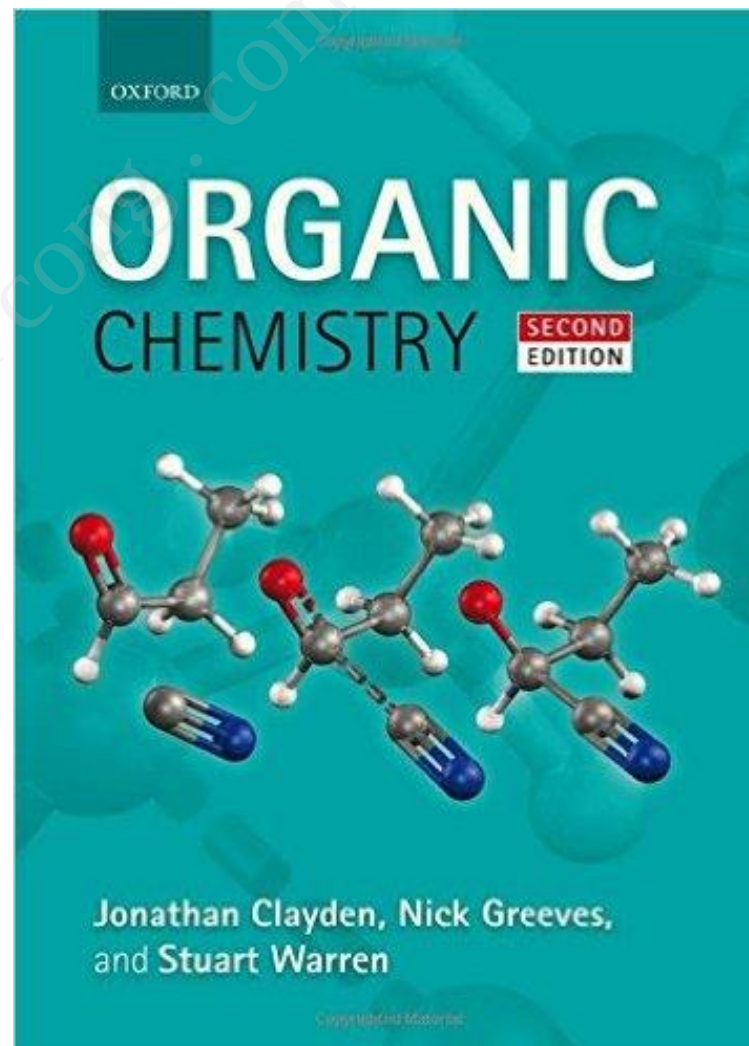
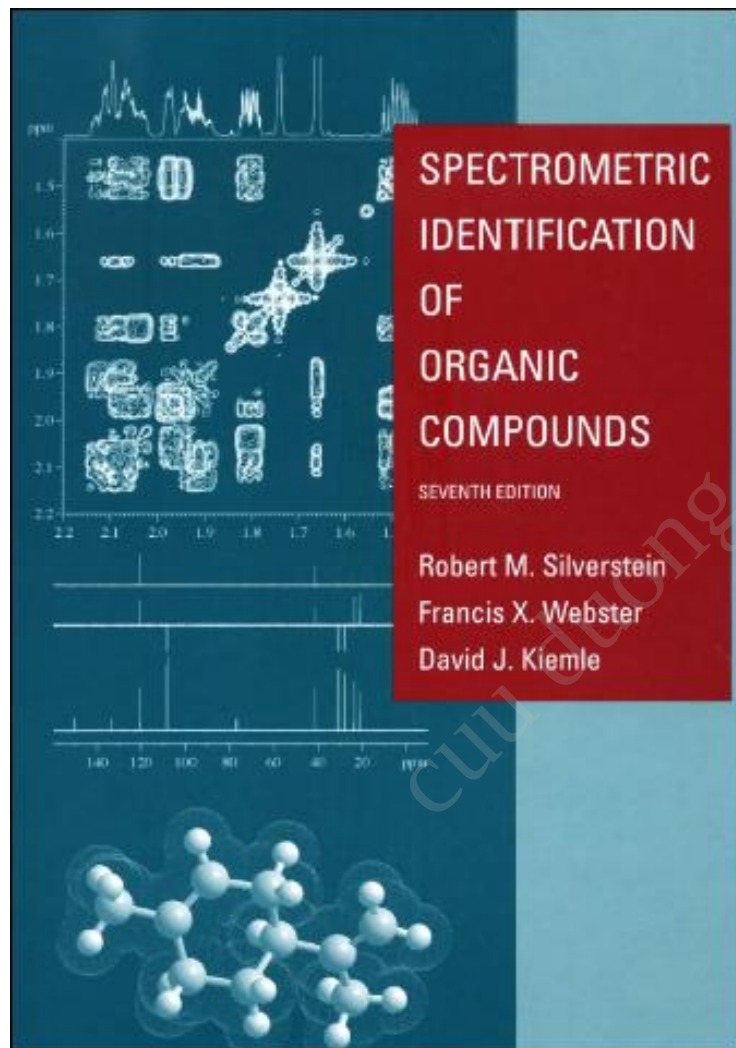


TÀI LIỆU THAM KHẢO

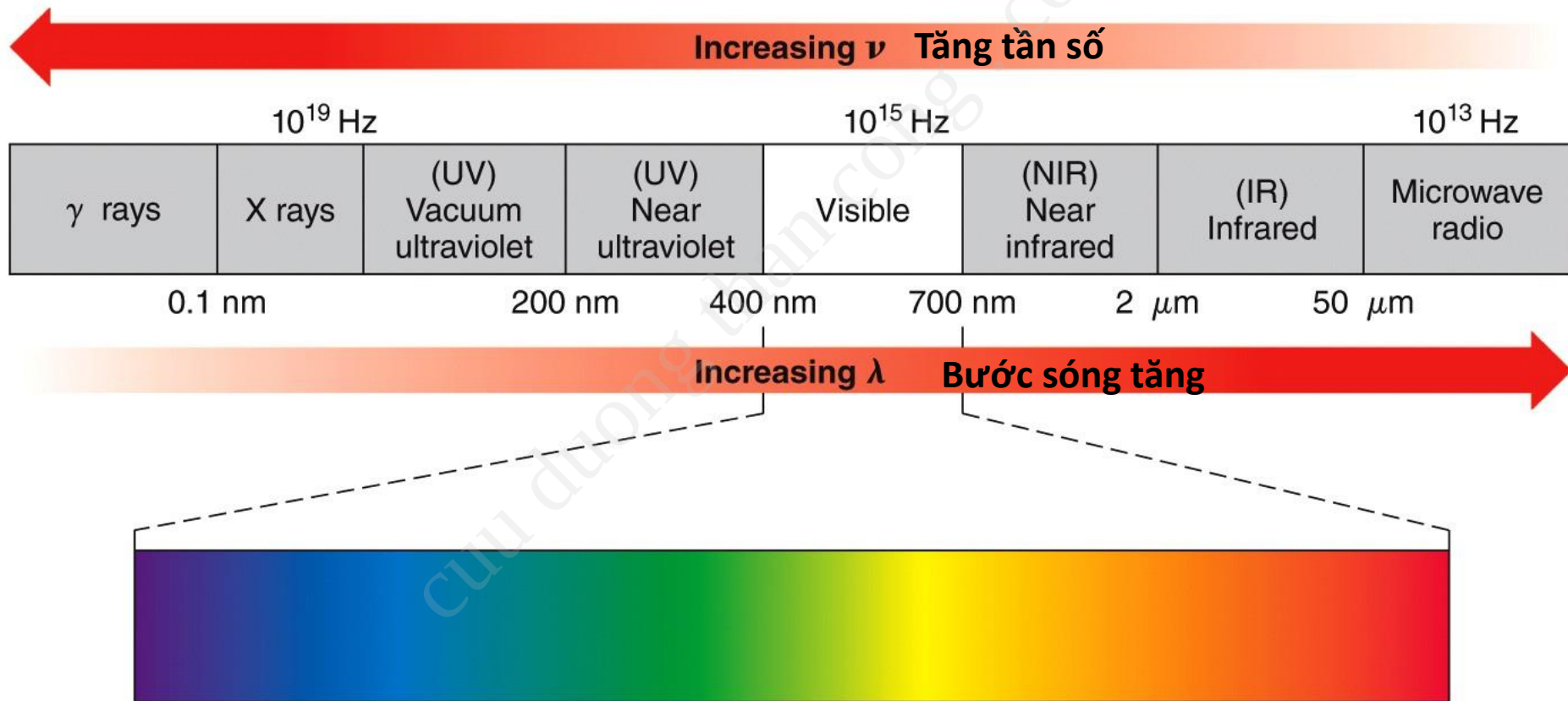


TRONG BÀI TRƯỚC

- Quang phổ bao gồm tương tác giữa vật chất và ánh sáng (trường điện từ)
- Tính chất ánh sáng gồm tính chất sóng và tính hạt còn gọi là photon
- Tính chất ánh sáng gồm **bước sóng (λ , m) và tần số (ν , Hz)**

GIỚI THIỆU VỀ PHỔ NGHIỆM

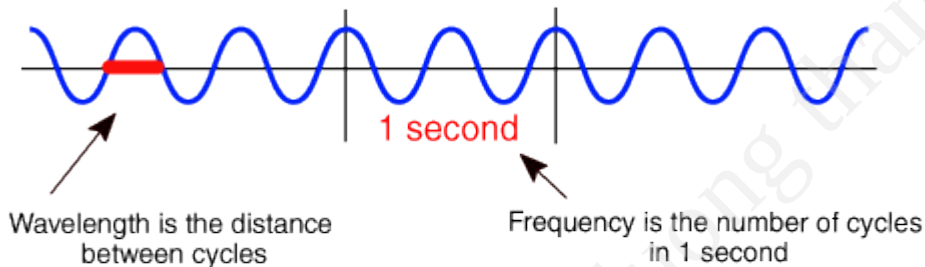
- Chỉ có một phần trường điện từ là nhìn thấy được – vùng khả kiến (Vis)



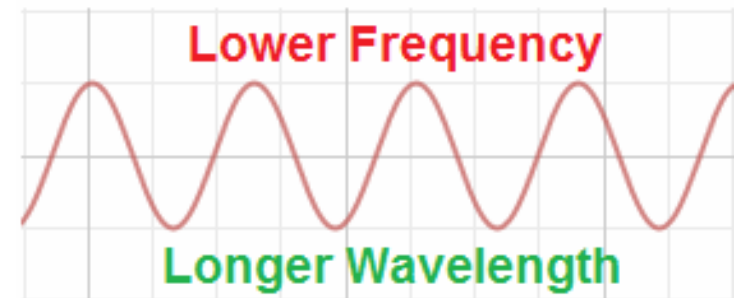
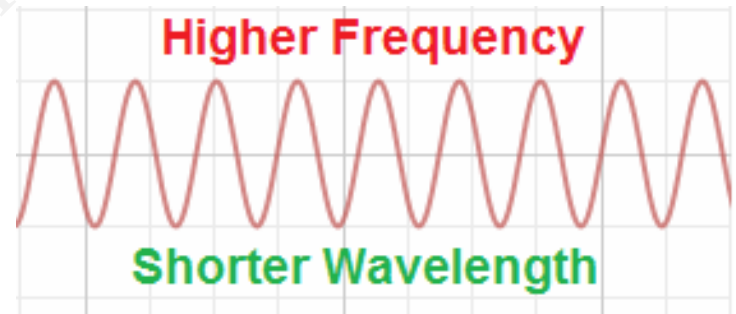
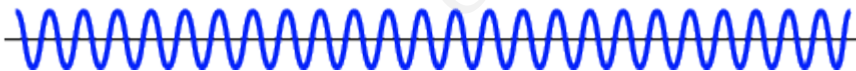
GIỚI THIỆU VỀ PHỔ NGHIỆM

- Tần số và bước sóng có tính nghịch đảo: bước sóng (λ) càng dài, tần số (ν) càng thấp và ngược lại ($c = \lambda\nu$). Tần số cao = năng lượng cao.

LOWER FREQUENCY = LONGER WAVELENGTH

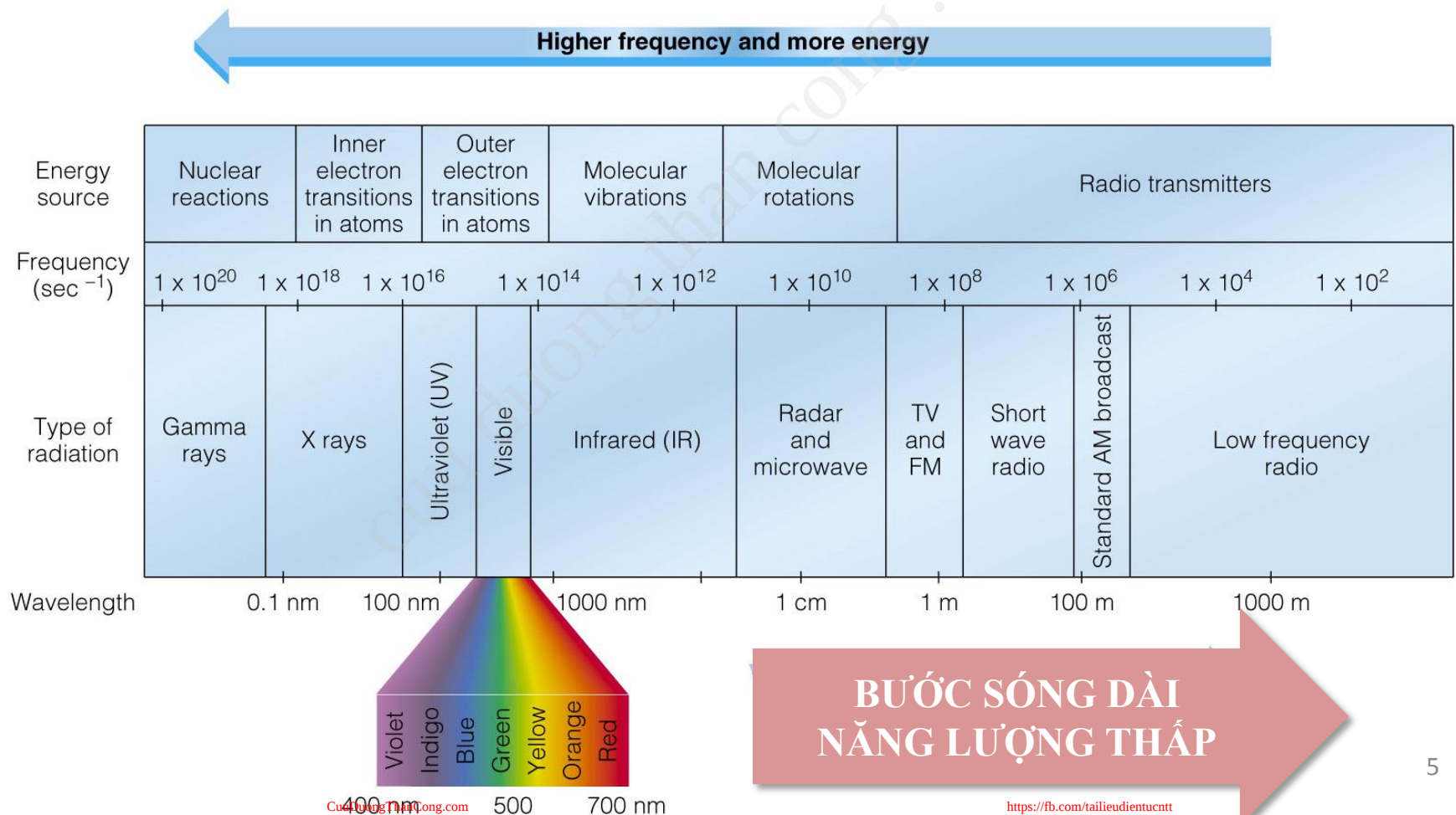


HIGHER FREQUENCY = SHORTER WAVELENGTH



GIỚI THIỆU VỀ PHỔ NGHIỆM

- bước sóng (λ) càng dài, tần số (ν) càng thấp và ngược lại ($c = \lambda\nu$).
Tần số cao = năng lượng cao.



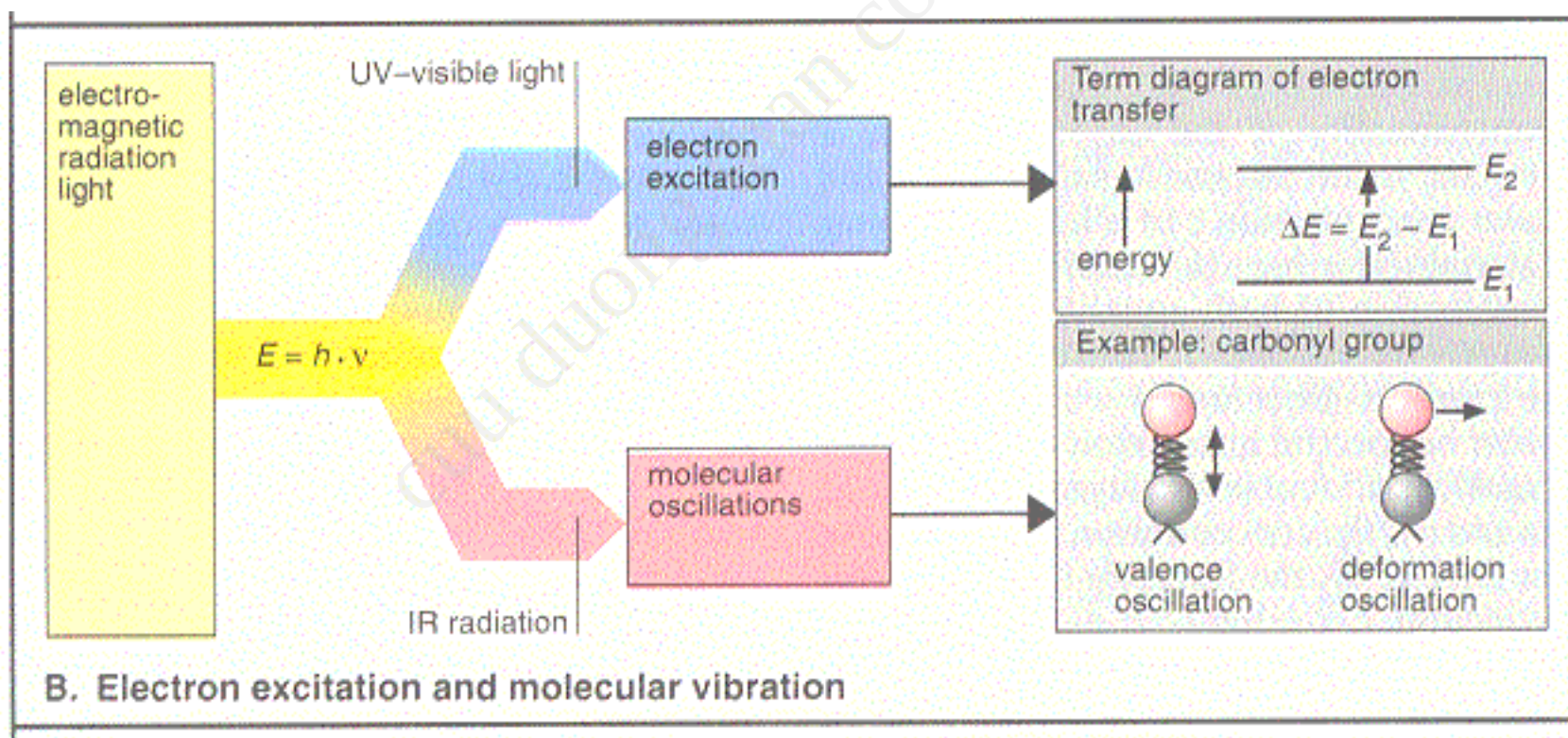
GIỚI THIỆU VỀ PHỔ NGHIỆM

- Tùy vào bước sóng sử dụng, người ta có nhiều loại phương pháp phân tích phổ khác nhau

Loại phổ	Vùng điện từ tương tác	Ghi chú
Phổ NMR	Vùng sóng radio	Proton hoặc carbon chuyển trạng thái spin
Phổ IR	Vùng hồng ngoại	Xác định nhóm chức/liên kết
Phổ UV-Vis	Vùng tử ngoại & khả kiến	Tương tác với hệ có liên kết π trong hợp chất

Phổ hồng ngoại và tử ngoại

- UV-Vis – kích thích π -electrons hoặc n-electrons
- IR – liên kết dao động – Đám mây e- dao động



Phổ hồng ngoại

Vùng bức xạ hồng ngoại (IR) là một vùng phổ bức xạ điện từ rộng nằm giữa vùng trông thấy và vùng vi ba; vùng này có thể chia thành 3 vùng nhỏ:

- Near-IR $4000\text{--}1000\text{ cm}^{-1}$ ($2.5\text{--}10\text{ }\mu\text{m}$)
- Mid-IR $4000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$ ($2.5\text{--}25\text{ }\mu\text{m}$)
- Far-IR $4000\text{--}100\text{ cm}^{-1}$ ($25\text{--}1000\text{ }\mu\text{m}$)

Phương pháp phân tích phổ hồng ngoại nói ở đây là vùng phổ nằm trong vùng có số sóng $4000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$.

Vùng này cung cấp cho ta những thông tin quan trọng về các dao động của các phân tử do đó là các thông tin về cấu trúc của các phân tử

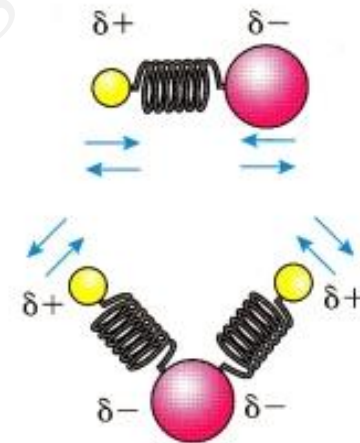
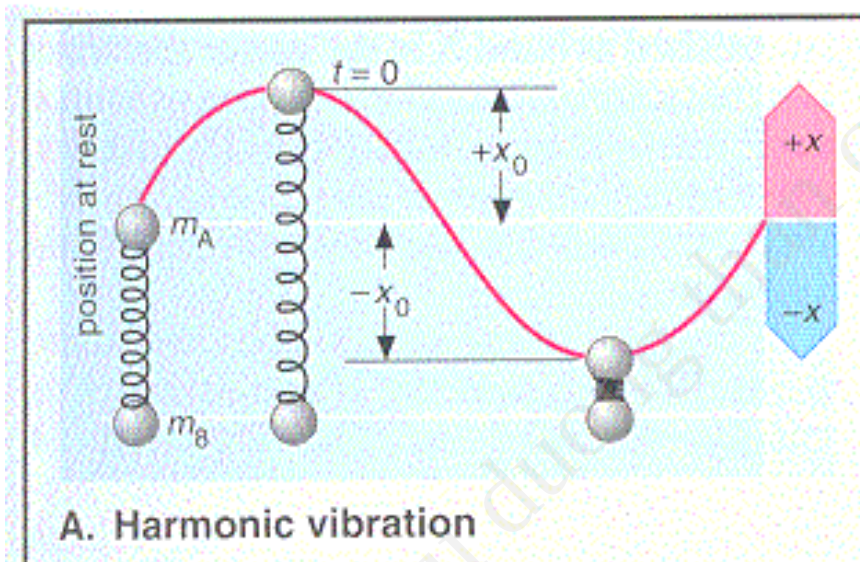
Để có thể hấp thụ bức xạ hồng ngoại, phân tử đó phải đáp ứng các yêu cầu sau:

- Độ dài sóng chính xác của bức xạ: một phân tử hấp thụ bức xạ hồng ngoại chỉ khi nào **tần số dao động tự nhiên của một phần phân tử** (tức là các nguyên tử hay các nhóm nguyên tử tạo thành phân tử đó) **cũng là tần số của bức xạ tới.**

- Một phân tử chỉ **hấp thụ bức xạ hồng ngoại** khi nào sự **hấp thụ đó gây nên SỰ BIẾN THIÊN momen lưỡng cực** của chúng.

DAO ĐỘNG TRONG PHÂN TỬ HẤP THU NĂNG LƯỢNG VÙNG HỒNG NGOẠI

- Định luật Hook: phụ thuộc vào khối lượng nguyên tử

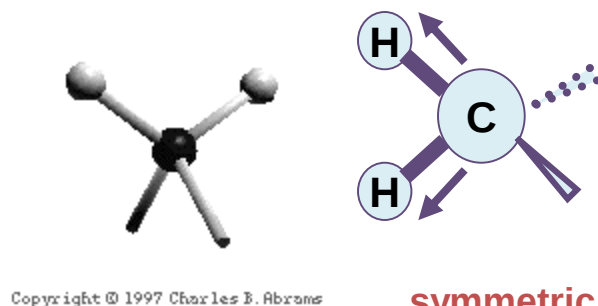


λ (m): bước sóng, độ dài sóng

- Tần số (frequency, Hz) $\nu = c/\lambda$
- Số sóng (wavenumber, cm^{-1})

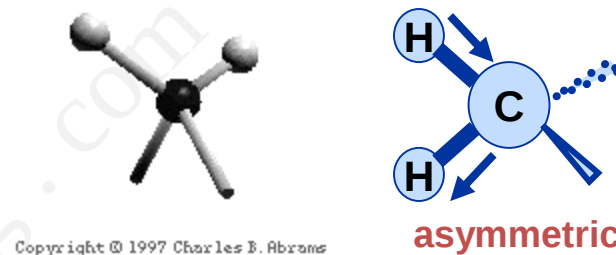
$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} \quad (\text{cm}^{-1})$$

- Phân tử dao động theo 2 loại dao động chính
- Dao động kéo giãn (dao động hóa trị) – stretch (ν)** – dao động dọc theo trục của liên kết



symmetric

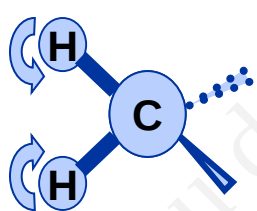
Dao động kéo giãn đối xứng, ν_s
(symmetric stretching)



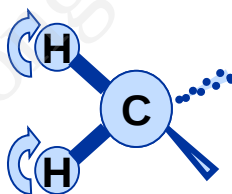
asymmetric

Dao động kéo giãn bất đối xứng, ν_{as}
(asymmetric stretching)

- Dao động biến dạng – bend (δ)** – dao động **KHÔNG** theo trục của liên kết



scissor

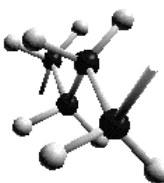


rock

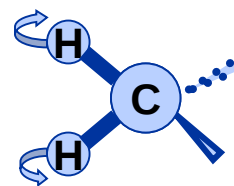
in plane



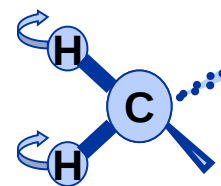
Copyright © 1997 Charles B. Abrams



Copyright © 1997 Charles B. Abrams

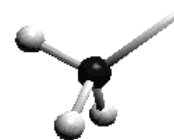


twist



wag

out of plane



Copyright © 1997 Charles B. Abrams

Trong mặt phẳng

CuuDuongPhamCong.com

Ngoài mặt phẳng

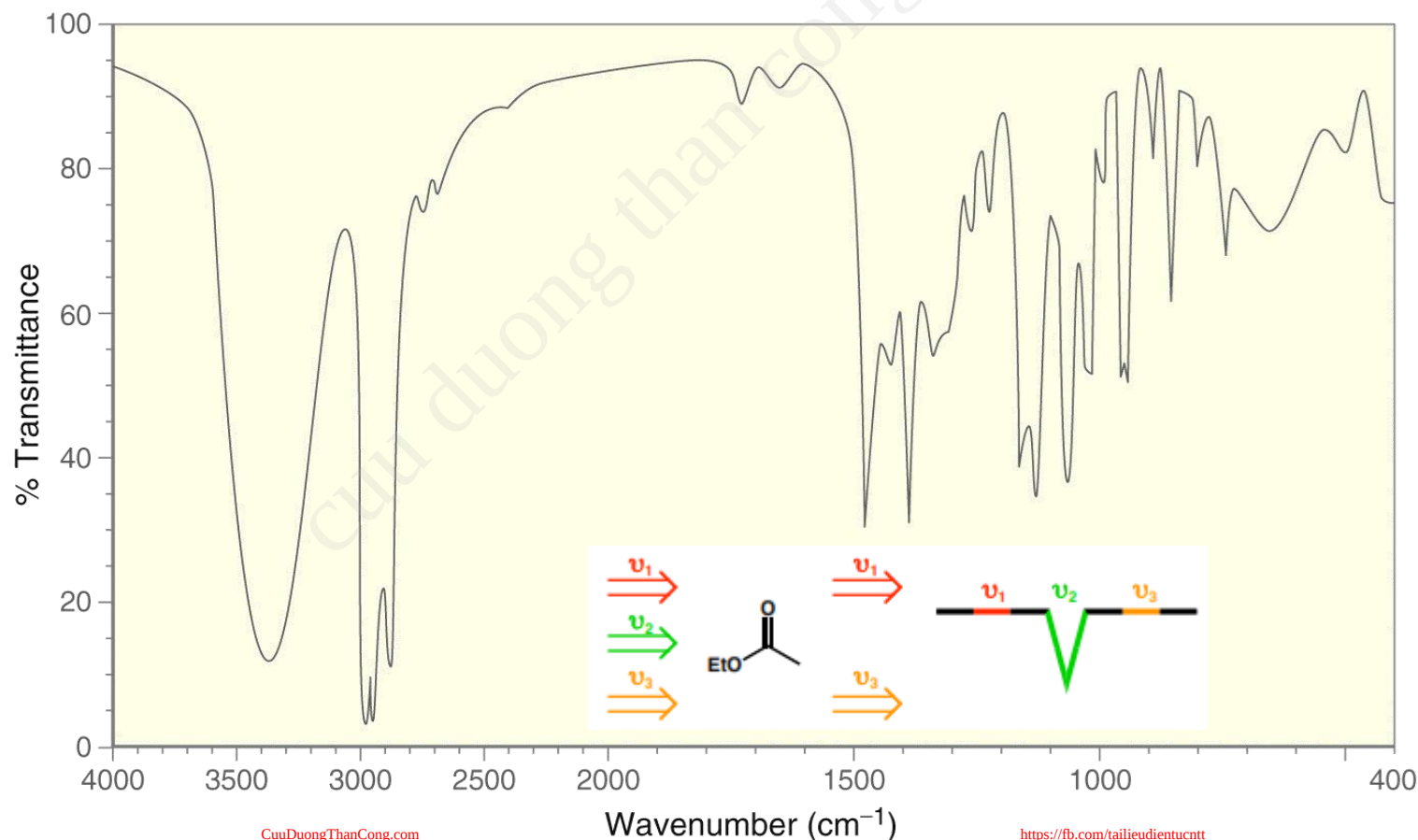
<https://fb.com/tailieuchientrung>

Mỗi loại dao động trong phân tử hấp thụ ở một tần số xác định.

