جامعة الصرة

كلية التربية للعلوم الصرفة

قسم الكيمياء

المختبر الحاسبات

2015 - 2014

1- الاطياف الالكترونية (اطياف الاشعة الفوق البنفسجية والمرئية)
2- اطياف الاشعة تحت الحمراء
3- الكيمياء الحاسوبيه ((برنامج ..hyperchem , Gussain , chemoffice))
4- الفلورة
5- مطيافية الكتله
6- جهاز تحليل العناصر
7- تحضير غاز الهيدرجين
8- تحضير غاز الاوكسجين
9- الماء كمذيب , قابلية اذابة الماء للمواد المختلفة
10- الكشف عن بخار الماء في الهواء الجوي
11- خواص الحوامض (تأثير الحوامض على ورقة زهرة الشمس).
12- تفاعل الحوامض مع الفلزات
13- قابلية المحاليل الحامضية على ايصال التيار الكهربائي
14- خواص القواعد
15- التأصر الكيميائي

تجربة (مطيافية الاشعة فوق البنفسجية)

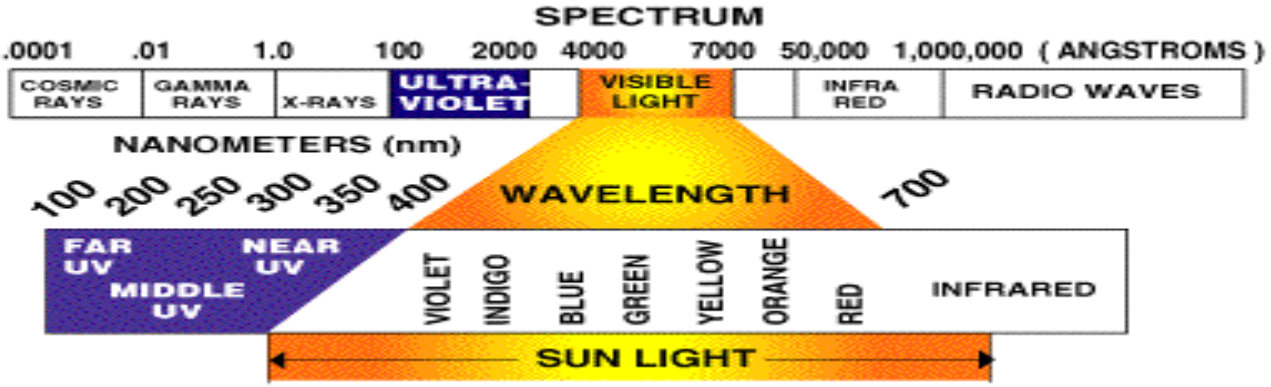
((الاشعاع الكهرومغناطيسي.. مبدأ مطيافية الاشعة فوق البنفسجية والمرئيه ..مكونات الاجهزة واساس عملها ...التجربه العملية لبعض النماذج)

مطيافية الاشعة فوق البنفسجية

مقدمة :

يسلك الضوء المرئي سلوك الضوء فوق البنفسجي في كثير من مظاهره حيث أن كلاهما ينتج عن إمتصاصة إثارة إلكترونية في الجزيئات . كما أن أغلب الأجهزة التي تستخدم في طرق التحليل الطيفي في مجال الأشعة المرئية هي نفسها التي تستخدم في طرق التحليل الطيفي في مجال الأشعة فوق البنفسجية . لذا فقد جرت العادة على دراستهما معاً .

ويغطي هذان الطيفان المجال (200 - 800 nm).كما في الشكل الاتي:



مطيافية فوق البنفسجية والمرئية UV and Visible Spectroscopy :

المطيافية الإلكترونية هي أحد أنواع الدراسات الطيفية والتي تعتمد على إمتصاص الأشعة فوق البنفسجية أو المرئية ، ولقد سميت بهذا الإسم لأن إمتصاص الأشعة في هاتين المنطقتين يؤدي إلى إثارة الإلكترونات في الجزيء الذي يمتص تلك الأشعة .

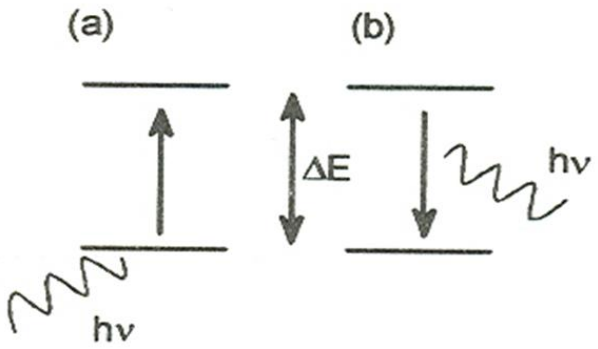
الإثارة الإلكترونية :

كما هو معروف تتكون الجزيئات من ذرات كل منها يتألف من نواة ومن إلكترونات تدور حولها في مستويات طاقة محددة . فإذا إمتصت الجزيئات طاقة معينة إنتقلت الإلكترونات من مستوى الطاقة الأدنى (ground state) إلى مستوى طاقة أعلى (excited state) . وهذا مايدعى بالإثارة الإلكترونية .

