

التحليل الكمي للمجاميع العضوية باستخدام تقنية الأشعة تحت الحمراء

كريم ثامر شنيهج، سلمى محمد رضا، لمياء جليل بصري

مركز البحث والتطوير النفطي

Corresponding Author E-mail: speprdc@gmail.com

الخلاصة:

استخدام طيف الأشعة تحت الحمراء لاجراء التحليل الكمي للمجاميع العضوية اعتماداً على حساب طيف الامتصاص للمجاميع العضوية (العطريات والبارافينات والنفثينات والاولفينات ومجموعة الكاربونيل) وعند رسم علاقة النسب المئوية مع مقدار الامتصاصية تم الحصول على المنحنيات القياسية واشتقاق المعادلات الرياضية في الحسابات الكمية بواسطة جهاز الاشعة تحت الحمراء (FTIR) .

وحددت النسب المئوية للمجاميع العضوية للمركبات البارافينية والعطرية والنفثينية في زيوت التزيت وحساب الامتصاصية عند Wave number (750 cm^{-1}) طبق قانون بير في المدى بين (15 – 40) مايكروغرام/مل وبمعامل ارتباط مقداره 0.9192 وكذلك تحديد النسب المئوية للبارافينات والعطريات بالكبروسين تحت Wave number (1610 cm^{-1}) طبق قانون بير في المدى بين (10.2 – 50) مايكروغرام/مل وبمعامل ارتباط مقداره 0.9842 وايضاً تم تحديد النسب المئوية الى الزايلينات هي (m-xylene، o- xylene، p- xylene) طبق قانون بير في المدى بين (5–30) مايكروغرام/مل وبمعامل ارتباط مقداره 0.9849 و 0.9613 و 0.9032 وايضاً تم تحديد ومعاملة كل واحد على حده مع زيت البارافين وبنسب ايضاً مختلفة وبنفس الطرق السابقة حصلنا على المعادلات الرياضية لحساب المواد البارافينية الى الميتا والبارا والاورثو زايلين وكذلك تحديد مجموعة Carbonyl group حيث مزجت مادة مثيل اثيل كيتون (MEK) طبق قانون بير في المدى بين (5 – 30) مايكروغرام/مل وبمعامل ارتباط مقداره 0.9716 و 0.9670 و ايجاد المعادلة النهائية لحساب المواد العطرية الموجودة في الـ (Toluene) بنفس الطرق السابقة حسب النسبة المئوية للـ (MEK) تحت عدد موجي (1730 cm^{-1}) . وقد تمت مقارنة النتائج التي حصلنا عليها من المعادلات الرياضية بواسطة جهاز الأشعة تحت الحمراء مع نتائج جهاز التحليل الكروماتوغرافيا (GC) للمقاطع النفطية الخفيفة لغرض التأكد من دقة الطريقة فقد كانت النتائج قريبة جداً بين قراءة الجهازين ونسبة الخطأ في جميع النقاط لا تتجاوز (±0.5%).

المقدمة:

مطياف الأشعة تحت الحمراء Infrared spectroscopy: هو أحد فروع علم الأطياف الذي تتعامل مع المنطقة تحت الحمراء من الطيف الكهرومغناطيسي أما القياسات المطيافية Spectrometry فإنها تعني قياس هذه التداخلات بين المادة والشعاع وصفيًا عن طريق التعرف على التراكيب الكيميائية لهذه المواد أو كميًا عن طريق قياس تراكيز هذه المواد.

تم اعتماد تقنية الاشعة تحت الحمراء بتقييم كميات المركبات العطرية والبرافينات والنفتينات اعتماداً على طيف امتصاص المجاميع الوظيفية لهذه المكونات في المقاطع النفطية. أما الاشعة تحت الحمراء هي المنطقة التي تكون تحت المنطقة المرئية مباشرة ولها طول موجي يتراوح بين 2.5-25 ميكرومتر ومن الوحدات الأشهر من الطول الموجي هي مقلوب الطول الموجي بالسنتيمتر ويسمى **العدد الموجي** حيث ان العدد الموجي يتناسب مع التردد والطاقة.

وأما الأجهزة التي تقوم بهذه القياسات تدعى بالمطيافيات أو أجهزة مقياس الطيف **Spectrometers** أو راسم طيفي Spectrograph ويشار الى مخطط التداخل بين المادة والشعاع بمخطط طيفي spectrogram أو طيف spectrum.

ويشمل مجموعة من التقنيات، وأشهرها مطيافية الامتصاص (Absorption spectroscopy) يمكن استعمال المطيافية، كما هي الحال مع جميع أنواع المطيافيات، في تحديد هوية المركبات [1,2,3].

الهدف من البحث:

استخدام تقنية الاشعة تحت الحمراء في اجراء التحليل الكمي للمجاميع العضوية في المقاطع النفطية والمركبات العضوية والمحسنتات البترولية.