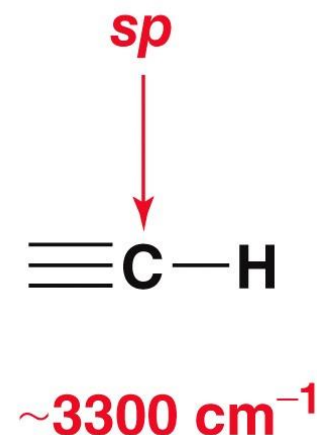
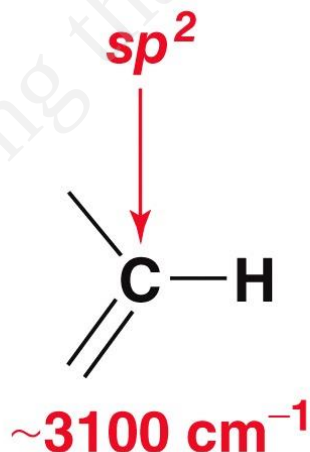
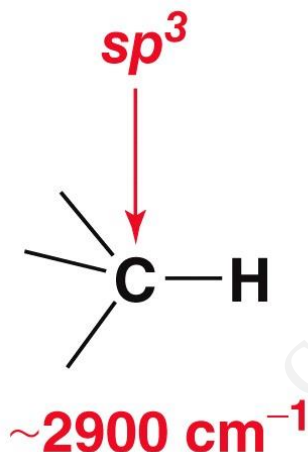
% truyền qua giảm dần khi năng lượng ở tần số tương ứng bị

hấp thụ. **Số sóng tỉ lệ thuận với tần số -> tần số cao = năng**

lượng cao = số sóng cao

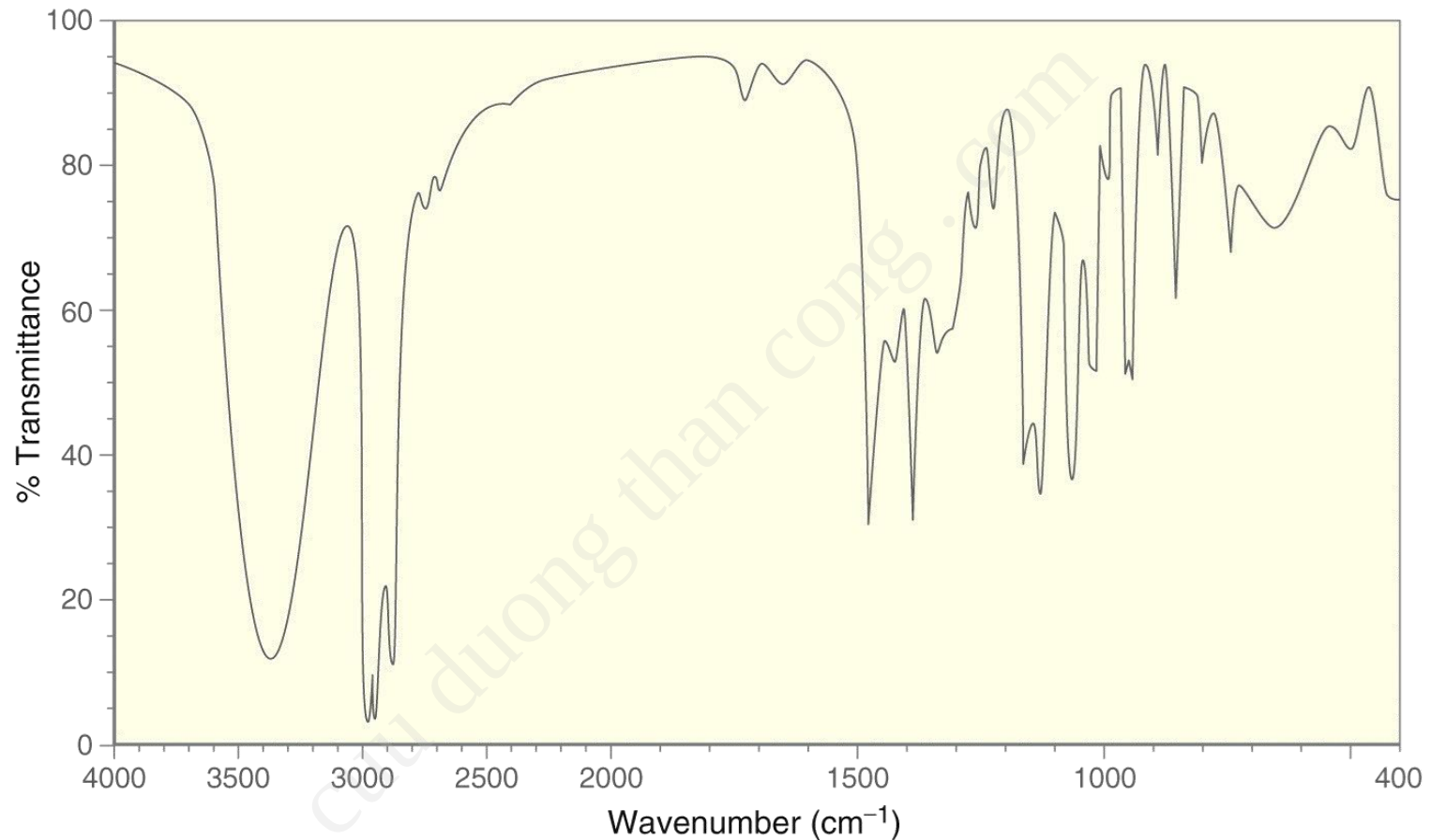


- ❖ Phổ IR giúp xác định được các loại dao động đặc trưng của các liên kết hay các nhóm chức có trong phân tử
- ❖ Các liên kết hay các nhóm chức **C-C; C=C; C≡C; C-H; C-O; C=O; C-N; O-H; N-H; C ≡ N ...**



- Trục hoành biểu thị số sóng, cm^{-1}
- ν = tần số; c = vận tốc ánh sáng; λ = bước sóng

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda \text{ (cm)}}$$



Thông tin quan trọng trên phổ IR: số sóng, cường độ và hình dạng mũi.

Số sóng trên phổ IR

- Số sóng của dao động kéo giãn phụ thuộc vào **độ bền của liên kết (bond strength)** và **khối lượng của nguyên tử** tham gia liên kết

$$\tilde{\nu} = \left(\frac{1}{2\pi C} \right) \left(\frac{f}{m_{\text{red}}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

force constant (bond strength)

reduced mass = $\left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right)$

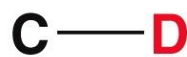
- Liên kết ngắn hơn, bền hơn và nguyên tử nhỏ hơn sẽ hấp thụ tần số cao hơn (số sóng lớn hơn)

TABLE 2.1 IR Absorption Ranges

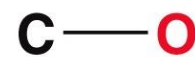
Bond Type	Force Constant <i>f</i> in dyne/cm
C—O	5.0×10^5
C—C	4.5×10^5
C—N	4.9×10^5
C=C	9.7×10^5
C=O	12.1×10^5
C≡C	15.6×10^5
C—D	5.0×10^5
C—H	5.0×10^5
O—H	7.0×10^5



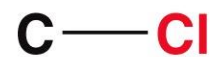
~3000 cm⁻¹



~2200 cm⁻¹



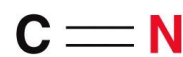
~1100 cm⁻¹



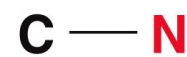
~700 cm⁻¹



~2200 cm⁻¹



~1600 cm⁻¹



~1100 cm⁻¹

Số sóng trên phổ IR

Định luật Hook

$$\tilde{\nu} = \left(\frac{1}{2\pi C} \right) \left(\frac{f}{m_{\text{red}}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

force constant (bond strength)

$$\text{reduced mass} = \left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right)$$

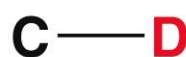
- Liên kết **NGẮN** hơn, **BỀN** hơn và **NGUYÊN TỐ NHỎ** hơn sẽ hấp thu năng lượng nhiều hơn → hấp thu **TẦN SỐ CAO HƠN (SỐ SÓNG LỚN HƠN)**

TABLE 2.1 IR Absorption Re

Bond Type	Force Constant <i>f</i> in dyne/cm
C—O	5.0×10^5
C—C	4.5×10^5
C—N	4.9×10^5
C=C	9.7×10^5
C=O	12.1×10^5
C≡C	15.6×10^5
C—D	5.0×10^5
C—H	5.0×10^5
O—H	7.0×10^5



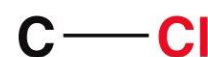
~3000 cm⁻¹



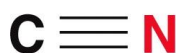
~2200 cm⁻¹



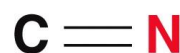
~1100 cm⁻¹



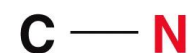
~700 cm⁻¹



~2200 cm⁻¹



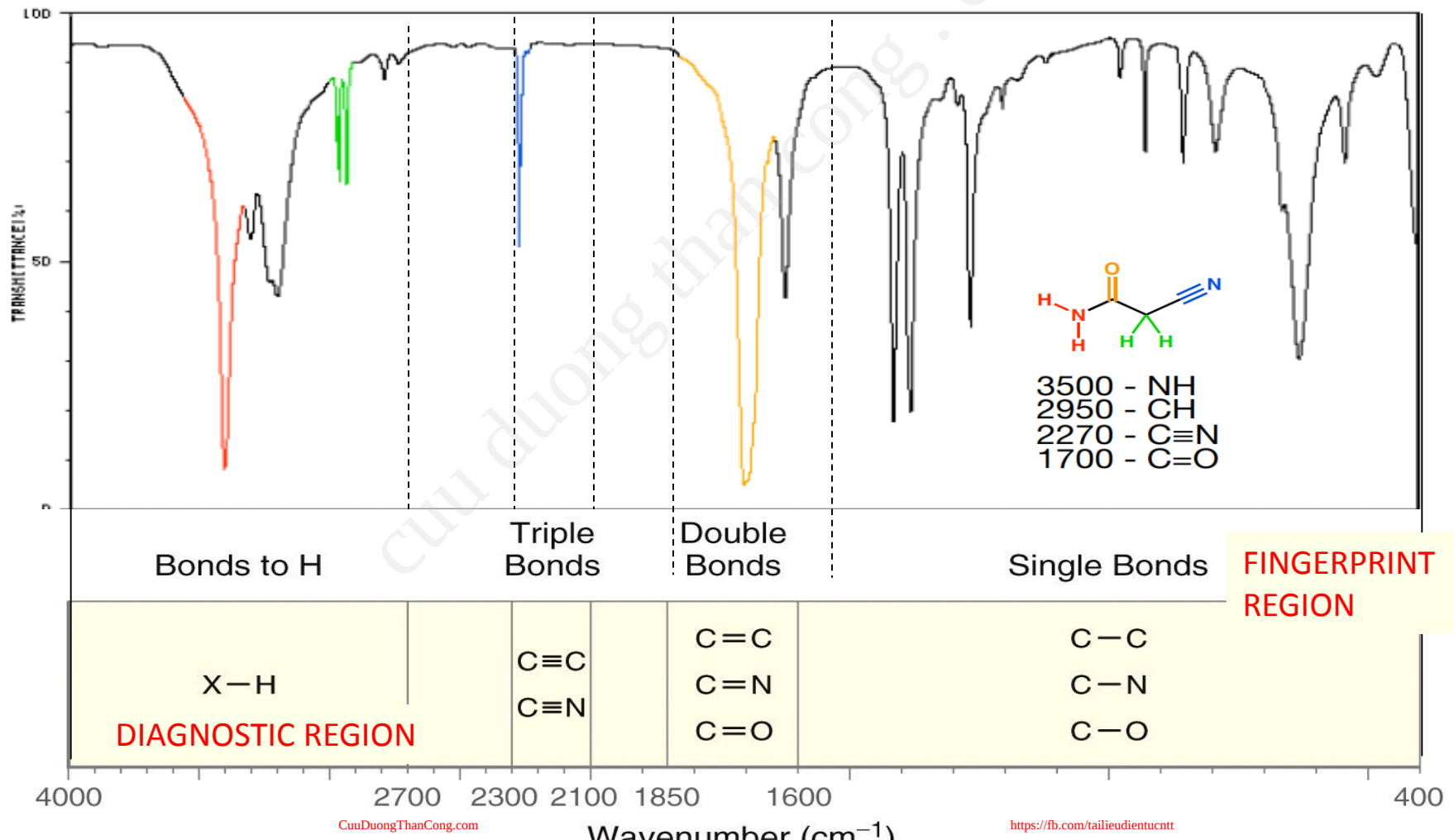
~1600 cm⁻¹



~1100 cm⁻¹

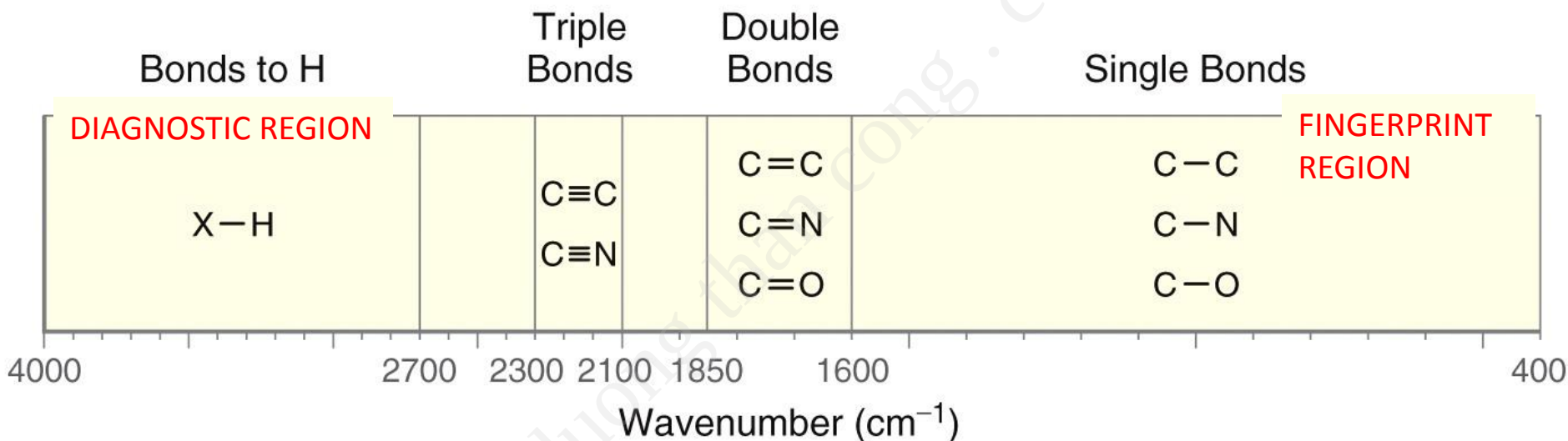
Số sóng

- Từ công thức định luật Hook và các đặc trưng liên kết, ta có được bảng xác định vùng số sóng của các liên kết



Số sóng

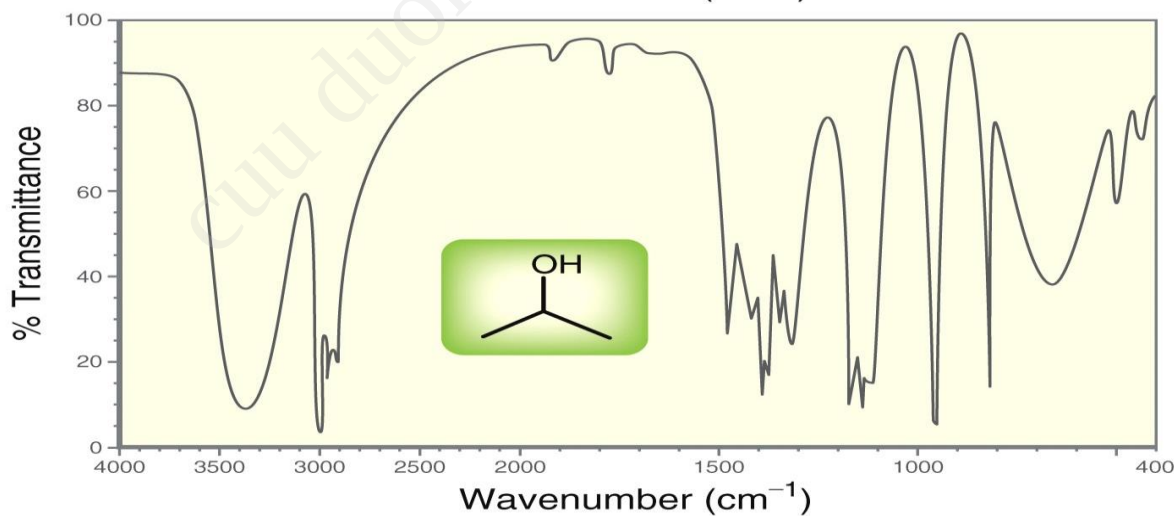
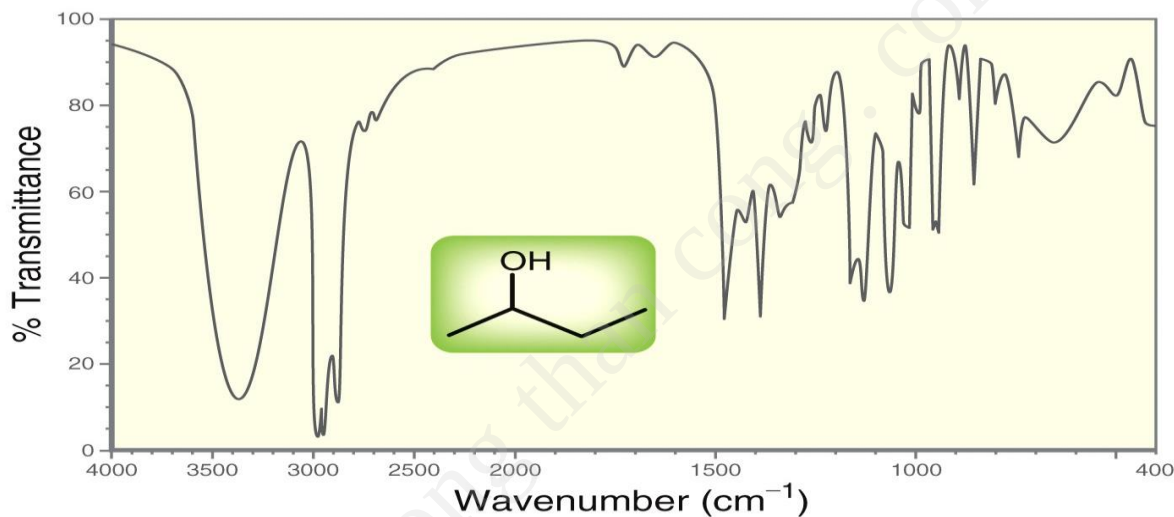
- Vùng có số sóng $> 1500 \text{ cm}^{-1}$ gọi là **VÙNG NHÓM CHỨC**, vùng đặc trưng cho dao động các nhóm chức.



- Vùng có số sóng $< 1500 \text{ cm}^{-1}$ gọi là **vùng vân tay**. Vùng này gồm nhiều dao động kéo giãn và dao động biến dạng của hầu hết liên kết đơn nên khó đọc hơn. Tuy nhiên, với hợp chất nhất định sẽ có vùng vân tay đặc trưng của các tín hiệu của hợp chất trùng lặp.

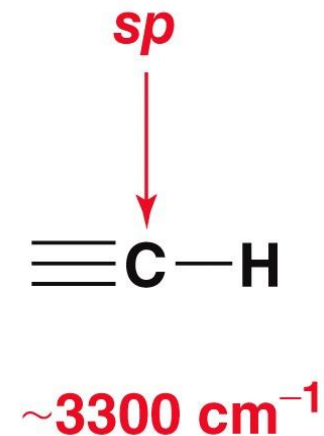
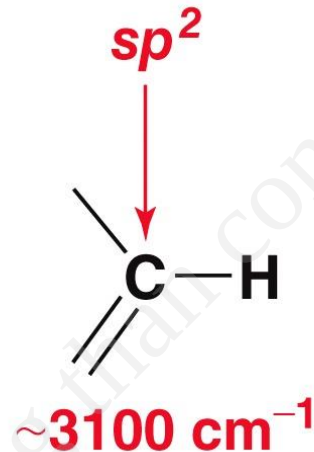
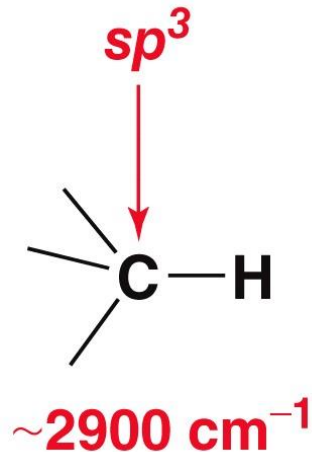
Số sóng

- Ví dụ: so sánh hai phổ



Số sóng vùng X-H

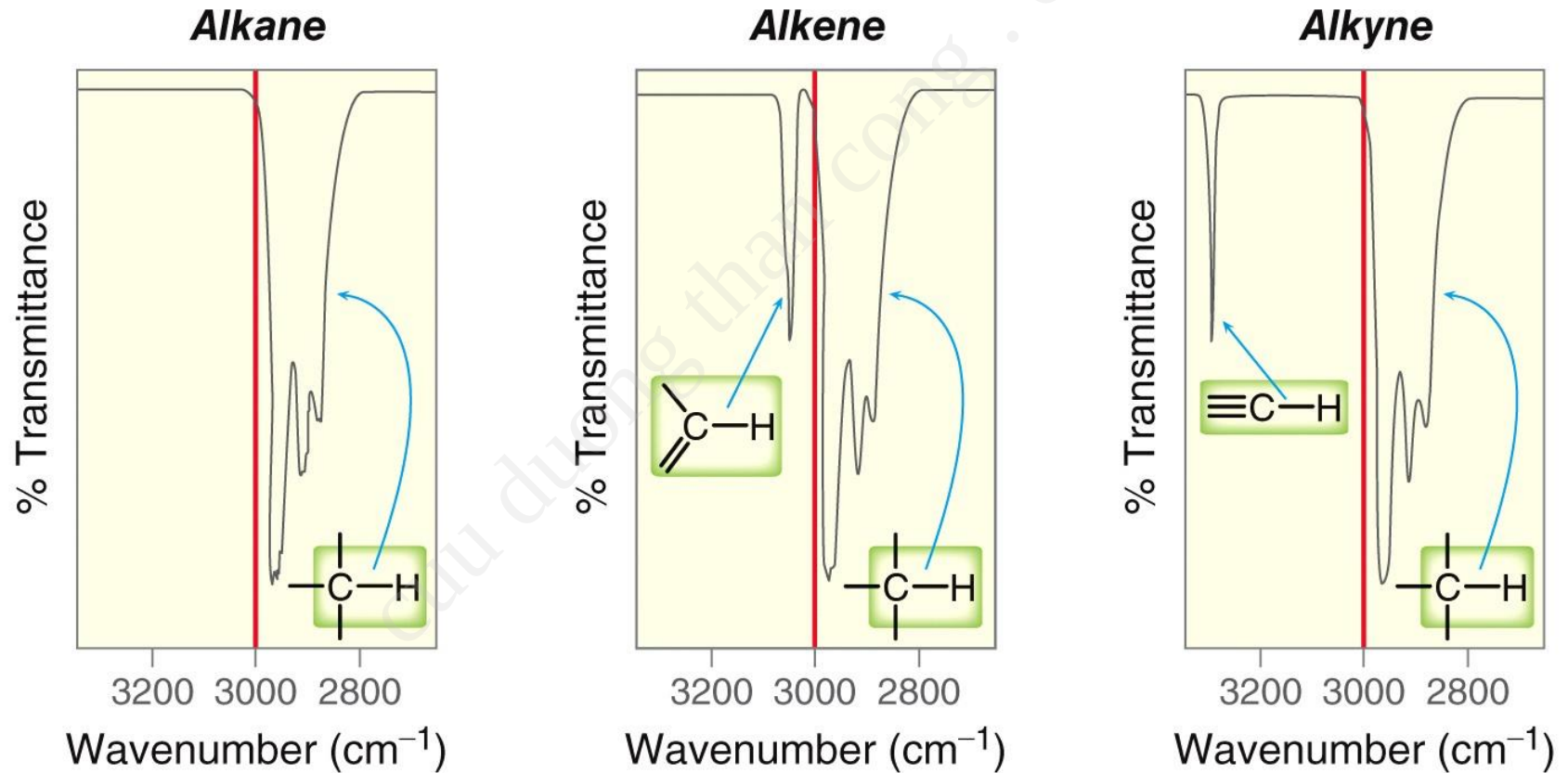
- So sánh số sóng của các liên kết sau



- Do sự lai hóa và che phủ của các orbital lai hóa tạo liên kết, liên kết trở nên ngắn hơn và bền hơn $\rightarrow$ liên kết hấp thu năng lượng ở số sóng cao hơn.

Số sóng vùng X-H

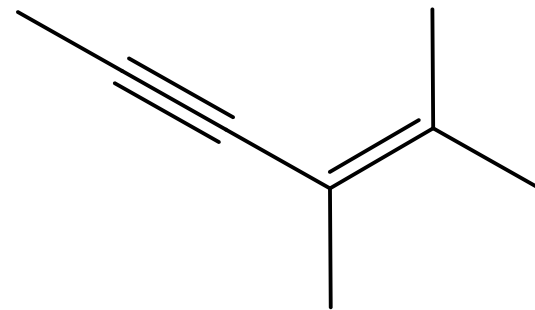
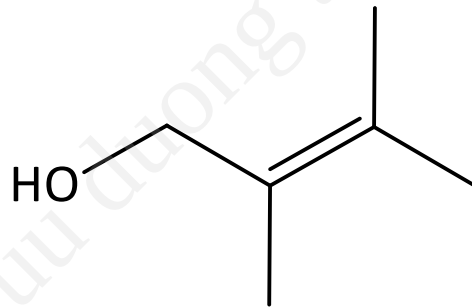
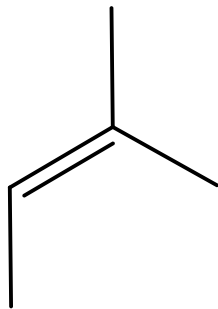
- Vùng số sóng $\approx 3000 \text{ cm}^{-1}$ trên phổ hồng ngoại có thể cho thông tin về nhóm chức trong hợp chất



Số sóng vùng X-H

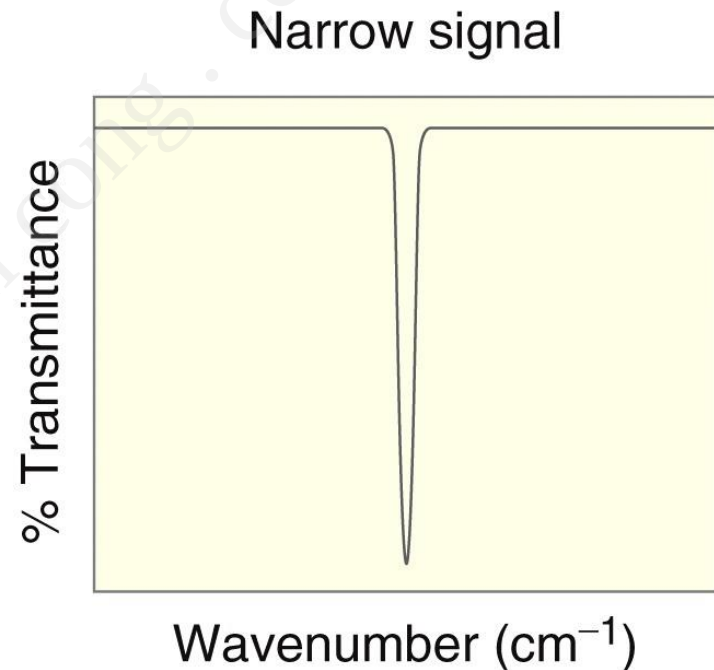
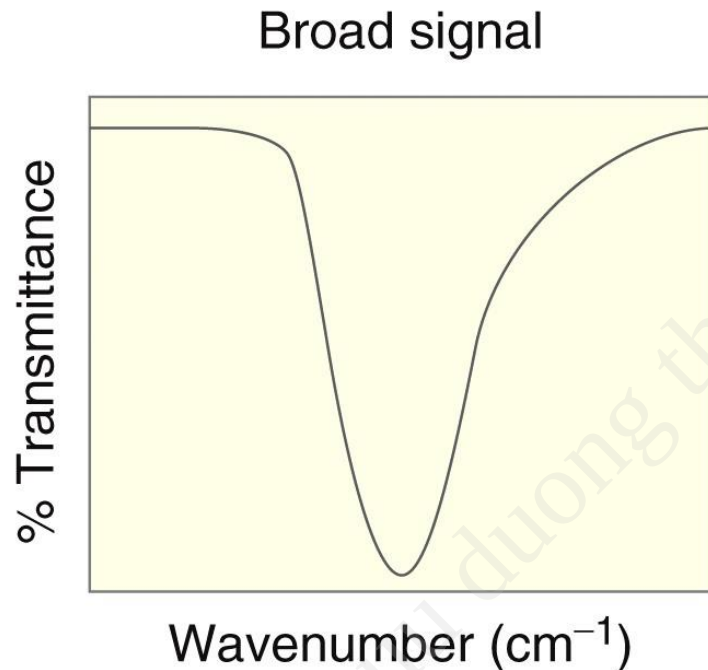
- Carbon bậc 4 không cho tính hiệu C-H trong vùng chức năng.

→ Dự đoán số sóng $> 3000\text{ cm}^{-1}$ (nếu có) thuộc các cấu trúc sau



Hình dạng mũi IR – rộng – hẹp

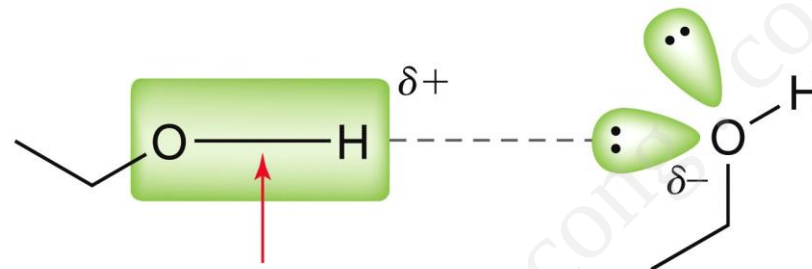
- Dạng rộng và dạng nhọn



- Dao động kéo giãn O-H thường cho tín hiệu rộng

Hình dạng mũi IR – rộng – hẹp

- Liên kết O-H thường tạo liên kết H $\rightarrow$ làm yếu liên kết O-H

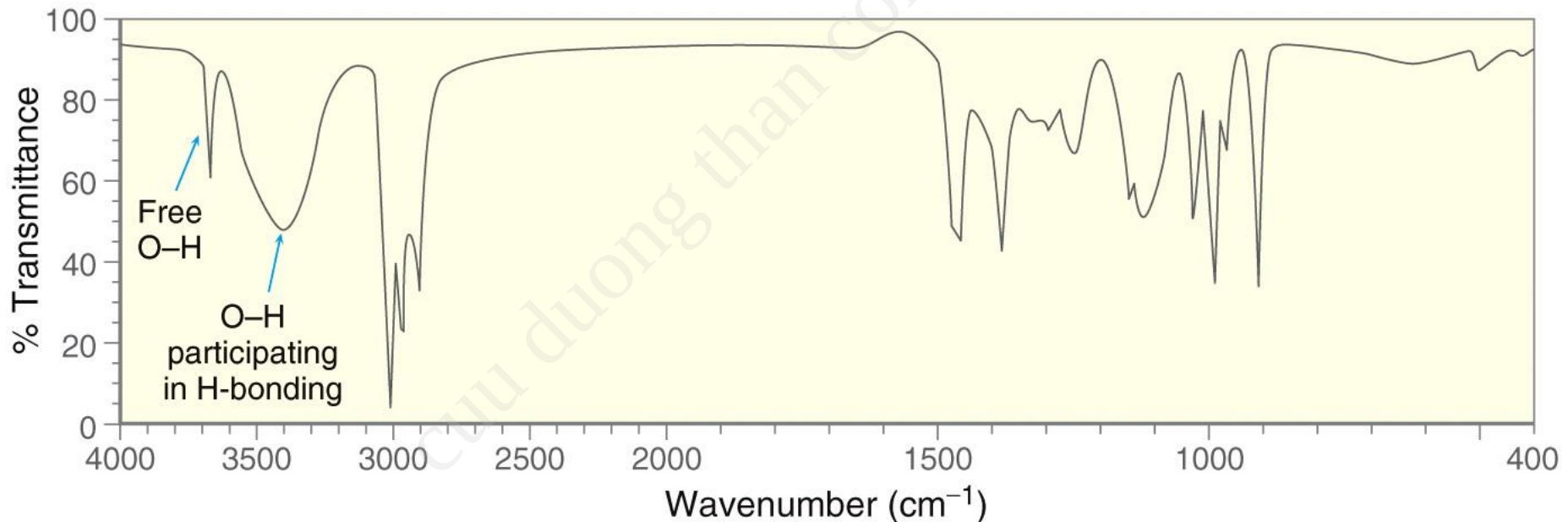


**This bond is weakened
as a result of H bonding**

- Mẫu chứa nhiều phân tử có liên kết O-H ở các cường độ khác nhau dẫn đến tín hiệu mũi O-H trở nên dạng bầu tròn.
- Mũi của dao động kéo giãn O-H sẽ nhọn và hẹp nếu dung dịch không tạo liên kết Hydro

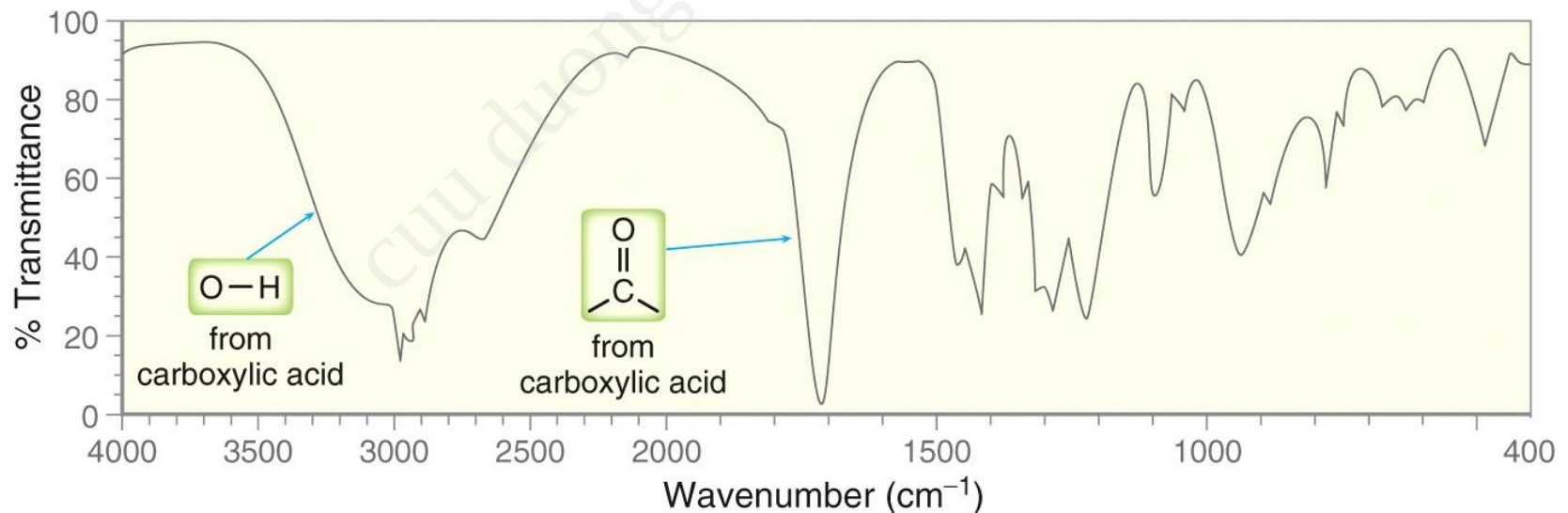
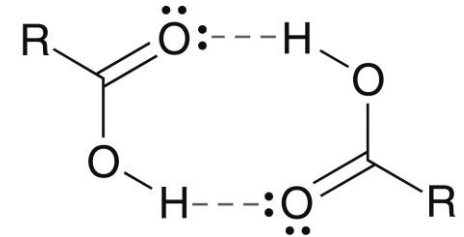
Hình dạng mũi – rộng – hẹp

- Mẫu có nồng độ trung bình, cả mũi nhọn và tròn bầu đều xuất hiện do sự tồn tại của O-H liên kết hydro và O-H tự do.



