**İnfraqırmızı spektr və onun xüsusiyyətləri.**

İnfraqırmızı spektroskopiya molekulyar spektroskopiya üsulu olmaqla maddə tərəfindən udulan infraqırmızı şüalar tərəfindən molekuldaxili titrəyiş (vibrasiya və ya rəqsi hərəkət) və molekulun özünün fırlanma hərəkətinin artmasının ölçülməsinə əsaslanır. Tədqiqatlar zamanı titrəyiş hərəkətləri daha çox əhəmiyyət daşıdığından infraqırmızı spektroskopiya bəzən titrəyiş spektroskopiyası da adlanır. Titrəyiş spektroskopiyası molekuldakı əsas energetik vəziyyətin daxildə yarımsəviyyələrin titrəyiş tezliklərni ölçməyə əsaslanır.

İnfraqırmızı spektr üç sahə diapozonuna bölünə bilir: yaxın, orta və uzaq. Yaxın infraqırmızı sahədə əsasən obertonlar müşahidə edilir və bəzən maddələrin miqdari təyini bu sahədə aparılır. Obertonlar fiziki mahiyyətcə ─yüksək harmonik tonlar olmaqla əsas tona xüsusi rəng verən əlavə tonlar –tembrlər kimi başa düşülür. Uzaq infraqırmızı sahədə demək olar ki, yalnız karbon − metal rabitələrinin titrəyişləri müşahidə olunur. Laborotoriyada istifadə edilən infraqırmızı spektrometrlərin çoxunun sahə diapozonu 7800−370 sm−1 arasında yerləşir. Üzvi birləşmələrin əksəriyyəti məhz bu diapozonda udma verir.

Molekulların infraqırmızı şüaları udaraq həyəcanlanmaları prosesi molekuldakı titrəyişlərin və ya rəqsi hərəkətlərin həyəcanlanma səviyyələri ilə əlaqələndirilir.

Atomların kimyəvi rabitələrinin titrəyiş amplitudlarının artması onun elektrik yükünün və ya dipol momentinin artmasına səbəb olur. Dipol böyüdükcə onun spektrdəki siqnalının intensivliyi də artır.

Çoxatomlu molekullarda titrəyişlər sadə molekullardakı titrəyişlərdən fərqlənir. Çoxatomlu molekullarda atomlar eyni zamanda bir neçə müxtəlif titrəyişlərdə iştirak edə bilərlər. Titrəyişlərin sayı molekulun atomlarının sayından asılıdır. Molekulda İnfraqırmızı şüaların udulması nəticəsində əmələ gələn titrəyişləri daha sadə şəkildə −iki əsas formada ifadə edirlər: valent (gərilmə) titrəyişləri və deformasiya (əyilmə) titrəyişləri .

Valent titrəyişləri zamanı molekuldakı atomlar rabitə uzunu boyunca gərilirlər ki, nəticədə atomlar arası məsafə gah qısalır, gah da uzanır. Rabitələr arası bucaq isə dəyişmir.

Valent titrəyişləri $ν$ ilə işarə edilərək simmetrik ( $ν$s ) və asimmetrik ( $ν$as) olur. Simmetrik valent titrəyişləri zamanı hər iki atom bir-birlərinə doğru və ya əksinə simmetrik olaraq istiqamatlənir, lakin asimmetrik valent titrəyişləri zamanı atomlar bir–birlərinə doğru və ya əksinə qeyri-simmetrik istiqamətlənirlər. Adətən asimmetrik valent titrəyişlərinə daha çox enerji sərf olunur.

Rabitənin təbiəti və valent titrəyişi tezliyi arasındakı əlaqə Huk qanunu ilə izah edilə bilər. Huk qanununa görə rabitələrin sayı artdıqca valent titrəyişi də artır. Başqa sözlə, ikiqat rabitənin həyəcanlanmasına birqat rabitəyə nisbətən daha çox enerji tələb olunur və müvafiq olaraq dalğa ədədi daha da artır.