الجزء العملي:

المطياف IR spectrometer الجهاز المستخدم في انجاز البحث 380Thermo Nicole



شكل (1) يوضح الجهاز المستخدم في انجاز البحث 380Thermo Nicole

الجزء العملي:

المواد الكيميائية المستخدمة :

جدول (1) المواد الكيميائية المستخدمة في البحث ودرجة نقاوتها ومناشئها [4, 5, 6]

No	Chemical name	Chemical formula	Purity	Company
1	n-Heptane	C ₇ H ₁₆	99%	U.K
2	Paraffin oil	---	99.9%	BDH Limited poole
3	O-Xylene	C ₈ H ₁₀	99%	Spain
4	MEK		99.9%	BDH Limited poole
5	Toluene	C ₆ H ₅ CH ₃	99%	Gainland Chemical
6	P - Xylene	C ₈ H ₁₀	99%	Sino pharm chemical reagent
7	m - Xylene	C ₈ H ₁₀	99%	Sino pharm chemical reagent
8	Cyclo Hexane	C ₆ H ₁₂	95%	S.D.Fine –chem limited

تحضير المحاليل:

1- حضر محلول قياسي لحساب نسب المواد العطرية في الزيوت من خلال مزج نسب مختلفة من زيت البرافين مع مذيب التلوين وكانت النسب كالتالي: .

- 1.5 مايكروغرام/مل من زيت البرافين مع 8.5 مايكروغرام/مل من مذيب التلوين.
- 3 مايكروغرام/مل من زيت البرافين مع 7 مايكروغرام/مل من مذيب التلوين .
- 4 مايكروغرام/مل من زيت البرافين مع 6 مايكروغرام/مل من مذيب التلوين .

2- حضر محلول قياسي لحساب نسب المواد البارافينية في الزيوت من خلال مزج نسب مختلفة من زيت البرافين مع مذيب التلوين وكانت النسب كالتالي: .

- 0.9 مايكروغرام/مل من زيت البرافين مع 3.1 مايكروغرام/مل من مذيب التلوين.
- 1 مايكروغرام/مل من زيت البرافين مع 3 مايكروغرام/مل من مذيب التلوين .

- 1.5 مايكروغرام/مل من زيت البرافين مع 2.5 مايكروغرام/مل من مذيب التلوين.
- 3- حضر محلول قياسي لحساب نسب المواد العطرية في الكيروسين من خلال مزج نسب مختلفة من مذيب التلوين مع الهبتان الاعتيادي وكانت النسب كالتالي:-
 - 0.4 مايكروغرام/مل من التلوين مع 3.5 مايكروغرام/مل من الهبتان .
 - 0.5 مايكروغرام/مل من التلوين مع 3.5 مايكروغرام/مل من الهبتان.
 - 1 مايكروغرام/مل من التلوين مع 3.5 مايكروغرام/مل من الهبتان .
 - 0.6 مايكروغرام/مل من التلوين مع 1 مايكروغرام/مل من الهبتان .
 - 2 مايكروغرام/مل من التلوين مع 2 مايكروغرام/مل من الهبتان.
- 4- حضر محلول قياسي لحساب نسبة الاورثو زاييلينات من خلال مزج نسب مختلفة من الاورثو زاييلين مع زيت البرافين وكانت النسب كالتالي:- .
 - 0.5 مايكروغرام/مل من الاورثو زاييلين مع 9.5 مايكروغرام/مل من زيت البرافين .
 - 1 مايكروغرام/مل من الاورثو زاييلين مع 9 مايكروغرام/مل من زيت البرافين.
 - 1.5 مايكروغرام/مل من الاورثو زاييلين مع 8.5 مايكروغرام/مل من زيت البرافين .
 - 2.5 مايكروغرام/مل من الاورثو زاييلين مع 7.5 مايكروغرام/مل من زيت البرافين .
 - 3 مايكروغرام/مل من الاورثو زاييلين مع 7 مايكروغرام/مل من زيت البرافين .
- 5- حضر محلول قياسي لحساب نسبة البارازاييلينات من خلال مزج نسب مختلفة من البارازاييلين مع زيت البرافين وكانت النسب كالتالي:- .
 - 0.5 مايكروغرام/مل من البارازاييلين مع 9.5 مايكروغرام/مل من زيت البرافين .
 - 1 مايكروغرام/مل من البارازاييلين مع 9 مايكروغرام/مل من زيت البرافين.
 - 1.5 مايكروغرام/مل من البارازاييلين مع 8.5 مايكروغرام/مل من زيت البرافين .
 - 2.5 مايكروغرام/مل من البارازاييلين مع 7.5 مايكروغرام/مل من زيت البرافين .
 - 3 مايكروغرام/مل من البارازاييلين مع 7 مايكروغرام/مل من زيت البرافين .
- 6- حضر محلول قياسي لحساب نسبة الميثازاييلينات من خلال مزج نسب مختلفة من الميثازاييلين مع زيت البرافين وكانت النسب كالتالي:- .
 - 0.5 مايكروغرام/مل من الميثازاييلين مع 9.5 مايكروغرام/مل من زيت البرافين.
 - 2.5 مايكروغرام/مل من الميثازاييلين مع 7.5 مايكروغرام/مل من زيت البرافين.
 - 3 مايكروغرام/مل من الميثازاييلين مع 7 مايكروغرام/مل من زيت البرافين.