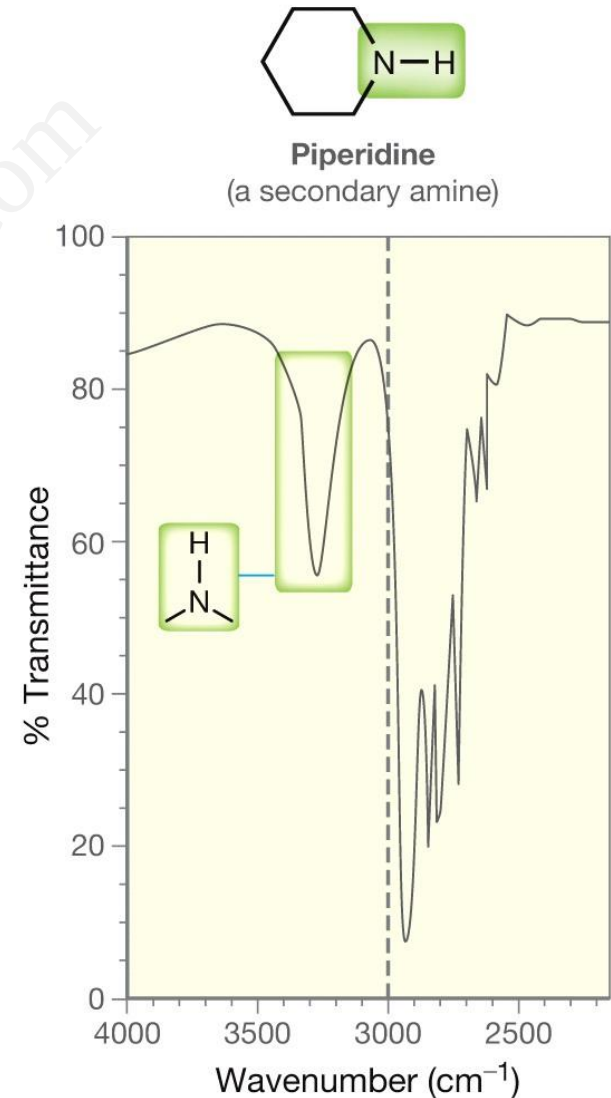
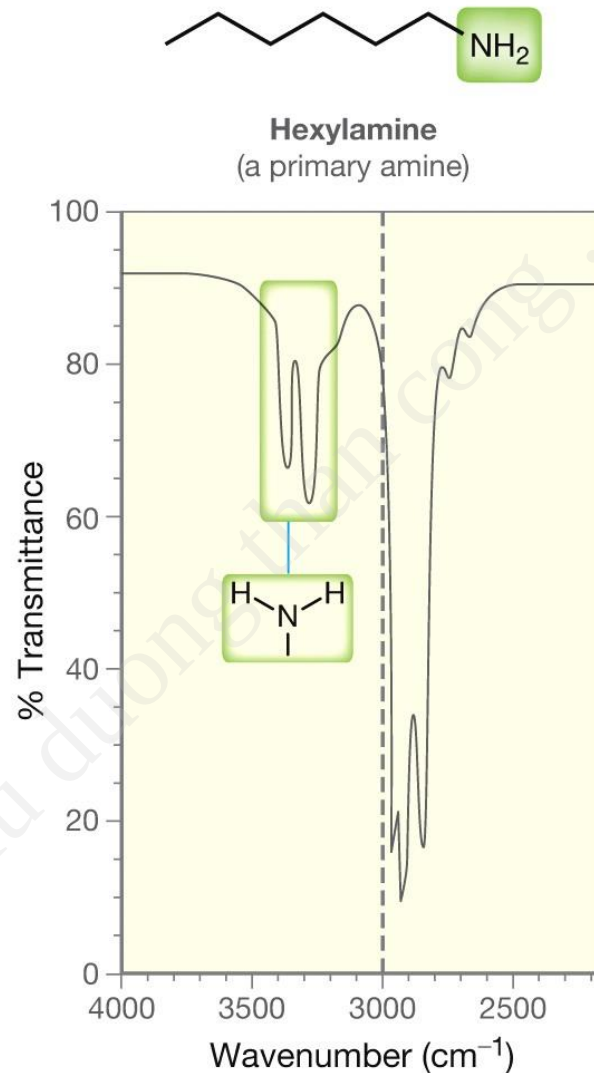
Hình dạng mũ IR – rộng – hẹp

- Carboxylic acid cũng hình thành liên kết hydro $\rightarrow$ mũ tròn bầu ở vùng 3000 cm^{-1} so với mũ bầu ở 3400 cm^{-1} đặc trưng của dao động kéo giãn của nhóm O-H.
- Mặt khác, do hình thành liên kết hydro giữa 2 phân tử acid $\rightarrow$ tín hiệu rộng hơn.



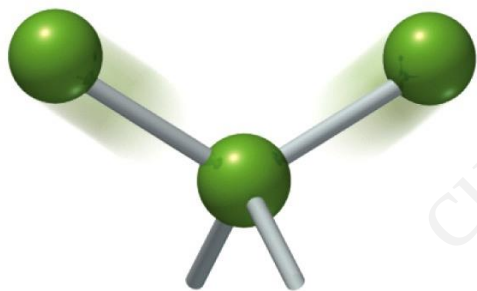
Hình dạng mũi IR – mũi đôi

- Amin bậc 1 và bậc 2 có mũi dao động có cường độ mạnh.
- Ngoài ra, N-H cũng có khả năng tạo liên kết hydro nên mũi IR rộng.
- Liên kết nào phân cực hơn, O-H hay N-H?

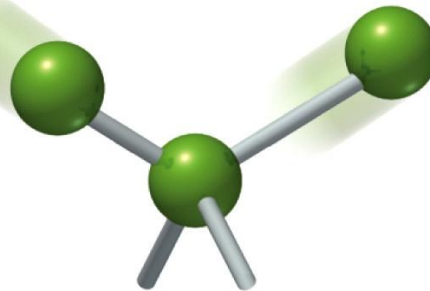


Hình dạng mũi IR – mũi đôi

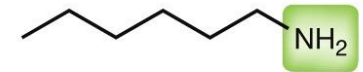
- Amin bậc 1 xuất hiện 2 đỉnh khá phức tạp.
- 2 liên kết N-H dao động theo 2 kiểu khác nhau nên tạo ra 2 tín hiệu khác nhau.



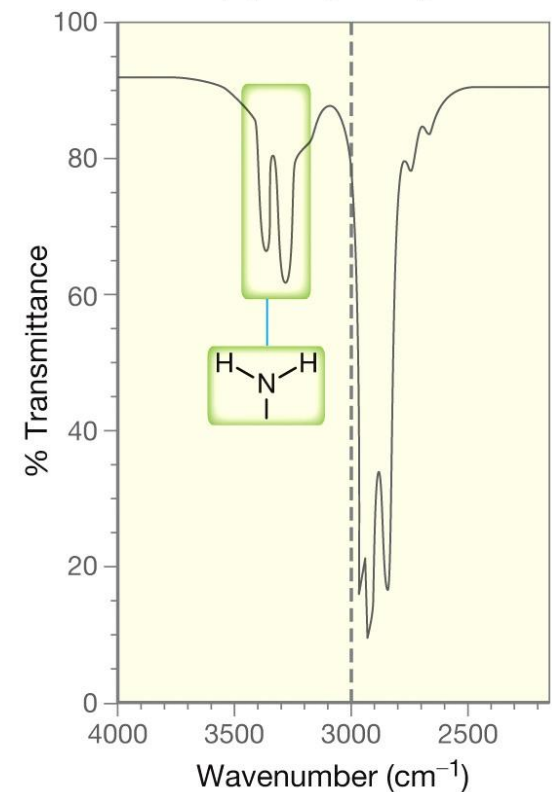
Symmetric stretching



Asymmetric stretching



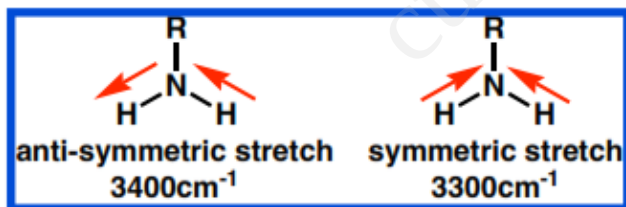
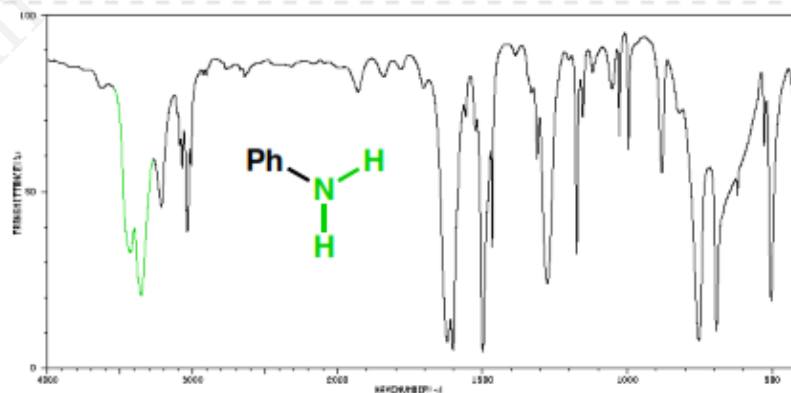
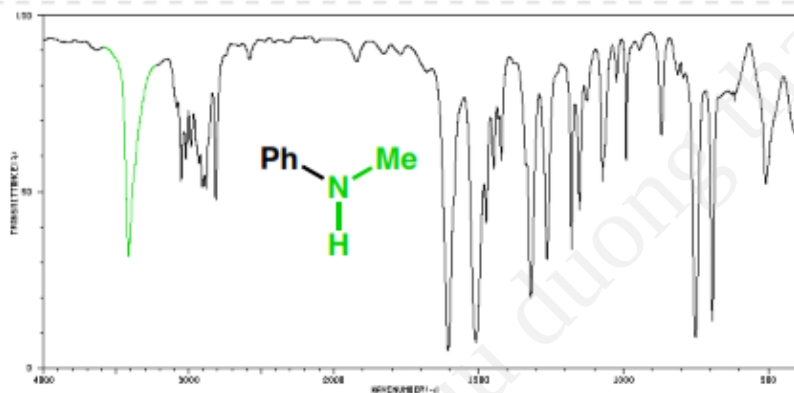
Hexylamine
(a primary amine)



Số sóng vùng X-H & hình dạng mũi

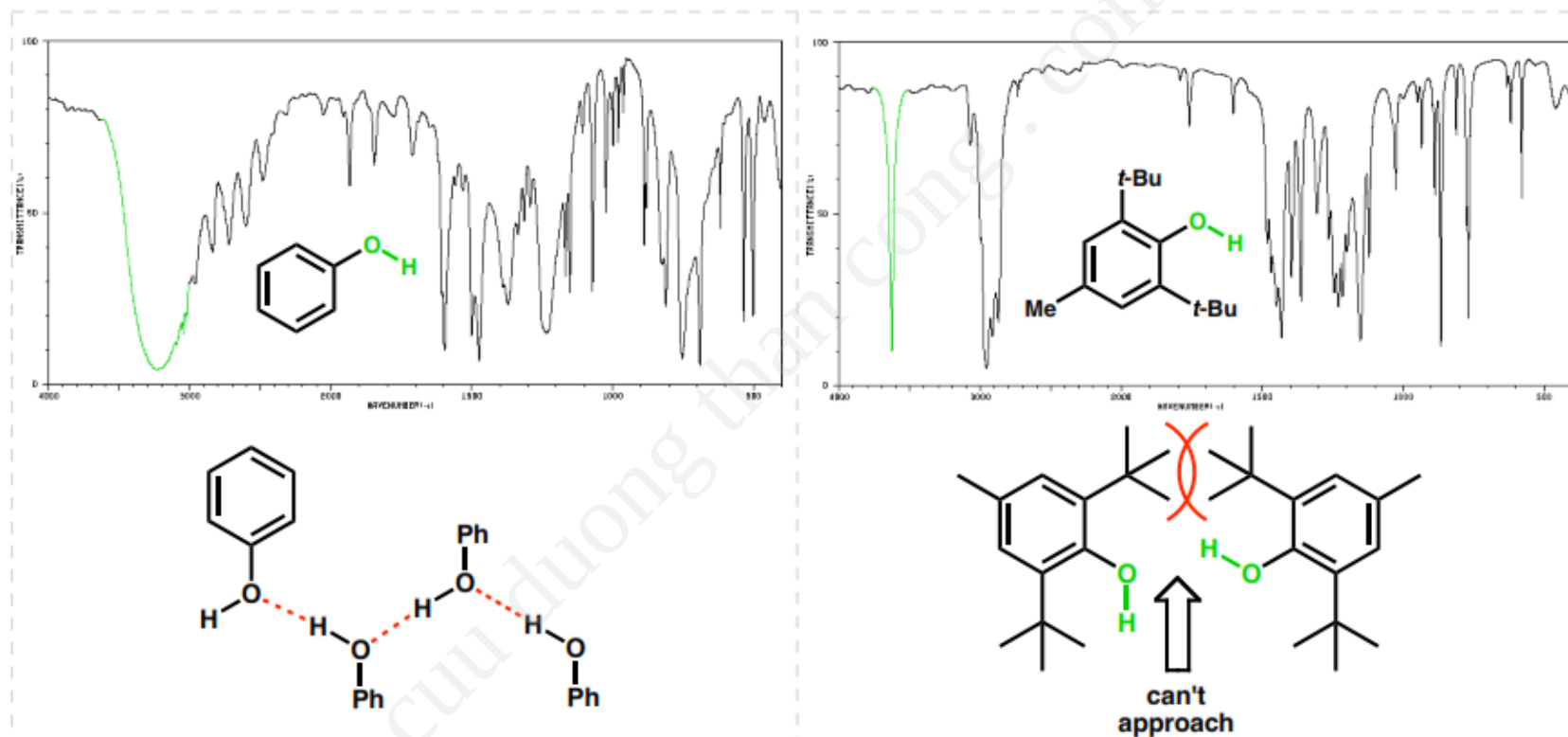
C-H	2900 - 3000 cm^{-1}
N-H	3300 - 3400 cm^{-1}
O-H	3500 - 3600 cm^{-1}

Reduced mass μ very similar for all
So order a result of bond strength
 $\text{OH} > \text{NH} > \text{CH}$



- 2 N-H bonds in aniline act as one 'unit'
- Two possible vibrations so two peaks

Số sóng vùng X-H & hình dạng mũ

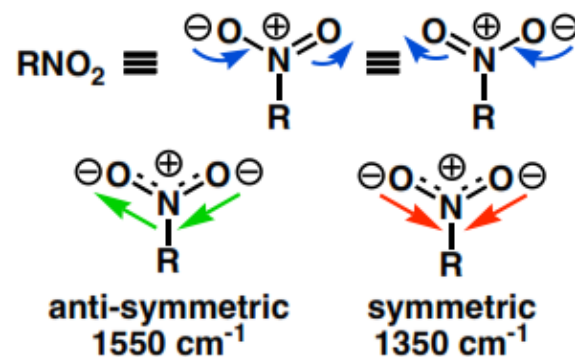
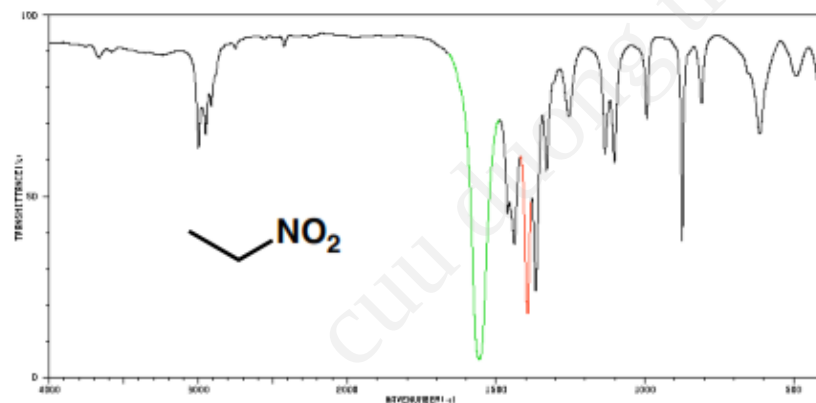


- H-bonds vary in strength and length
- They cause a weakening of X-H bonds
- The range of strengths leads to a range of absorptions

Số sóng vùng liên kết đôi

C=O carbonyl group	1900 – 1500 cm ⁻¹ strong
C=C alkene	1640 cm ⁻¹ weak
O–N=O nitro group	1500 & 1300 cm ⁻¹ 2 strong peaks

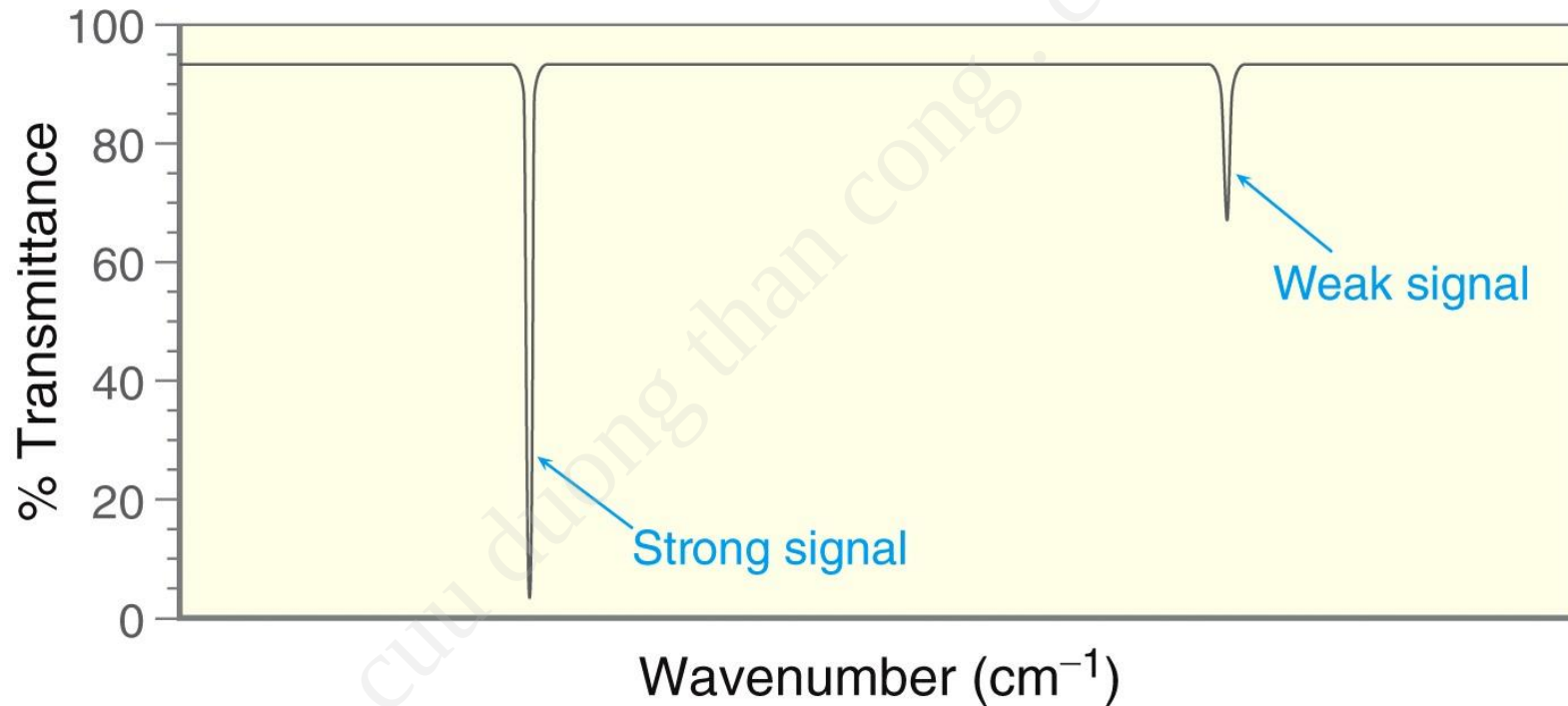
Vùng quan trọng nhất, cho
nhiều thông tin nhất



- Two peaks as two forms of stretch (like primary amine)
- Symmetric stretch weaker absorption as less change in dipole

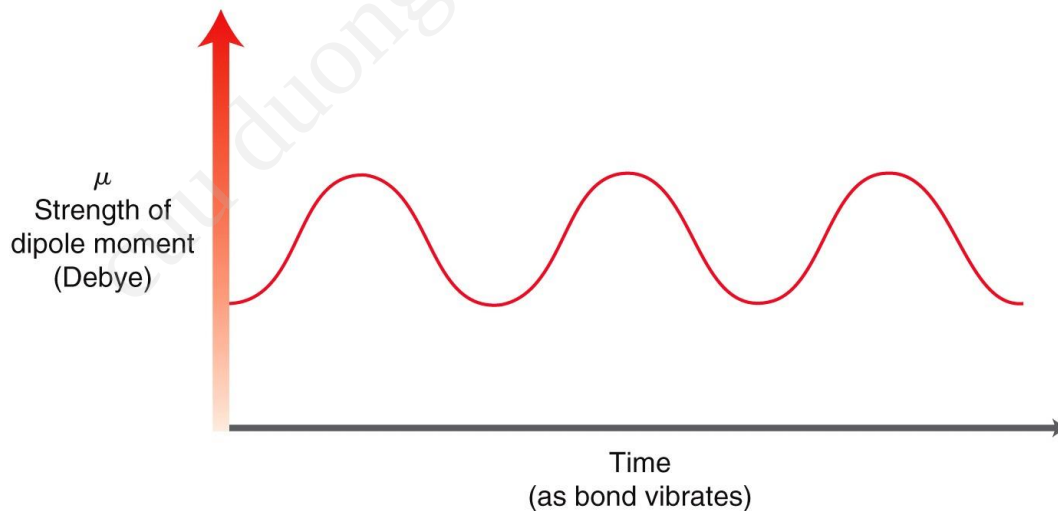
Cường độ mũi

- Mũi hấp thu có nhiều cường độ: mạnh, yếu, trung bình



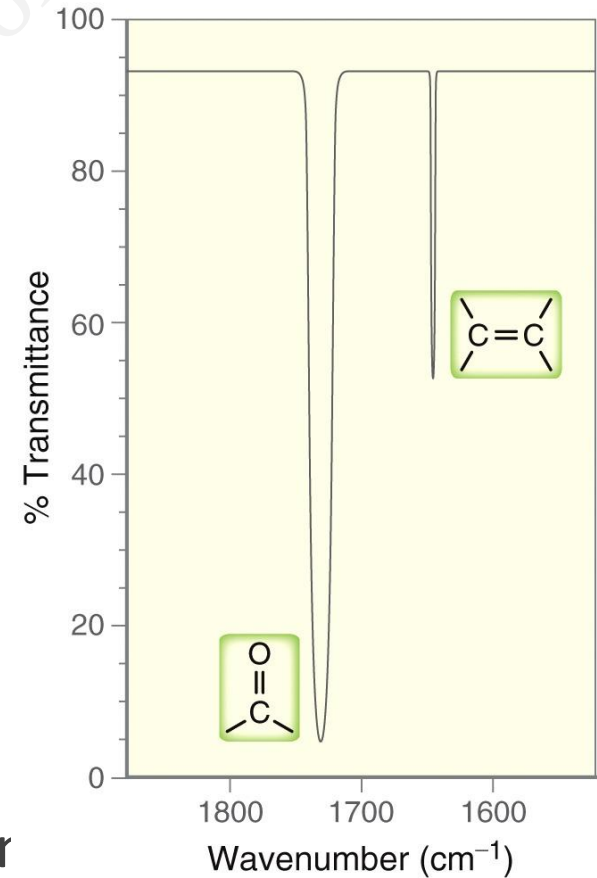
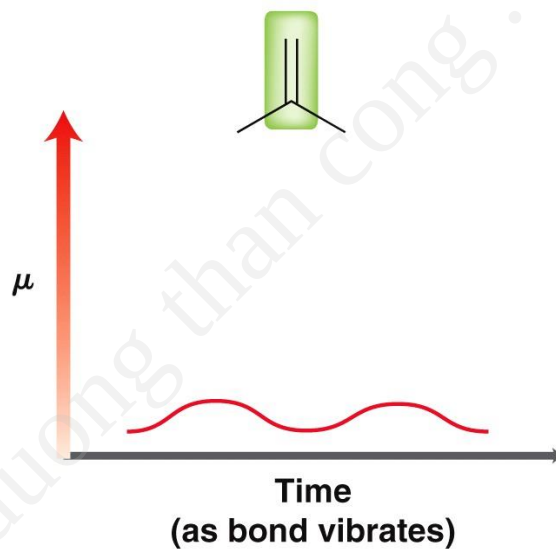
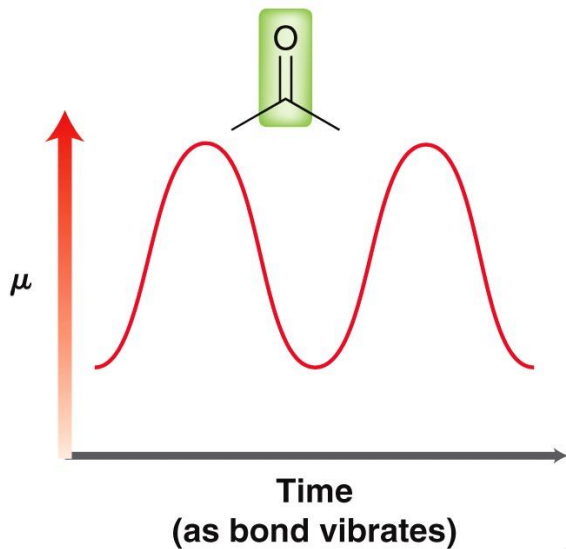
Cường độ tín hiệu IR

- Khi liên kết dao động kéo giãn, mô-men lưỡng cực cũng dao động
- Mô men lưỡng cực $\mu = e \times d$; e: điện tích, d: khoảng cách giữa điện tích.
- Dao động của mô men lưỡng cực tạo nên điện trường quanh liên kết



Cường độ tín hiệu IR

- Liên kết càng phân cực, khả năng tương tác giữa sóng điện trường và bức xạ hồng ngoại càng cao.

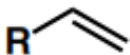
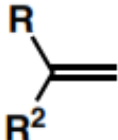
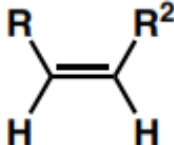
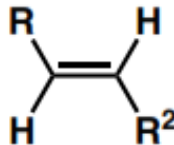
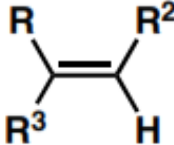
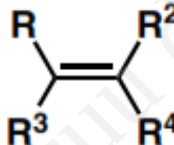


- Độ phân cực càng cao = tín hiệu IR càng mạnh (cường độ tăng)

Cường độ tín hiệu IR

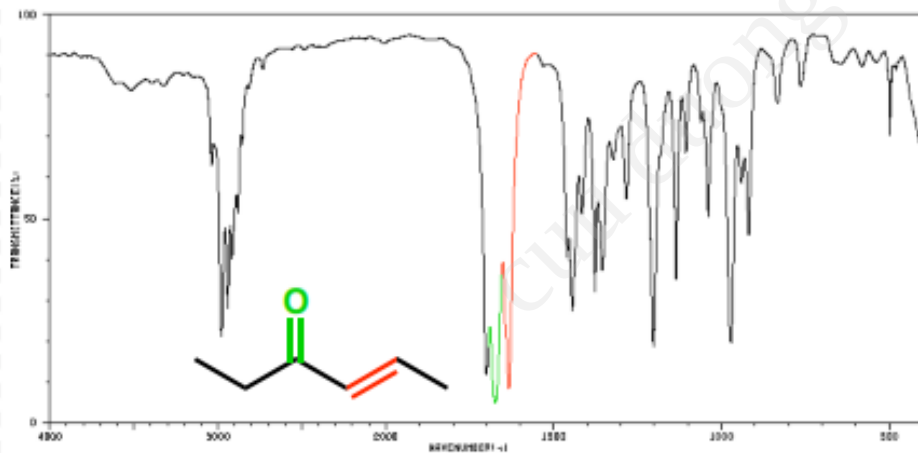
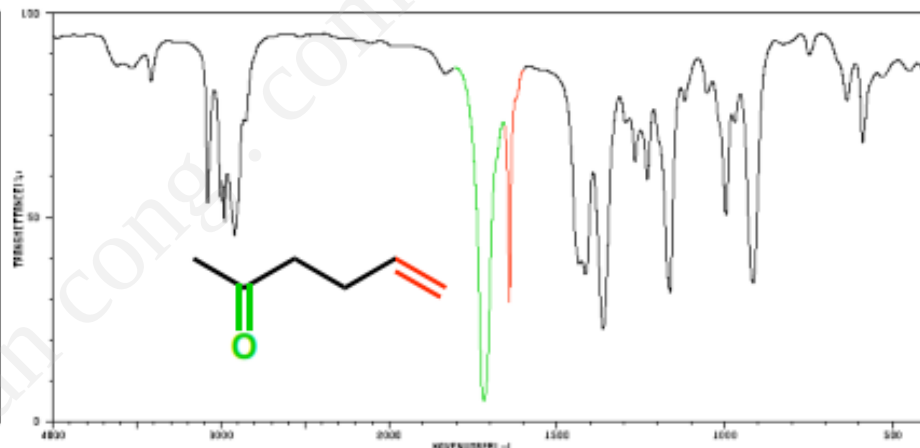
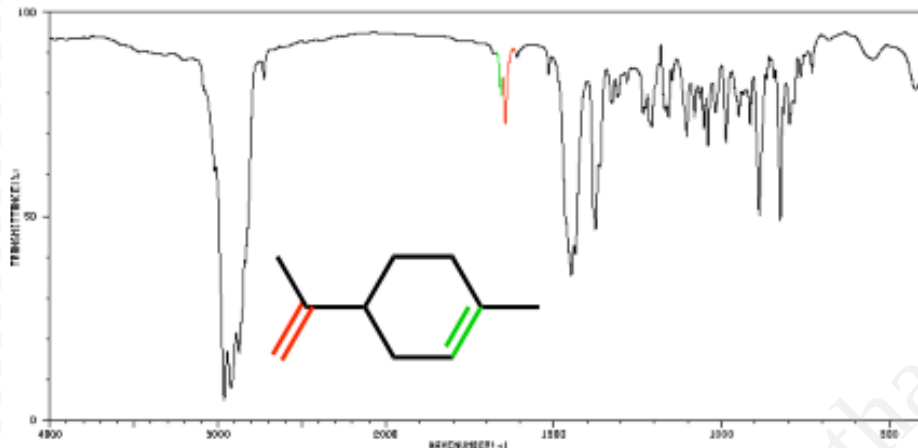
- Mũi có cường độ mạnh khi nhiều liên kết của cùng loại dao động
- Mặc dù liên kết C-H không phân cực nhiều, chúng thường có tín hiệu rất mạnh do có nhiều liên kết C-H.