Deformasiya titrəyişləri isə daha aşağı tezlikdə adətən “barmaq izləri “ tezliklərində, yəni 1500sm-1 –dən aşağı tezliklərdə baş verir. Deformasiya titrəyişləri zamanı bir atomu birləşdirən rabitələr arası valent bucaqları dəyişir. Deformasiya titrəyişləri $δ$ ilə işarə olunur.

Deformasiya titrəyişlərinin həyəcanlandırılması üçün valent titrəyişlərinə nisbətən daha az enerji tələb olunur. Müvafiq olaraq deformasiya titrəyişləri az tezlikli olur və daha uzaq sahədə müşahidə edilir.Deformasiya titrəyişləri simmetrik və asimmetrik və yaxud yastı və qeyri-yastı adlandırılır.

Spektrdə 1500sm-1 dalğa uzunluğundan yuxarı sahələr funksional qruplara, aşağı “barmaq izləri” sahələri isə molekulu tam xarakterizə edən zolaqlara aid edilir. Spektrin “barmaq izləri” sahələri nümunələri etalon maddə ilə eyniləşdir-mək üçün çox əlverişlidir.

İQ spektrlərin oxunması.



Burada A (3400-3300sm-1)-ikili amidlərə (NH), B (2810, 2720 sm-1) –aldehidlərə (CH) , C (1700sm-1) –aldehid (C=O) və amid, D (1600 sm-1) – benzol həlqəsinə, E (1515 sm-1) – amid və benzol həlqəsinə aiddir.

Zolaqların intensivlikləri optik sıxlıq (A) və ya işıqburaxma (T) ilə ifadə olunurlar . Optik sıxlıq işıqburaxmaya əks rəqəmin onluq loqarifmidir:

 A=lg(1/T)

İşıq buraxma nümunə üzərinə düşən şüanın enerjisinin nümunədən keçən şüanın enerjisinə nisbətidir. Zolaqların intensivlikləri intensivlik faktoru ilə müəyyən olunur və sonuncu da işıqburaxma (T) ilə ifadə oluna bilər.

 T=$\frac{(İ0-İ)}{İ0}$∙100

İnfraqırmızı Furye-spektroskopiyada işıqburaxma spektrinin çəkilməsi üçün ardıcıl üç əməliyyat yerinə yetirilməlidir; 1) İşıq şüasının nümunə olmadan interferoqramı çəkilir ($Rν$); 2) İşıq şüasının nümunədən buraxmaqla interferoqramı çəkilir (S$ν$) 3) S$ν$ spektrinin R$ν$spektrinə olan nisbəti spektrin son işıqburaxma (T$ν$) əmsalını təyin edir.

 T$ν$ =S$ν$/R$ν$

**İnfraqırmızı spektrofotometriya üçün nümunələrin hazırlanması.**

İnfraqırmızı spektrin çəkilməsi üçün nəzərdə tutulan nümunə maye , qaz və bərk aqreqat vəziyyətlərdə, üzvi və qeyri–üzvi ola bilər. Qaz və aşağı qaynama temperaturuna malik nümunələrin spektrini çəkmək üçün onları vakum küvetə yerləşdirirlər. Labaratoriyaya daxil olmuş nümunənin aqreqat vəziyyətindən asılı olaraq onun analizi aparılır. Məs, əgər labaratoriyaya daxil olan nümunə mayedirsə onu məhlullara, həlledicilərdə həll olmursa durulaşdırmadan nazik küvetlərdə və ya iki düz lövhəsi arasında sıxmaqla maye plyonka şəklində təyin edirlər .Əgər daxil olan nümunə bərk maddədirsə onu məhlul şəklinə saldıqdan sonra və ya vazelin yağında suspenziyaya çevirməklə, həmçinin KBr –la tablet halına salmaqla və yaxud pirozilat şəklində təyin edirlər.