7 - حضر محلول قياسي لحساب نسب المواد الأروماتية من خلال مزج نسب مختلفة من MEK مع مذيب التلوين وكانت النسب كالتالي:

- 0.1 مايكروغرام/مل من MEK مع 9.5 مايكروغرام/مل من التلوين.
- 0.2 مايكروغرام/مل من MEK مع 0.8 مايكروغرام/مل من التلوين.
- 0.3 مايكروغرام/مل من MEK مع 8.5 مايكروغرام/مل من التلوين.
- 0.5 مايكروغرام/مل من MEK مع 0.5 مايكروغرام/مل من التلوين.
- 0.75 مايكروغرام/مل من MEK مع 0.25 مايكروغرام/مل من التلوين.

8- حضر محلول قياسي لحساب مجموعة الكربونيل من خلال مزج نسب مختلفة من MEK مع مذيب التلوين وكانت النسب كالتالي:

- 0.9 مايكروغرام/مل من MEK مع 9.5 مايكروغرام/مل من التلوين.
- 2.5 مايكروغرام/مل من MEK مع 7.5 مايكروغرام/مل من التلوين .
- 3 مايكروغرام/مل من MEK مع 7 مايكروغرام/مل من التلوين .

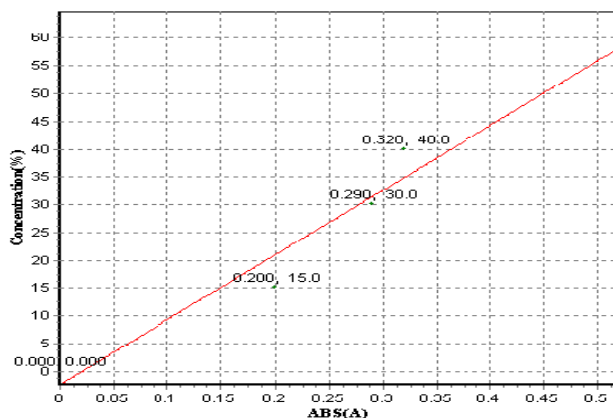
تشخيص المركبات العطرية والبرافينية في مقاطع زيوت التزيت:

1- تحضير منحنيات المعايرة

- ايجاد النسبة المئوية لكمية العطريات في زيت البرافين و مقدار الامتصاصية

جدول (2) النسبة المئوية لكمية العطريات في زيت البرافين و مقدار الامتصاصية

No.	Conc.	% Tran.	Abs.
1	0.0	100.1	0.0
2	15	63.1	0.2
3	30	51.3	0.29
4	40	47.9	0.32



شكل (2) منحنى المعايرة للنسب المئوية لكمية العطريات في زيت البرافين.

والمعادلة التالية توضح كيفية حساب نسبة العطريات:

$$CA\% = 116.650 \times Abs - 2.371$$

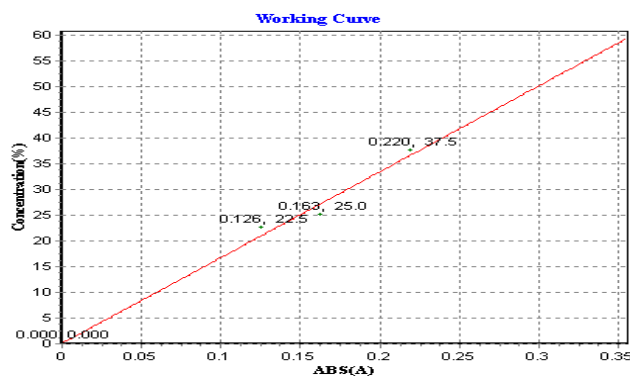
$$\text{Correlation} = 0.9192 \text{ vol } \%$$

- ايجاد النسبة المئوية لكمية البارافينات في زيت البرافين

حساب مقدار الامتصاصية من خلال طيف الاشعة تحت الحمراء لنماذج قياسية تم تحضيرها مختبريا.

جدول (3) نسبة البارافينات في زيت البرافين.