Vùng nối đôi - Alkene

structure	wavenumber (cm ⁻¹)	comment
	1640 (m, sh)	m = medium sh = sharp
	1655 (m, sh)	More substituents the stronger the bond & higher absorption
   	1660 - 1675 (w)	• More substituents = stronger bond • But less change in dipole moment so reduced intensity • Symmetrical alkenes close to no absorption

- sp² centres form stronger bonds as more s character ⇒ better orbital overlap
- C-H of alkene >3000 cm⁻¹
- C-H of alkyl <3000 cm⁻¹

Vùng nối đôi – Alkene - Ví dụ

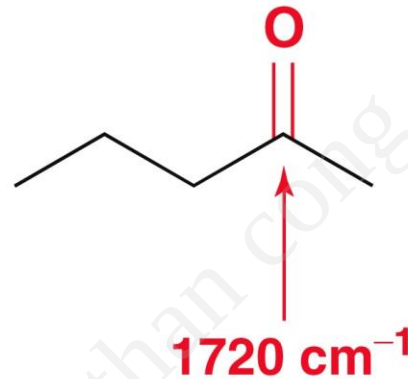


- Limonene - peaks weak as little change in dipole moment
- **Internal** alkene higher wavenumber due to substitution
- But less intense as less change in dipole moment
- Isolated C=O & C=C in normal positions (above)
- Conjugated / resonance lowers both as more single bond character **BUT** more intense as polarised

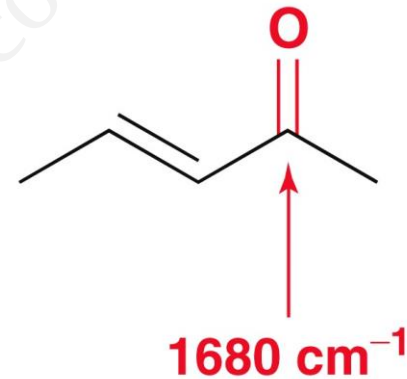
Số sóng vùng nối đôi – nhóm carbonyl

Ảnh hưởng của hệ liên hợp: **liên kết pi trong hệ liên hợp làm liên kết C=O yếu hơn** do hiệu ứng liên hợp → liên kết nghiêng về liên kết đơn hơn → **mũi dao động ở số sóng thấp hơn.**

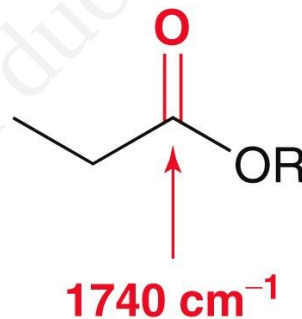
A ketone



A conjugated ketone



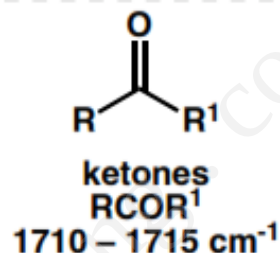
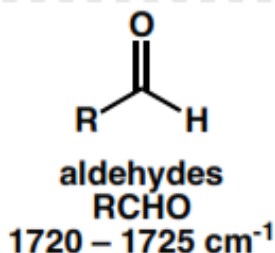
An ester



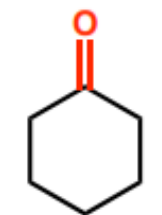
A conjugated, unsaturated ester



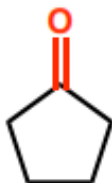
Vùng nối đôi – nhóm carbonyl



Aldehydes have stronger bonds than ketones - why?
Carbonyl functionality most useful in IR (in my opinion)



1715 cm^{-1}



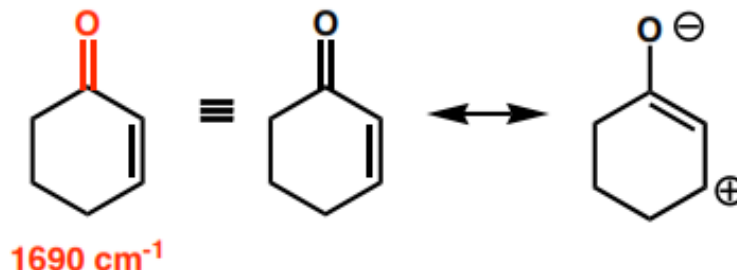
1745 cm^{-1}



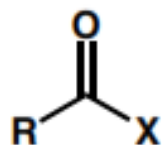
1780 cm^{-1}

- As C=O gets more strained so bond gets stronger! But more reactive
- Angle less than 120° so needs more p character
- Leaves more s character in C=O so shorter and stronger bond

- Why weaker than normal?
- Delocalisation results in single bond character

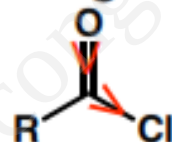


Carboxylic acid derivatives



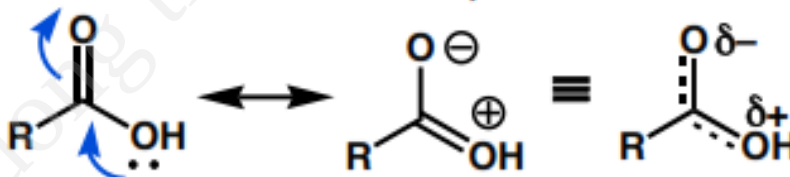
X = Cl 1815 cm^{-1}

Electronegative Cl drags electrons close making π bond shorter and stronger



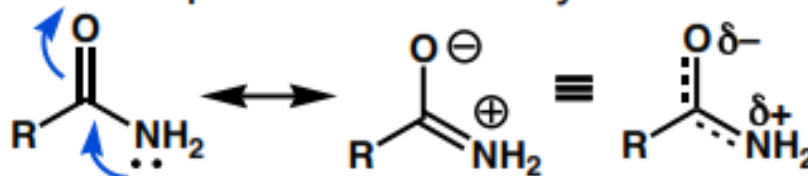
X = OH 1745 cm^{-1}

Stronger than ketone due to electronegative oxygen. But delocalisation of lone pair weakens π bond.

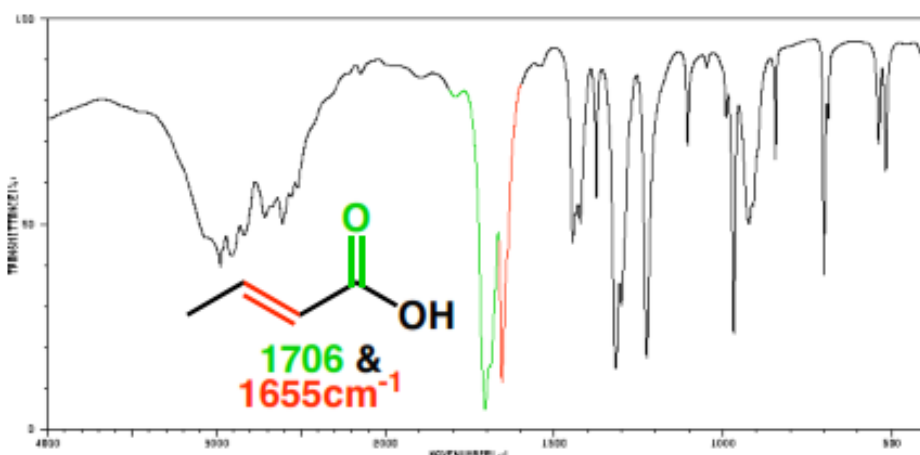
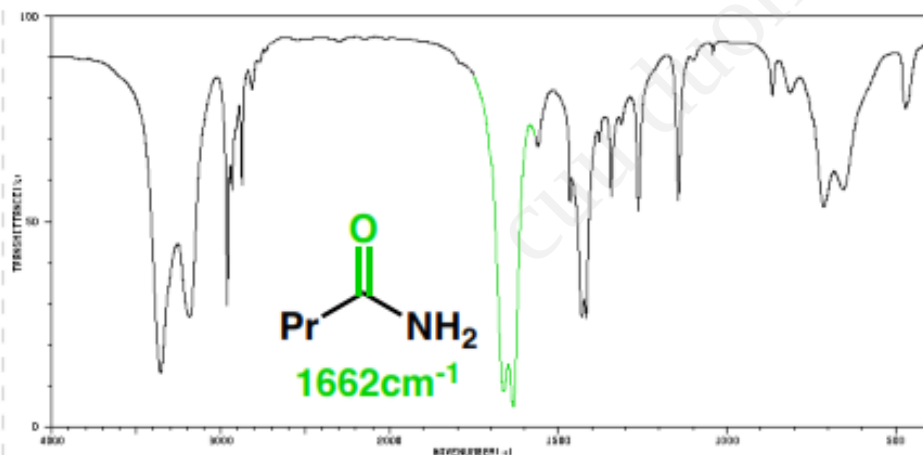
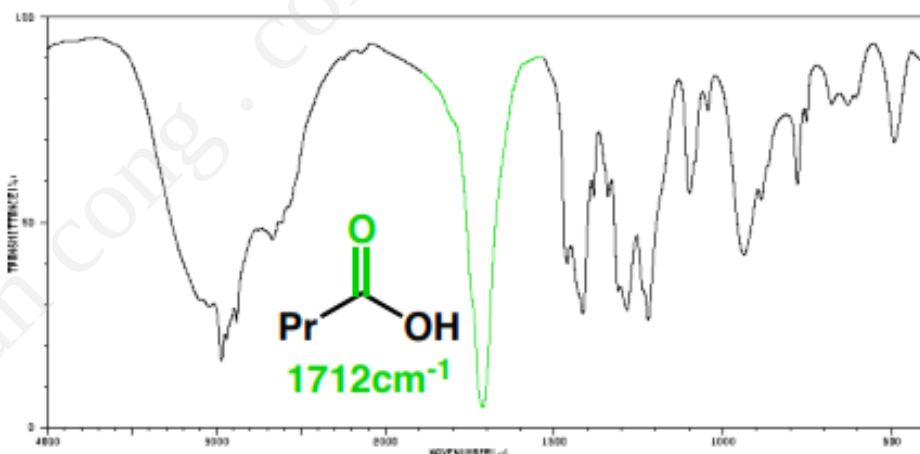
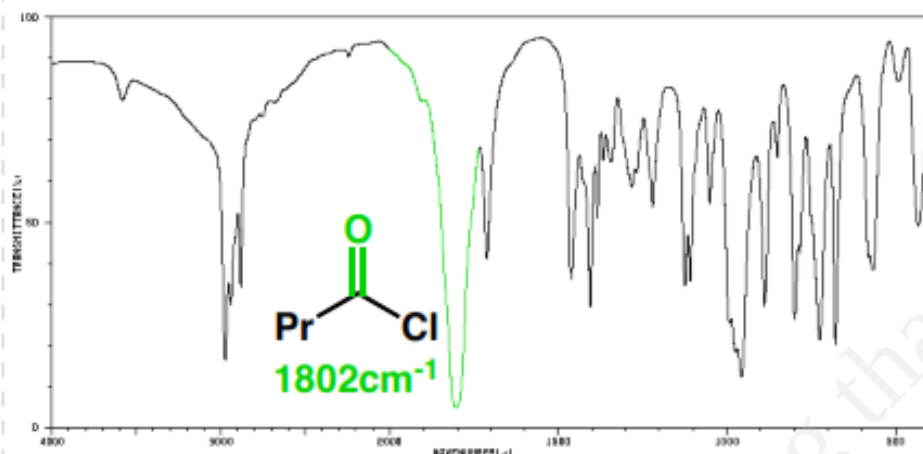


X = NH_2 1650 cm^{-1}

Amides have even weaker π bond due to increased delocalisation. Nitrogen is less electronegative so donates lone pair more readily.



Vùng nổi đôi – nhóm carbonyl-ví dụ



Vùng vân tay

- 1500 cm^{-1} or less is fingerprint region - unique to a molecule
- But dull C-C, C-N & C-O roughly same reduced mass and bond strength - so nothing distinctive
- Deformations (or bending) occurs at low energy as well
- Very few are useful



Summary of absorptions in IR spectra

Position of band	→	reduced mass bond strength	light atoms - high frequency strong bond - high frequency
Strength of band	→	change in dipole moment	large dipole - strong band
Width of band	→	hydrogen bonding	strong H bond - weak band

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) $1600-1850 \text{ cm}^{-1}$ – vùng liên kết đôi
- b) $2100-2300 \text{ cm}^{-1}$ – vùng liên kết ba
- c) $2700-4000 \text{ cm}^{-1}$ – liên kết X-H
- d) Phân tích số sóng, cường độ và hình dạng của các mũi

2. Có nhóm C=O không

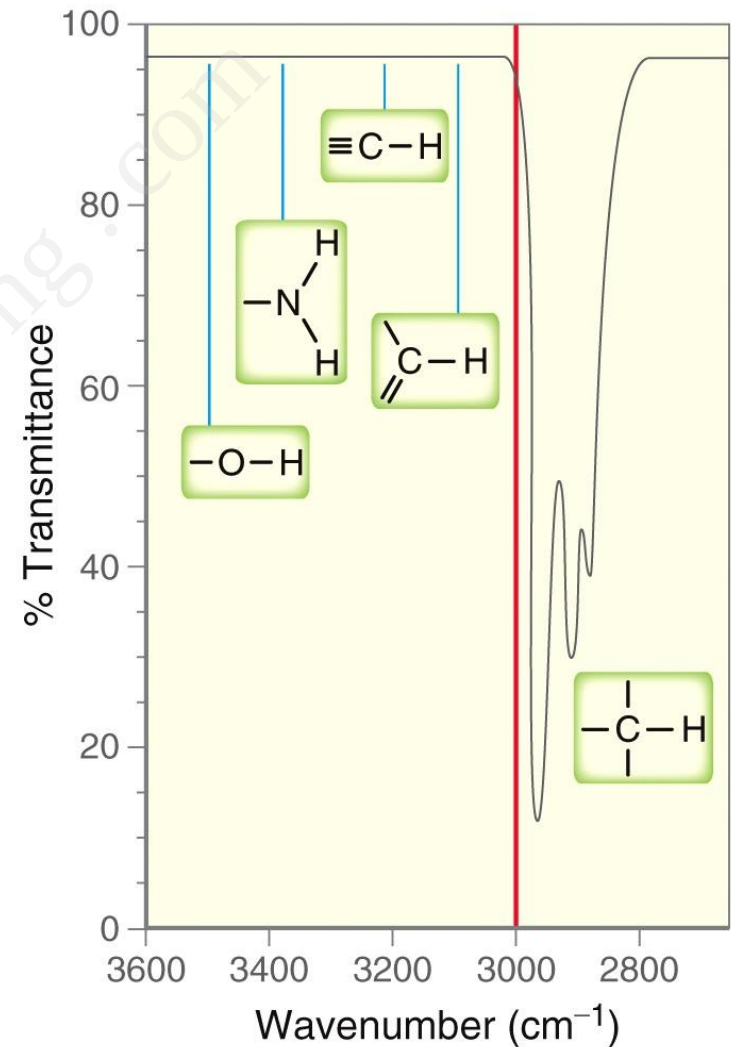
- a) $1820 - 1660 \text{ cm}^{-1}$
- b) Cường độ lớn
- c) Độ rộng trung bình

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	Mũi trung bình N-H	Mũi cao C-O	Mũi cao C=O	Mũi trung bình C-H	Còn lại
3400-2400	3400-3300	1300-1000	1810-1760	2850-2750	
	NH hay NH ₂		Hai mũi cách nhau 60cm ⁻¹		

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-cai 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 nối ba không

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

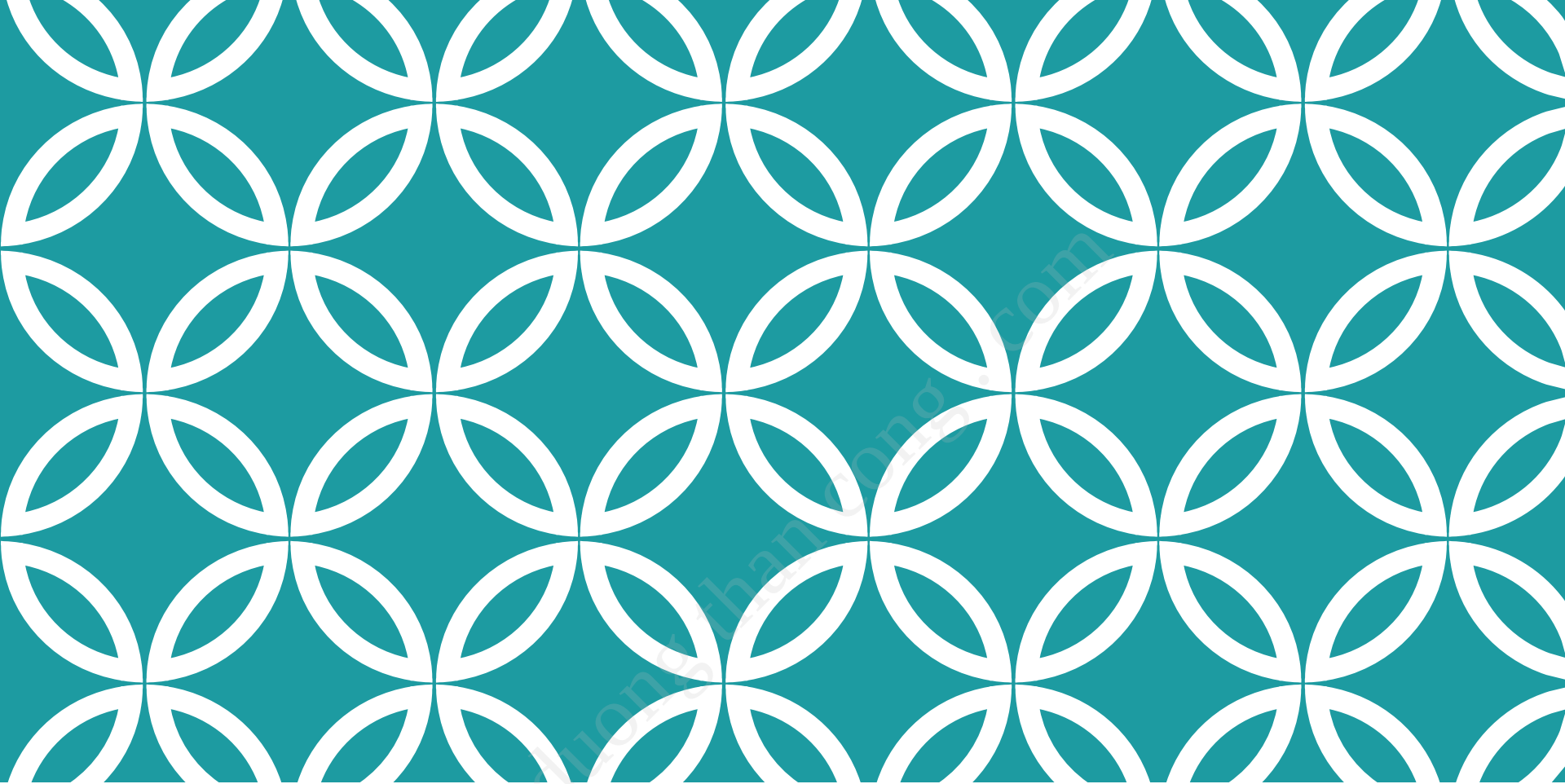
Phân tích phổ IR

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**

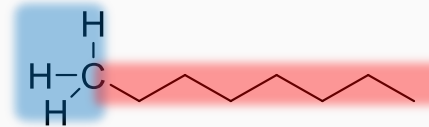
6. Không có nhóm chức nào $\Rightarrow$ alkane

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



CÁC VÍ DỤ

Octane



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}

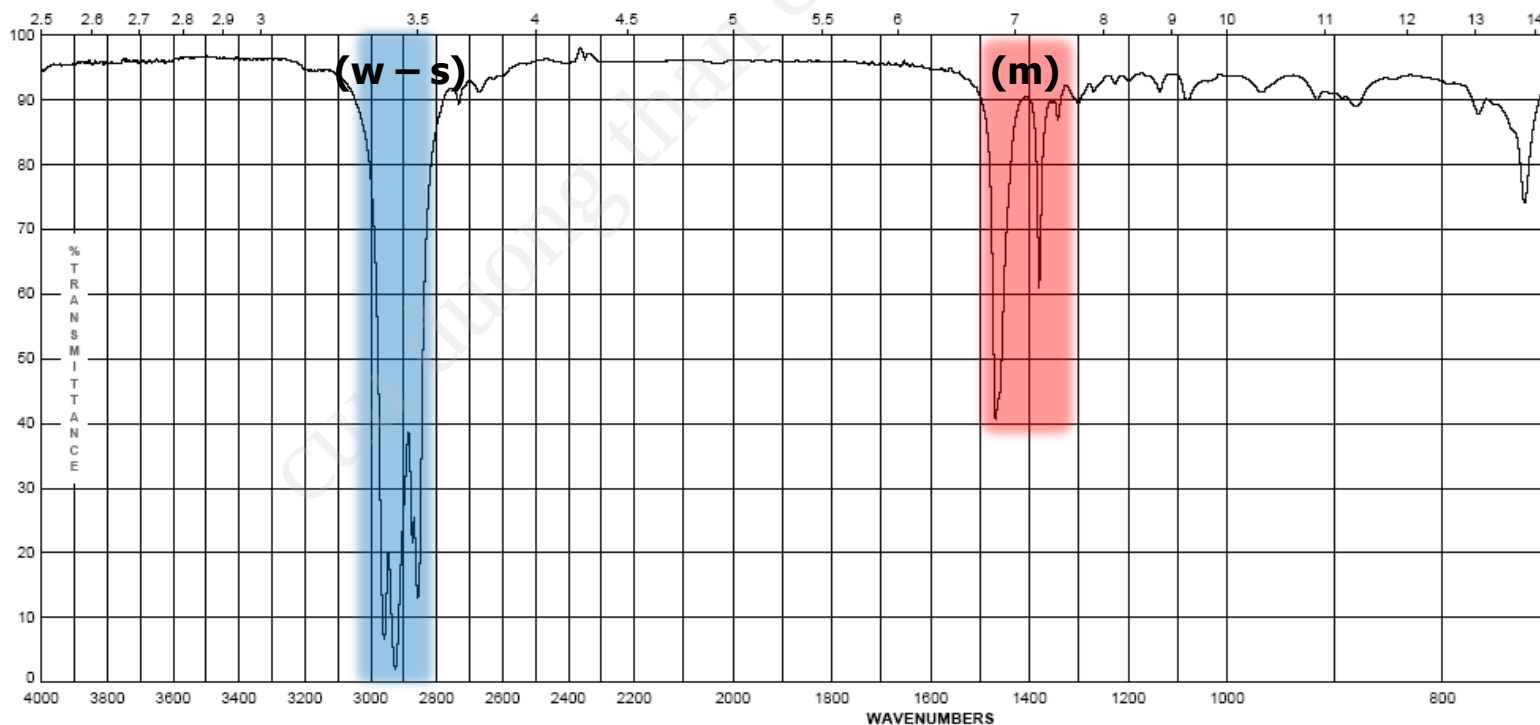
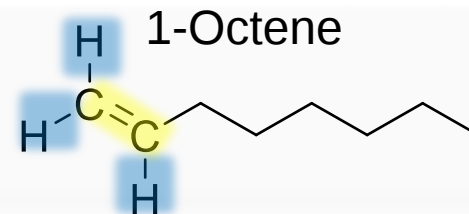


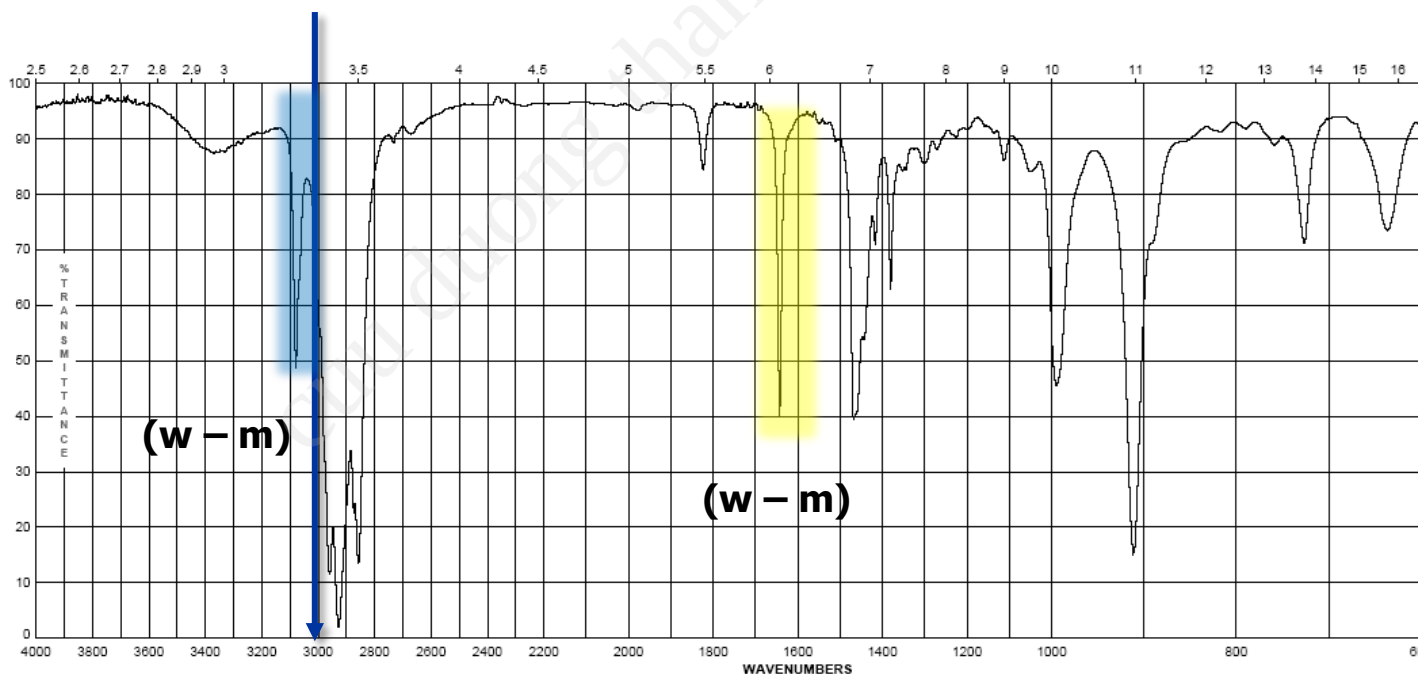
Table 4.1 Characteristic infrared bands of aliphatic hydrocarbons

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 $\text{C}=\text{C}$ và $\text{C}-\text{H}$



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



Alkenes

3100–3000

=C–H stretching

1680–1600

C=C stretching

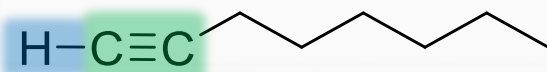
1400

=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

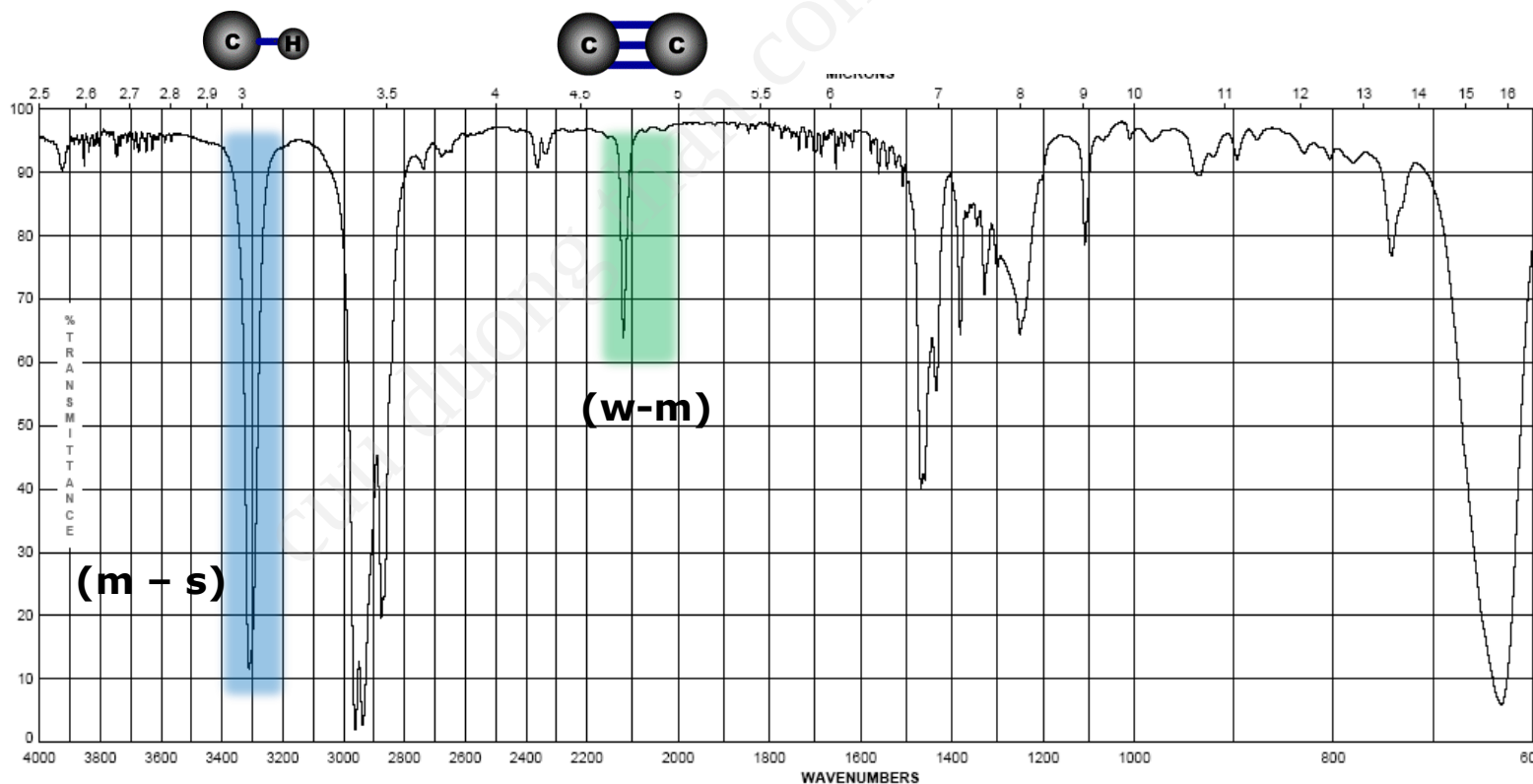
- **Giãn C≡C: 2100-2260 cm⁻¹**; cường độ mũi tùy vào độ phân cực của LK

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

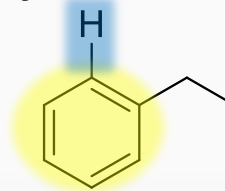
- **Dao động C_{sp}-H alkyne cuối mạch: 3200-3300 cm⁻¹**