عملية الامتصاص Absorption method

M + hv ..... M* Absorption

جزيئ في حالة مستقرة



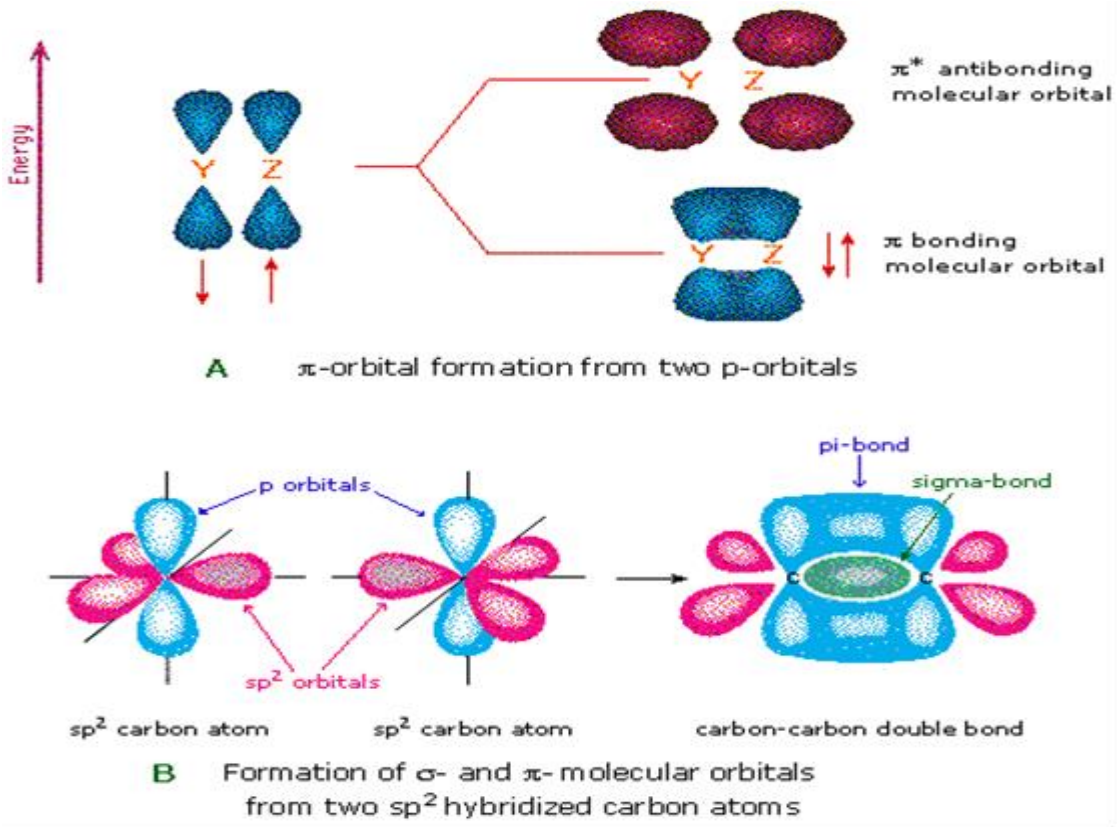
$E_2 - E_1 = E = h\nu = h c / \lambda$

ولكي يسبب شعاع ضوئي إثارة إلكترونية ينبغي أن يكون هذا الشعاع في مجال الأشعة المرئية أو فوق البنفسجية . وتردد الشعاع الممتص يرتبط بالطاقة بالعلاقة : E =hu

النظرية الجزيئية للتأصر Molecular Orbital Theory

تفيد النظرية الجزيئية للتأصر في فهم وتفسير الانتقالات الأليكترونية داخل الجزيئات. فمن المعروف أنه عندما تتحد ذرتان بأصرة تساهمية covalent bond تساهم كل من الذرتين بأليكترون حتى تتكون الاصرة A:B ، وهذه الاصرة الجديدة المتكونة تحتل مسار جديد يسمى المسار الجزيئي molecular orbital ، وفي هذه الحالة تنتمي أليكترونات الاصرة الى الجزيء كله وليس لأي من الذرتين بالتحديد ، أي يندمج المساران من الذرتين المرتبطتين ، وينبثق مسارين جزيئين جديدين أحدهما منخفض الطاقة ، ويسمى المسار المتأصر bonding orbital والآخر عالي الطاقة ويسمى المسار الغير المتأصر anti bonding orbital.

