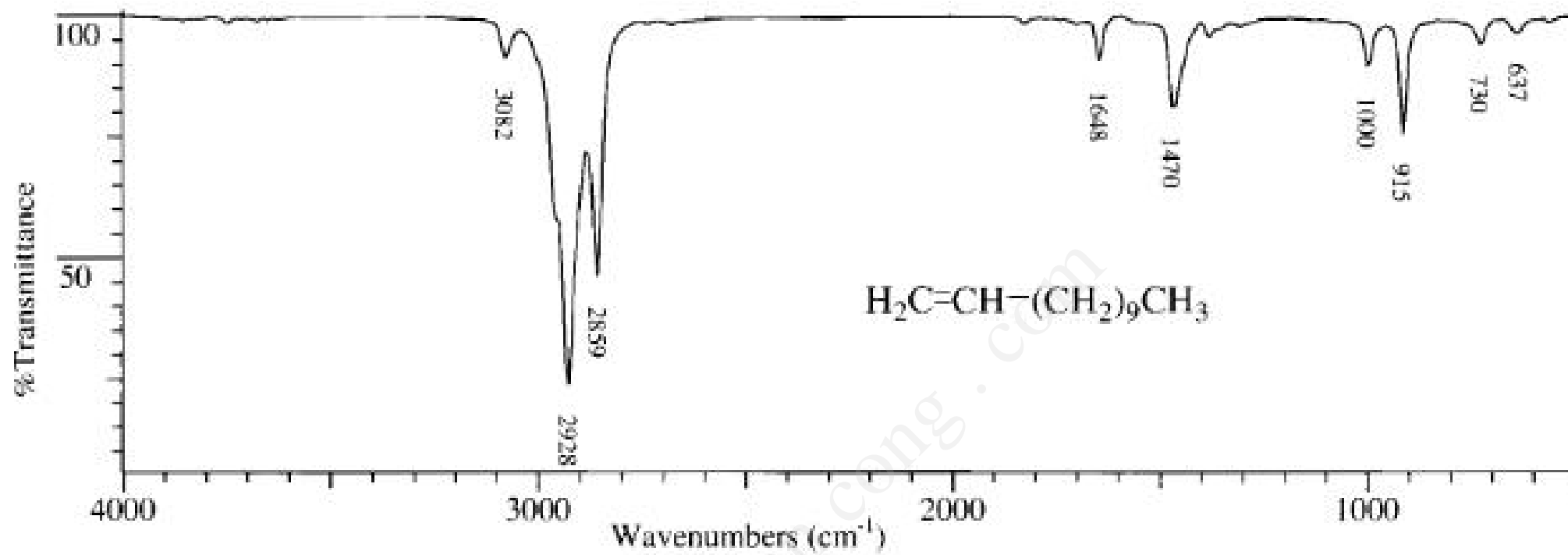
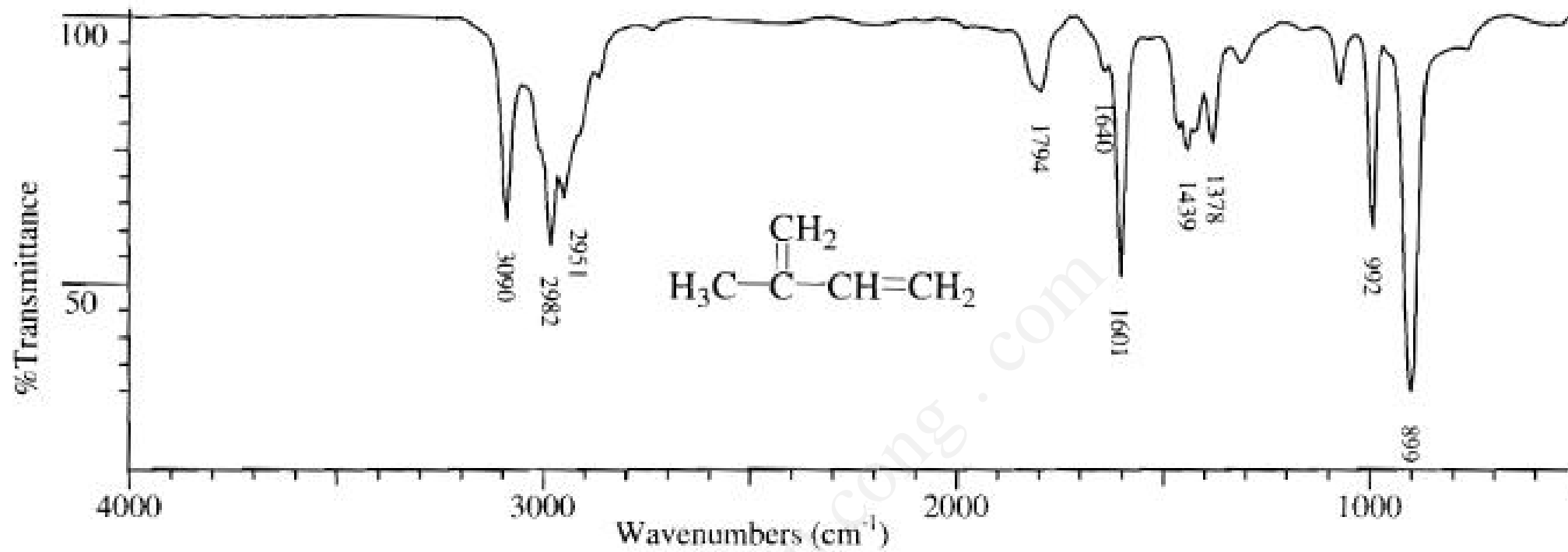


FIGURE 2.8. Dodecane. C—H stretch: 2953 cm⁻¹ ν_{as} CH₃, 2870 cm⁻¹ ν_s CH₂, 2922 cm⁻¹ ν_{as} CH₂, 2853 cm⁻¹ ν_s CH₂. C—H bend: 1464 cm⁻¹ δ_s CH₂, 1450 cm⁻¹ δ_{as} CH₂, 1379 cm⁻¹ δ_a CH₃. CH₂ rock: 724 cm⁻¹ ρ CH₂.

Alkane mạch nhánh







Alkyne

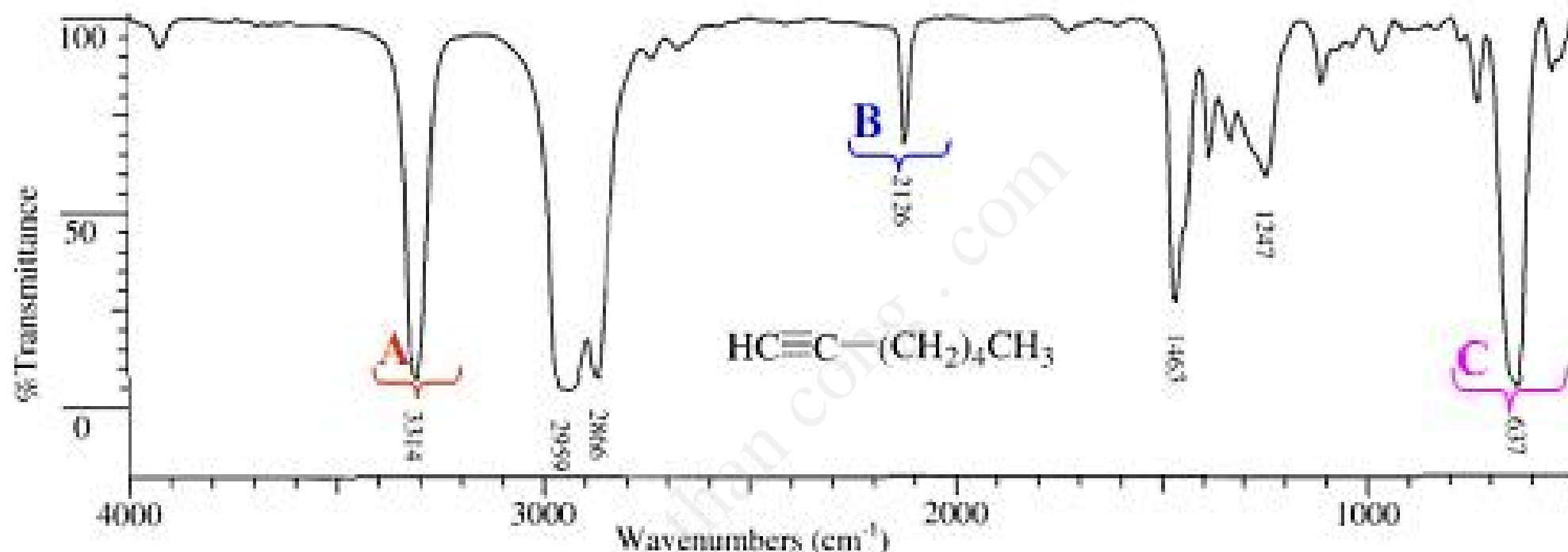


FIGURE 2.12. 1-Heptyne. $\equiv\text{C}-\text{H}$ stretch, 3314 cm^{-1} . Alkyl $\text{C}-\text{H}$ stretch $1450-1360\text{ cm}^{-1}$ (see Figure 2.8), $2960-2860\text{ cm}^{-1}$. $\text{C}\equiv\text{C}$ stretch, 2126 cm^{-1} . $\text{C}-\text{H}$ bend: 1463 cm^{-1} δ_{CH_2} , 1450 cm^{-1} δ_{CH_3} . $\equiv\text{C}-\text{H}$ bend overtone, 1247 cm^{-1} . $\equiv\text{C}-\text{H}$ bend fundamental, 637 cm^{-1} .