4. Hydrocarbon thơm (Aromatic)

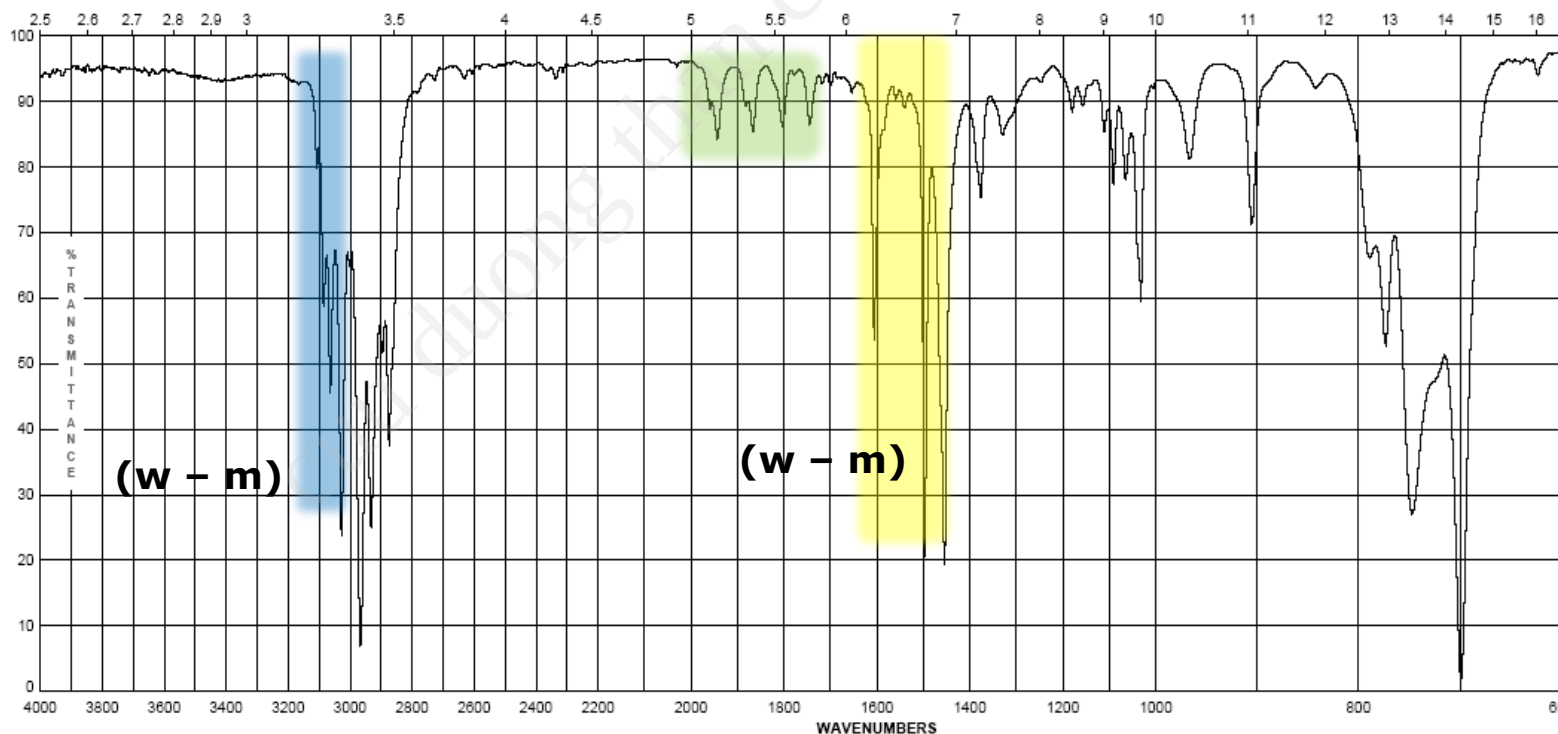
- *Giãn bất đối xứng và đối xứng C-H ở 3000-3100 cm^{-1} (Dải không no).*
- *Dao động uốn ngoài mặt phẳng C-H ở 900-675 cm^{-1} với cường độ mạnh (Vùng đặc trưng của Hydrocarbon thơm).*
- *Giãn C=C ở 1430-1600 cm^{-1} , thường là peak đôi.*

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



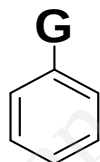
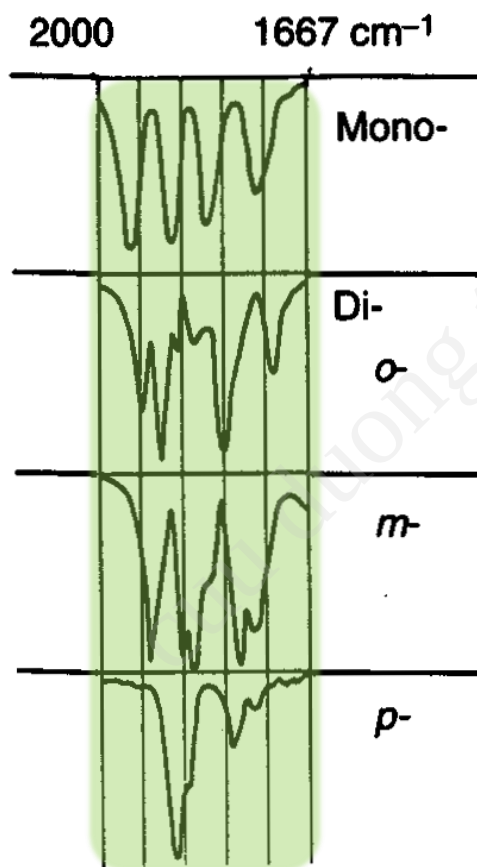
4. Aromatics

- 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

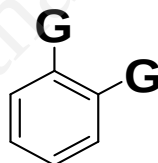


4. Aromatics

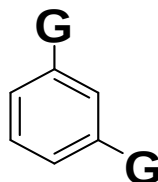
- Nếu không có nhóm C=O, trong vùng 1667-2000 cm^{-1} (w) xuất hiện nhóm mũi với cường độ yếu của vòng thơm
- Vùng này được gọi là dải họa âm hay dải bội âm (*overtone*) có số sóng bằng bội số của dải cơ bản



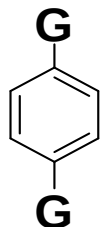
1 nhóm thế



nhóm thế ở vị trí *ortho* or *o*-



nhóm thế ở vị trí *meta* or *m*-



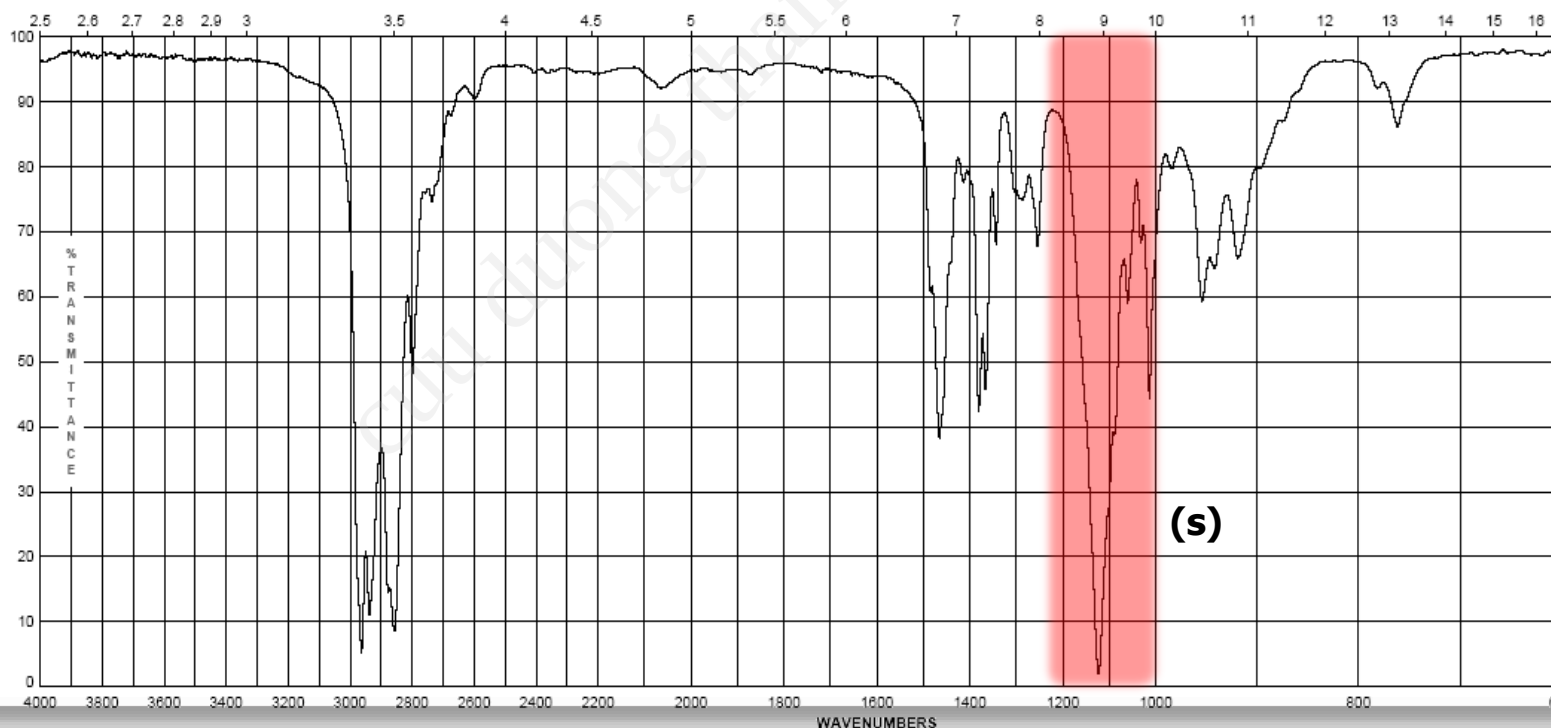
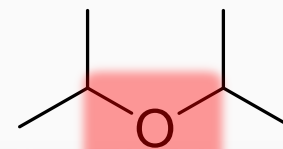
nhóm thế ở vị trí *para* or *p*-

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 cm^{-1}** ; mũi rộng, mạnh
- Như ether: giãn C-O 1050-1260 cm^{-1}

alcohols bậc 1: 1075-1000;

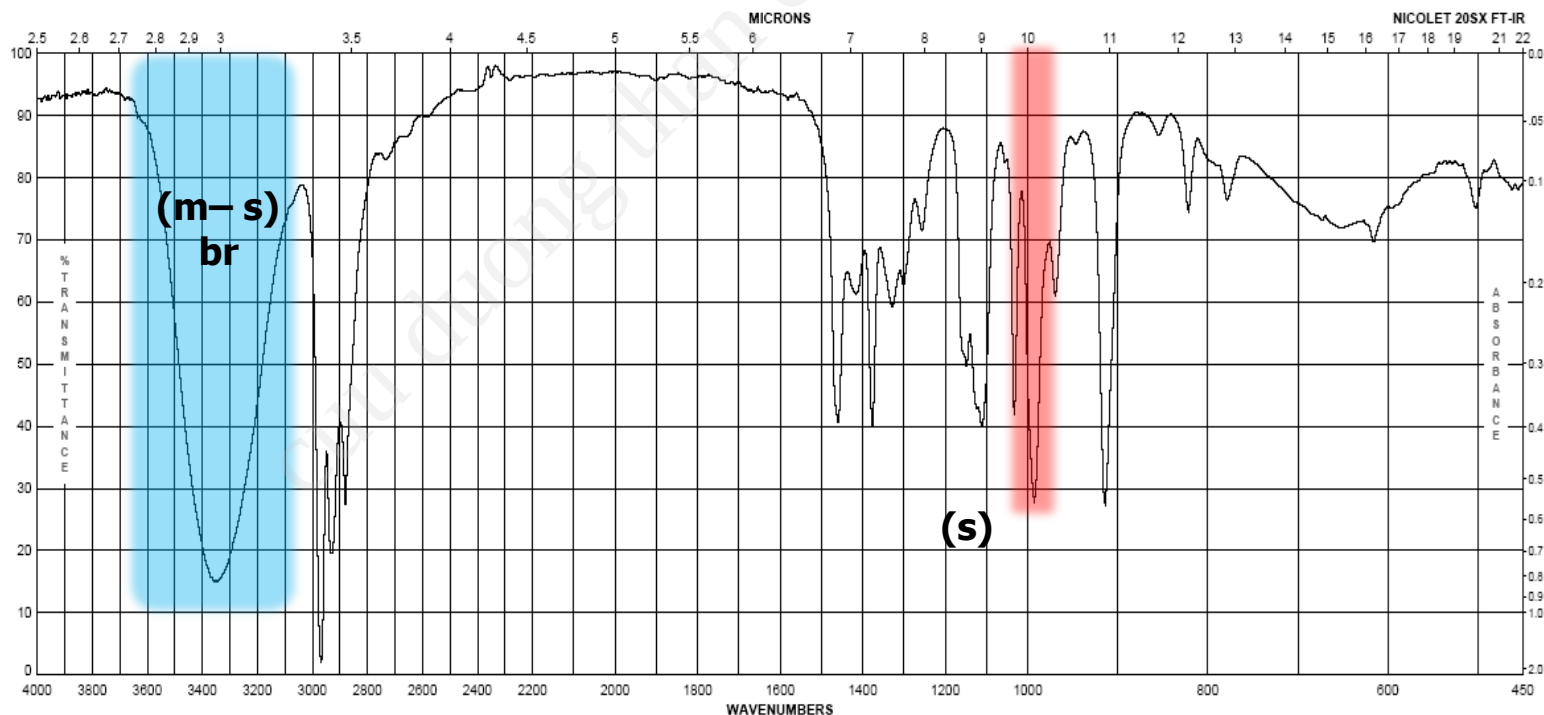
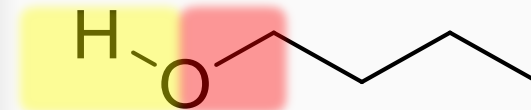
alcohols bậc 2: 1075-1150;

alcohols bậc 3: 1100-1200;

phenol: 1180-1260

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

1-butanol

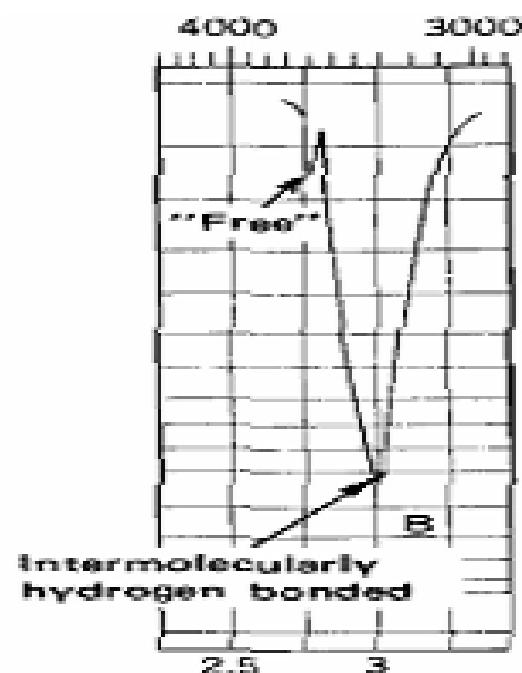
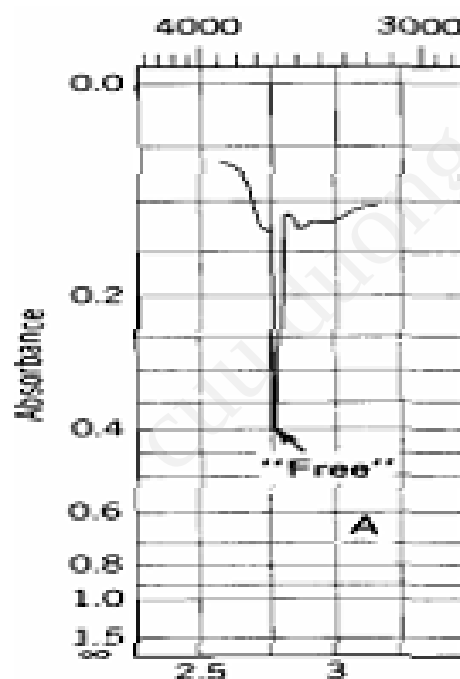


7. Alcohols

❖ *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

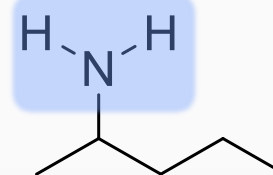
❖ Đặc trưng nhất của Amine là giãn N-H của Amine bậc 1 và bậc 2.

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

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

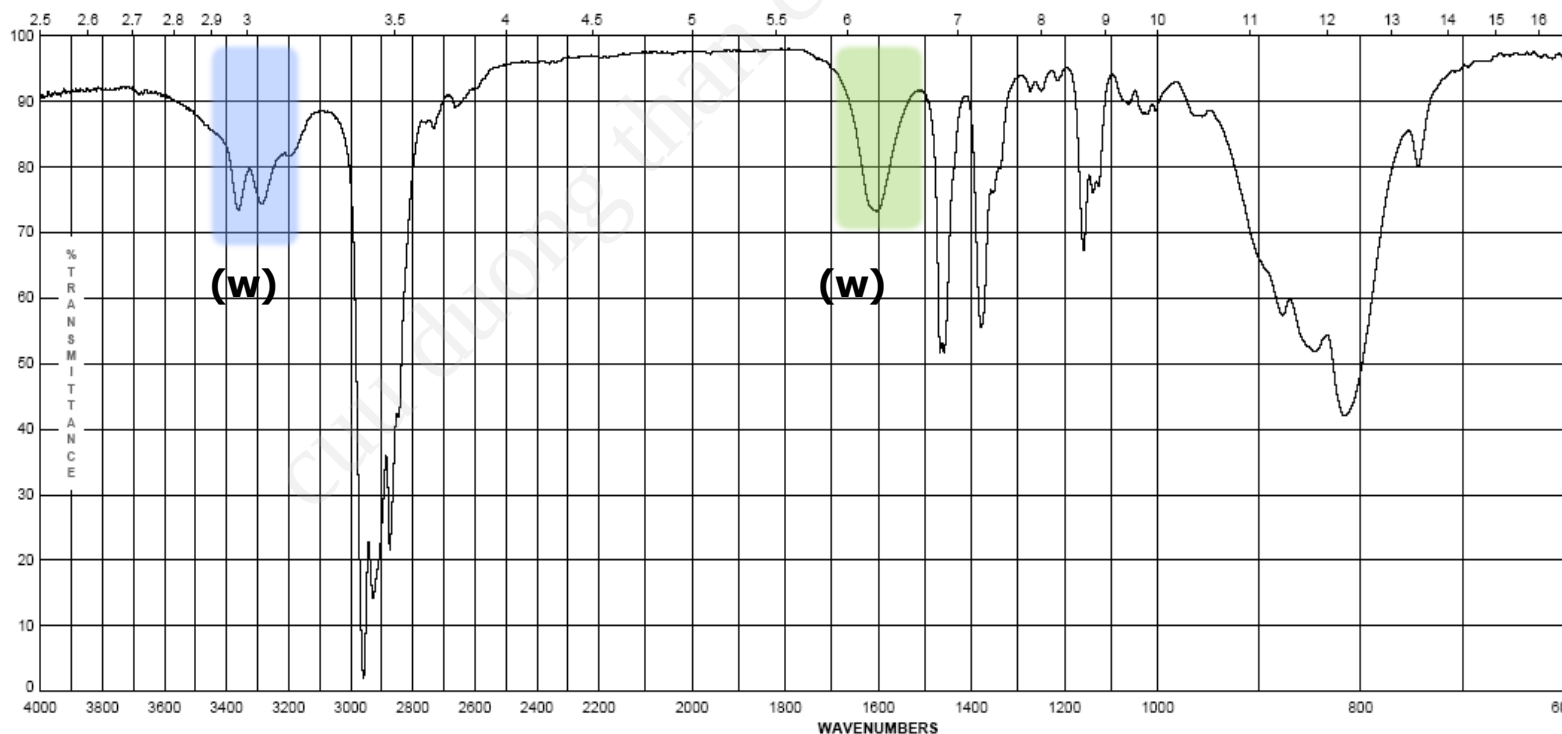
➤ *Giãn N-H tự do đối xứng và bất đối xứng ở: 3400-3500 cm^{-1} . Nếu có liên kết Hydrogene thì dao động giãn ở bước sóng dài hơn ($< 3400 \text{ cm}^{-1}$).*

2-aminopentane



8. Amines – bậc 1

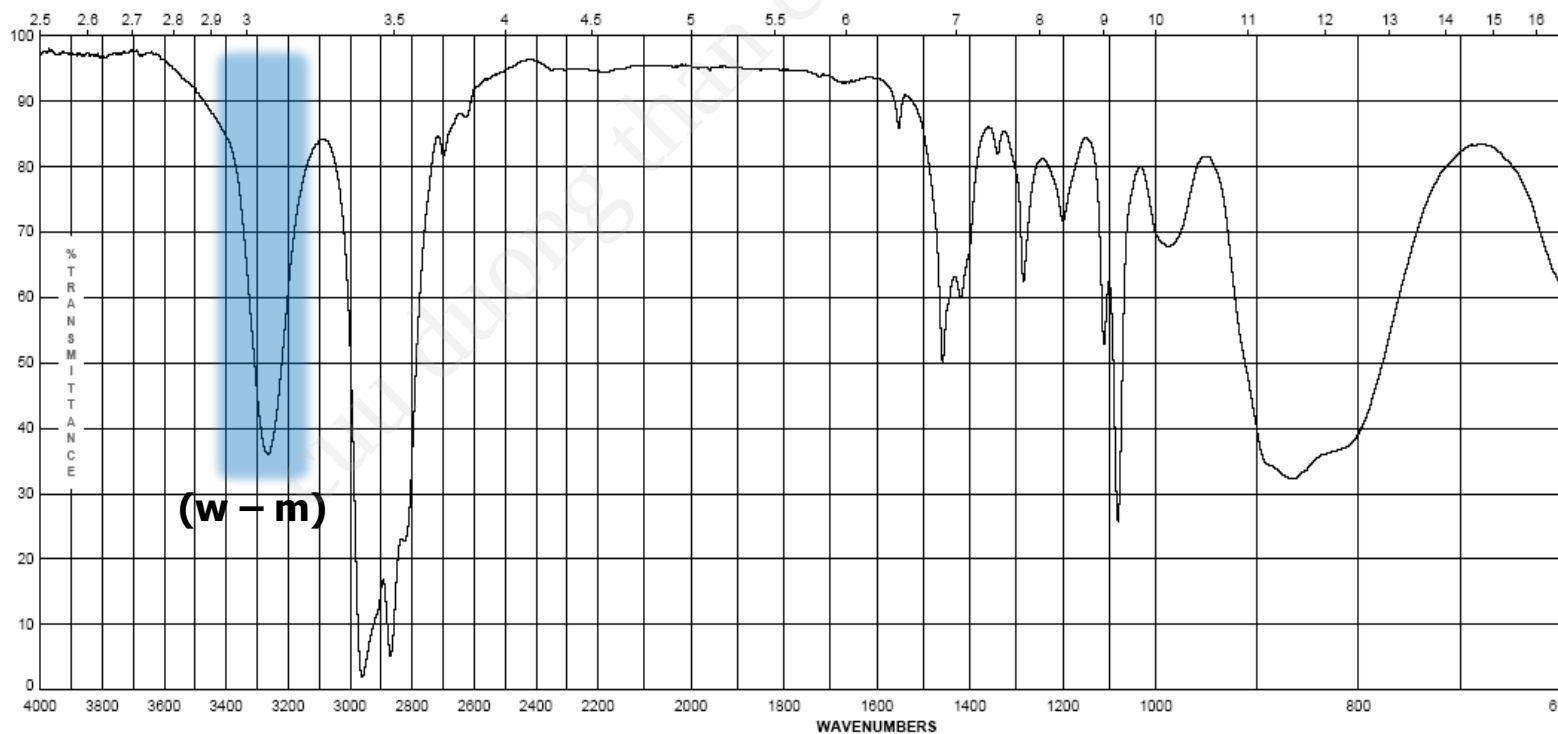
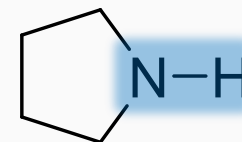
- giãn-N-H của NH_2 **mũi đôi:** $3200\text{--}3500\text{ cm}^{-1}$
(symmetric and anti-symmetric modes)
- Biến dạng -NH_2 $1590\text{--}1650\text{ cm}^{-1}$
- Dãy dao động biến dạng $780\text{--}820\text{ cm}^{-1}$

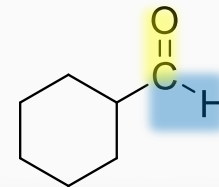


9. Amines – Bậc 2

- 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

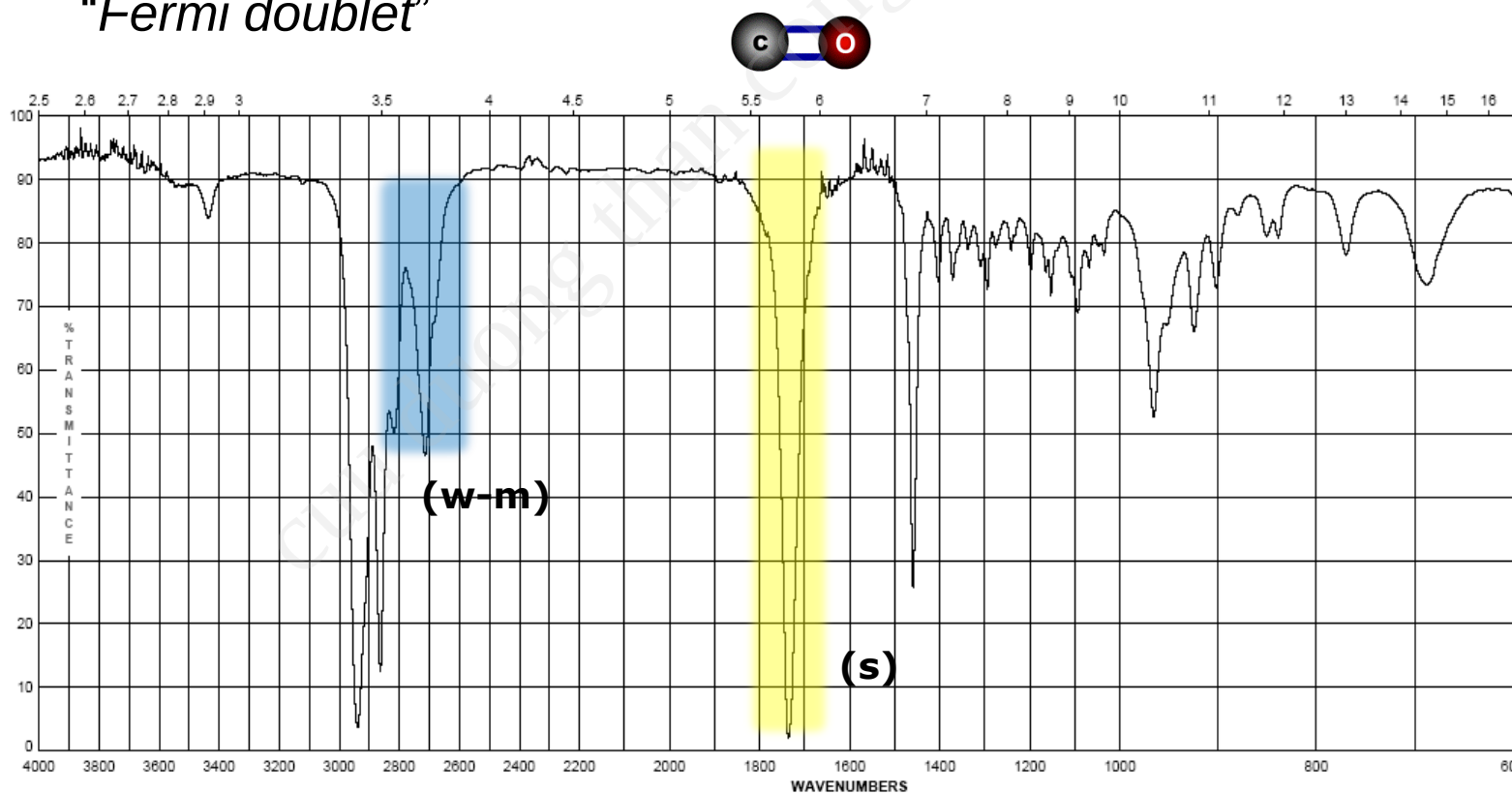
pyrrolidine

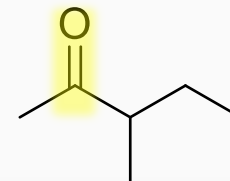




10. Aldehydes

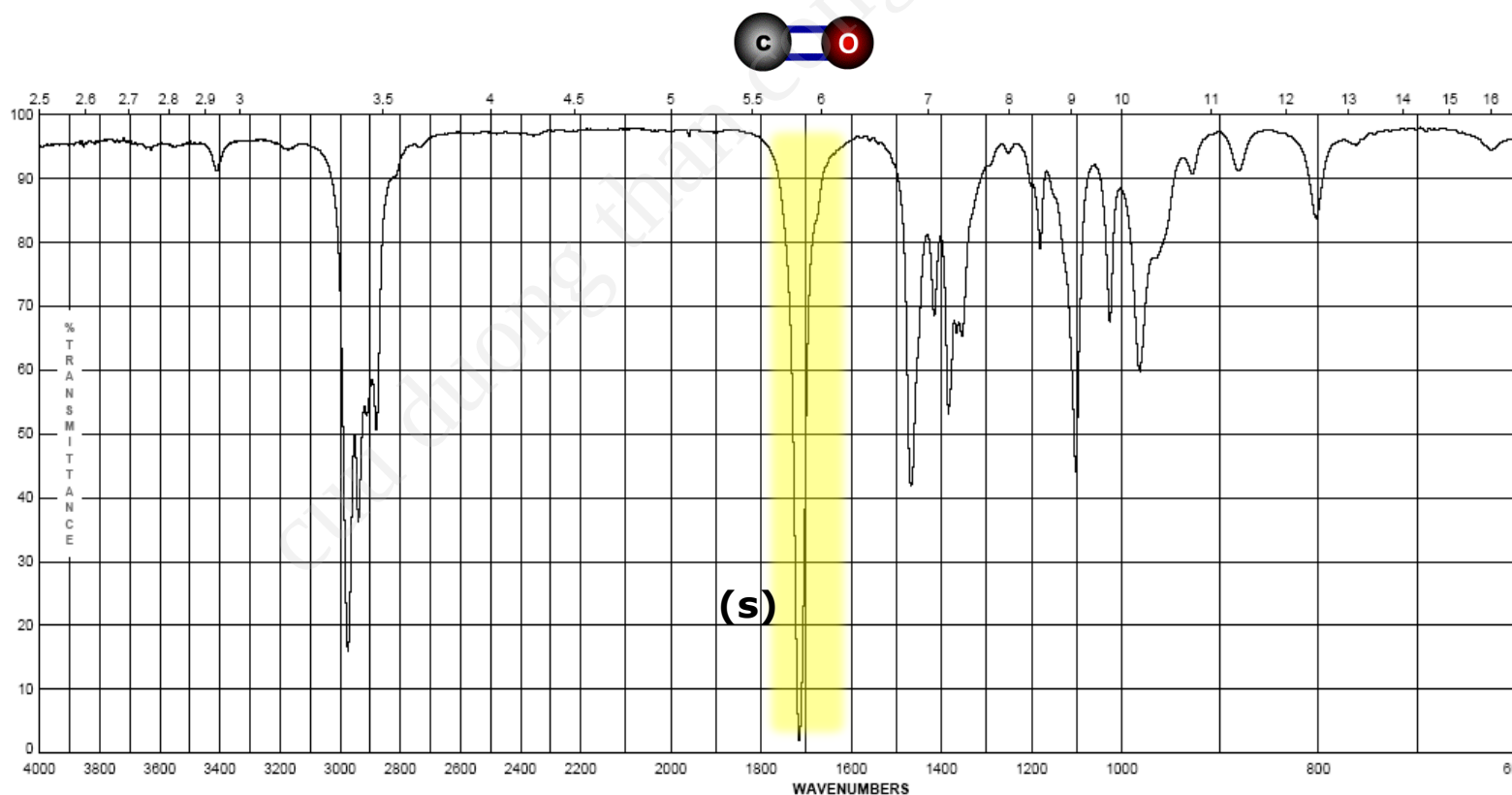
- Giãn C=O (carbonyl) $1720\text{--}1740\text{ cm}^{-1}$
- Aldehyde liên hợp & benzaldehyde $\nu_{\text{C=O}} 1710\text{--}1685\text{ cm}^{-1}$
- Giãn sp^2 C-H đặc trưng, mũi đôi $2720\text{ \& } 2820\text{ cm}^{-1}$ gọi là “*Fermi doublet*”