كذلك من المعروف أن الاواصر التساهمية تتكون بأزواج من الأليكترونات لتعطي روابط sigma (σ) or pi (π) ، وتتكون اواصر سيجما بانطباق المسارات الذرية بالرأس head on overlap حيث تقترب الذرتين على نفس المحور ، بينما تتشكل اواصرباي بالانطباق الجانبي parallel overlap لمسارات p المتوازية



كيفية تكوين رابطة سيجما ورابطة باي

وهكذا فان النظرية الجزيئية للتأصر تشير الى وجود مسار غير متأصر يسمى (σ^*) antibonding orbital لكل مسار اصرة (σ) bonding orbital وبالمثل هناك مسار غير متأصر π^* لكل مسار أصرة π .

وتعرف أليكترونات التكافؤ الغير مشاركة في الاواصر الكيميائية في الجزيء بالأليكترونات غير المتأصرة non-bonding or " n" electrons وتتواجد الأليكترونات غير المتأصرة في الجزيئات العضوية أساسا في المسارات الذرية للنتروجين والأكسيجين والكبريت والهالوجينات.

وتحدث الانتقالات الأليكترونية في الجزيئات العضوية بامتصاصها أشعة UV or Visible بواسطة الأليكترونات في مسارات π أو في مسارات σ أو في مسارات n مثيرة اياها الى المسارات الجزيئية الغير المتأصرة العالية الطاقة (الحالة المثارة).

هذا ويوجد في الجزيئات العضوية ثلاث أنواع من الإلكترونات:

النوع الاول:

إلكترونات مشتركة في الاصرة مشبعة كالرابطة بين الهيدروجين والكربون ، والكربون والكربون في المركبات المشبعة وتسمى هذه الاصرة بأصرة σ وكمية الطاقة اللازمة لإثارة الإلكترونات الاصرة σ أكبر بكثير من طاقة الأشعة فوق البنفسجية لذا فإن المركبات المشبعة لاتمتص في هذا المجال لذا تستعمل عادة كمذيبات جيدة .

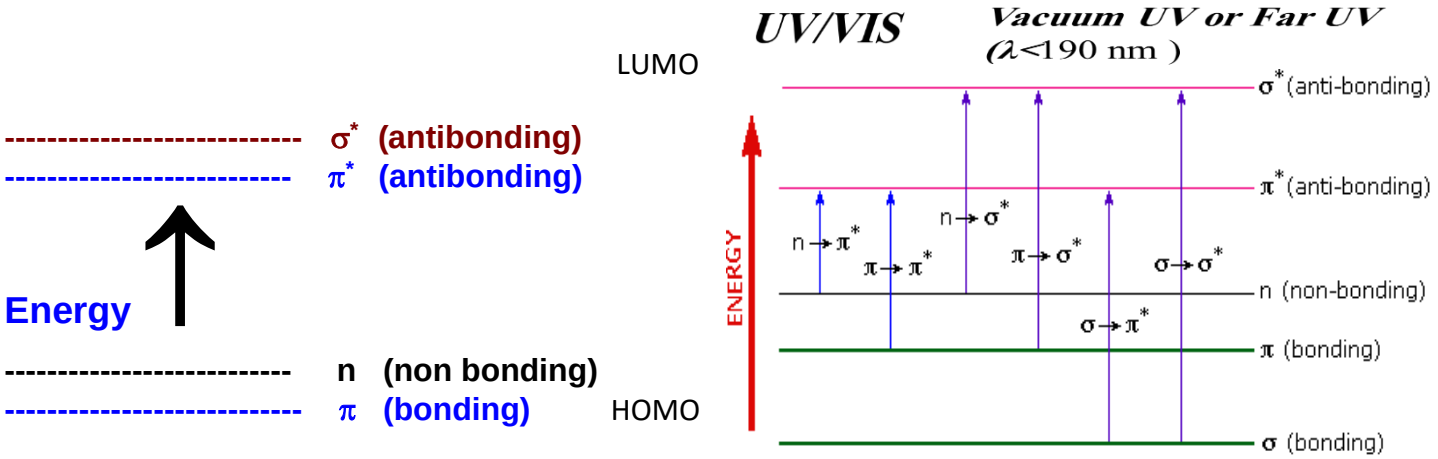
والنوع الثاني:
من الإلكترونات تلك التي تشترك في الاصرة غير مشبعة . وهذه المركبات تحتوي عادة على أصرة σ واصرة π وكمثال على المركبات التي تحتوي على ثلاث اواصر متعاقبه (conjugated) البنزين وهيكساتترايين المتعاقب .