No.	Conc.	%Tran.	Abs.
1	0.0	100.0	0.0
2	22.5	74.8	0.126
3	25	68.7	0.163
4	37.5	60.3	0.22



شكل (3) منحنى المعايرة للنسب المئوية لكمية البارافينات في زيت البرافين

والمعادلة توضح كيفية حساب نسبة البارافينات.

$$CP\% = 166.590 \times Abs + 0.052$$

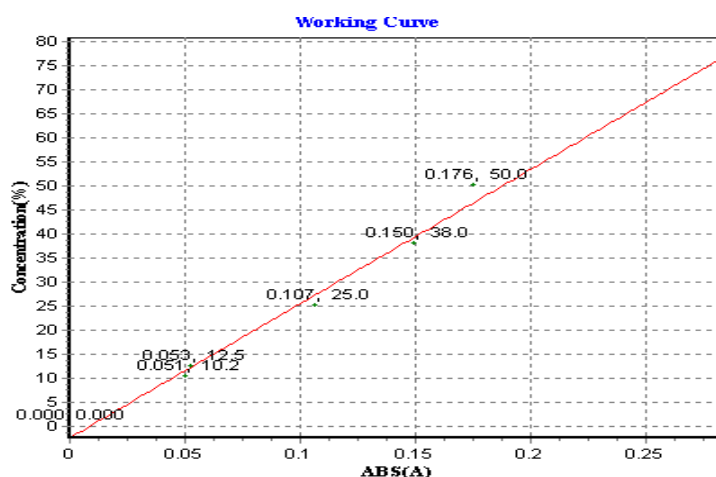
$$\text{Correlation} = 0.9895 \text{ vol } \%$$

- ايجاد النسب المئوية للعطريات في مقطع الكيروسين

حساب مقدار الامتصاصية من خلال طيف الاشعة تحت الحمراء.

جدول (4) النسب المئوية للعطريات في الكيروسين

No.	Conc.	%Tran.	Abs.
1	0.0	100.0	0.0
2	10.2	88.9	0.051
3	12.5	88.5	0.053
4	25	78.2	0.107
5	38	70.8	0.150
6	50	66.7	0.176



شكل (4) منحنى المعايرة لكمية العطريات في مقطع الكيروسين

والمعادلة هي:

$$CA\% = 278.920 \times Abs - 2.347$$

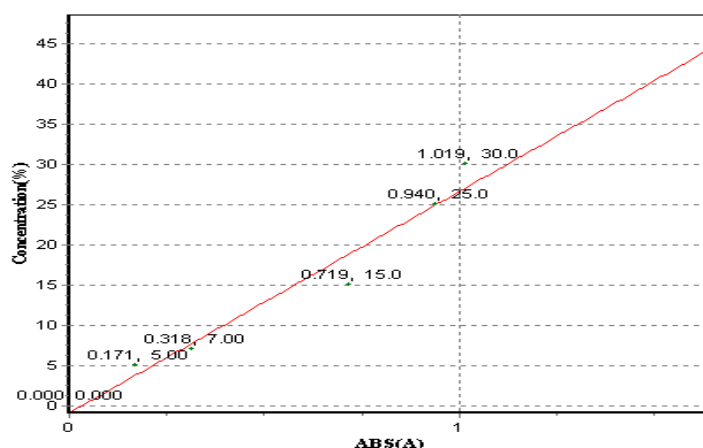
$$\text{Correlation} = 0.9842 \text{ vol } \%$$

- ايجاد النسب المئوية الـ m-xylene مع زيت البارافين

تم مزج نسب مختلفة من ميتا زايلين مع زيت البارافين لحساب تركيز الميتا زايلين القياسي.

جدول (5) النسب المئوية الـ m-xylene مع زيت البارافين

No.	Conc.	%Tran.	Abs.
1	0.0	100.0	0.0
2	5	67.5	0.171
3	7	48.1	0.318
4	15	19.1	0.719
5	25	11.5	0.94
6	30	9.6	1.019



شكل (5) منحنى المعايرة m-xylene بواسطة جهاز IR .

$$C_{mx}\% = 27.465 \times Abs - 0.830$$

$$Correlation = 0.9613 \text{ vol } \%$$

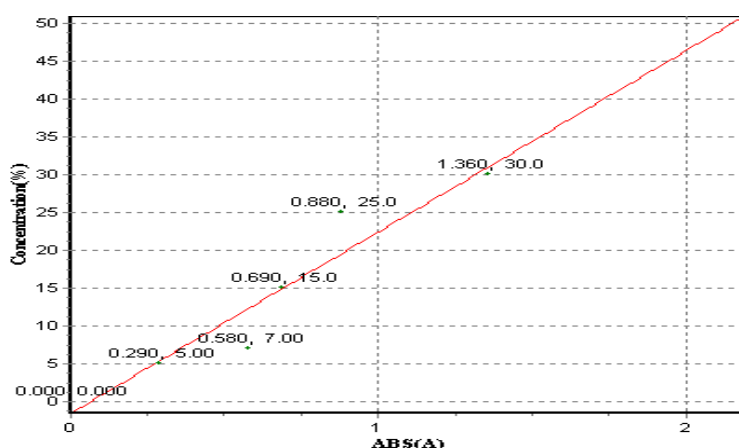
Cmx: يمثل تركيز الميتا زايلين

- ايجاد النسب المئوية الـ O-xylene مع زيت البارافين القياسي

تم مزج نسب مختلفة من الـ O-xylene مع زيت البارافين وايجاد معادلة المنحنى القياسي بواسطة جهاز IR