11. Ketones

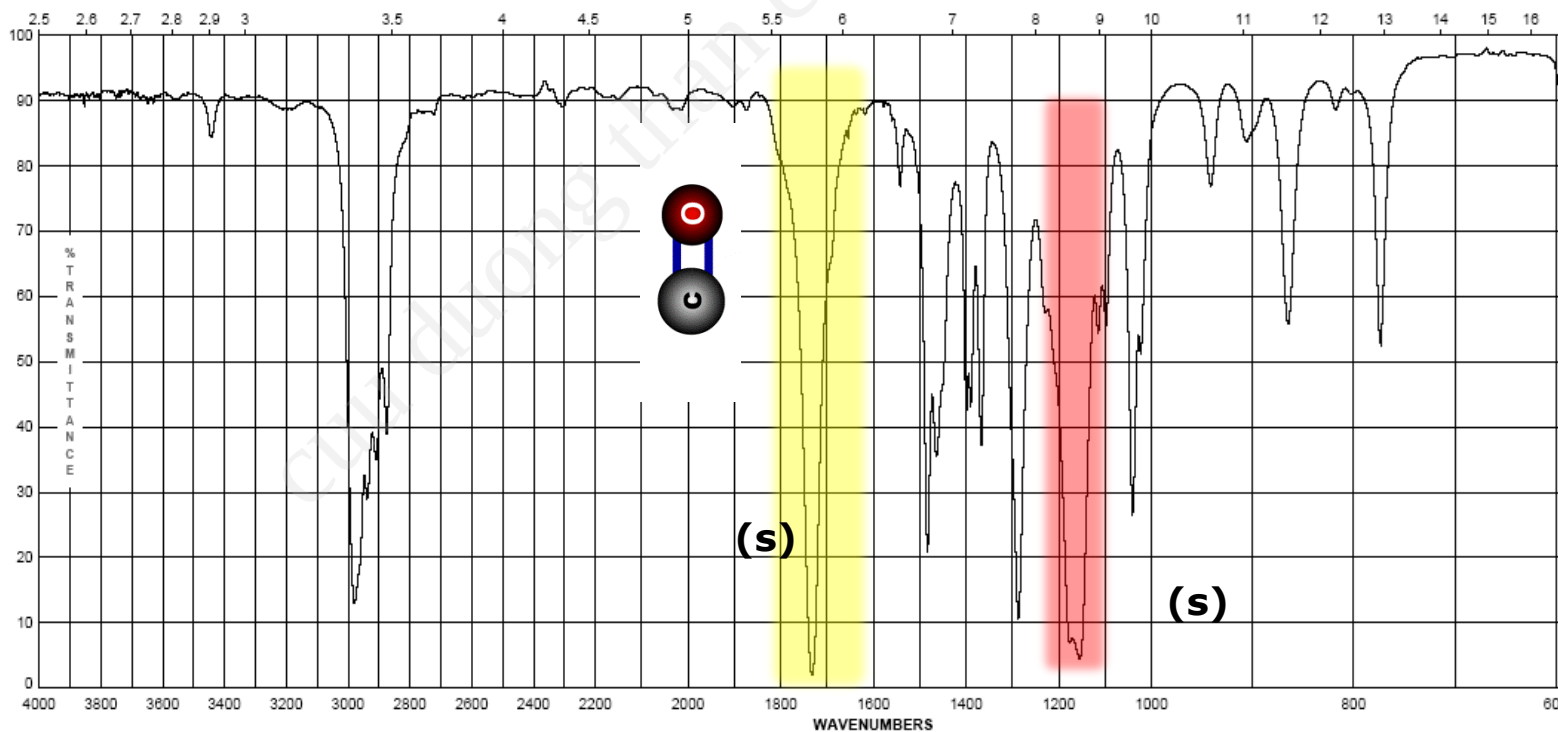
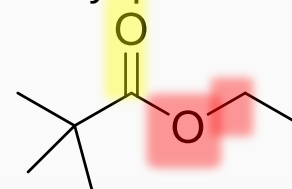
- Tương tự dao động nhóm carbonyl
- Giãn C=O 1705-1725 cm^{-1}



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}

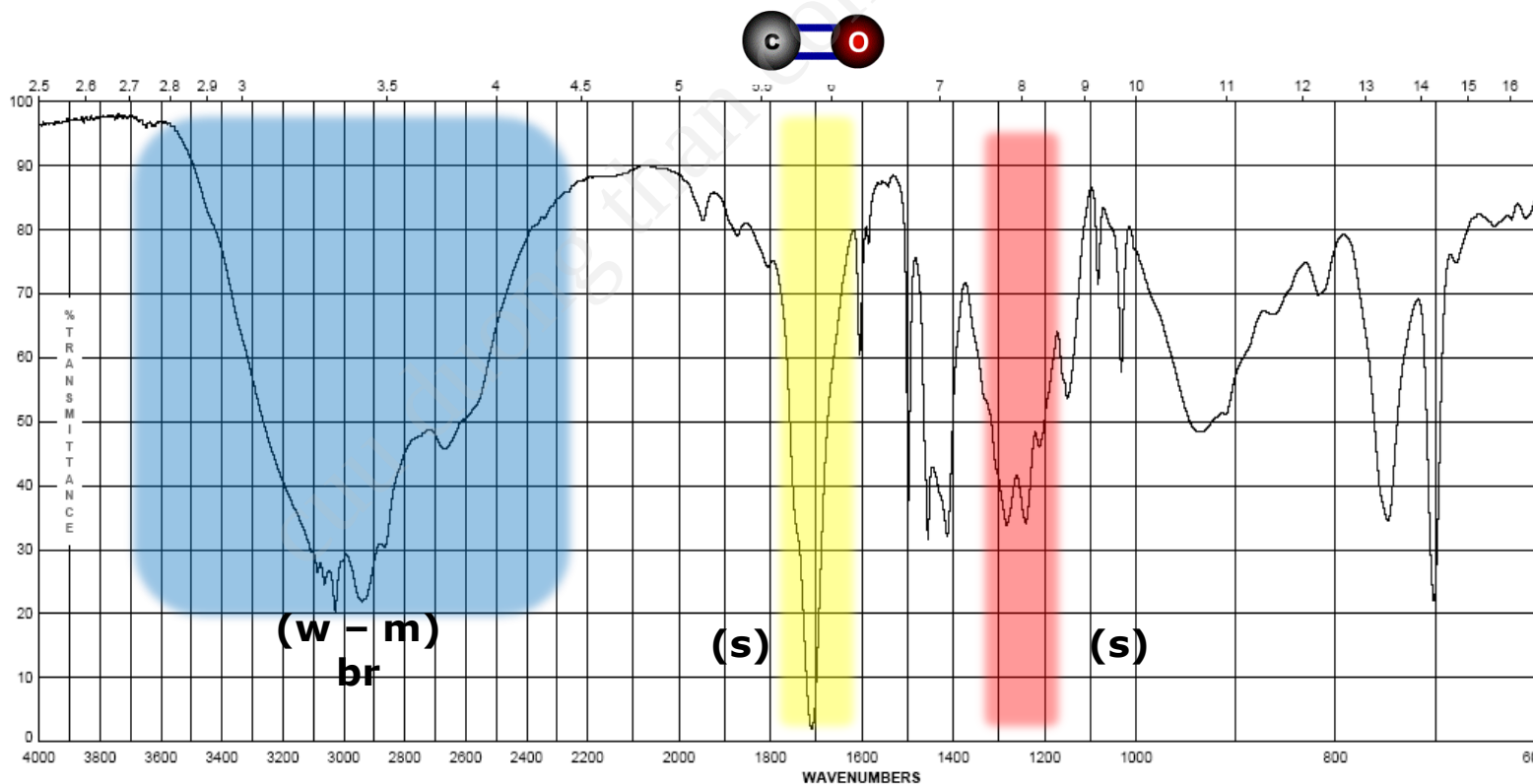
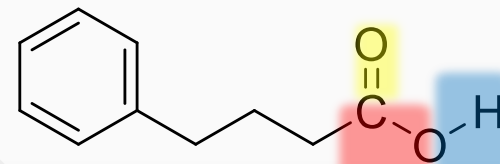
Ethyl pivalate



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

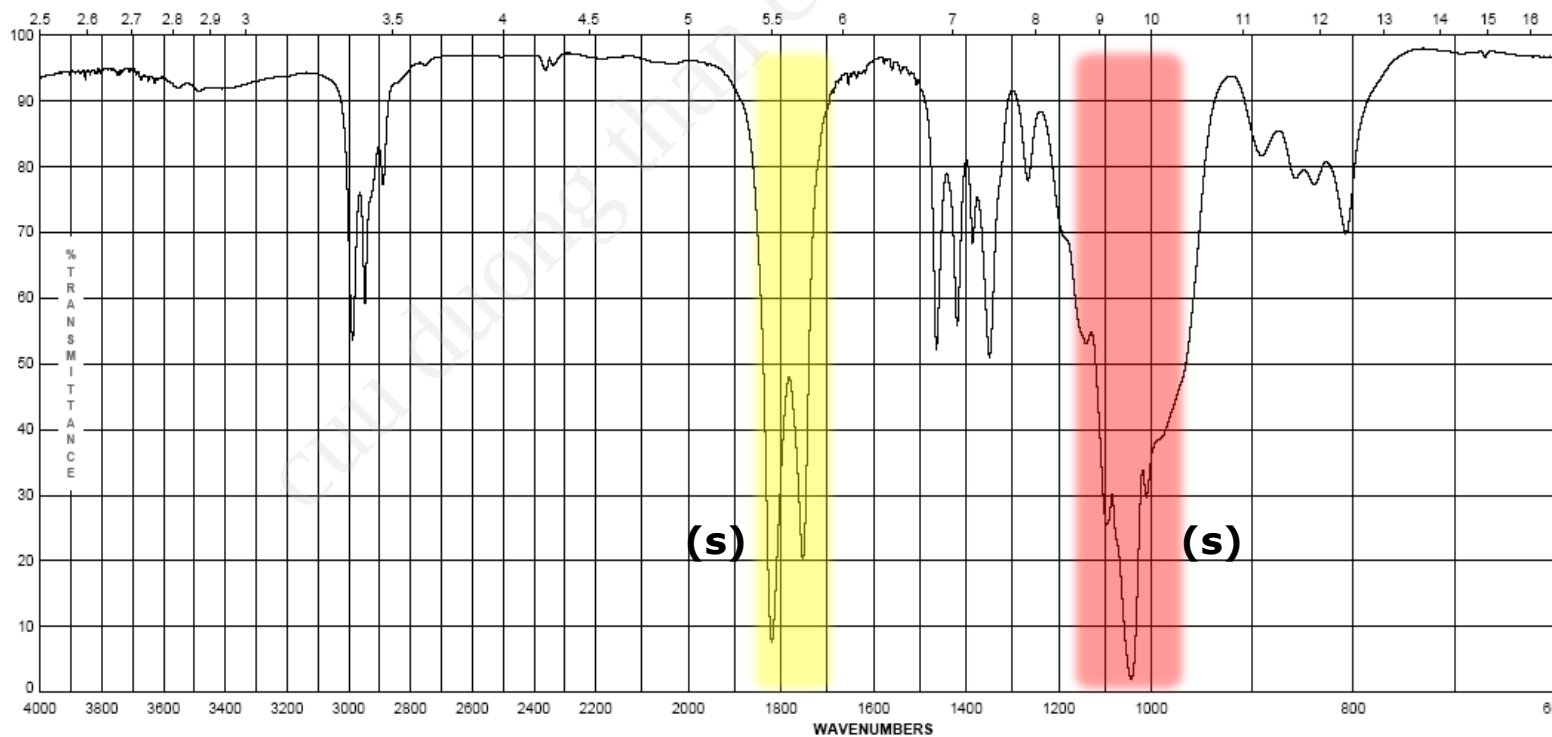
4-phenylbutyric acid



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 :

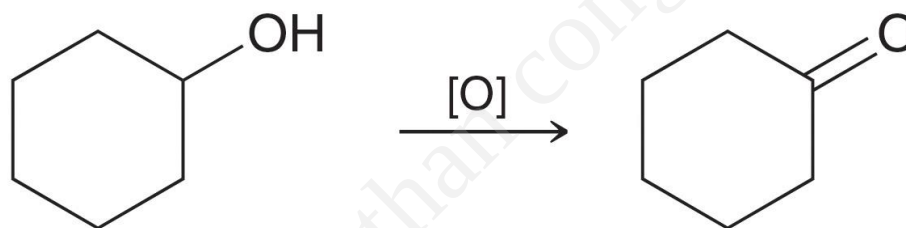
- Sau đó nghiên cứu các **vùng tần số nhóm** để xác định có hay không có các nhóm chức.
- Trong nhiều trường hợp việc đọc phổ (giải phổ) và tìm các tần số đặc trưng không đủ để nhận biết một cách toàn diện về chất nghiên cứu, nhưng có lẽ là có thể suy đoán được kiểu hoặc loại hợp chất.

2. Xác định độ tinh khiết.

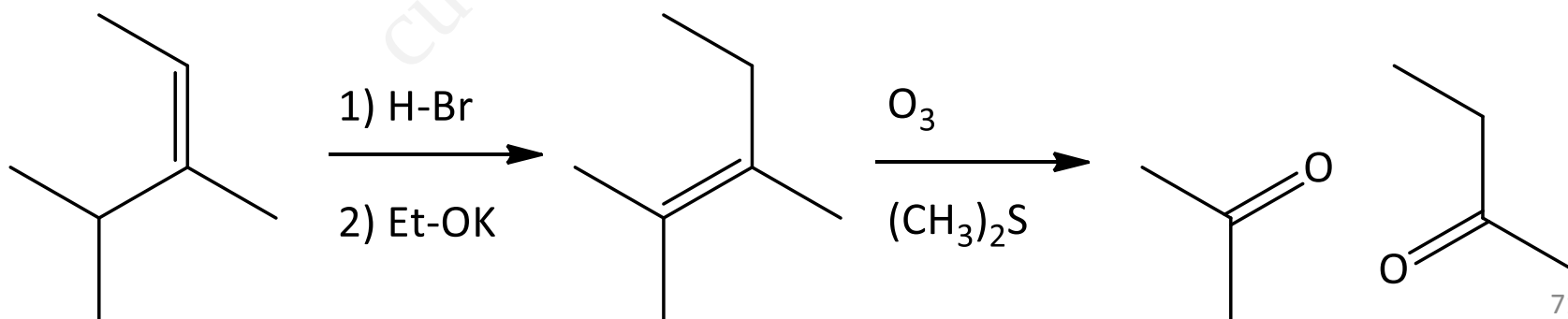
3. Phân tích định lượng.

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 ($-CH_2-$)

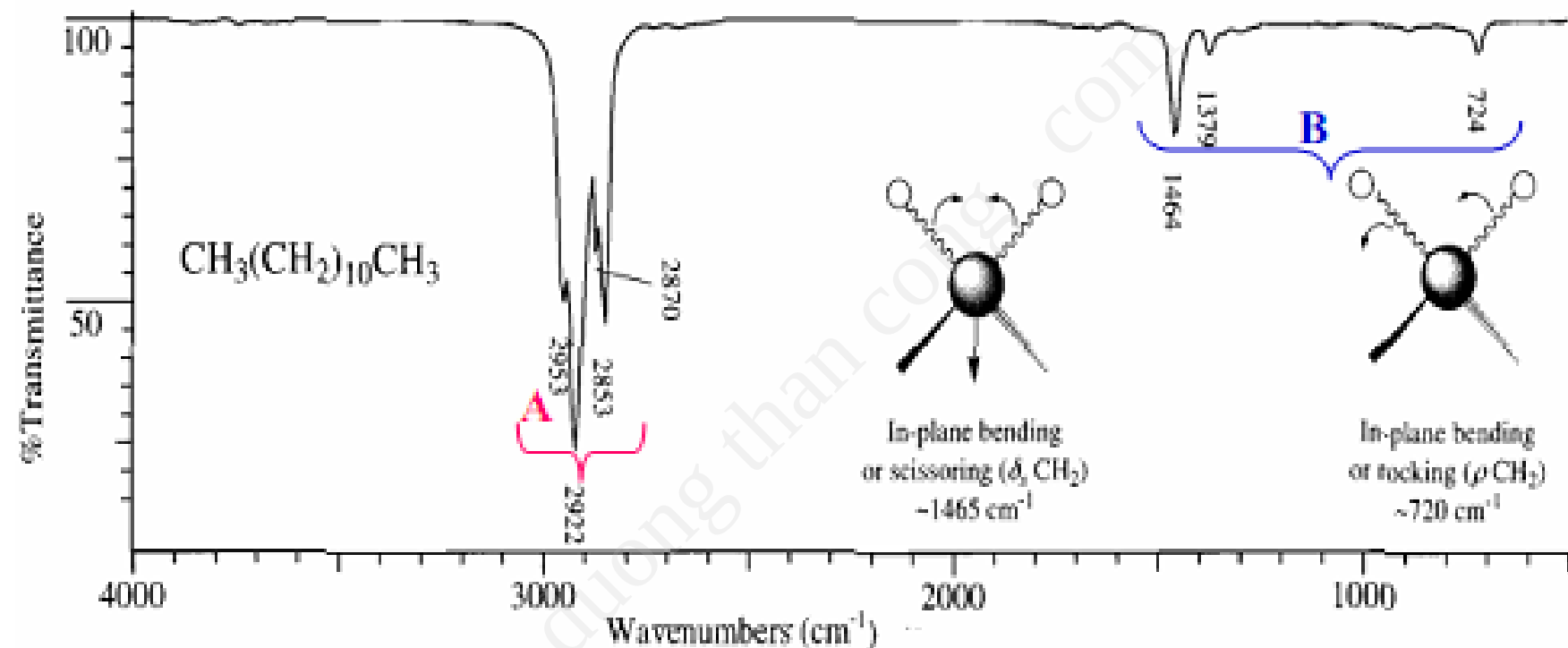
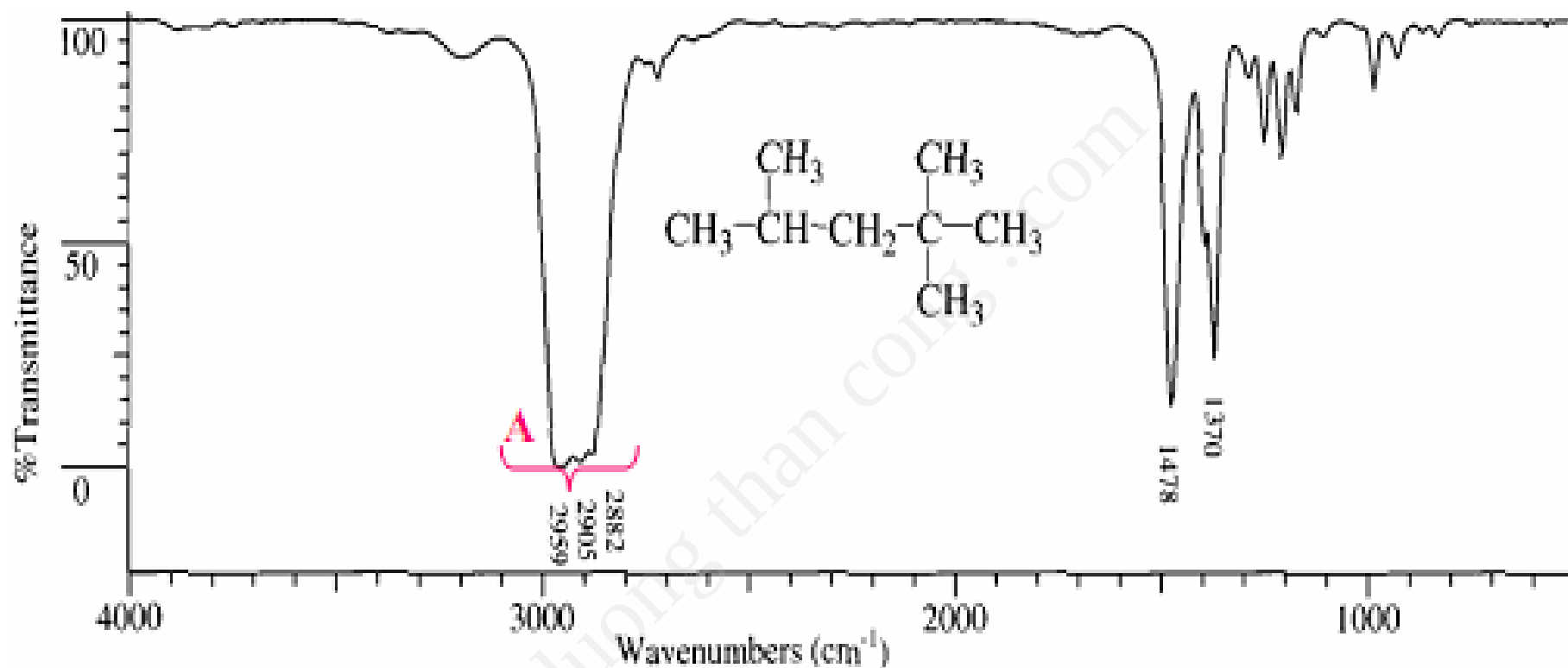
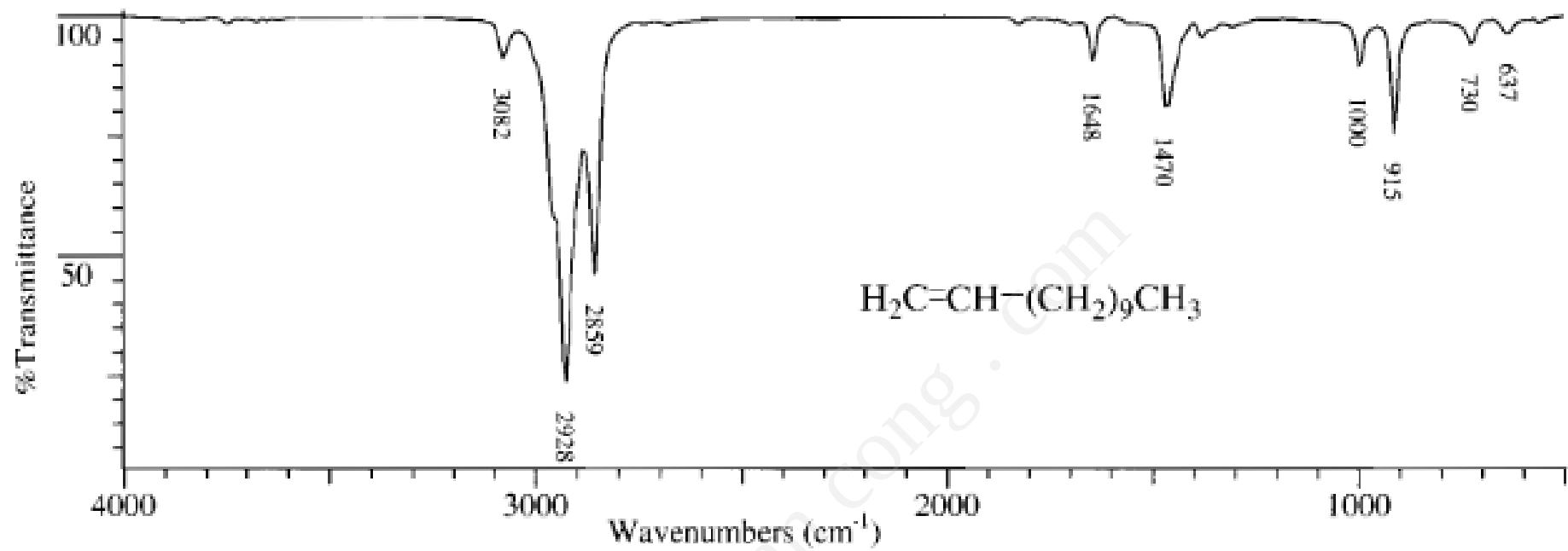
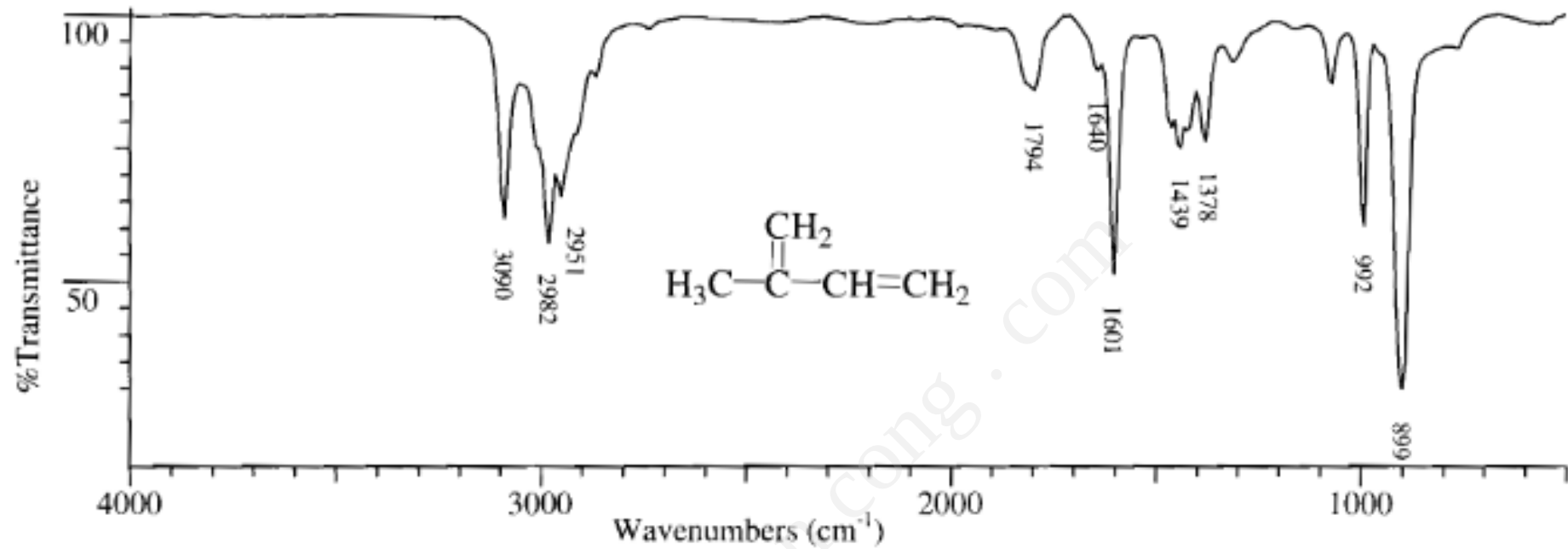


FIGURE 2.8. Dodecane. C—H stretch: 2953 cm⁻¹ ν_{as} CH₃, 2870 cm⁻¹ ν_s CH₃, 2922 cm⁻¹ ν_{as} CH₂, 2853 cm⁻¹ ν_s CH₂. C—H bend: 1464 cm⁻¹ δ_s CH₂, 1450 cm⁻¹ δ_{as} CH₃, 1379 cm⁻¹ δ_s CH₃. CH₂ rock: 724 cm⁻¹ ρ CH₂.

Alkane mạch nhánh







Alkyne

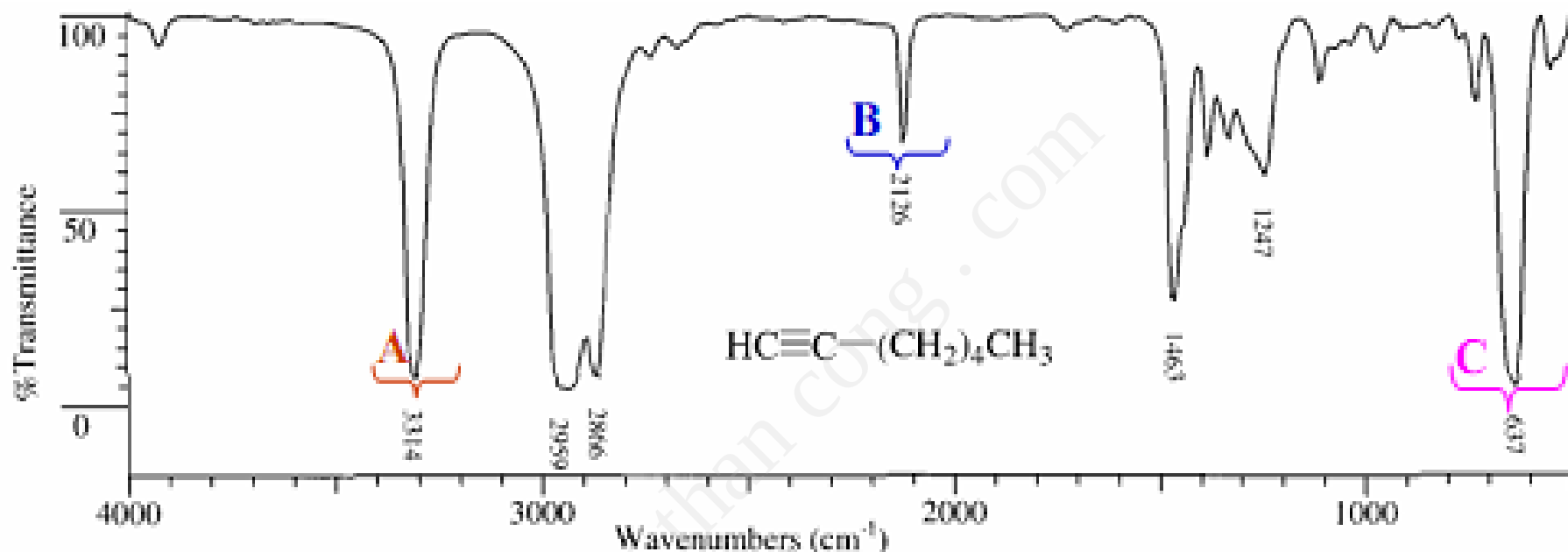


FIGURE 2.12. 1-Heptyne. $\equiv\text{C}-\text{H}$ stretch, 3314 cm^{-1} . Alkyl $\text{C}-\text{H}$ stretch $1450-1360\text{ cm}^{-1}$ (see Figure 2.8). $2960-2860\text{ cm}^{-1}$. $\text{C}\equiv\text{C}$ stretch, 2126 cm^{-1} . $\text{C}-\text{H}$ bend: 1463 cm^{-1} δ_{CH_2} , 1450 cm^{-1} δ_{CH_3}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

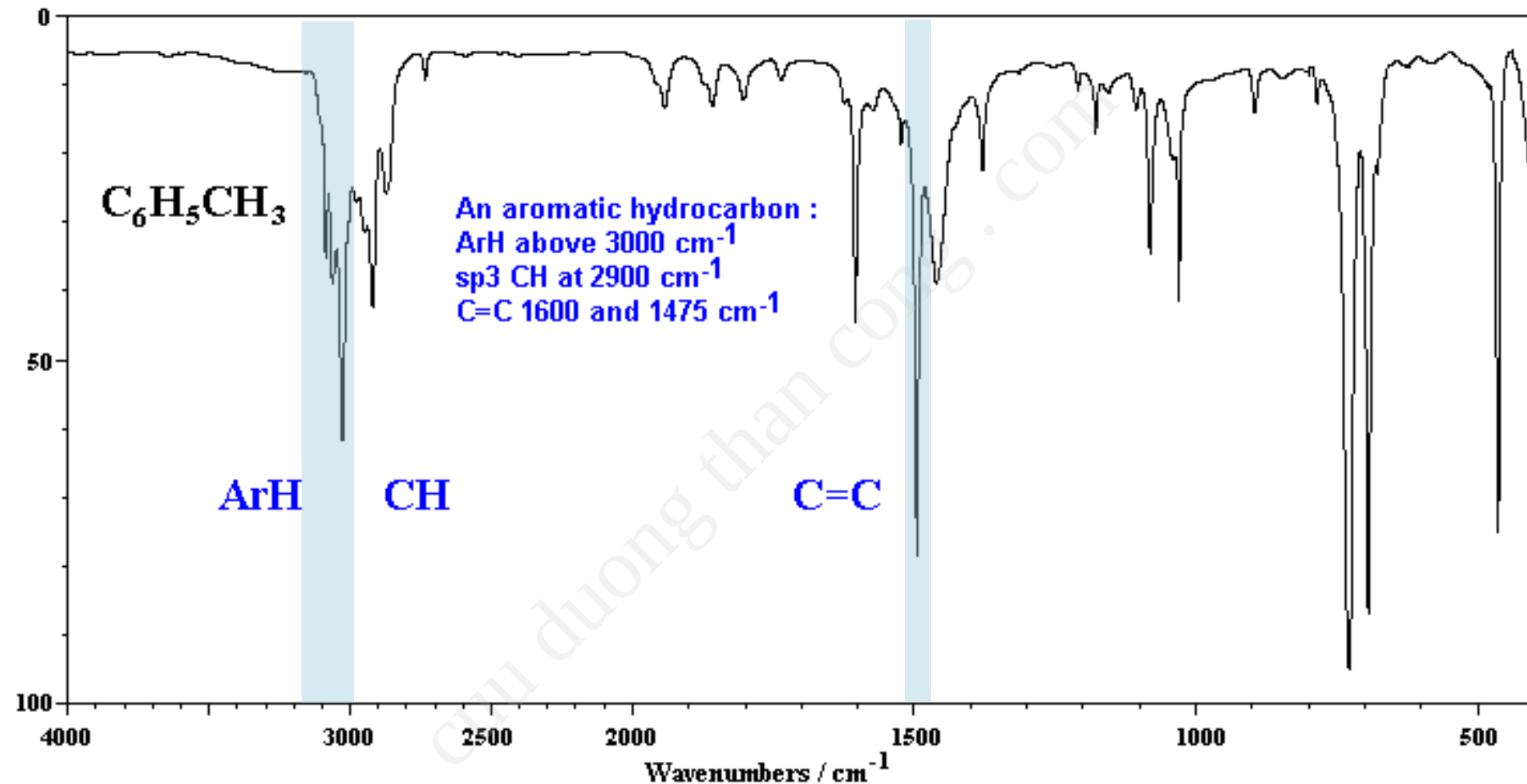
A: $\equiv\text{C}-\text{H}$ giãn: 3314 cm^{-1}