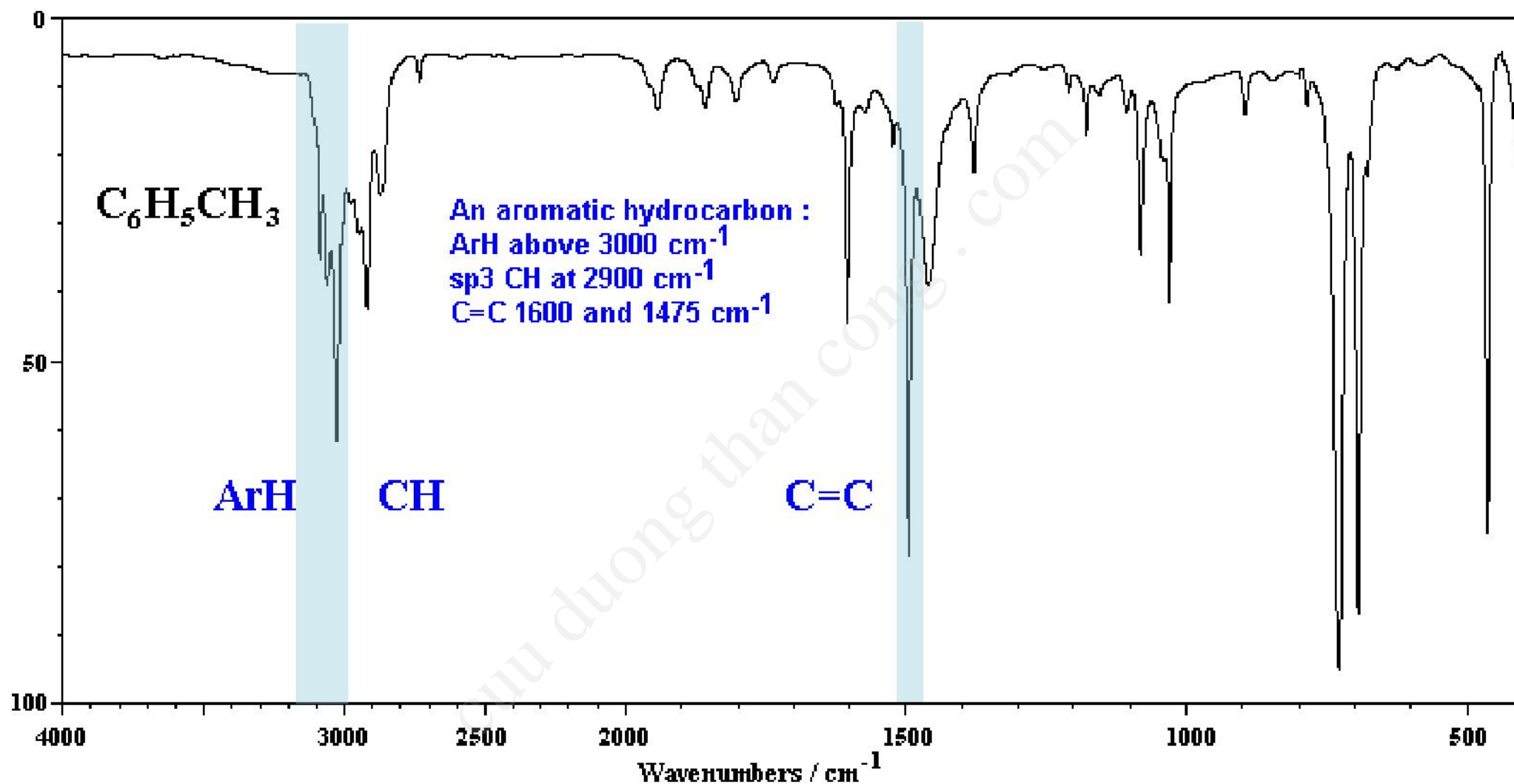
A: $\equiv\text{C}-\text{H}$ giãn: 3314 cm^{-1}

B: $\text{C}\equiv\text{C}$ giãn: 2126 cm^{-1}

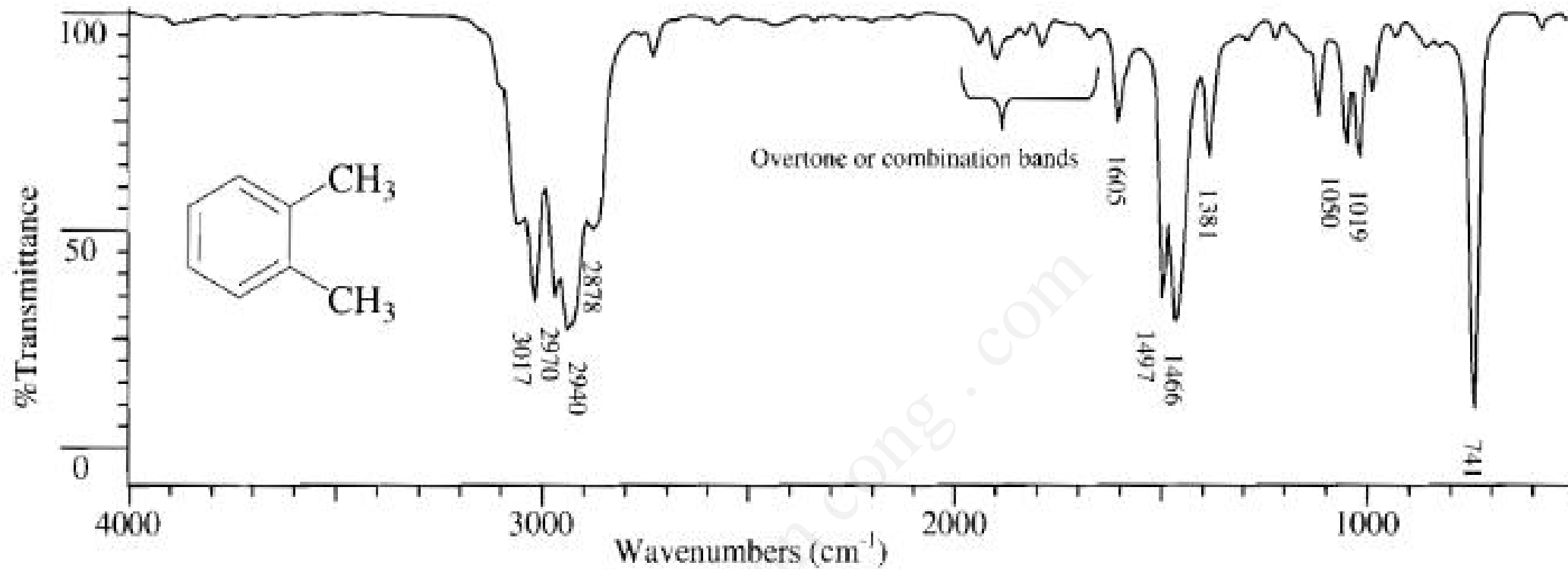
C: $\equiv\text{C}-\text{H}$ uốn (Cơ bản): 637 cm^{-1}

