

IR分光法の原理

☆ IR分光法とは

試料の振動力起を赤外線吸収により調べる方法

赤外線 $\lambda = 2.5 \sim 16.7 \mu\text{m}$

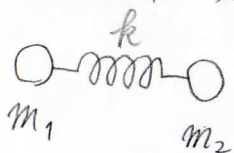
そのエネルギー $E = \frac{hc}{\lambda}$
 $= 4 \sim 42 \text{ kJ mol}^{-1}$

エネルギー単位としての波数 $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$

$E \propto \tilde{\nu}$

$\tilde{\nu} = 600 \sim 4000 \text{ cm}^{-1}$
カイザー

☆ 振動力起



換算質量 $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

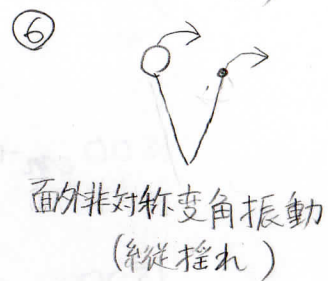
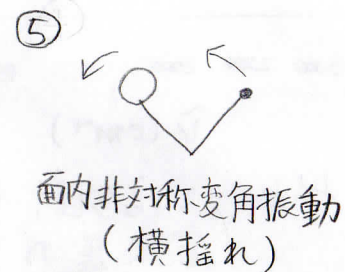
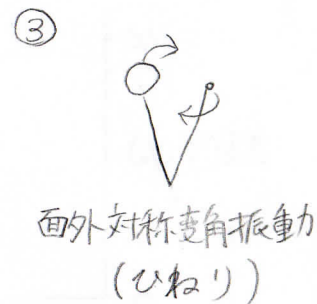
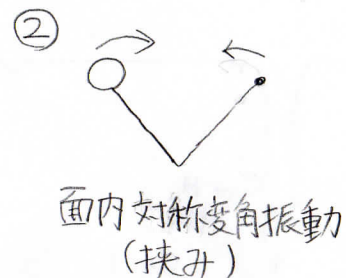
振動準位 E

$E = (n + \frac{1}{2}) h \omega$
 $(n = 0, 1, 2, \dots, h = \frac{h}{2\pi}, \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}})$

$\Delta E = h \omega = hc \tilde{\nu}$

$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{k \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}}$

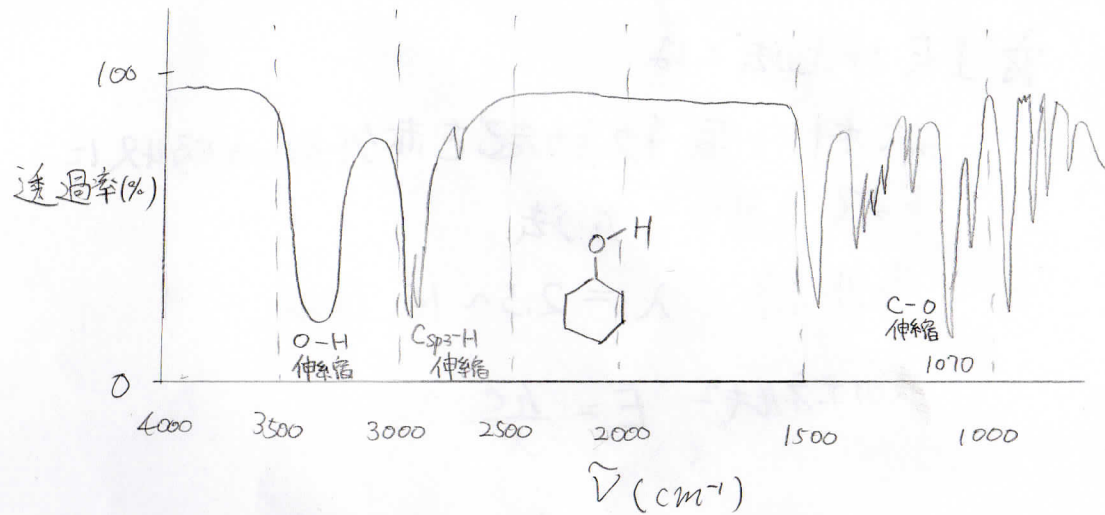
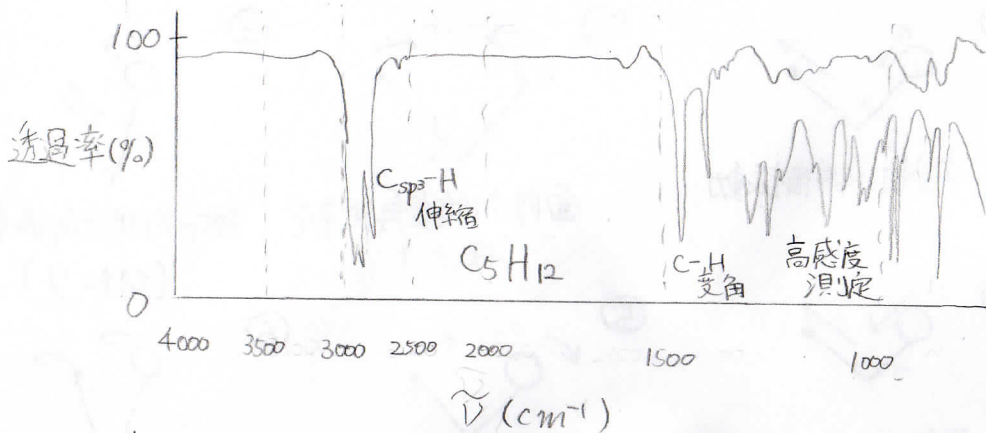
☆ 振動モードの種類