جدول (6) النسب المئوية الـ O-xylene مع زيت البارافين

No.	Conc.	%Tran.	Abs.
1	0.0	100.0	0.0
2	5	51.3	0.29
3	7	26.3	0.58
4	15	20.4	0.69
5	25	13.2	0.88
6	30	4.4	1.36



شكل (6) منحنى المعايرة الـ O-Xylene بواسطة جهاز IR.

$$Cox\% = 23.993 \times Abs - 1.529$$

$$Correlation = 0.9032 \text{ vol } \%$$

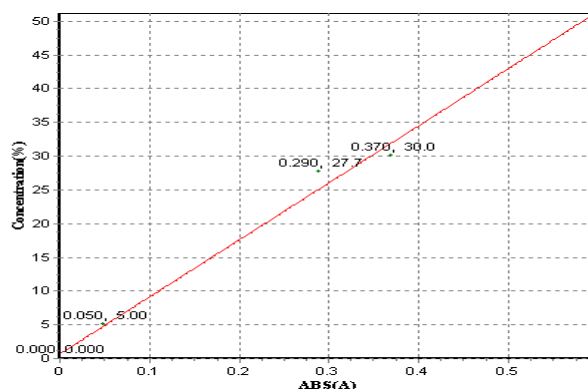
Cox: تمثل تركيز الاورثوزايلين

- ايجاد النسب المئوية الـ p-xylene بواسطة جهاز IR

تم مزج نسب مختلفة من الـ p-xylene مع زيت البارافين وايجاد معادلة منحنى المعايرة

جدول (7) النسب المئوية الـ p-xylene بواسطة جهاز IR.

No.	Conc.	%Tran.	Abs.
1	0.0	100.0	0.0
2	5	89.1	0.05
3	27.7	51.3	0.29
4	30	42.7	0.37



شكل (7) منحنى المعايرة p-xylene بواسطة جهاز IR.

Cpx :- تركيز البارازايلين .

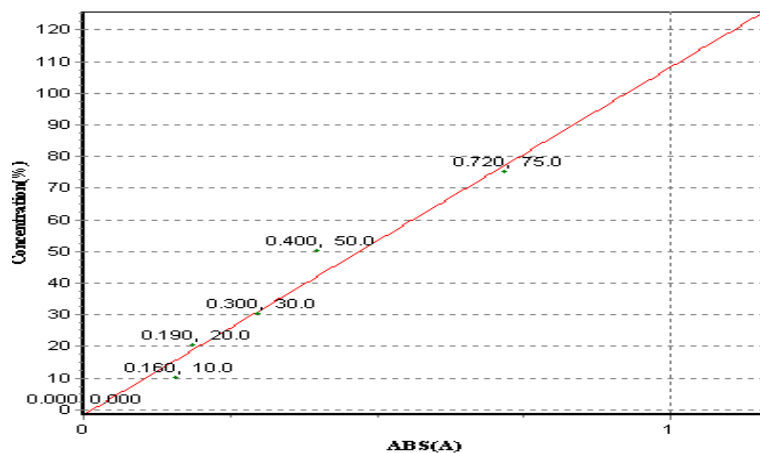
$$Cpx\% = 84.676 \times Abs + 0.645$$

Correlation: 0.9849 vol %.

- النسب المئوية لمادة MEK مع التلوين.

جدول (8) النسب المئوية لمادة MEK مع التلوين لحساب الأروماتيك.

No.	Conc.	%Tran.	Abs.
1	0.0	100.0	0.0
2	10	69.2	0.16
3	20	64.6	0.19
4	30	50.1	0.30
5	50	39.8	0.4
6	75	19.1	0.72



شكل (8) منحنى المعايرة MEK من خلال مزج نسب مختلفة من التلوين مع MEK .

$$\text{Toluene}\% = 109.840 \times \text{Abs} - 1.569$$

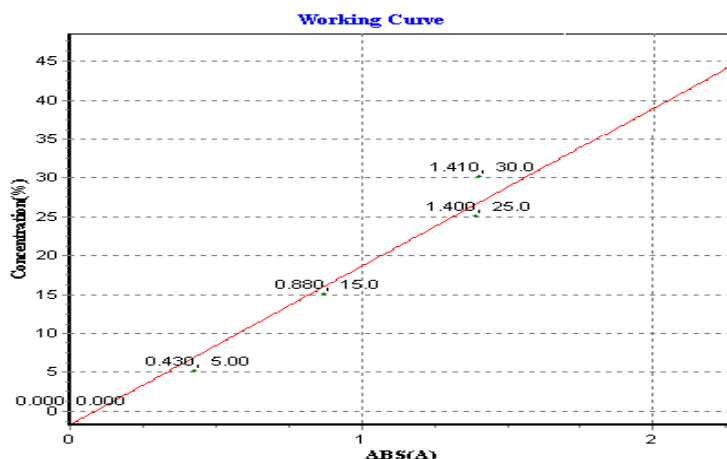
Correlation: 0.9716 vol %

- ايجاد النسب المئوية للامتصاصية لـ MEK بواسطة IR.