Hydrocarbon thơm

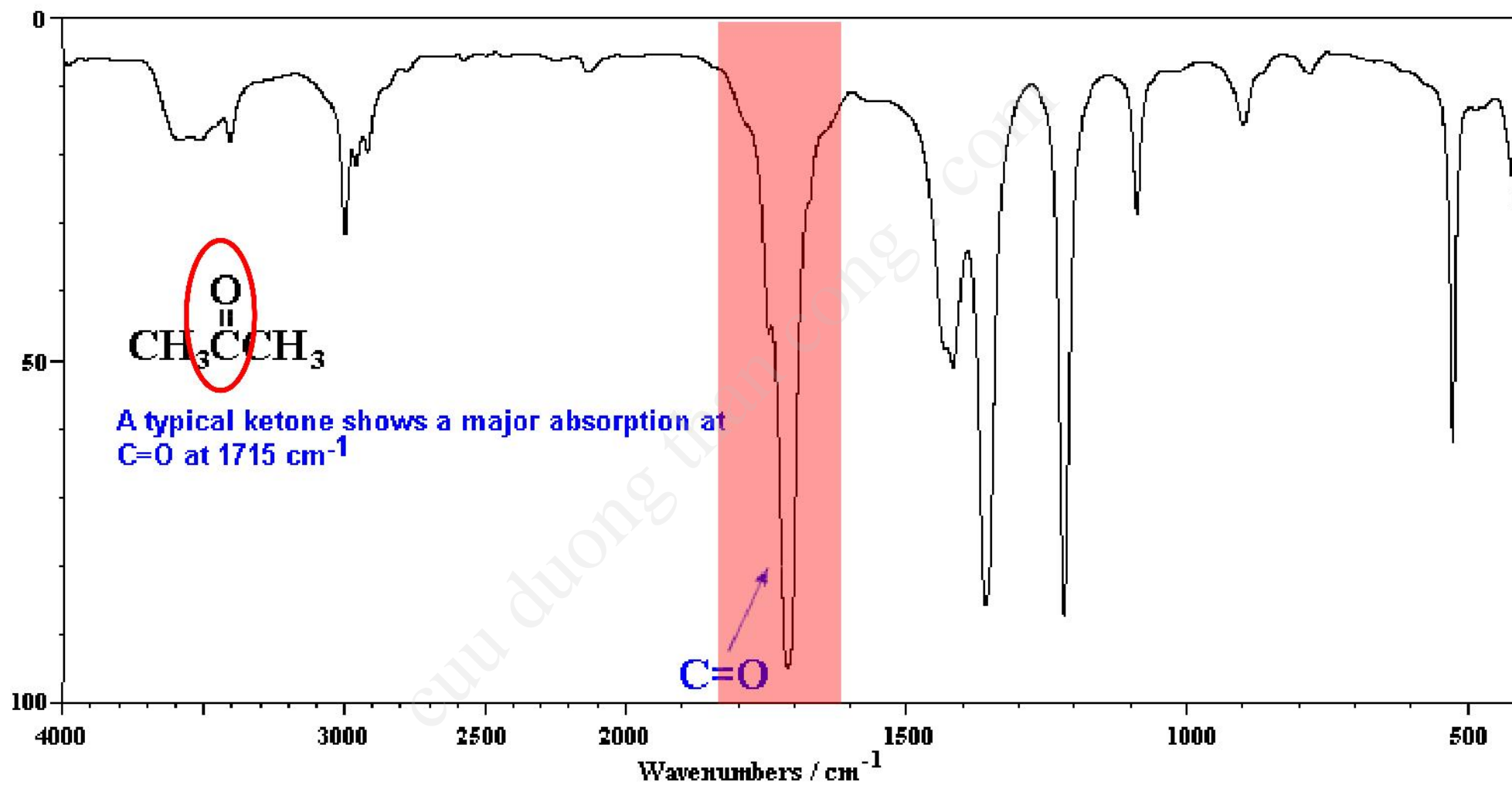
Absorbance / %



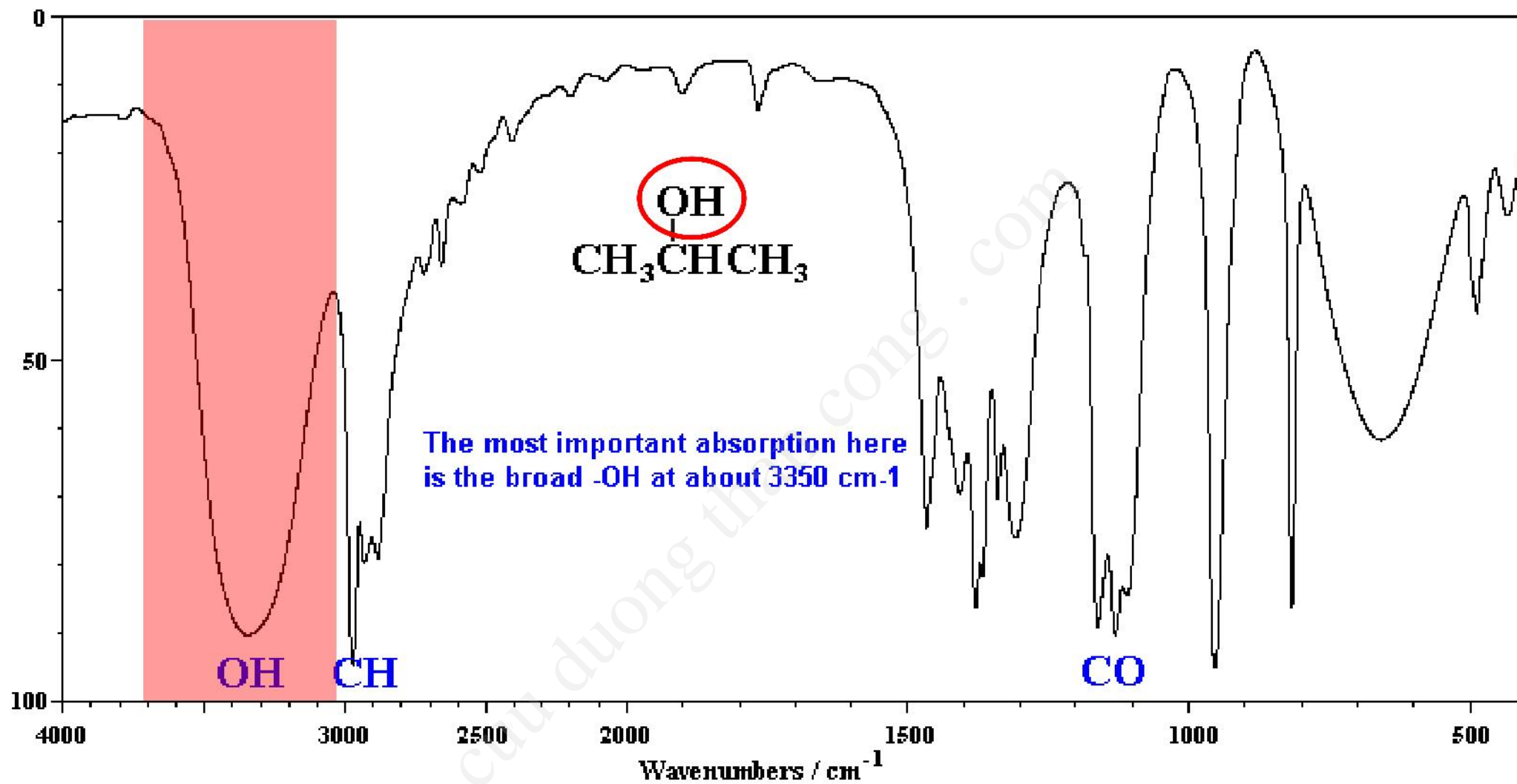
Hydrocarbon thơm có dao động kéo dẫn C-H của vòng thơm $> 3000\text{ cm}^{-1}$; sp^3 C-H $\sim 2900\text{ cm}^{-1}$; C=C vòng thơm ~ 1600 và 1475 cm^{-1}