☆ 官能基とその伸縮振動

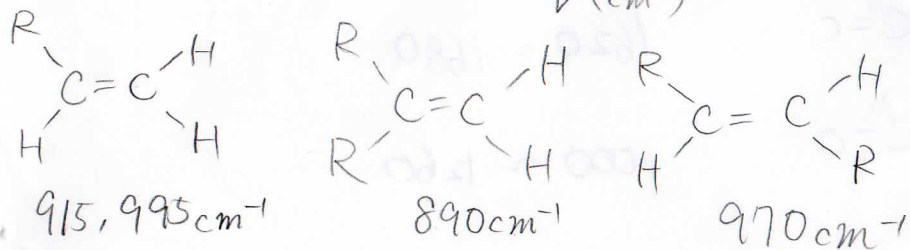
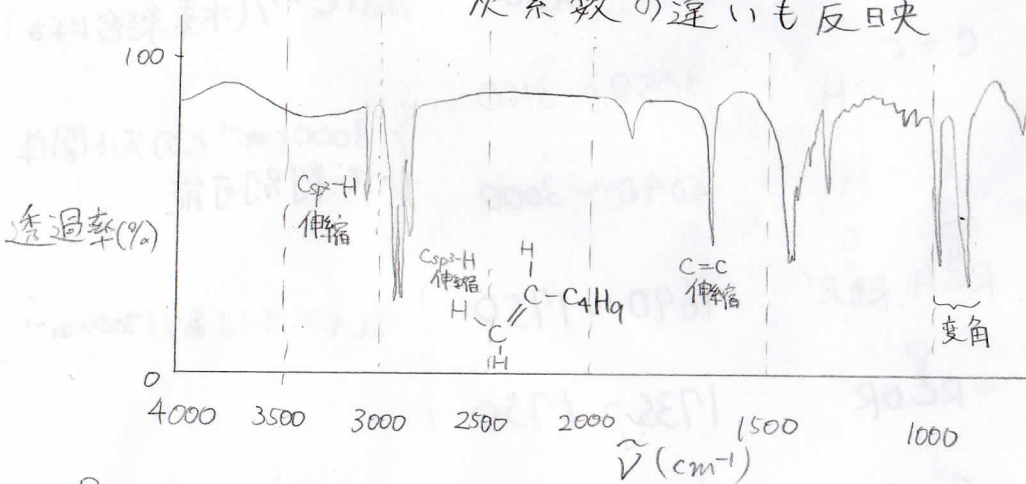
官能基	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	注
RO-H	3200 ~ 3650	広いピーク(水素結合による)
C=C-H	3050 ~ 3150	
C-H	2840 ~ 3000	
R ¹ CH, R ² CR'	1690 ~ 1750	3000 cm ⁻¹ との大小関係で判別可能
RCOR	1735 ~ 1750	
C=C	1620 ~ 1680	カルボニルは約1700 cm ⁻¹
C-O	1000 ~ 1260	

☆ 赤外吸収スペクトルの例



1500 cm^{-1} 以上 : 診断領域
官能基の伸縮振動

1500 cm^{-1} 未満 : 指紋領域
C-C伸縮や各種変角振動で
複雑なパターンを示す
炭素数の違いも反映



練習問題

2つの $C_5H_{11}Br$ の異性体に $NaOH, H_2O, EtOH$ と反応させて IR を測定すると、以下の吸収が見られた

A \rightarrow 1660, 2850~3020, 3350 cm^{-1}

B \rightarrow 1670, 2850~3020

A と B に考えられる構造は?

答え

$-OH$: 強塩基, 強い求核剤 \rightarrow $S_N2, E2$

1660 $cm^{-1} \rightarrow$ C=C 伸縮

2850~3020 $cm^{-1} \rightarrow$ $C_{sp^3}-H$ 伸縮

3350 $cm^{-1} \rightarrow$ O-H 伸縮