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

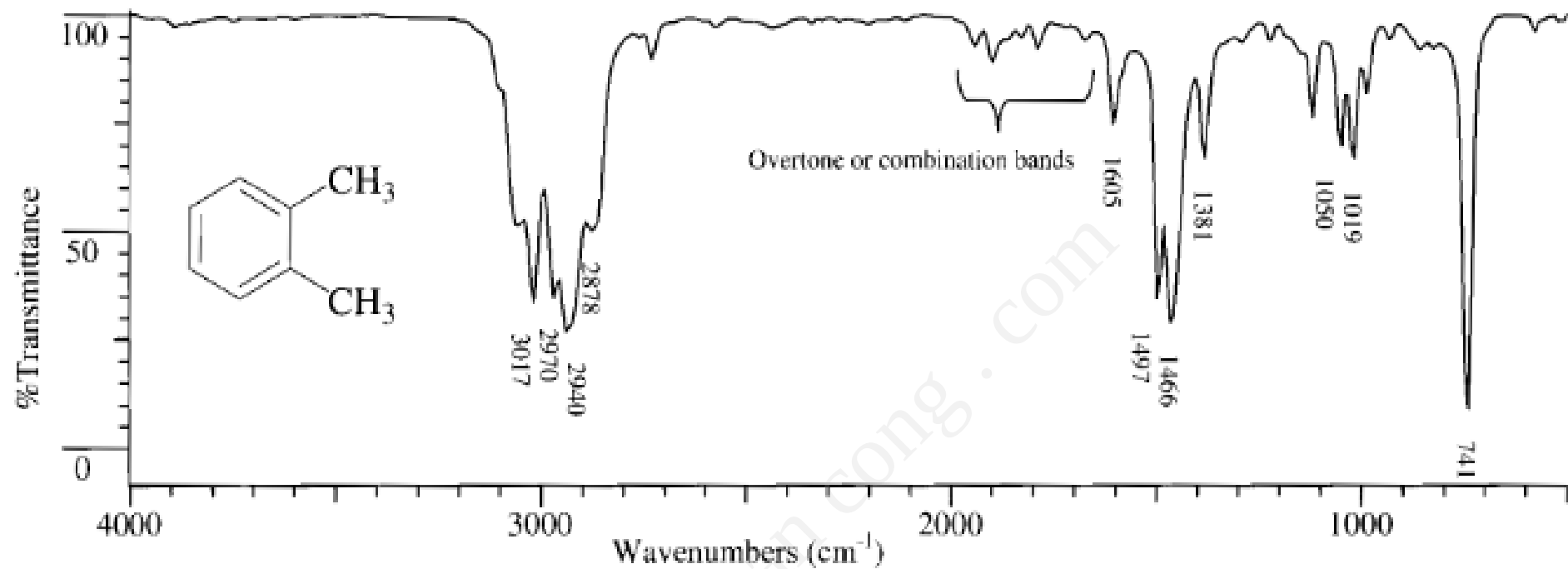
C: $\equiv\text{C}-\text{H}$ uốn (Cơ bản): 637 cm^{-1}

Hydrocarbon thơm

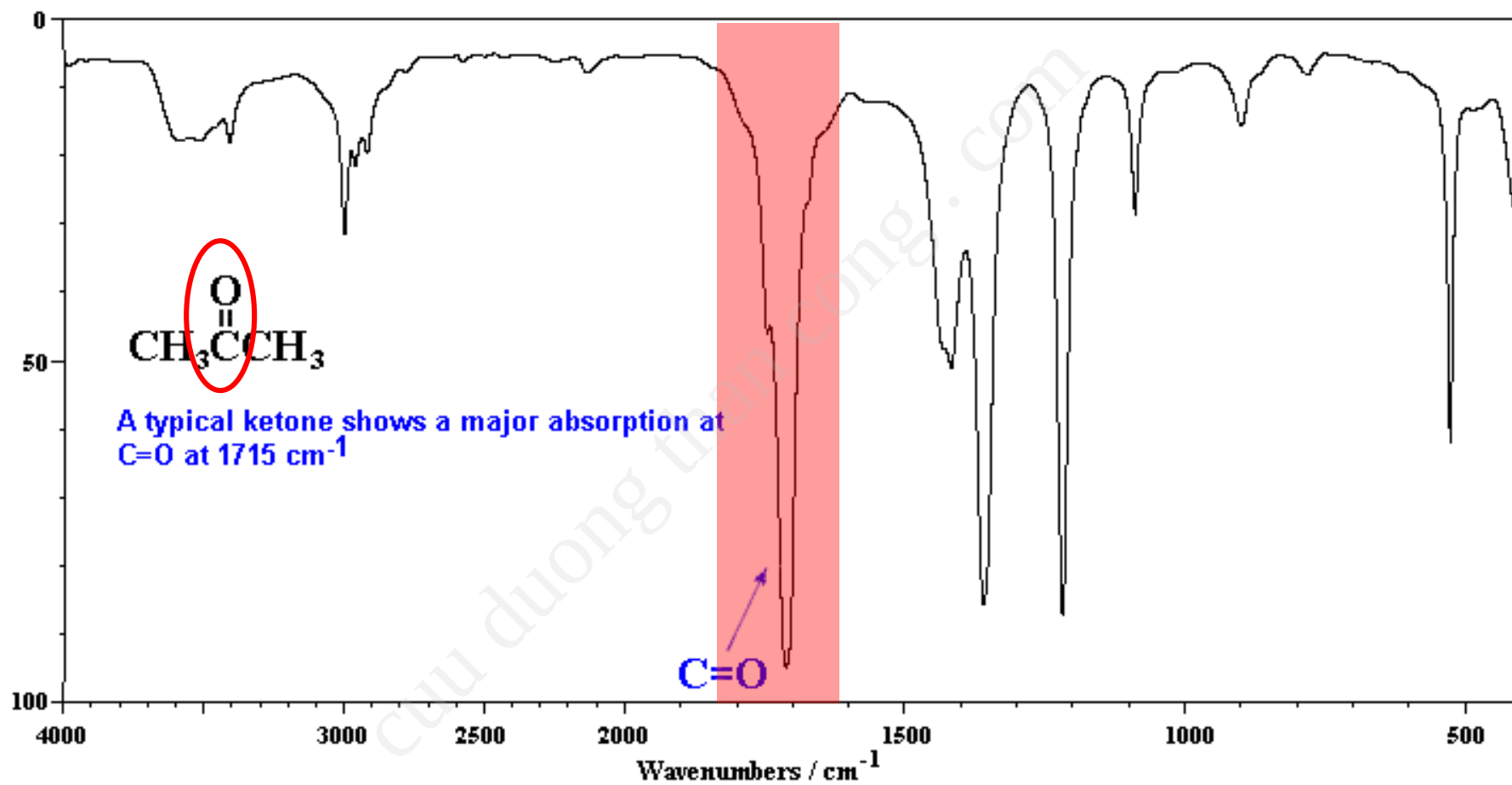
Absorbance / %



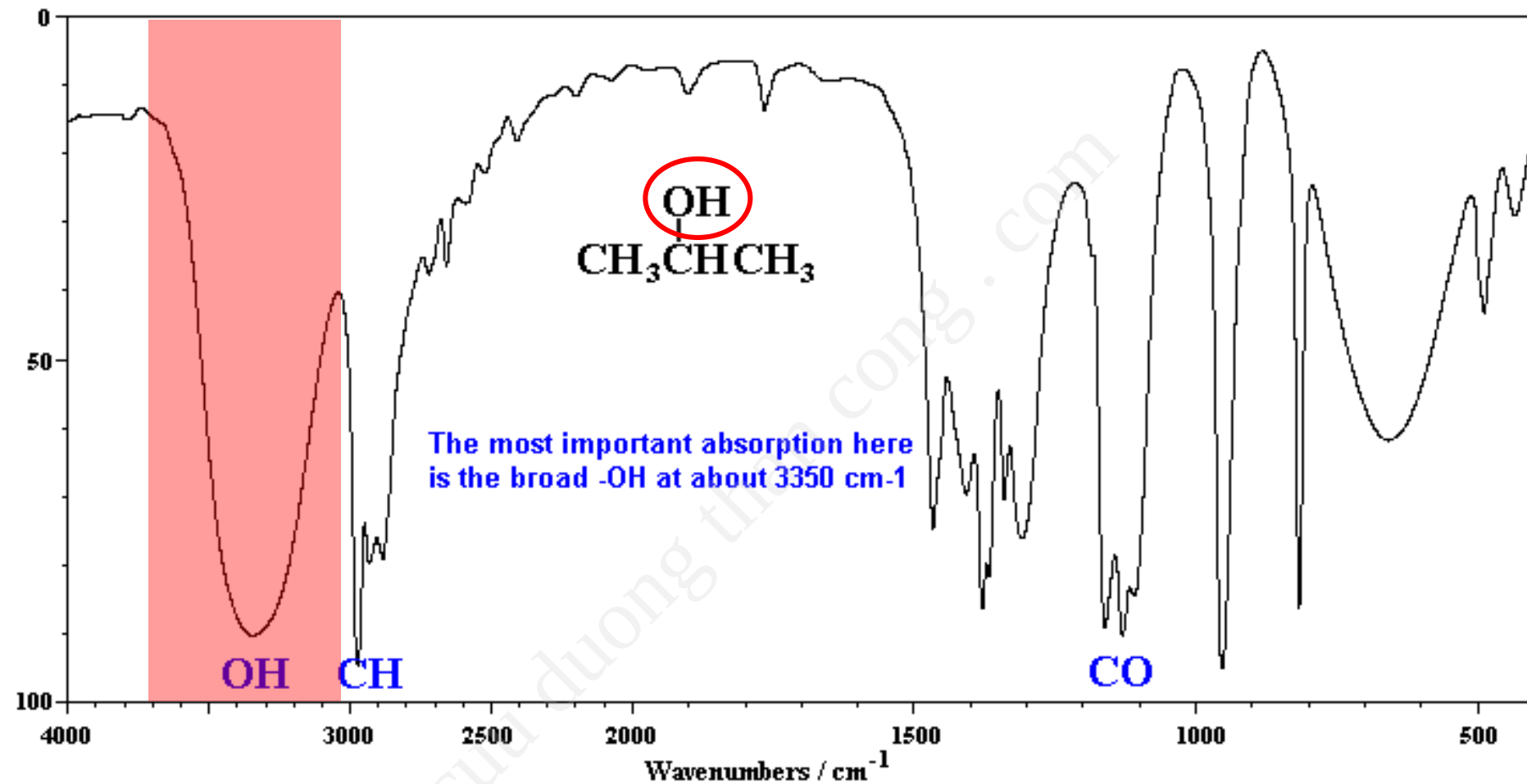
Hydrocarbon thơm có dao động kéo dẫn C-H của vòng thơm $> 3000\text{ cm}^{-1}$; sp^3 C-H $\sim 2900\text{ cm}^{-1}$; C=C vòng thơm ~ 1600 và 1475 cm^{-1}

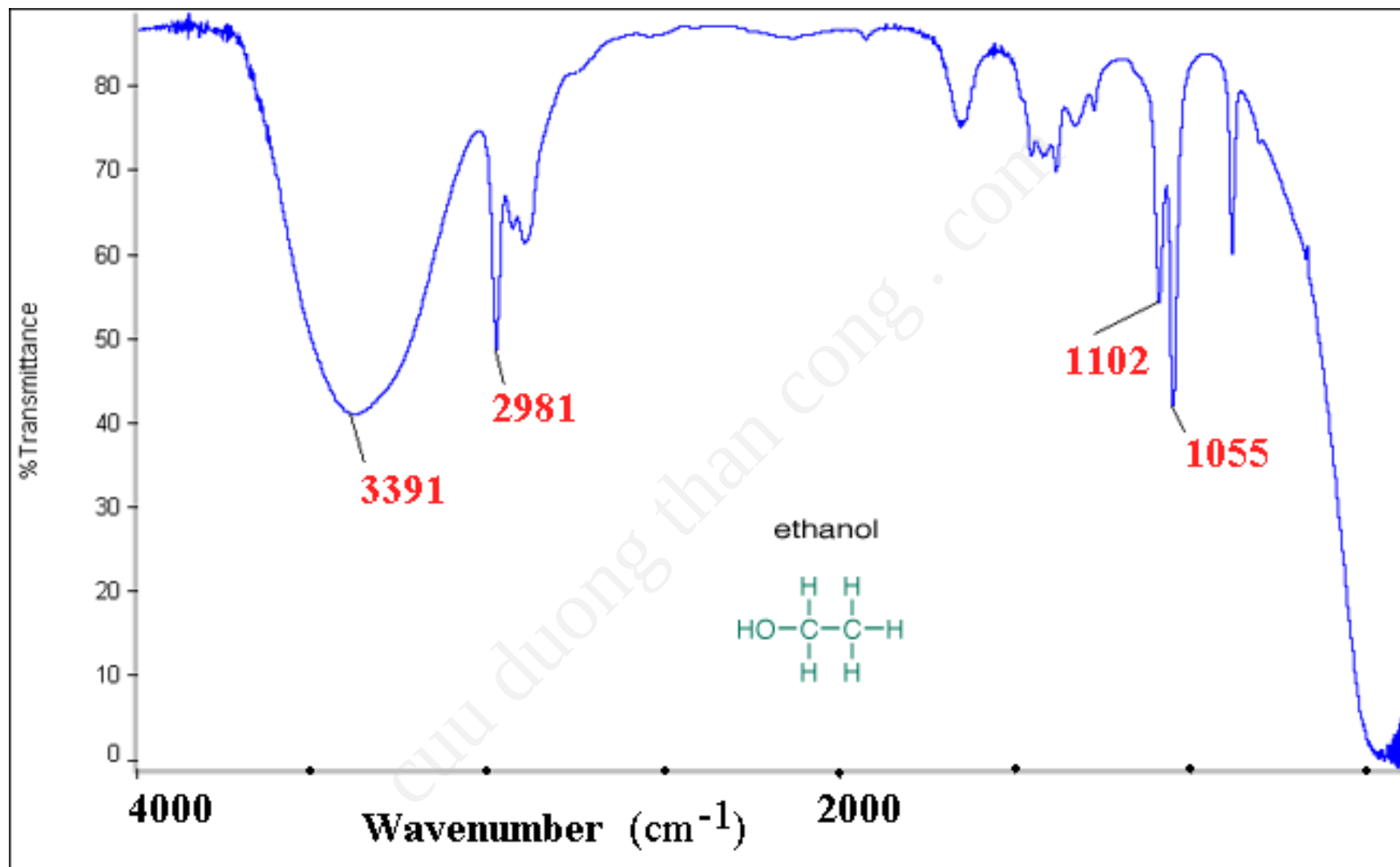


Absorbance / %

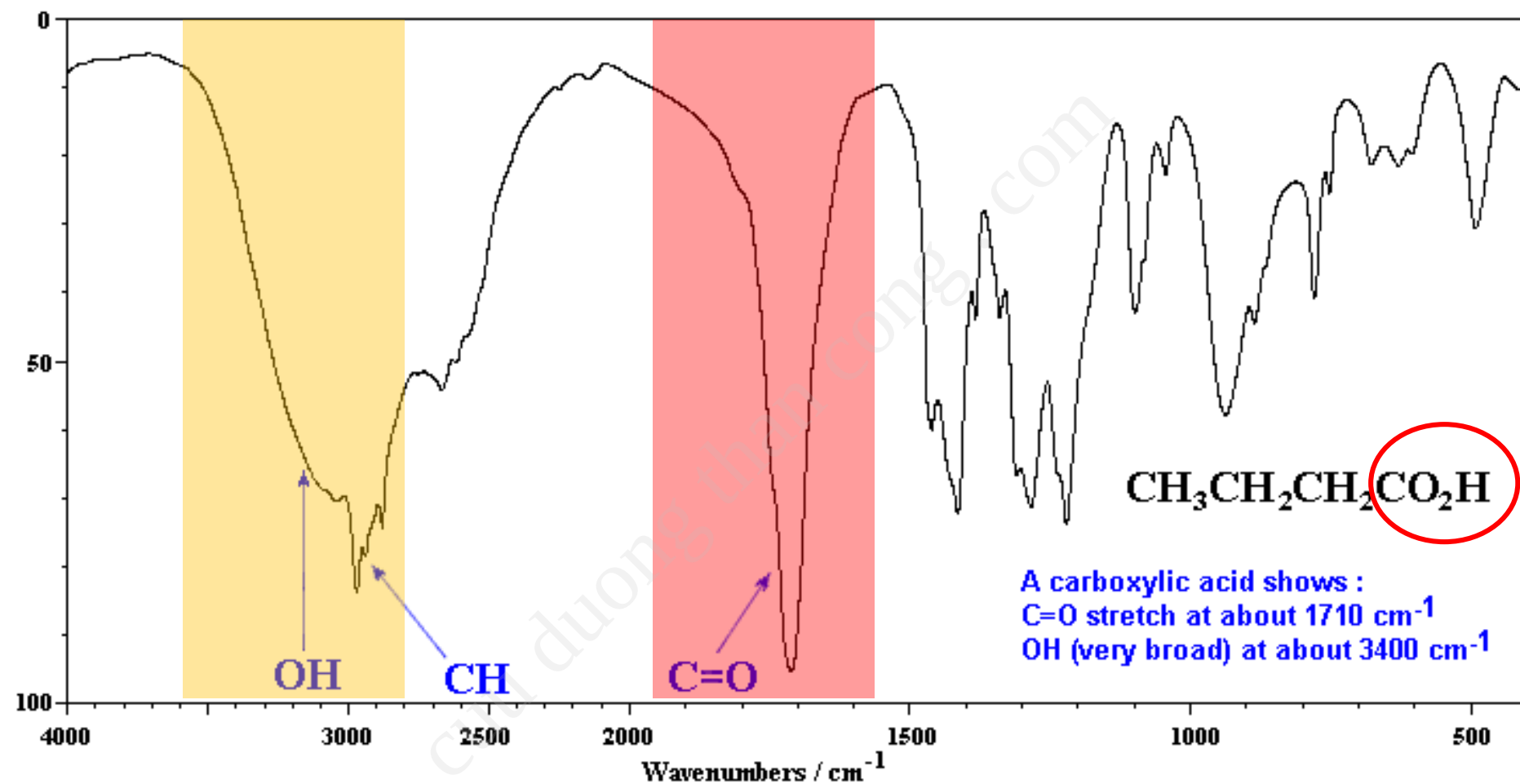


Absorbance / %

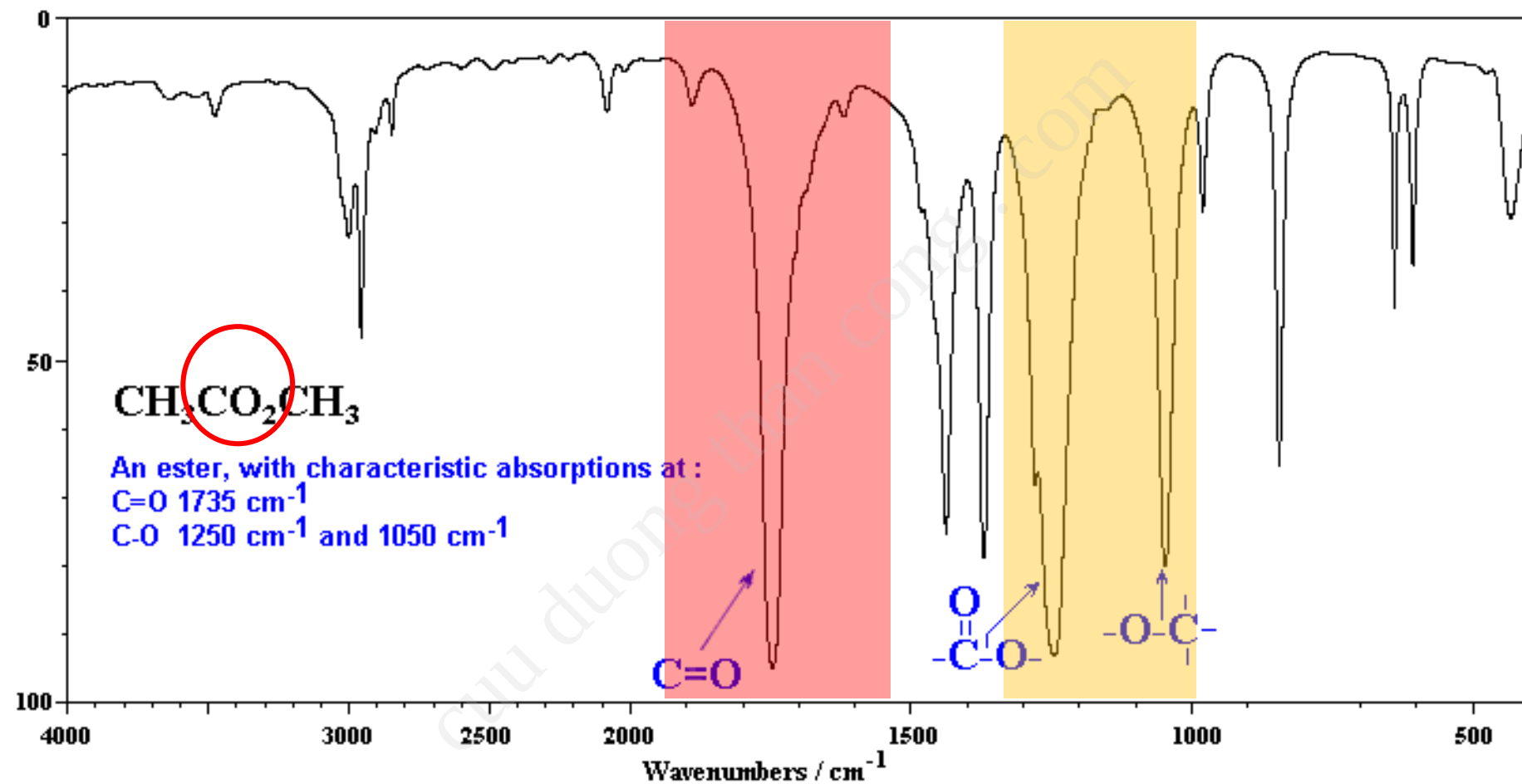




Absorbance / %



Absorbance / %



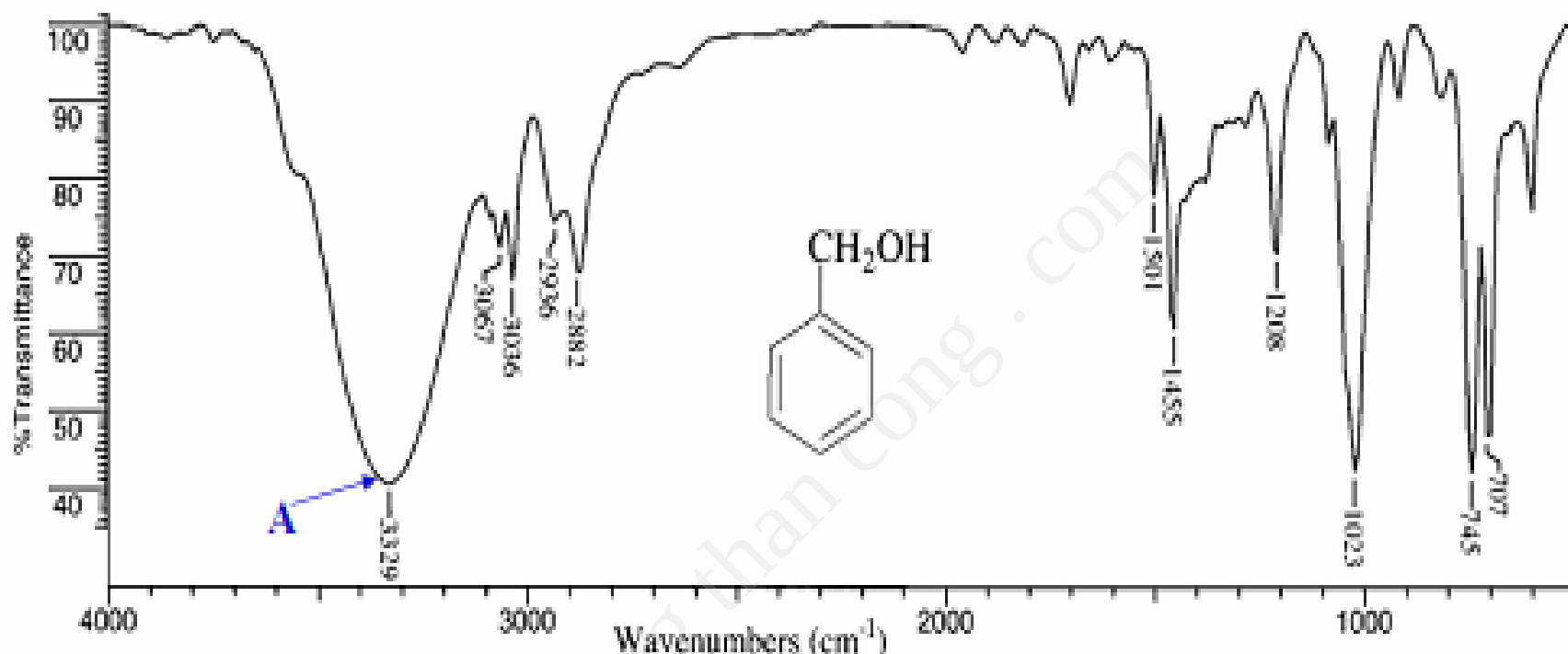


FIGURE 2.16. Benzyl alcohol. O—H stretch: intermolecular hydrogen bonded, 3329 cm^{-1} . C—H stretch: aromatic $3100\text{--}3000 \text{ cm}^{-1}$. C—H stretch: methylene, $2940\text{--}2860 \text{ cm}^{-1}$. Overtone or combination bands, $2000\text{--}1667 \text{ cm}^{-1}$. C=C ring stretch, $1501, 1455 \text{ cm}^{-1}$, 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}

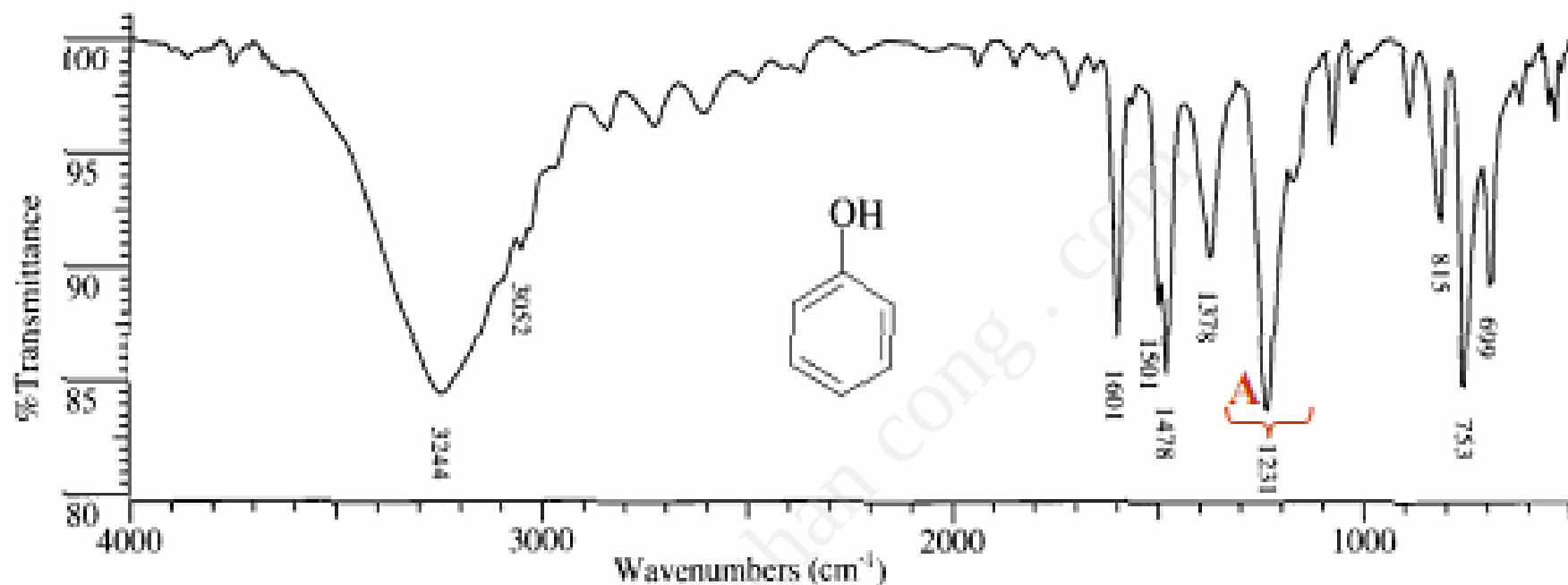
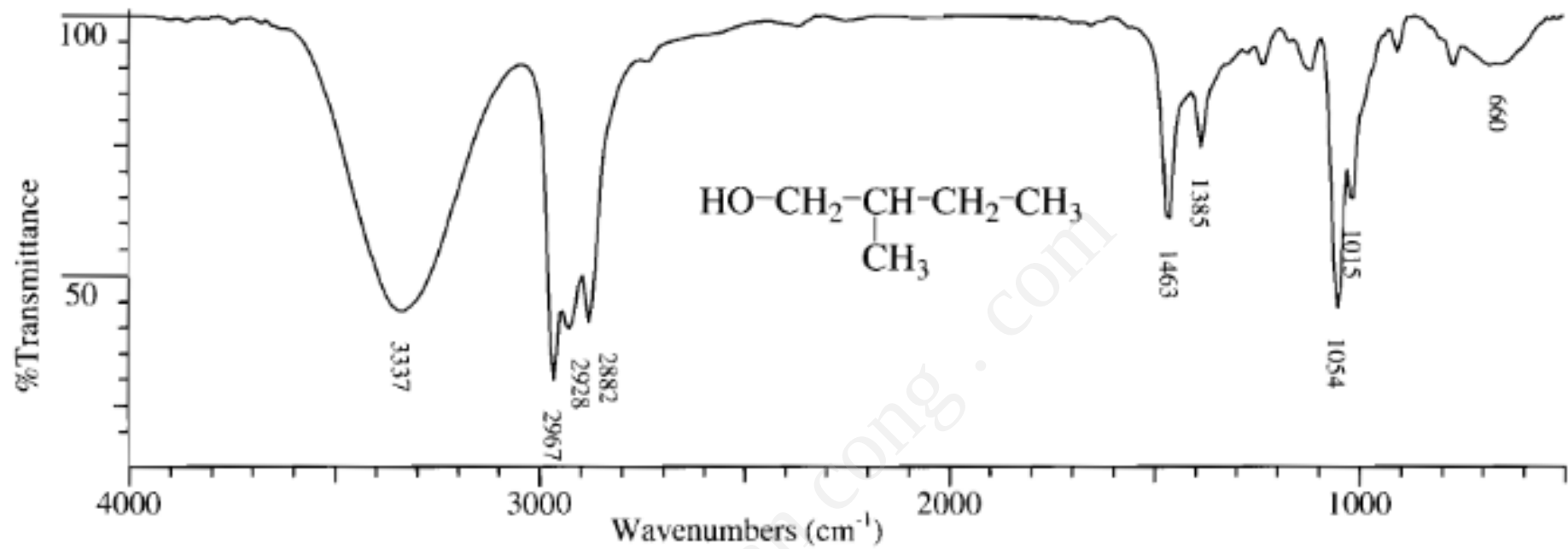