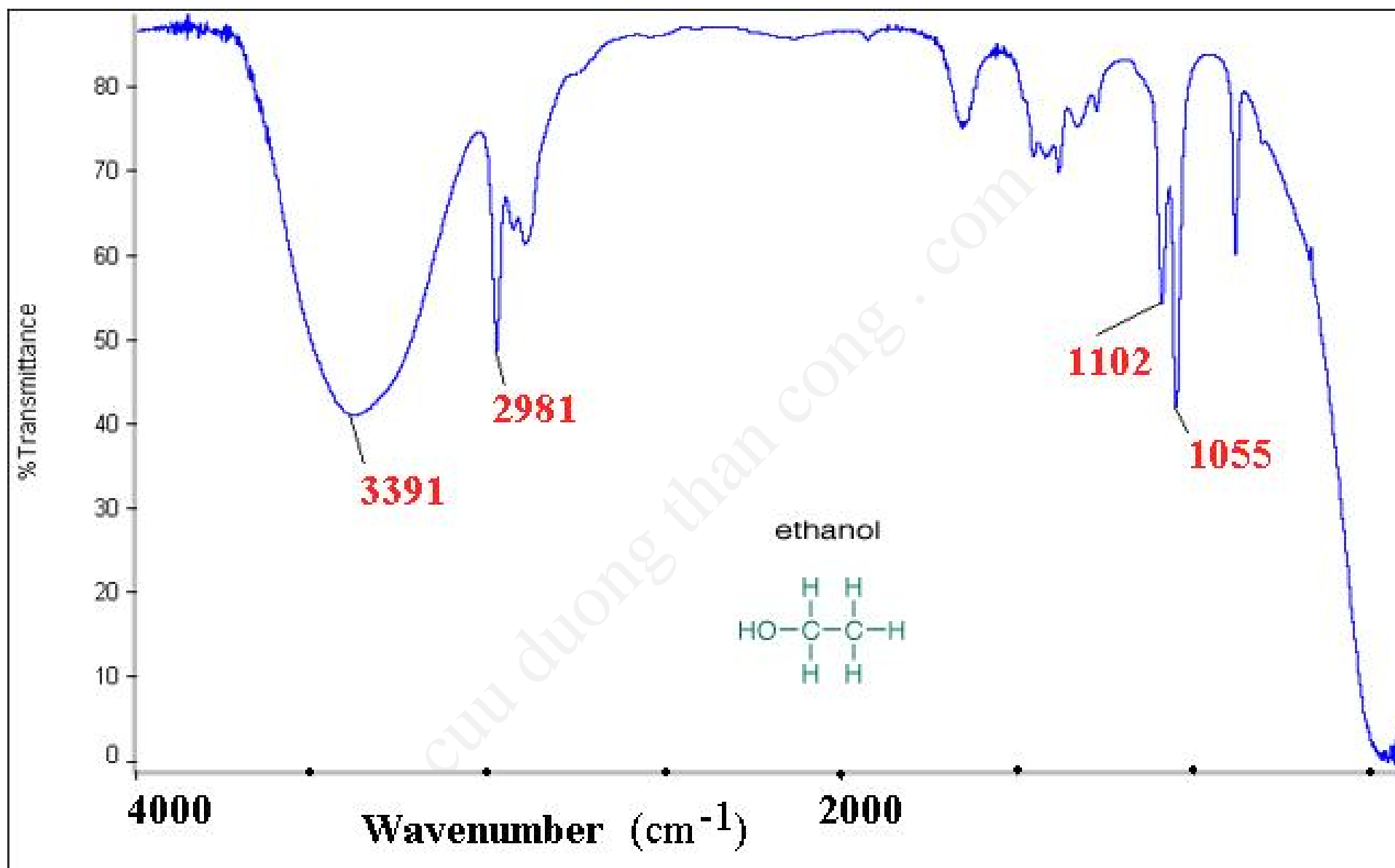


Absorbance / %

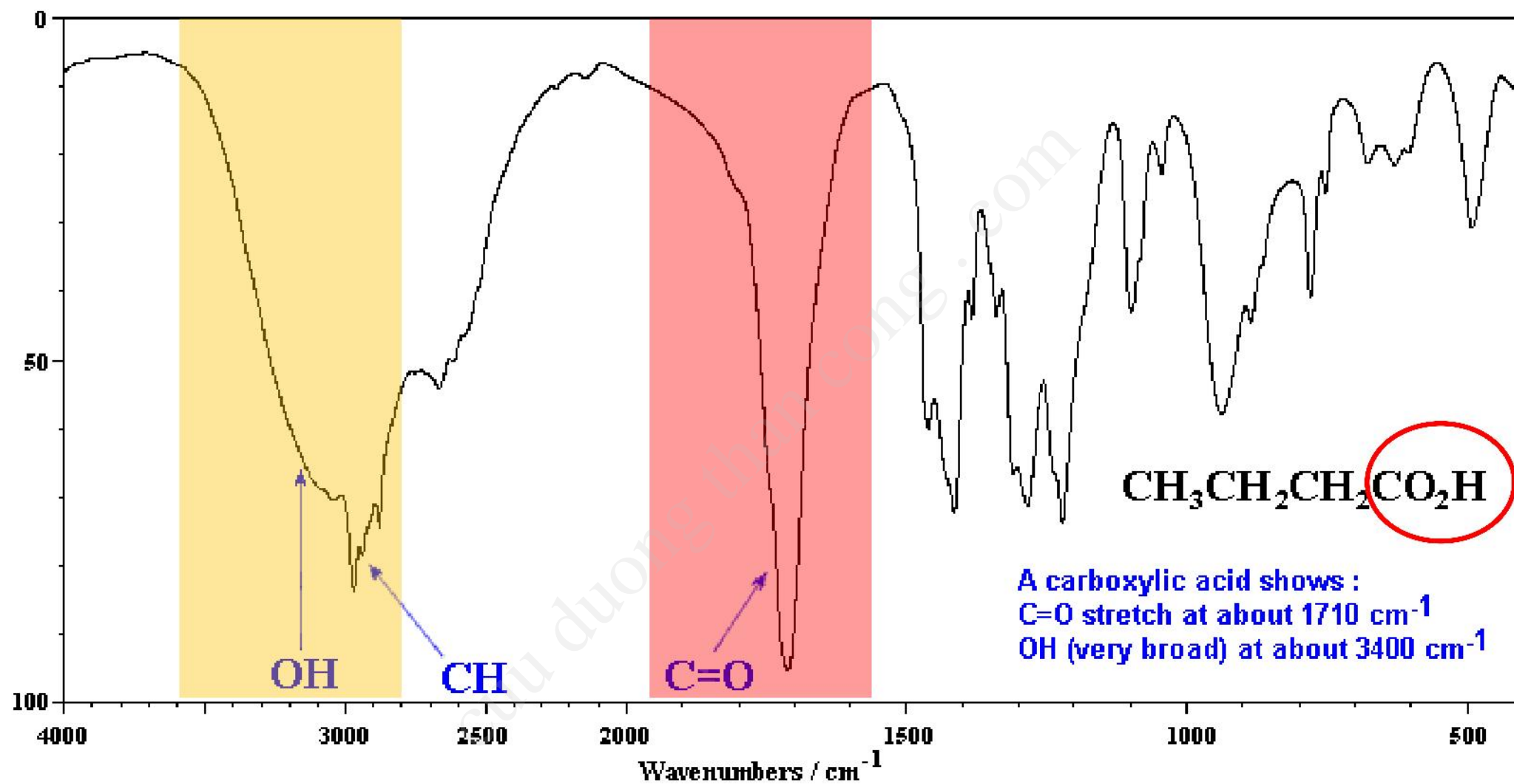


Absorbance / %

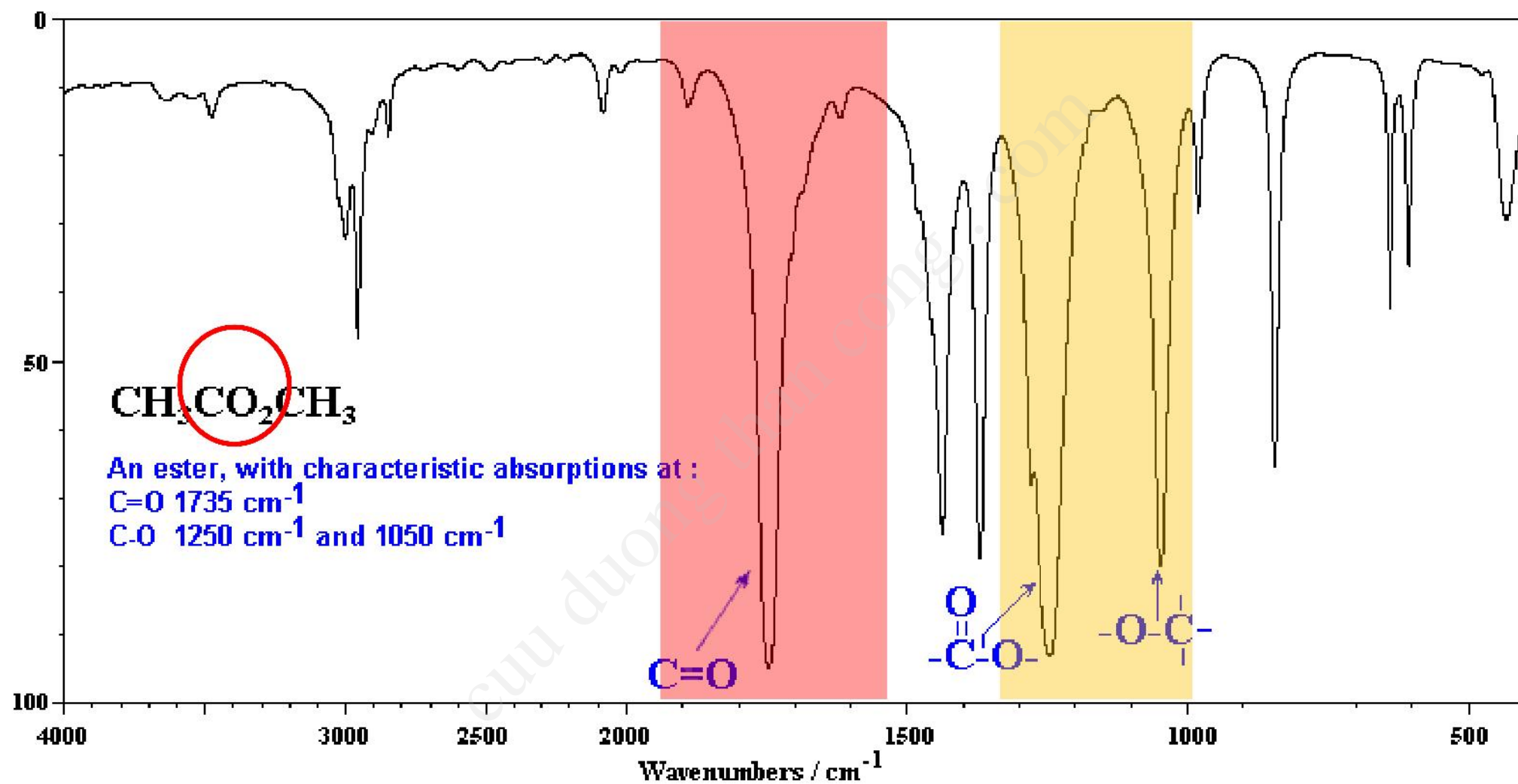




Absorbance / %



Absorbance / %



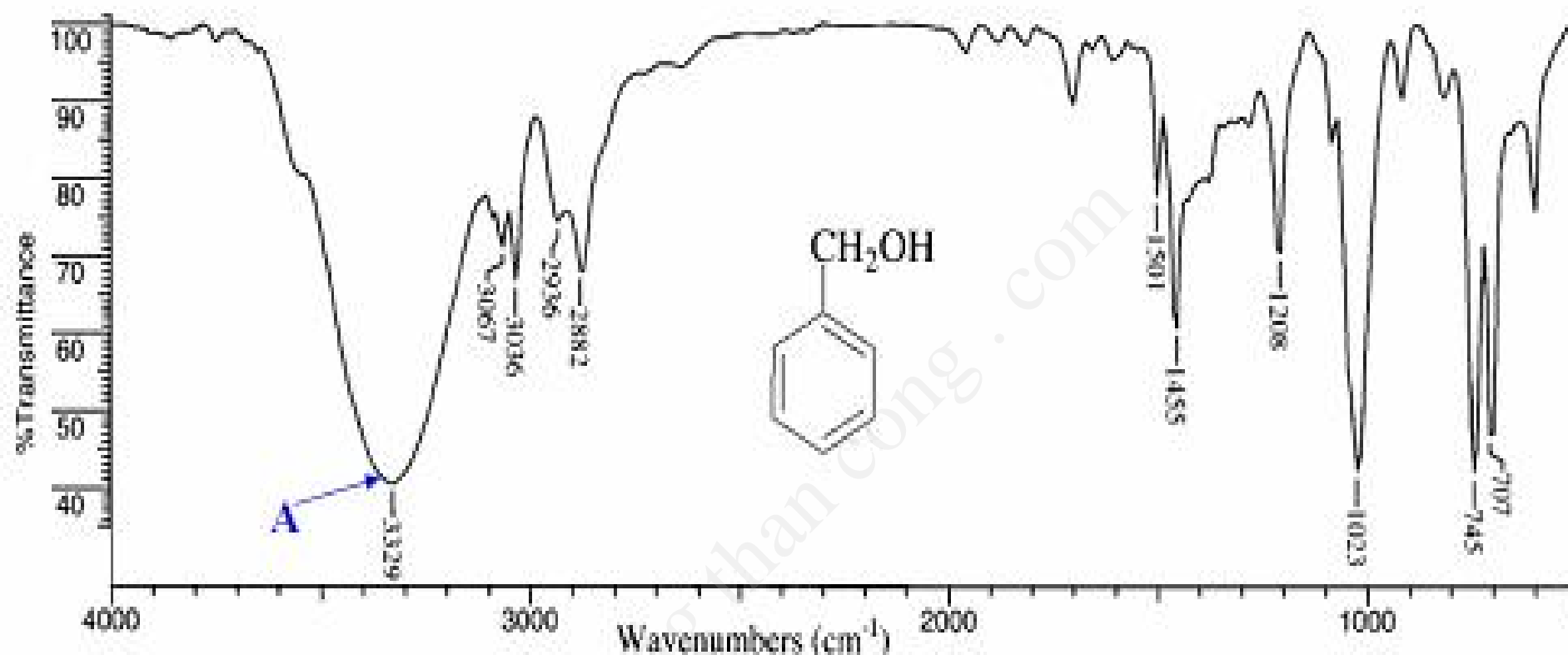


FIGURE 2.16. Benzyl alcohol. O—H stretch: intermolecular hydrogen bonded, 3329 cm^{-1} . C—H stretch: aromatic $3100\text{--}3000\text{ cm}^{-1}$. C—H stretch: methylene, $2940\text{--}2860\text{ cm}^{-1}$. Overtone or combination bands, $2000\text{--}1667\text{ cm}^{-1}$. C=C ring stretch, $1501, 1455\text{ cm}^{-1}$, overlapped by CH_2 scissoring, about 1471 cm^{-1} . O—H bend, possibly augmented by C—H in-plane bend, 1209 cm^{-1} . C—O stretch, primary alcohol (see Table 2.5) 1023 cm^{-1} . Out-of-plane aromatic C—H bend, 745 cm^{-1} . Ring C=C bend, 707 cm^{-1} .