تم مزج نسب مختلفة من التلوين مع مادة مثيل اثيل كيتون وقيست الامتصاصية لها بواسطة جهاز طيف الاشعة تحت الحمراء.

جدول (9) النسب المئوية الى MEK الناتجة من مزج التلوين مع MEK.

No.	Conc.	%Tran.	Abs.
1	0.0	100.0	0.0
2	5	37.2	0.43
3	15	13.2	0.88
4	25	4.0	1.40
5	30	3.9	1.41



شكل (9) النسب المئوية الى MEK الناتجة من مزج التلوين مع MEK.

$$MEK\% = 20.396 \times Abs - 1.807$$

Correlation : 0.9670 vol %

2- التطبيقات العملية لكل المركبات:

استخدمت عدة نماذج لحساب نسبة المواد العطرية والبارافينية والنفثينات والاولفينات للزيوت كتطبيق عملي على المعادلات الرياضية التي تم الحصول عليها من المنحنيات.

جدول (10) يوضح الجدول نسب المواد العطرية والبارافينية والاولفينات.

Sample(4)	Sample(3)	Sample(2)	Sample (1)	Test
3.228	0.2	Nil	Nil	نسبة المواد العطرية
80.06	48.69	74.35	33.1	نسبة البارافينات
16.712	51.11	25.65	66.9	نسبة النفثينات + الاولفينات

وفحصت عدة نماذج لزيوت التشحيم لتحديد المجموعات الوظيفية الاساسية وكانت النتائج كما مبينة في جدول (11) .

جدول (11) نماذج لزيوت التشحيم .

Sample(5)	Sample(4)	Sample(3)	Sample(2)	Sample (1)	Test
2.295	1.087	0.62	4.97	0.91	نسبة المواد العطرية
97.705	42.677	64.19	95.03	14.38	نسبة البارافينات
Nil	56.236	35.19	Nil	84.71	نسبة النفثينات + الاولفينات

وايضاً كتطبيق عملي للبحث لتقدير المجاميع الوظيفية لنماذج زيوت التزيب حيث قيست نسبة المواد العطرية والبارافينية والنفثينية لنماذج مختلفة من زيوت التزيب.

جدول (12) تقدير المجاميع الوظيفية لزيوت التزيب

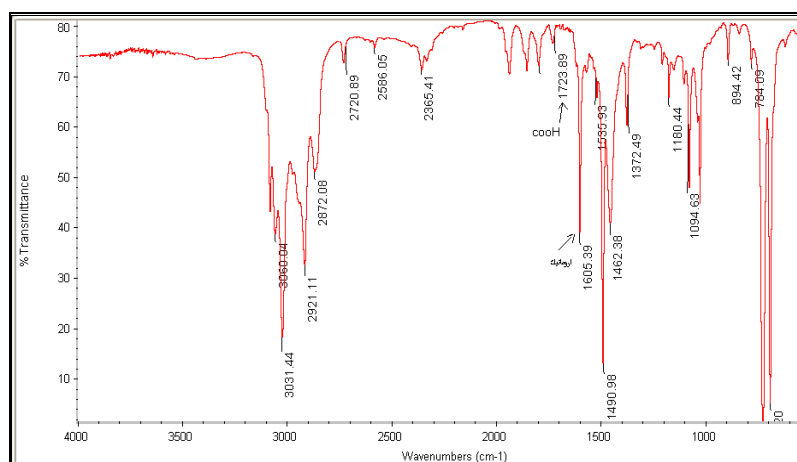
Sample(3)	Sample(2)	Sample (1)	Test
1.478	6.728	1.712	نسبة المواد العطرية
14.345	35.816	6.382	نسبة البارافينات
84.177	57.456	91.906	نسبة النفثينات + الاولفينات

فحصت نماذج أخرى لزيوت التزيب وحساب نسب المركبات العطرية (CA) والبارافينية (CP) والنفثينية (CN) وتم تحديد مكونات ثلاثة نماذج من زيوت تزيب مختلفة المناشئ كتطبيقات عملية على المعادلات الرياضية التي حصلنا عليها من المنحنيات القياسية وحسبت لها أيضاً الانحراف القياسي (SD) للنماذج وكانت نسبة الخطأ تتراوح بين (0.8-4.3) والنتائج موضحة بالجدول (13).

جدول (13) نسب CA,CP,CN,SD لزيت التزيت لنفس العينة .

