अवरक्त स्पेक्ट्रोस्कोपी (Infrared spectroscopy.)

- अवरक्त स्पेक्ट्रम अणु की कंपन ऊर्जा और घूर्णन ऊर्जा स्तरों में संक्रमण के कारण प्राप्त होता है।

- कंपन ऊर्जा स्तरों में संक्रमण के लिए आवश्यक ऊर्जा का अवशोषण विद्युत चुंबकीय स्पेक्ट्रम के अवरक्त क्षेत्र (0.8 - 200μ) में होता है। इस कारण इसे अवरक्त स्पेक्ट्रोस्कोपी कहते हैं।

- अवरक्त स्पेक्ट्रम के द्वारा किसी अणु या यौगिक में क्रियात्मक समूह की उपस्थिति के बारे में जानकारी देता है।

- अवरक्त स्पेक्ट्रम तरंग संख्या (Wave Number) और पारगम्यता (Transmittance) के बीच खींचा गया ग्राफ होता है। इसमें अवशोषण बैण्ड की दिशा परावैंगनी स्पेक्ट्रम में प्राप्त बैण्ड से ठीक विपरीत होता है।

$T = \frac{1}{A}$ $\quad A =$ अवशोषणांक

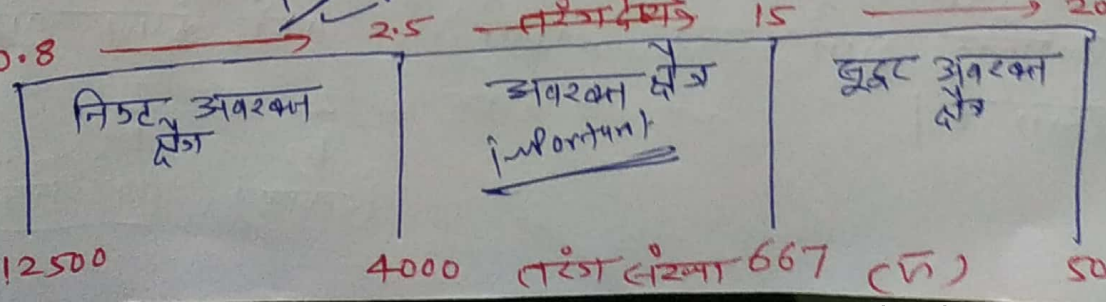
$T = \log_{10} \frac{I}{I_0}$ $\quad T = -\epsilon c l.$

- $\bar{\nu} \propto \frac{1}{\lambda}$,

$1\mu = 10^{-3} mm = 10^{-4} cm$

- अवरक्त क्षेत्र के लिए $\lambda = 0.8\mu - 200\mu$ (imp. क्षेत्र = 2.5 से 15 μ.)

imp. $\bar{\nu}$ = तरंग संख्या = 667 - 4000 cm^{-1}



Scanned with CamScanner

- अवरक्त क्षेत्र का 2.5 μ से 15 μ का क्षेत्र महत्वपूर्ण होता है, क्योंकि अधिकतर कार्बनिक यौगिक इसी क्षेत्र में अवशोषण करते हैं।

* सैद्धान्तिक आधार :-

- अवरक्त स्पेक्ट्रोस्कोपी को हम कंपन स्पेक्ट्रोस्कोपी भी कहा जाता है क्योंकि अवरक्त क्षेत्र की विकिरण को अवशोषित होने पर अणु या यौगिक के कंपन ऊर्जा स्तर में संक्रमण होता है।

- अवरक्त स्पेक्ट्रम, दो भिन्न कंपन ऊर्जा स्तरों के मध्य संक्रमण के कारण प्राप्त होता है।

- कंपन ऊर्जा

$$E_{vib} = \left(v + \frac{1}{2}\right) h\nu_0$$

$E_{vib.}$ = कंपन ऊर्जा
$v = 0, 1, 2, 3 \ldots$ (कंपन क्वाण्टम संख्या)
h = प्लांक स्थिरांक
ν_0 = कंपन की मूल आवृत्ति

* Zero point energy (शून्य ऊर्जा) :- जब कंपन करने वाला अणु न्यूनतम कंपन ऊर्जा स्तर में होता है, अर्थात् $v = 0$ तब उसकी ऊर्जा $E_0 = \frac{1}{2} h\nu_0$ होती है। इसे शून्य ऊर्जा कहते हैं।

- परम शून्य ताप पर भी जहाँ घूर्णन एवं स्थानांतरण आणविक गति रुक जाती है, वहाँ कंपन गति बनी रहती है।

Scanned with CamScanner

मौलिक कंपन बैण्ड :- (Fundamental vibrational band)

- मूल ऊर्जा स्तर ($v=0$) से प्रथम ऊर्जा स्तर ($v=1$) में संक्रमण के कारण प्रबल अवशोषण होता है और तीव्र बैण्ड प्राप्त होता है। इसे मौलिक बैण्ड कहते हैं और कंपन मौलिक कंपन कहते हैं।

$$\Delta E_{vib.} = E_{v_1} - E_{v_0}$$

$$= \left(1+\frac{1}{2}\right)h\nu_0 - \left(0+\frac{1}{2}\right)h\nu_0$$

$$= \frac{3}{2}h\nu_0 - \frac{1}{2}h\nu_0$$

$$= h\nu_0$$

*. **ओवरटोन :-** मूल अवस्था से द्वितीय ऊर्जा स्तर के संक्रमण के कारण अर्थात $v=0$ से $v=2$ में संक्रमण के कारण दुर्बल बैण्ड प्राप्त होता है। इसे ओवरटोन कहते हैं।

*. **Modes of vibration :- (कंपन की विधाएँ)**

- किसी भी ~~अणु~~ या ~~कोई~~ ~~का~~ नाभिक की स्थिति को प्रदर्शित करने के लिए 3 (तीन) निर्देशांक की आवश्यकता होती है। अतः N - नाभिक (परमाणु) के लिए 3N निर्देशांक की आवश्यकता होती है। जिसे हम स्वतंत्रता की कोटि (Degree of freedom) कहते हैं।

- 3N - स्वतंत्रता की कोटि में कंपन, घूर्णन तथा स्थानांतरण की कोटियाँ होती हैं।

~~स्वतंत्रता~~ स्थानांतरण की कोटि = 3

घूर्णन की कोटि = 2 या 3

2 → (रेखीय), 3 → (अरेखीय)

Scanned with CamScanner

स्वतंत्रता की कोटि = 3N

स्वतंत्रता की कोटि = स्थानांतरण की कोटि + कंपन की कोटि + घूर्णन कोटि)

कंपन की कोटि या मूल कंपनो की संख्या = कुल स्वतंत्रता की कोटि − (स्थानांतरण की कोटि + घूर्णन की कोटि)

स्थानांतरण कोटि का मान = 3

रेखीय अणु के लिए घूर्णन कोटि = 2

अरेखीय अणु के लिए घूर्णन कोटि = 3

* रेखीय अणु के लिए मूल कंपनो की संख्या = 3N − (3+2)
= $\underline{3N-5}$

* अरेखीय अणु के लिए मूल कंपनो की संख्या = 3N − (3+3)
= $\underline{3N-6}$

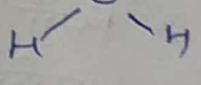
Ex. CO_2 रेखीय अणु है, N = 3,

O=C=O

कंपन की संख्या = 3N − 5
3×3 − 5
= 9−5
= 4

H_2O अणु (अरेखीय) N = 3.

O
H   H



कंपनो की संख्या =
3N − 6
3×3 − 6
9 − 6
= 3.

Scanned with CamScanner