A: Giãn O-H (Liên kết Hydrogen ngoại phân tử), 3329 cm^{-1}

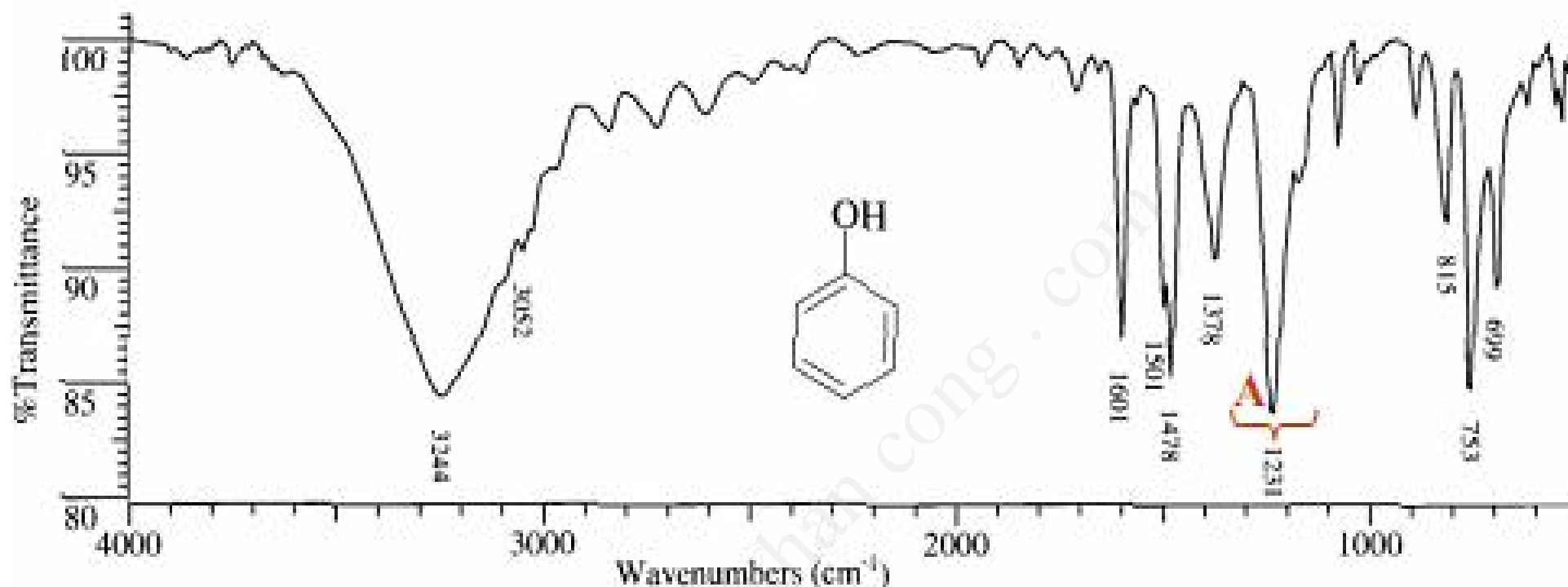
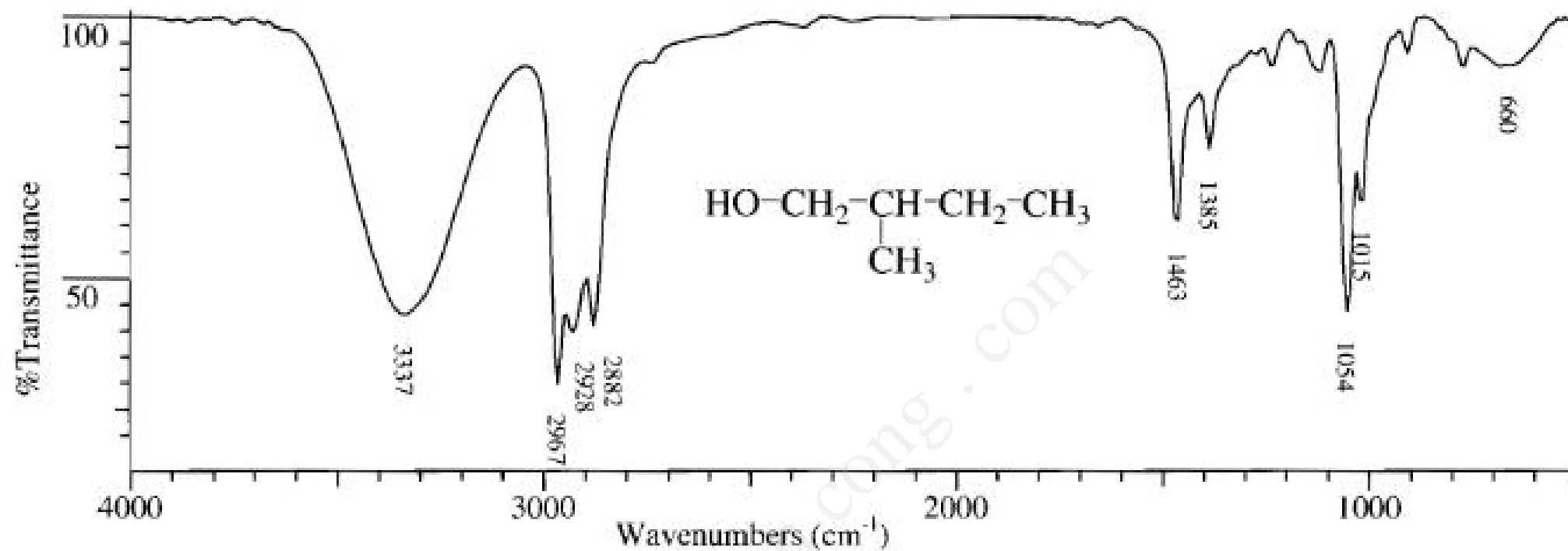


FIGURE 2.17. Phenol (Melt). Broad intermolecular hydrogen bonded, O—H stretch, 3244 cm^{-1} . Aromatic C—H stretch, 3052 cm^{-1} . Overtone or combination bands, $2000\text{--}1667\text{ cm}^{-1}$. C=C ring stretch, $1601, 1501, 1478\text{ cm}^{-1}$. In-plane O—H bend, 1378 cm^{-1} . C—O stretch, 1231 cm^{-1} . Out-of-plane C—H bend, $815, 753\text{ cm}^{-1}$. Out-of-plane ring C=C bend, 699 cm^{-1} . (Broad) hydrogen-bonded, out-of-plane O—H bend, about 650 cm^{-1} .

A:Giãn C-O, 1231 cm^{-1}



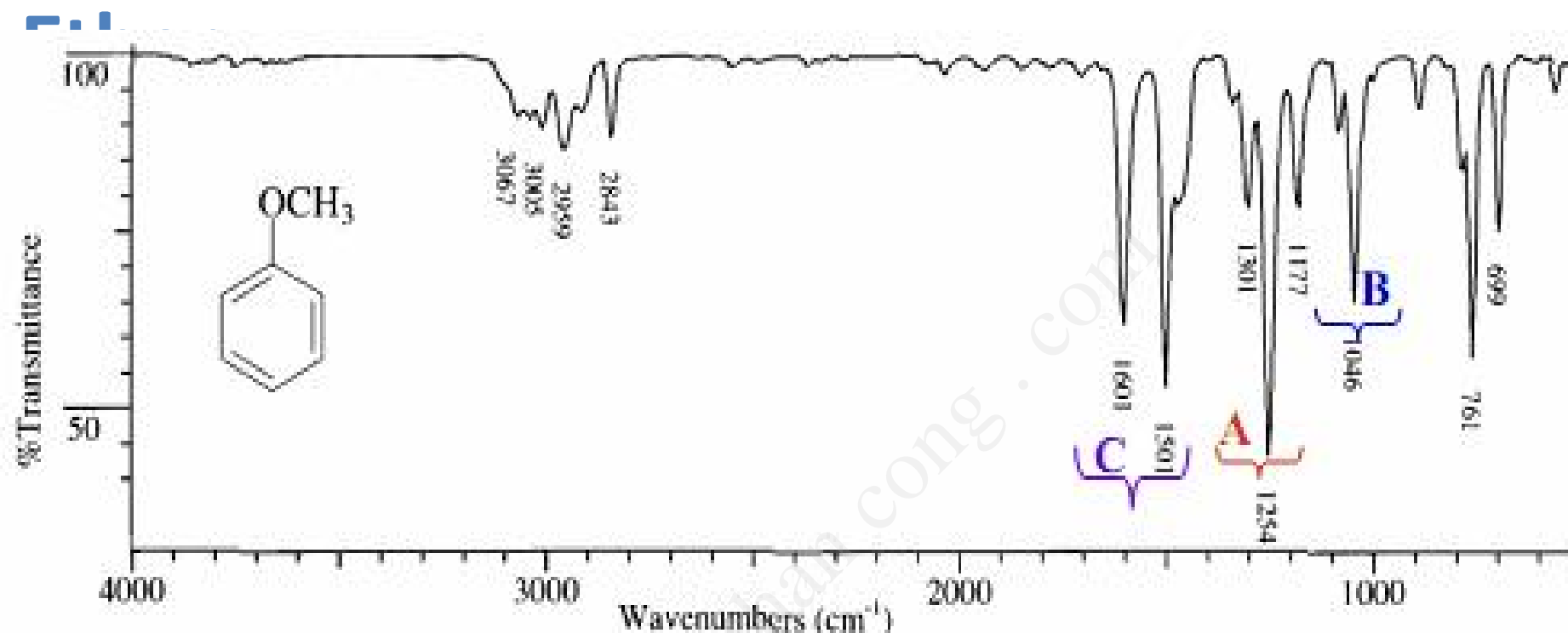


FIGURE 2.19. Anisole. Aromatic C—H stretch, 3067, 3030, 3005 cm^{-1} . Methyl C—H stretch, 2950, 2843 cm^{-1} . Overtone-combination region, 2000–1650 cm^{-1} . C=C ring stretch, 1601, 1501 cm^{-1} . Asymmetric C—O—C stretch, 1254 cm^{-1} . Symmetric C—O—C stretch, 1046 cm^{-1} . Out-of-plane C—H bend, 784, 761 cm^{-1} . Out-of-plane ring C=C bend, 699 cm^{-1} .

A: Giãn bất đối xứng C-O-C: 1254 cm^{-1} .