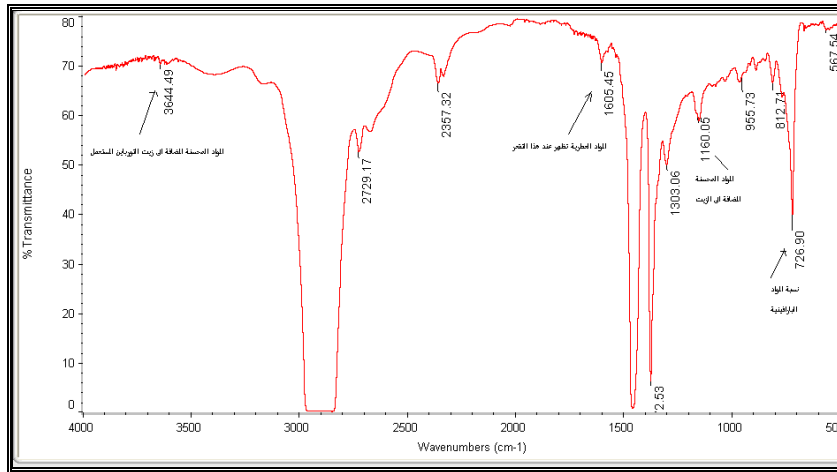
Sample Test	1	2	3	SD
CA	2.15	2.768	2.229	2.3823 ±0.83554
CP	33.2	35.147	34.388	34.2450 ±2.43799
CN	64.65	62.085	63.383	64.0703 ±4.39295

وكتطبيق عملي في المختبر على زيت مستعمل يحتوي على محسنات مضافة غير مختفية تماماً بعد فترة الاستعمال وبهذا أصبح بالإمكان تحديد صلاحية زيوت التزيت من خلال فحصها بطيف الأشعة تحت الحمراء وملاحظة وجود المحسنات وعدمها في الزيت كما في الشكل (10).



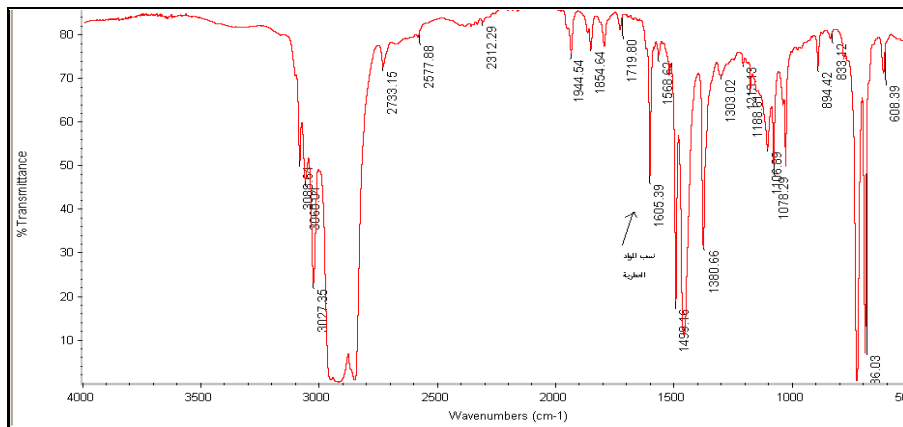
شكل (10) زيت مستعمل (زيت مخلفات التورباين) يحتوي على محسنات مضافة.

ولأجل ان يغطي البحث كافة المشتقات النفطية فقد تم إجراء عملية اذابة كمية من الاسفلت السيلال بواسطة مذيب التولوين ومن ثم تحديد طيفه بواسطة الأشعة تحت الحمراء لتحديد أهم المجاميع الوظيفية التي يحتويها وكذلك الأسفلت المعامل لزيادة النفاذية كما مبين في الشكل (11).



شكل (11) اسفلت سيال مذاب بالتولوين

وكتطبيق عملي على المواد العطرية في الكيروسين يمثل هذا الشكل الاصرة $C=C$ لطيف العطريات عند رقم الموجة 1610 cm^{-1} وكما موضح في الشكل (12).

شكل (12) نسبة المواد العطرية في مقطع للكيروسين وتكون واضحة بحدود 1605 cm^{-1} .

❖ التطبيق العملي لحساب العطريات لمقطع كيروسين:

$$A = -\log\left(\frac{\%T}{100}\right) = \log\left(\frac{I_0}{I}\right)$$

$$A = \log\frac{16.3}{13.1} = 0.094$$

$$\text{Conc.} = 278.920 * 0.094 - 2.347$$

$$\text{Conc.} = 23.87 \text{ vol\%}$$

A: تمثل الامتصاصية

Conc: تركيز الامتصاصية

❖ تطبيق عملي لحساب نسب الزايلينات (ميتازايلين):