FIGURE 2.17. Phenol (Melt). Broad intermolecular hydrogen bonded, O—H stretch, 3244 cm^{-1} . Aromatic C—H stretch, 3052 cm^{-1} . Overtone or combination bands, $2000\text{--}1667\text{ cm}^{-1}$. C=C ring stretch, $1601, 1501, 1478\text{ cm}^{-1}$. In-plane O—H bend, 1378 cm^{-1} . C—O stretch, 1231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



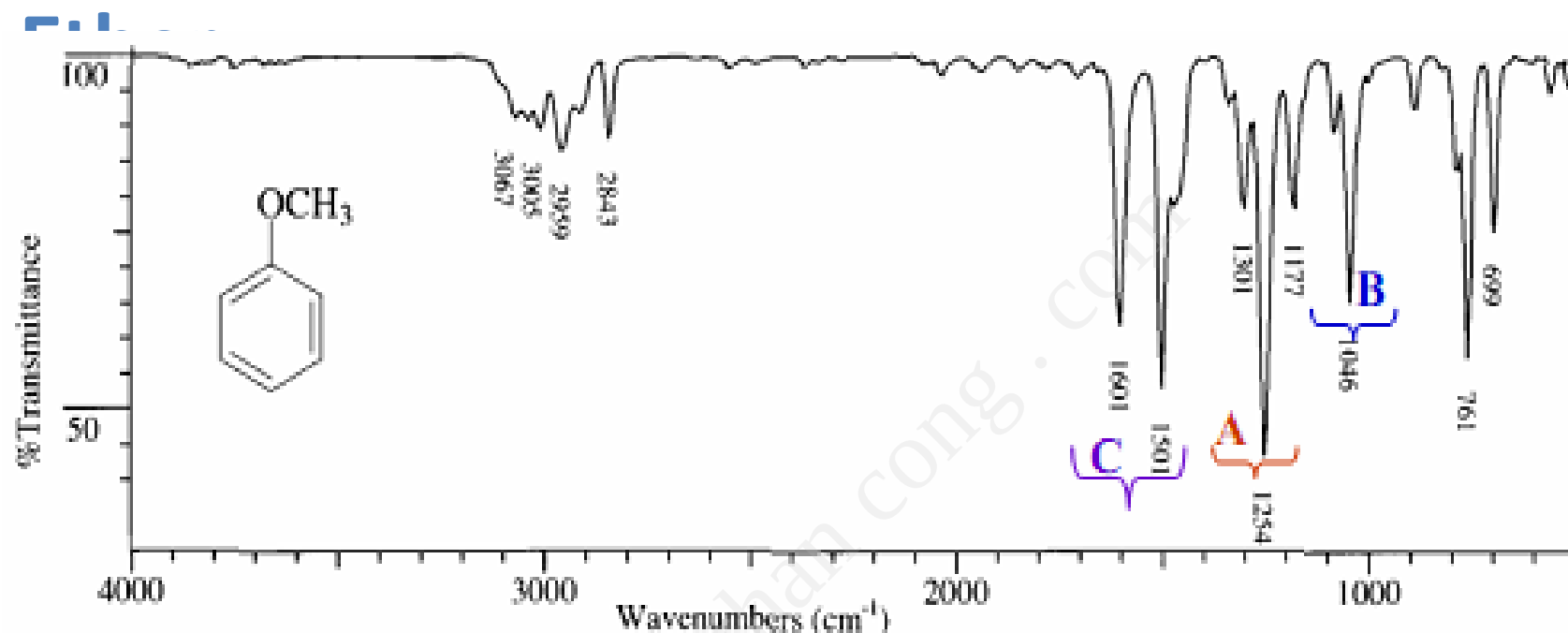


FIGURE 2.19. Anisole. Aromatic C—H stretch, 3067, 3030, 3005 cm^{-1} . Methyl C—H stretch, 2950, 2843 cm^{-1} . Overtone-combination region, 2000–1650 cm^{-1} . C=C ring stretch, 1601, 1501 cm^{-1} . Asymmetric C—O—C stretch, 1254 cm^{-1} . Symmetric C—O—C stretch, 1046 cm^{-1} . Out-of-plane C—H bend,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

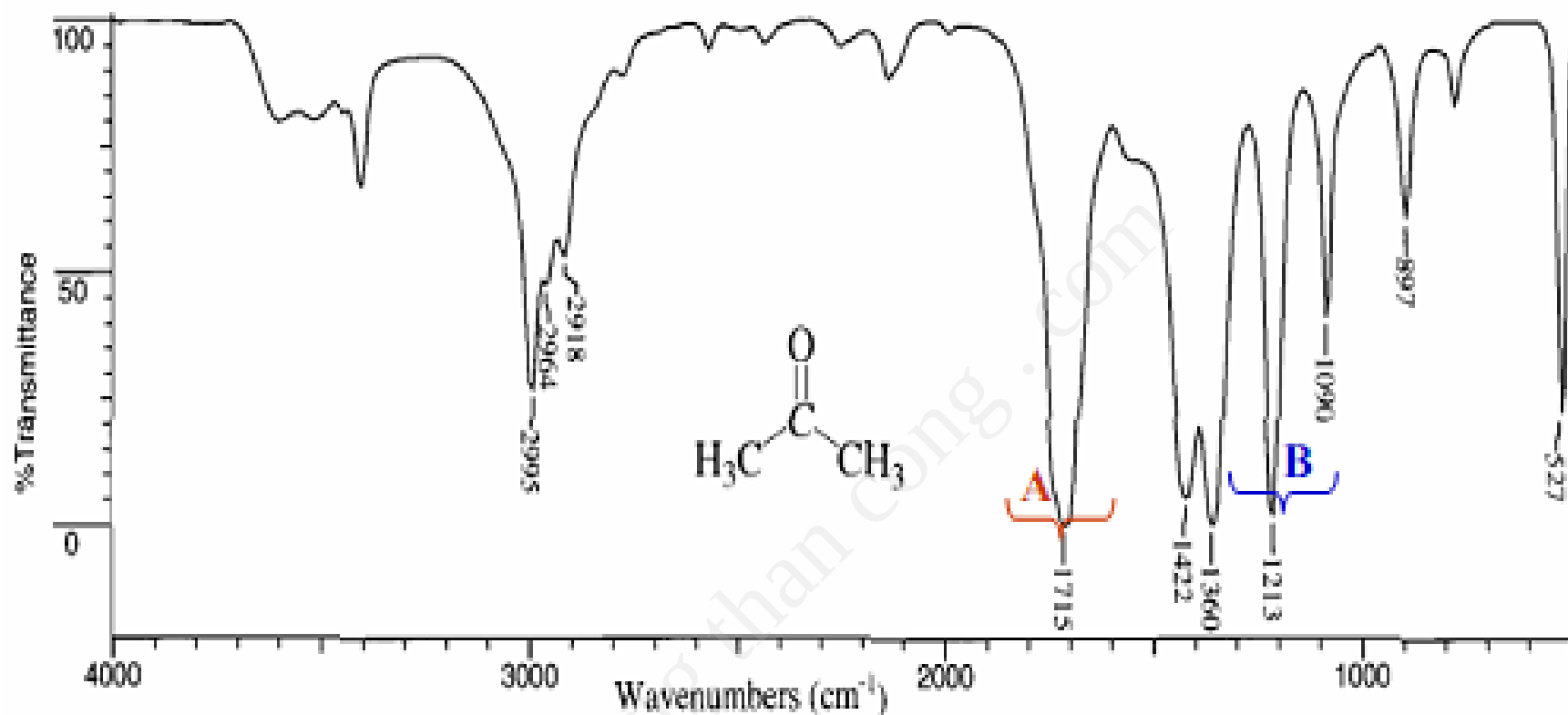


FIGURE 2.20. Acetone. ν_{as} , Methyl, 2995 cm⁻¹. ν_{as} , Methylene, 2964 cm⁻¹. ν_s , Methyl, 2918 cm⁻¹. Normal C=O stretch, 1715 cm⁻¹. δ_{as} , CH₃ 1422 cm⁻¹. δ_s , CH₃ 1360 cm⁻¹. C—CO—C stretch and bend, 1213 cm⁻¹.

A: Dao động giãn C=O: 1715 cm⁻¹

B: Dao động giãn và uốn C-CO-C: 1213 cm⁻¹

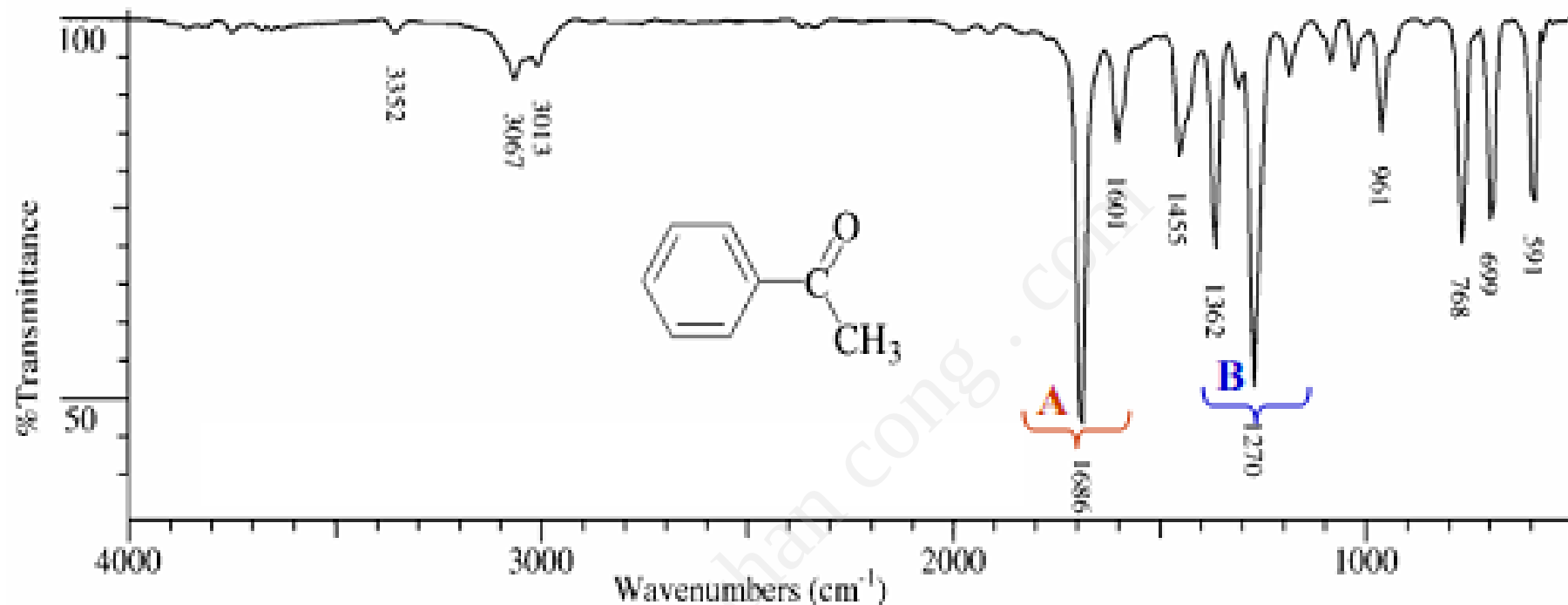


FIGURE 2.21. Acetophenone. Overtone of C=O stretch 3352 cm^{-1} ; frequency about twice that of C=O stretch. C=O stretch, 1686 cm^{-1} , lower frequency than observed in Figure 2.20 because of the conjugation with the phenyl group.

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

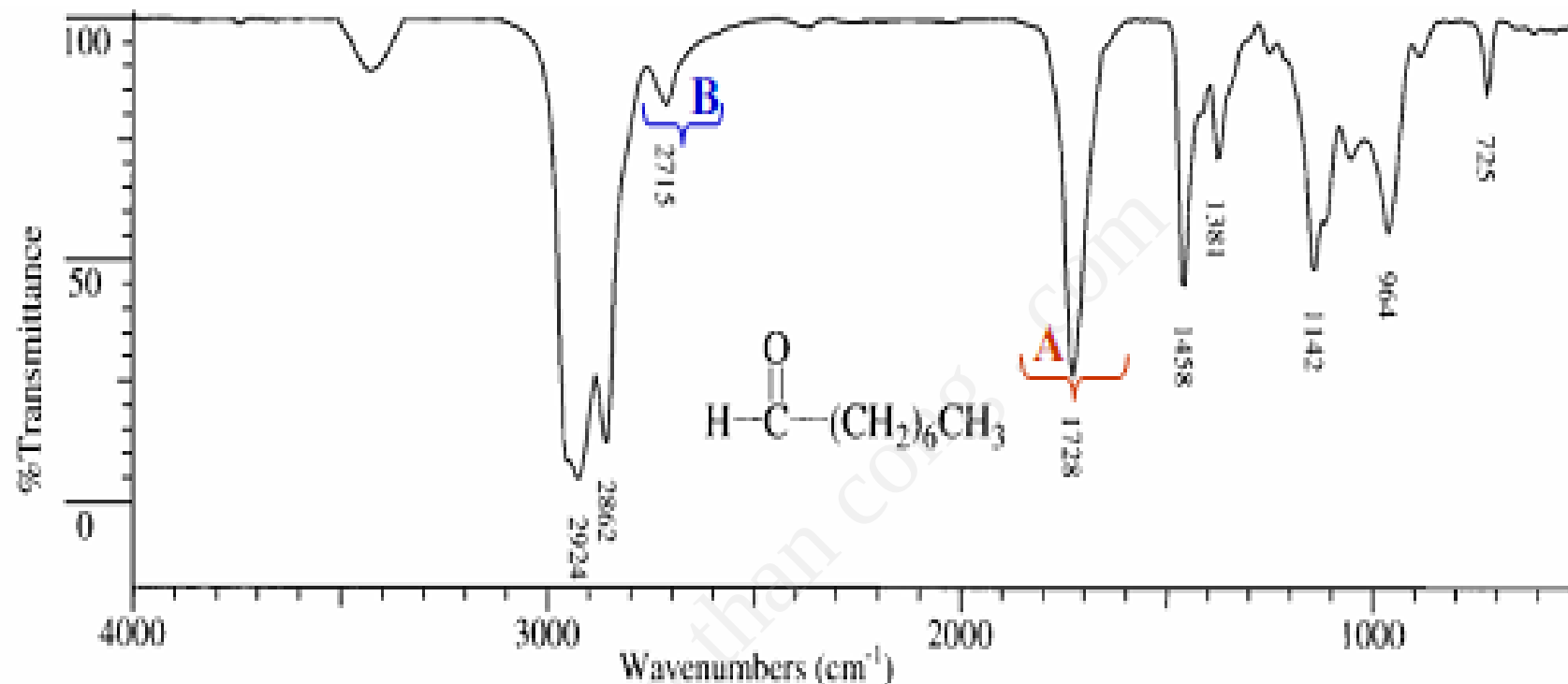


FIGURE 2.22. Octanal. Aliphatic, $2980\text{--}2860\text{ cm}^{-1}$ (see Figures 2.8). Aldehydic, C—H stretch, 2715 cm^{-1} . Normal aldehydic C=O stretch, 1728 cm^{-1} . Aldehydic C—H bend, 1381 cm^{-1} .

A: Dao động giãn C=O, 1728 cm^{-1}

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

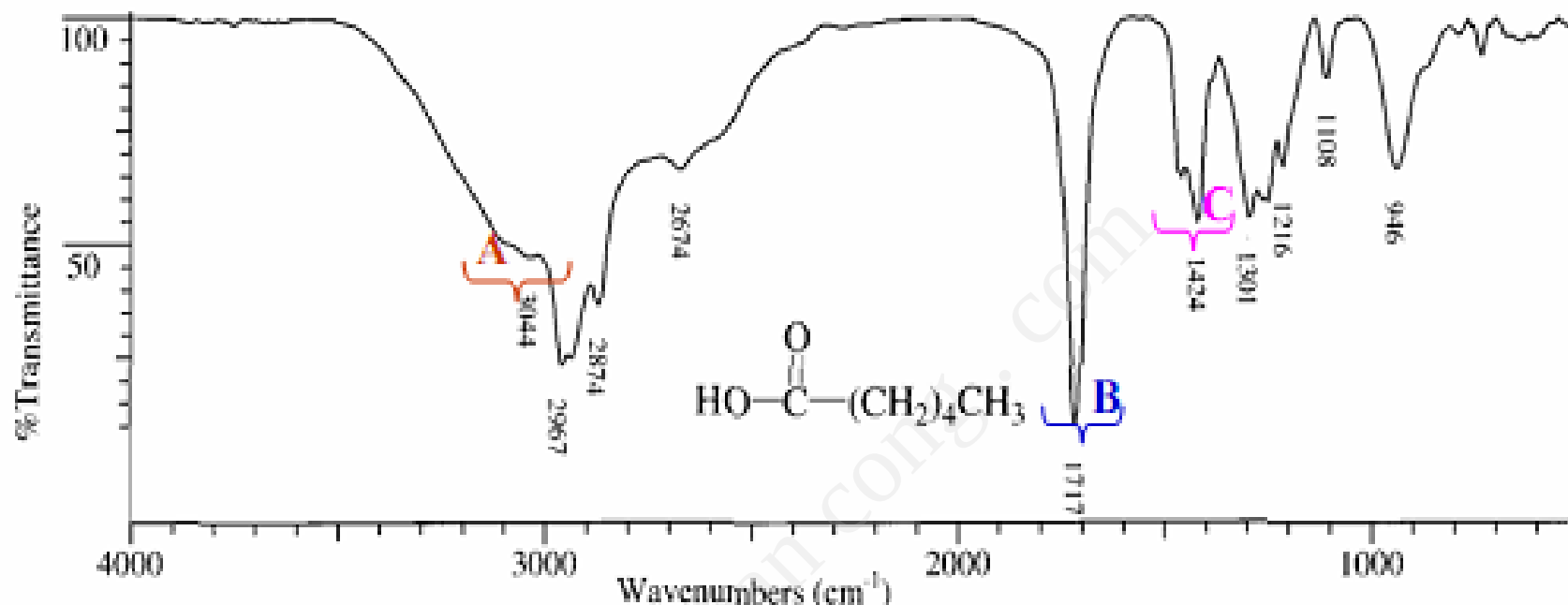


FIGURE 2.23. Hexanoic acid. Broad O—H stretch, 3300–2500 cm^{-1} . C—H stretch (see Figure 2.8), 2967, 2874, 2855 cm^{-1} . Superimposed upon O—H stretch. Normal, dimeric carboxylic C=O stretch, 1717 cm^{-1} . C—O—H in-plane bend, 1424 cm^{-1} . C—O stretch, dimer, 1301 cm^{-1} . F. O—H out-of-plane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

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}

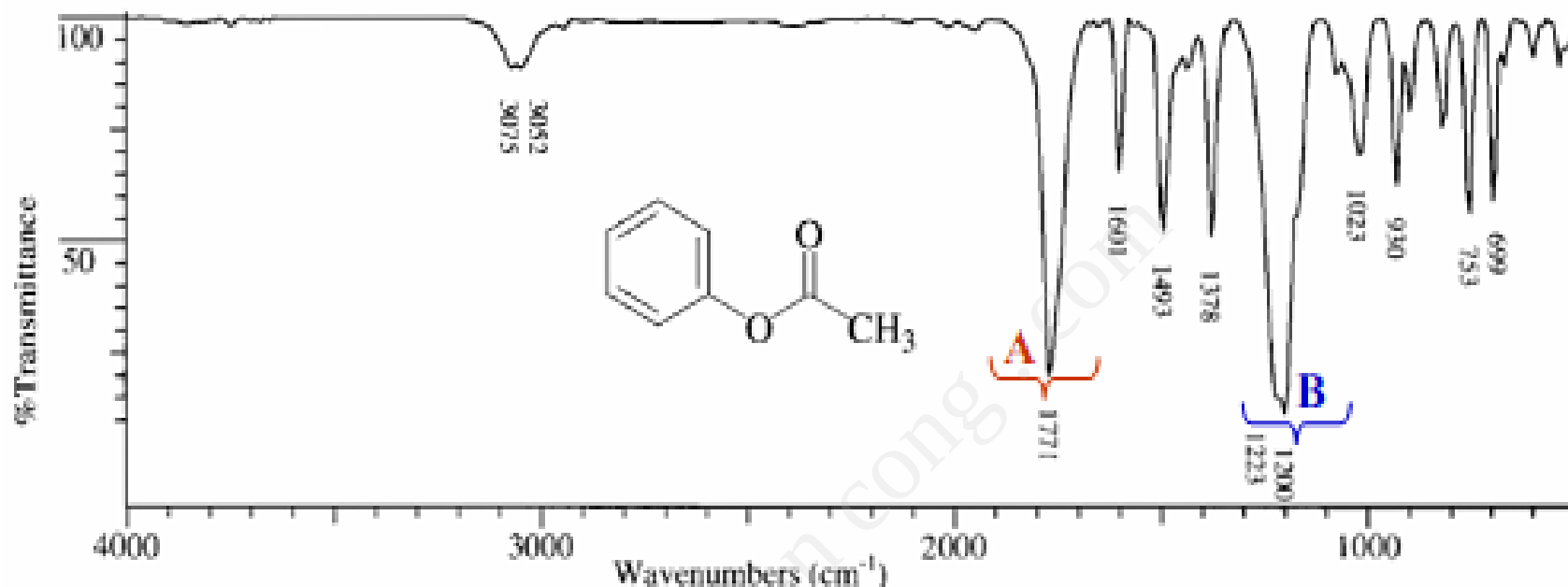


FIGURE 2.25. Phenyl acetate. Aromatic C—H stretch, 3075, 3052 cm^{-1} . C=O stretch, 1771 cm^{-1} : this is higher frequency than that from a normal ester C=O stretch (1740 cm^{-1} ; see Table 2.6) because of phenyl conjugation with alcohol oxygen; conjugation of an aryl group or other unsaturation with 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}

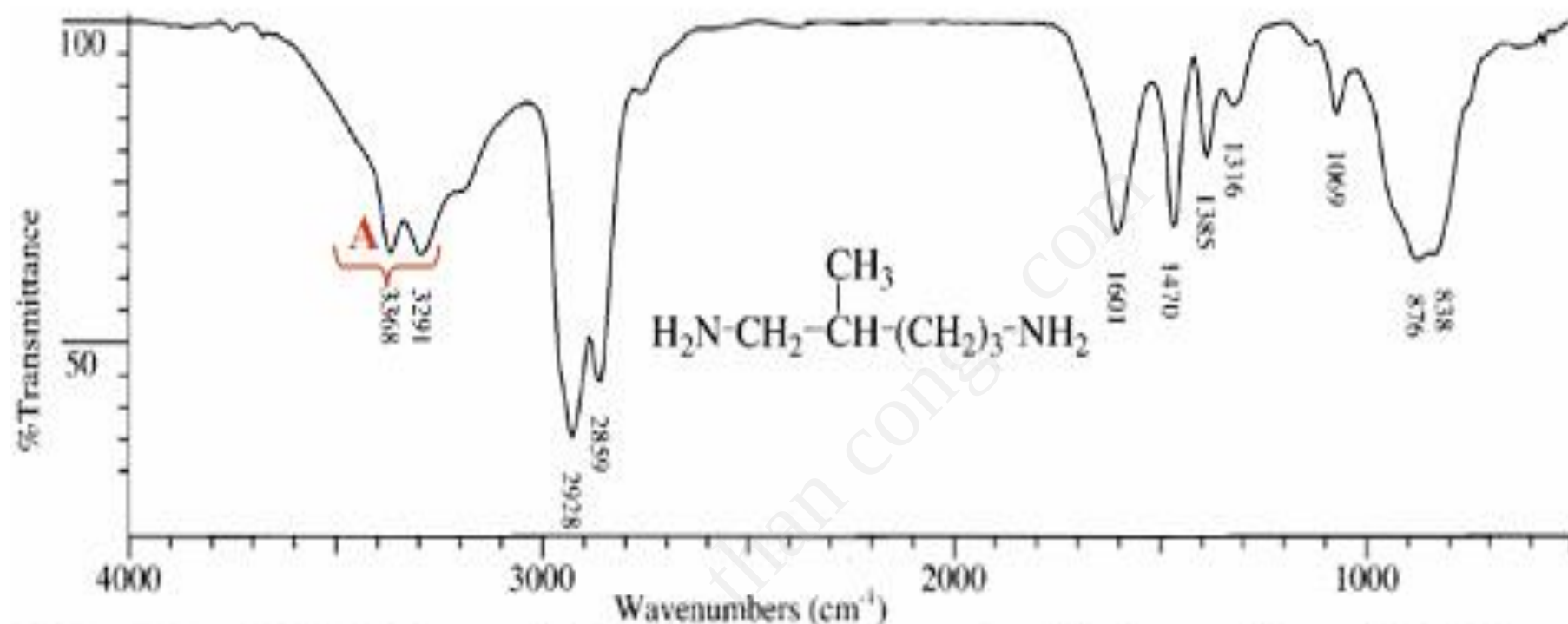
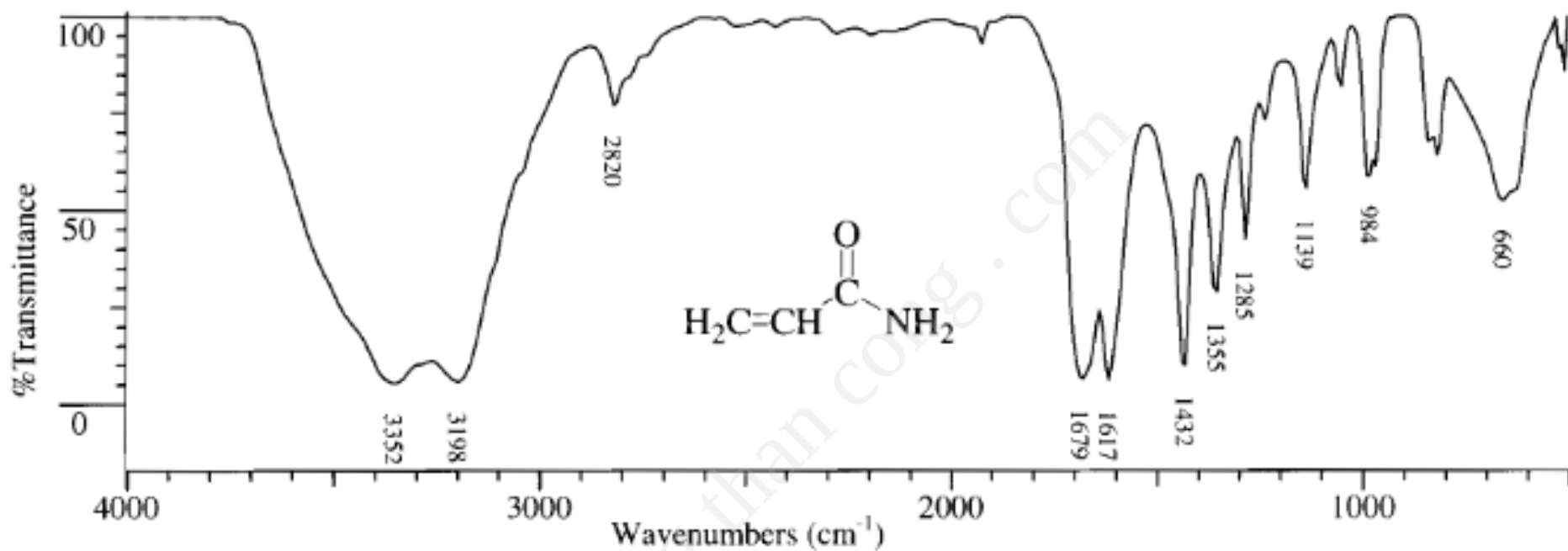


FIGURE 2.29. 2-Methyl-1,5-pentanediamine. N—H stretch, hydrogen-bonded, primary amine coupled doublet: asymmetric, 3368 cm⁻¹. Symmetric, 3291 cm⁻¹. (Shoulder at about 3200 cm⁻¹, Fermi resonance band with overtone of band at 1601 cm⁻¹. Aliphatic C—H stretch, 2928, 2859 cm⁻¹. N—H bend (scissoring) 1601 cm⁻¹. $\delta_s\text{CH}_2$ (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



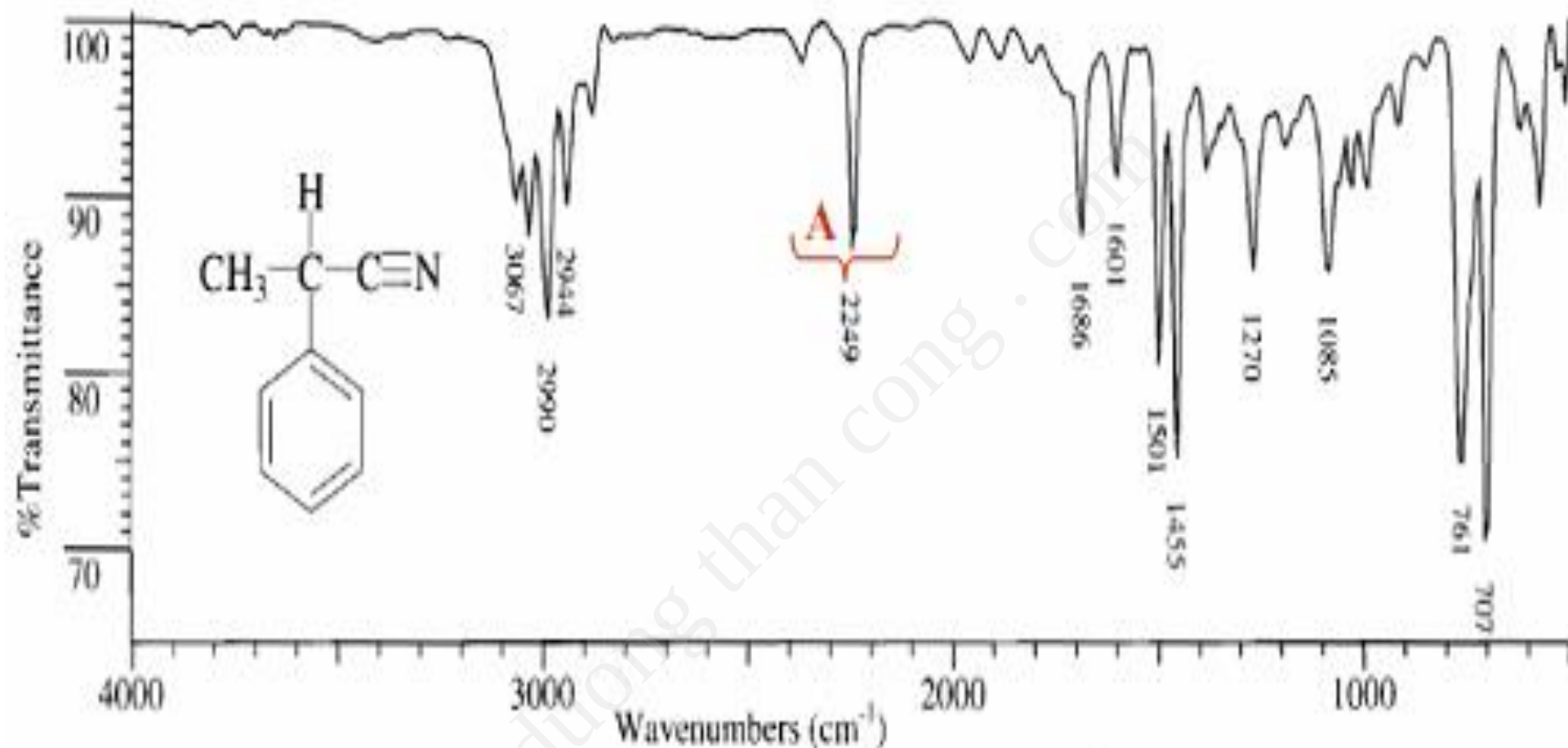


FIGURE 2.31. α -Methylbenzyl cyanide. Aromatic C—H stretch, 3067, 3030 cm⁻¹. Aliphatic C—H stretch, 2990, 2944 cm⁻¹. C $\equiv$ N stretch, 2249 cm⁻¹. Out-of-plane C—H bend (aromatic ring), 761 cm⁻¹.

A: Giãn C $\equiv$ N, 2249 cm⁻¹.