B: Giãn đối xứng C-O-C: 1046 cm^{-1} .

C: Giãn C=C của vòng: 1601 và 1501 cm^{-1} .

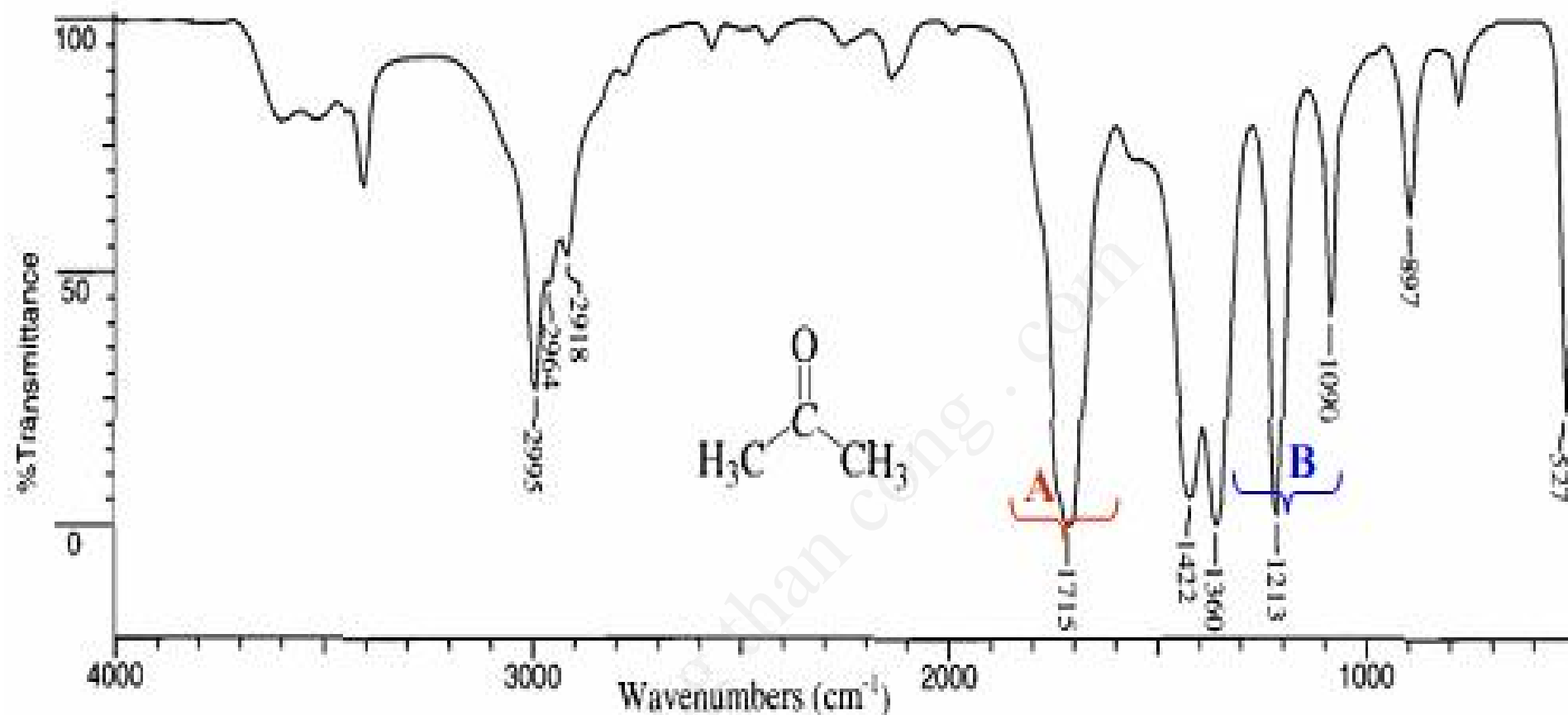


FIGURE 2.20. Acetone. ν_{as} , Methyl, 2995 cm^{-1} . ν_{as} , Methylene, 2964 cm^{-1} . ν_s , Methyl, 2918 cm^{-1} . Normal C=O stretch, 1715 cm^{-1} . δ_{as} , CH₃, 1422 cm^{-1} . δ_s , CH₃, 1360 cm^{-1} . C—CO—C stretch and bend, 1213 cm^{-1} .

A: Dao động giãn C=O: 1715 cm^{-1}

B: Dao động giãn và uốn C-CO-C: 1213 cm^{-1}

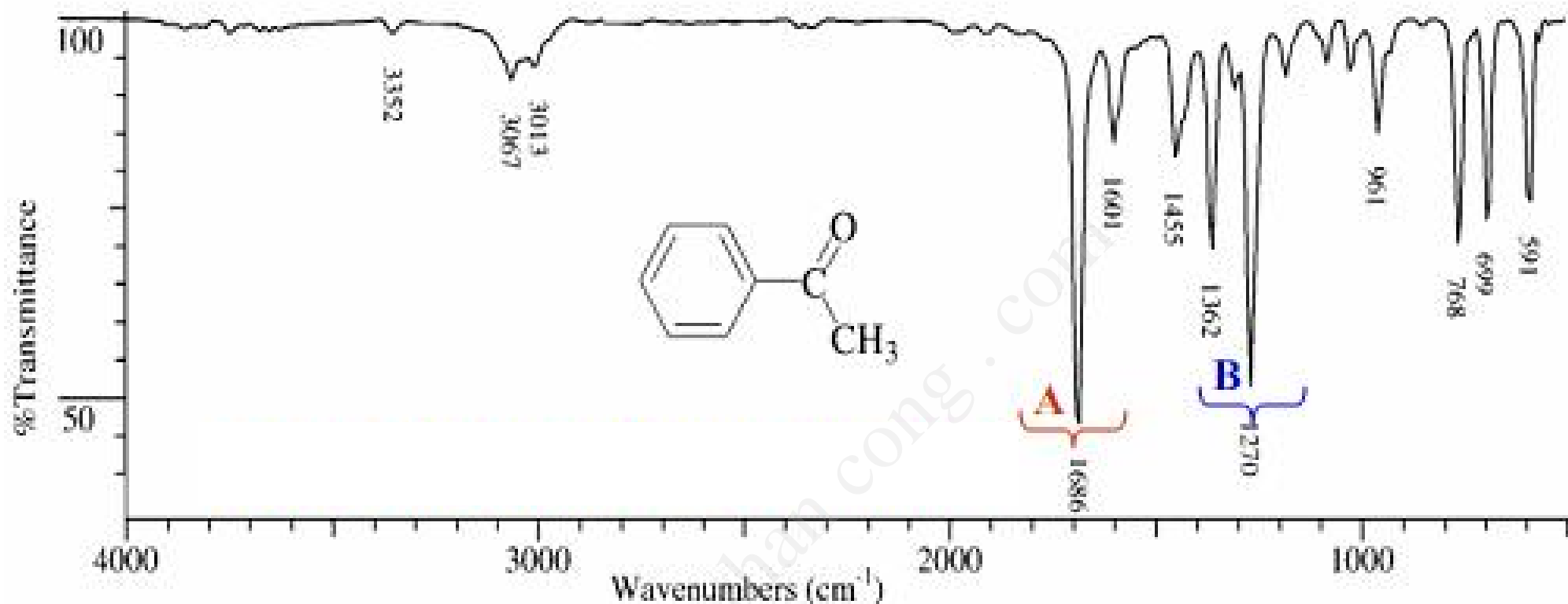


FIGURE 2.21. Acetophenone. Overtone of C=O stretch 3352 cm^{-1} ; frequency about twice that of C=O stretch. C=O stretch, 1686 cm^{-1} , lower frequency than observed in Figure 2.20 because of the conjugation with the phenyl group.

B: Dao động giãn và uốn của C-CO-C, 1270 cm^{-1}

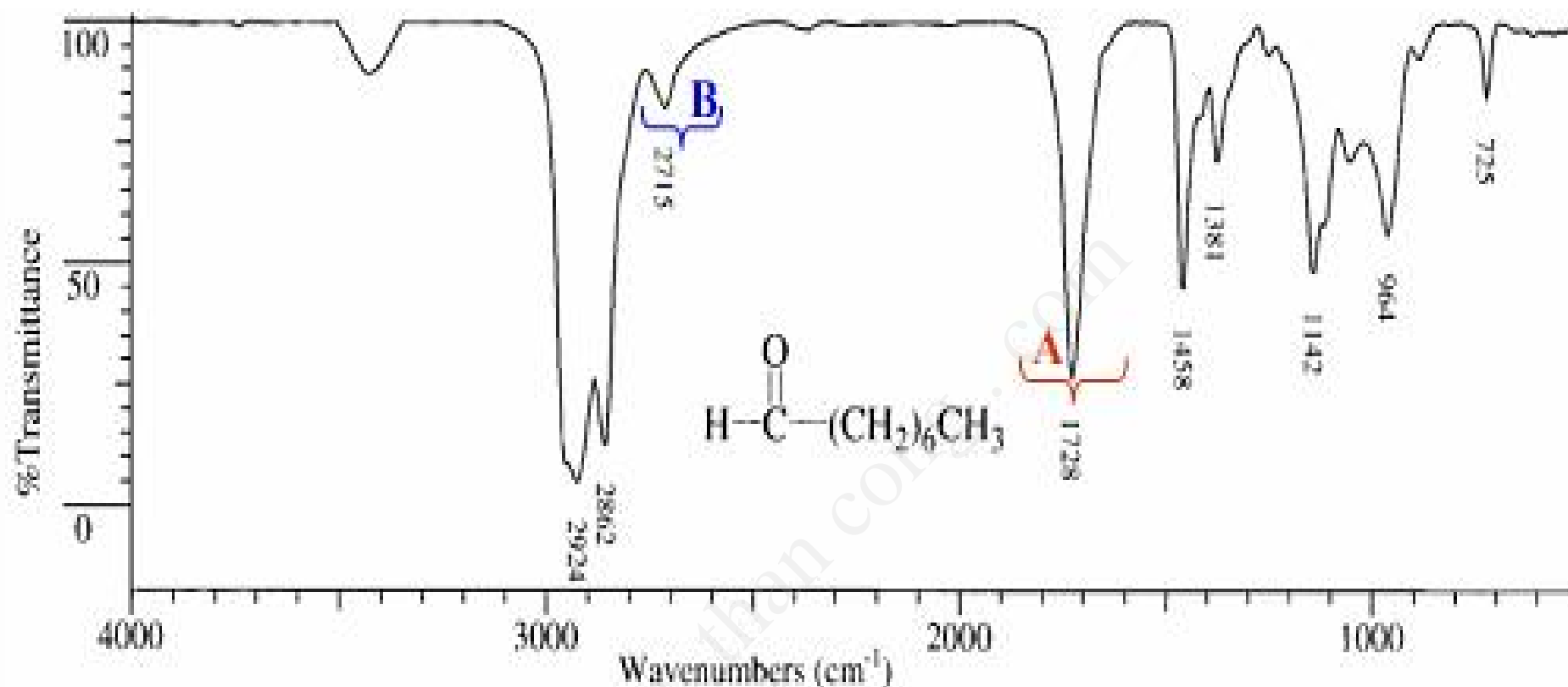


FIGURE 2.22. Octanal. Aliphatic, 2980–2860 cm^{-1} (see Figures 2.8). Aldehydic, C—H stretch, 2715 cm^{-1} . Normal aldehydic C=O stretch, 1728 cm^{-1} . Aldehydic C—H bend, 1381 cm^{-1} .