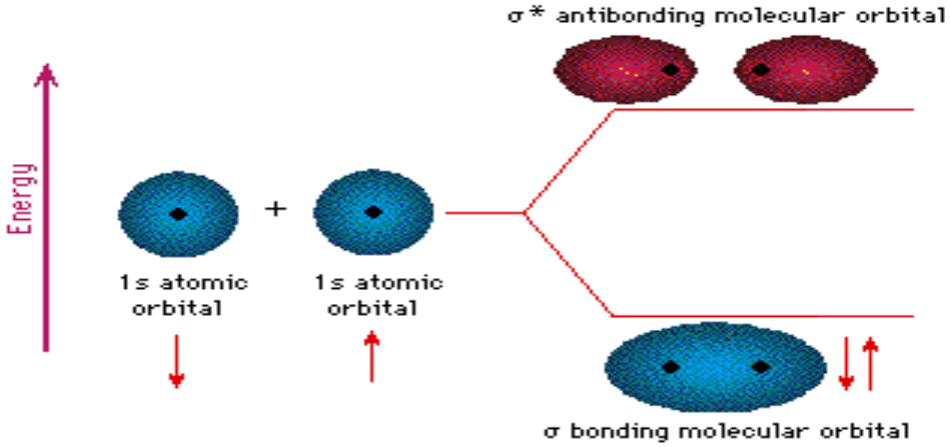
والنوع الثالث:
من الإلكترونات هي التي لاتشترك بأواصر بين الذرات وهذه تدعى بإلكترونات n الحرة . والمركبات العضوية المشبعة لاتحوي إلكترونات n لأن كل الإلكترونات في المستويات الخارجية للكربون والهيدروجين تشترك في الاواصر الكيميائية . أما المركبات العضوية التي تحوي النيتروجين والأكسجين والكبريت والهالوجينات فإنها تحتوي على إلكترونات n ويمكنها أن تمتص الأشعة المرئية أو فوق البنفسجية لأن هذه الأشعة يمكنها إثارة الإلكترونات n .

والخلاصة أن الأشعة فوق البنفسجية أو المرئية يمكن أن يمتصها مركب يحتوي على ذرة نيتروجين أو أكسجين أو هالوجين أو كبريت أو يحوي على أصرة غير مشبعة وتسمى المجموعة التي تحوي ذلك بالمجموعة الماصة أو الكروموفور (chromophore) . توجد اربعة احتمالات حسب ازدياد الطاقه هي :

$\sigma \rightarrow \sigma^*$ needs higher energy
$n \rightarrow \sigma^*$
$n \rightarrow \pi^*$
$\pi \rightarrow \pi^*$ needs lower energy

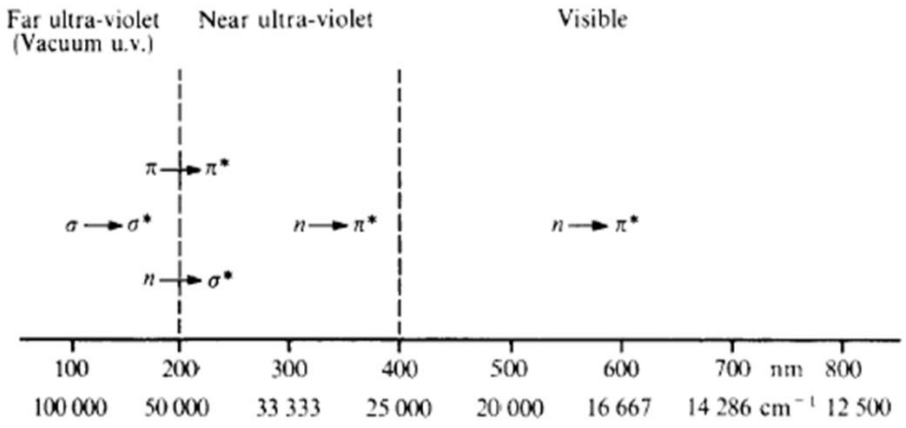
كما مبين بالشكل التالي





مستويات الطاقة للمسارات الجزيئية المختلفة

وعلى ذلك لا تمتص المركبات الهيدروكربونية المشبعة ـ الخالية من أليكترونات n والمشتملة فقط على أواصر σ اشعة UV العادية.


Far ultra-violet
(Vacuum u.v.)
Near ultra-violet
Visible
π → π*
σ → σ*
n → σ*
n → π*
n → π*
100
200
300
400
500
600
700 nm 800
100 000
50 000
33 333
25 000
20 000
16 667
14 286 cm⁻¹ 12 500