Maye aqreqat şəkildə olan nümunələr işıq selinin qarşısında yerləşdirilmiş küvetə-duzdan (Məs.NaCl) hazırlanmış iki yarımşəffaf yastı lövhə arasına yerləşdirilir. Həlledicilər: Aseton, Asetonitril, Benzol, Xloroform, Tsikloheksan, Su, Karbon 4-xlorid. Bəzən həlledici kimi deyterium həlledicilər götürülür. Belə həlledicilər öz protonlaşmış anoloqlarından fərqli olaraq daha şəffaf hesab olunur.

Bərk və ya poroşok şəkildə nümunələrin hazırlanması zamanı iki üsuldan istifadə olunur; KBr, polietilen və ya ZnSe ilə presləmə və maye parafinlər əsasında suspenziyanın hazırlanması. KBr ilə presləmə üsulu bərk nümunənin spektrinin çəkilməsi üçün daha geniş istifadə olunur. Vazelin yağı ilə bərk nümunulərin hazırlanması nümunə KBr ilə reaksiyaya girmək qabiliyyətinə malik olduqda və ya həlledici kimi yalnız H2O uyğun gəldikdə tətbiq edilir.

İnfraqırmızı spektrometr – maddələrin infraqırmızı udma, buraxma və əksolma spektrlərini qeydə almaq üçün cihazdır.

Dispersion İnfraqırmızı-spektrometr. Tipik dispersion infraqırmızı spektrometr aşağıdakı şəkildə fəaliyyət göstərir. Polixromatik mənbədən şüa küvetdə olan maddədən keçərək, monoxromatorun üzərinə düşür. Adətən monoxromator kimi difraksion qəfəs istifadə olunur. Sonradan spektrə bölünmüş infraqırmızı şüa nazik dəlikdən keçərək detektorun üzərinə düşür. Detektorda həmin şüanın intensivliyi müəyyən edilir. Prizmanın dəyişməsi hesabına difraksiya qəfəsinə müxtəlif dalğa uzunluqlarına malik şüa düşür, bu da spektri çəkmək imkanı verir.

Furye İnfraqırmızı-spetrometri. Furye dəyişməsi ilə İnfraqırmızı-spektrometrin əsas komponenti Maykelson interferometridir. Furye İnfraqırmızı-spektrometrlər adətən birşüalı rejimdə işləyirlər, bu zaman iki spektr çəkilir (nümunə ilə və onsuz), v onların fərqi udma spektrini verir.

İnfraqırmızı-spektroskopiya ilə dərman maddələrinin həm eynilik, həm təmizlik, həm də miqdari təyinini aparmaq mümkündür. Həmçinin, infraqırmızı spektroskopiya ilə aparılan analizlər digər analiz üsullarına nisbətən daha dəqiq və az nümunə tələb etməsinə görə fərqlənir.

Aşağıda İnfraqırmızı spektroskopiya ilə analiz olunan bəzi dərman vasitələri verilmişdir. Sefalosporin qrupu antibiotiklərin, ümumi anasteziyaedici (narkoztörədici) və analgeziya edici təsir göstərən (Ketamin) preparatın, antiseptik təsirə malik (Xlorheksidin) preparatının, psevdoefedrin-hidroxloridin, orsiprenalinin, fenoterolun, salbutamolun, verapamil- hidroxloridin, qlibenklamidin, vinkristinin, sulfinpirazonun, klotrimazolun, simetidinin, siprofloksasinin, fentanilin, sitarabinin, riboksinin, allopurinolun, karbamazepinin eynilik təyini zamanı infraqırmızı spektrofotometriya istifadə olunur.

Sefalosporin qrupu preparatlarının miqdari təyinində infraqırmızı spektrofotometr istifadə olunur. Bu zaman sefalosporinlərin infraqırmızı spektrləri standart preparatların infraqırmızı spektrləri ilə müqayisə edilir.