A: Dao động giãn C=O, 1728 cm^{-1}

B: Dao động giãn C-H của nhóm -CHO, 2715 cm^{-1}

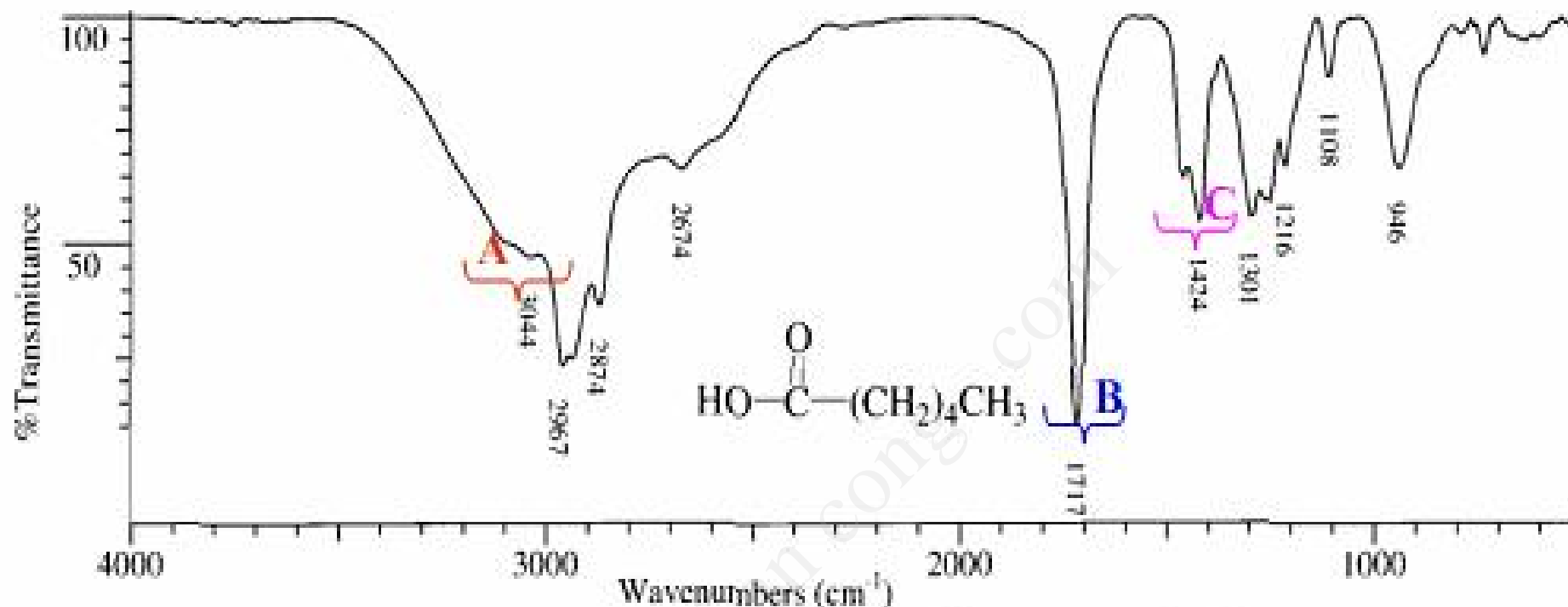


FIGURE 2.23. Hexanoic acid. Broad O—H stretch, $3300\text{--}2500\text{ cm}^{-1}$. C—H stretch (see Figure 2.8), 2967 , 2874 , 2855 cm^{-1} . Superimposed upon O—H stretch. Normal, dimeric carboxylic C=O stretch, 1717 cm^{-1} . C—O—H in-plane bend, 1424 cm^{-1} . C—O stretch, dimer, 1301 cm^{-1} . F.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

A: Dao động giãn O-H, trên 3000 cm^{-1}

B: Dao động giãn C=O, 1717 cm^{-1} (Dạng dimer)

C: Dao động uốn C-O-H, 1424 cm^{-1}

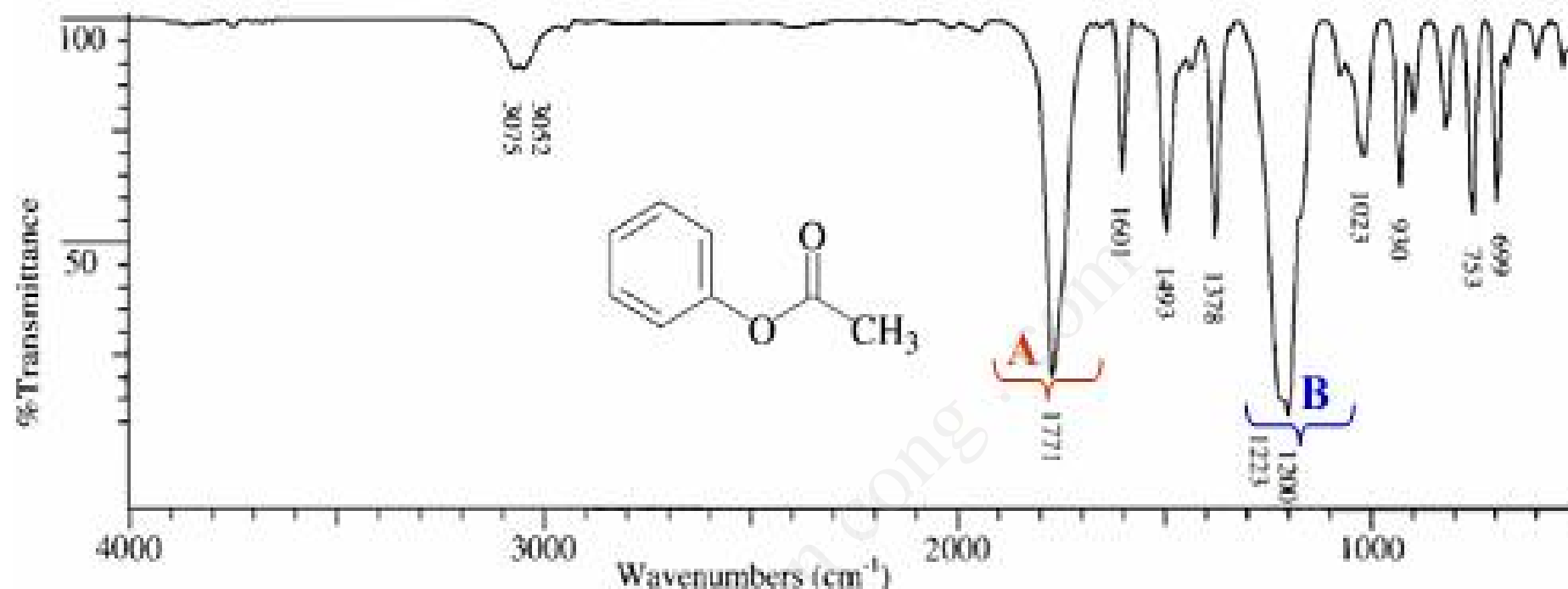


FIGURE 2.25. Phenyl acetate. Aromatic C—H stretch, 3075, 3052 cm^{-1} , C=O stretch, 1771 cm^{-1} ; this is higher frequency than that from a normal ester C=O stretch (1740 cm^{-1} ; see Table 2.6) because of phenyl conjugation with alcohol oxygen; conjugation of an aryl group or other unsaturation with the carbonyl group causes this C=O stretch to be at lower than normal frequency (e.g., benzoates absorb at about 1724 cm^{-1}). Ring C=C stretch, 1601 cm^{-1} , $\delta_{\text{as}}\text{CH}_3$, 1493 cm^{-1} , $\delta_{\text{s}}\text{CH}_3$, 1378 cm^{-1} . Acetate C(=O)—O stretch, 1223 cm^{-1} . O—C=C asymmetrical stretch, 1200 cm^{-1} .

A: Giãn C=O: 1771 cm^{-1}

B: Giãn bất đối xứng O-C-C cm^{-1} : 1200 cm^{-1}

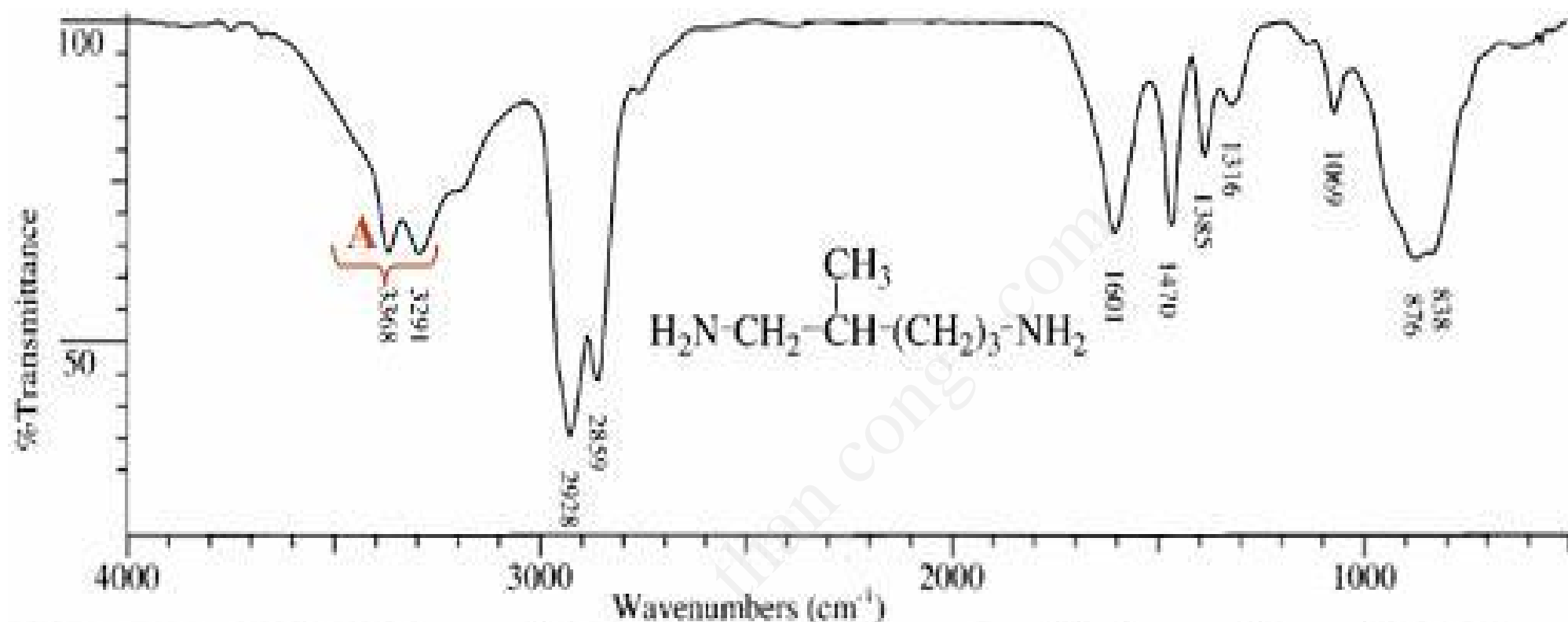
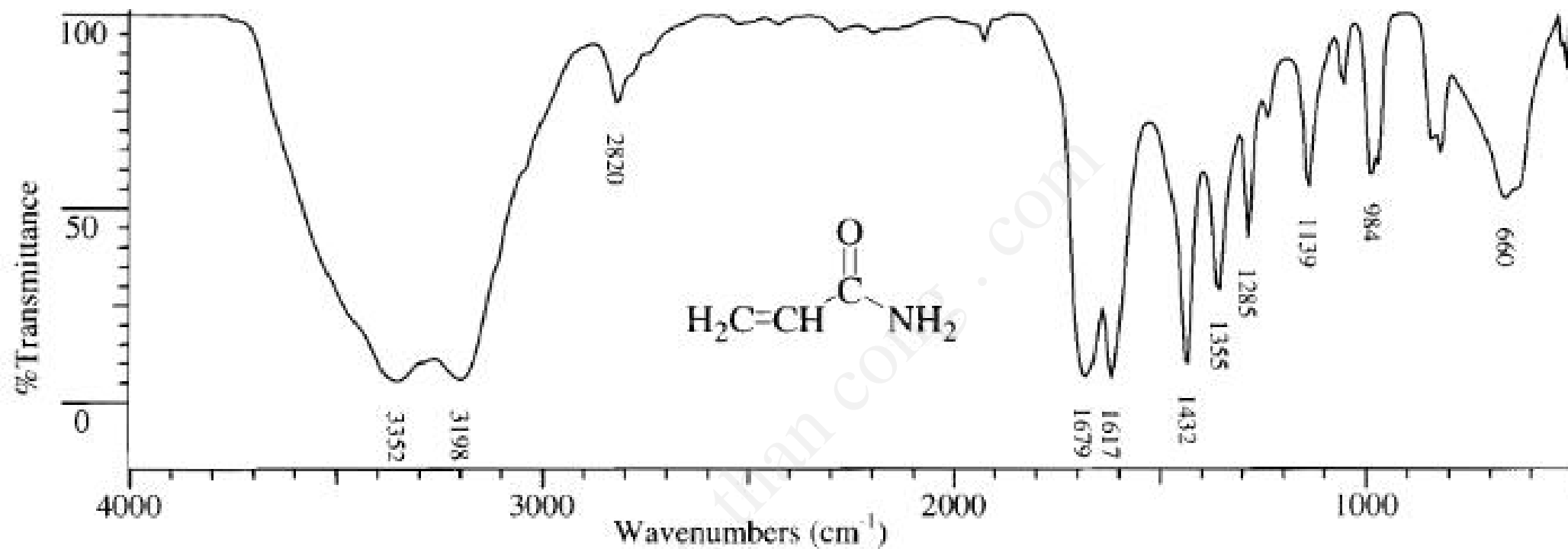


FIGURE 2.29. 2-Methyl-1,5-pentanediamine. N—H stretch, hydrogen-bonded, primary amine coupled doublet: asymmetric, 3368 cm⁻¹. Symmetric, 3291 cm⁻¹. (Shoulder at about 3200 cm⁻¹, Fermi resonance band with overtone of band at 1601 cm⁻¹). Aliphatic C—H stretch, 2928, 2859 cm⁻¹. N—H bend (scissoring) 1601 cm⁻¹. δCH_2 (scissoring), 1470 cm⁻¹. C—N stretch, 1069 cm⁻¹. N—H wag (neat sample), ~900–700 cm⁻¹.

A: Giãn N-H (Có liên kết Hydrogene), mũi đôi: giãn bất đối xứng (3368 cm-1) và giãn đối xứng (3291 cm-1).

Acrylamide



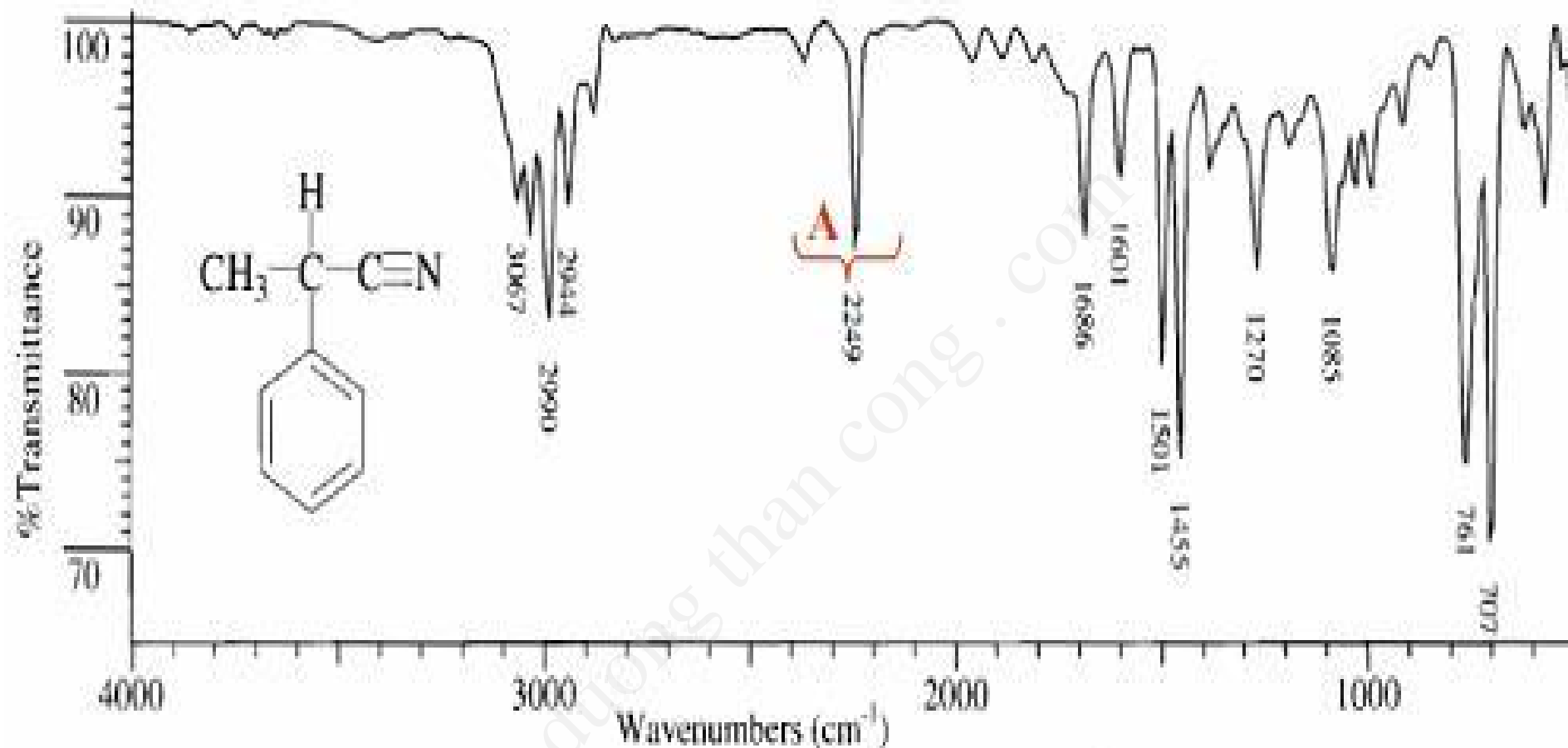


FIGURE 2.31. α -Methylbenzyl cyanide. Aromatic C—H stretch, 3067, 3030 cm^{-1} . Aliphatic C—H stretch, 2990, 2944 cm^{-1} . $\text{C}\equiv\text{N}$ stretch, 2249 cm^{-1} . Out-of-plane C—H bend (aromatic ring), 761 cm^{-1} .

A: Giãn $\text{C}\equiv\text{N}$, 2249 cm^{-1} .