$$A = -\log\left(\frac{\%T}{100}\right) = \log\left(\frac{I_0}{I}\right)$$

$$A = \log \frac{13.6}{12.4} = 0.040$$

$$\text{Conc.} = 27.465 \times 0.040 - 0.830$$

$$\text{Conc.} = 0.2686 \text{ vol\%}$$

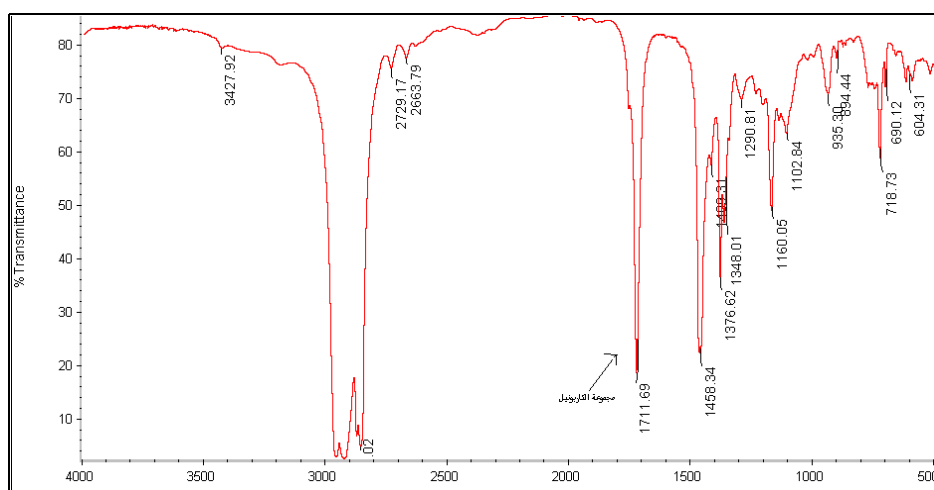
$$A = -\log\left(\frac{\%T}{100}\right) = \log\left(\frac{I_0}{I}\right)$$

$$A = \text{Log} \frac{12.6}{11.4} = 0.043$$

$$\text{Conc.} = 23.993 \times 0.043 - 1.529$$

$$\text{Conc.} = 0.4973 \text{ vol \%}$$

وكتطبيق عملي لمركبات مجموعة الكربونيل لمادة المثل اثيل كيتون فحصت هذه المادة وحددت مجموعة الكربونيل كما في الشكل (13).



شكل (12) مجموعة الكربونيل تظهر بحدود 1711.69 Cm^{-1}

3- المقارنة بين نتائج جهازي IR & GC:

تم اجراء مقارنة بين نتائج جهازي IR & GC لعدة نماذج من الكيروسين وكانت نسبة المواد العطرية متقاربة بين نتائج الجهازين. وحسب لها الانحراف القياسي للنماذج ايضاً كما في الجدول رقم (14) وكانت نسبة الخطا لاتتجاوز 0.5%.

جدول (14) نتائج المقارنة بين جهازي IR & GC.

Sample	Aromatic Conc. by IR	Aromatic Conc. by GC	S.D
1	4.6	4.3965	±0.124
2	11	11.6844	±0.34
3	17.528	18.63	±0.54
4	19.2	19.6	±0.2
5	10.5	12.5	±1.4

الاستنتاجات:

1. أن تقنية الأشعة تحت الحمراء يمكن ان تستخدم للتحليل الكمي اعتماداً على حساب طيف الامتصاص للمجاميع العضوية اعتمادا على قوانين لامبرت بير أخذين بعين الاعتبار نوع الخلية وسمكها وكيفية تحضير النموذج القياسي ليتوافق مع تراكيز المجموعات الوظيفية في العينات النفطية او المضافات والمذيبات .
2. لا تحتاج هذه التقنية الى مستلزمات كثيرة خلافا للاجهزة والطرق الاخرى .
3. تم اشتقاق المعادلات الرياضية للحسابات الكمية للمنحنيات القياسية وحسابها بجهاز الأشعة تحت الحمراء FTIR.
4. حساب النسب المئوية للمركبات البارافينية والعطرية والنفتينية في زيوت التزيت وتم حساب ايضاً النسبة المئوية للكبروسين وتحديد مجموعة الكاربونيل وكذلك الاولفينات .
5. من خلال النتائج التي حصلنا عليها من جهاز الأشعة تحت الحمراء ومقارنتها مع جهاز تحليل الـ GC كانت النتائج جداً متقاربة ونسبة الخطأ في جميع النقاط لا تتجاوز 0.5%.
6. تتميز الأشعة تحت الحمراء بالسرعة في انجاز التحليل والتشخيص المبكر للمجاميع العضوية التي تحتويها العينة وفي هذا البحث تم استخدام برنامج خاص بجهاز UV وهو UV-quantitative analysis window. والاستفادة من بعض خواص هذا البرنامج ليتم استخدامه بالتحليل الكمي بتقنية طيف الأشعة تحت الحمراء واشتقاق الموديلات الرياضية بواسطته وسهولة التعامل مع العينات على اختلاف انواعها وعدم تغير خواص النموذج بحيث يبقى النموذج محافظاً على مواصفاته.

المصادر:

1. M.K. Weldon, V.E. Marsico, Y.J. Chabal, D.R. Hamann, S.B. Christman and E.E. Chaban, Surf. Sci.
"Proceedings of the 8th Int'l conf. on Vibrations at Surfaces, in press "(1996).
2. Dr. Walt Volland, Bellevue Community College, Bellevue Washington. "Organic Compound Identification Using Infrared Spectroscopy ", 1999.
- 3 . وسام قاسم الشالجي، كريم ثامر شنيهج، "التحليل الألي لاختصاص التحليلات الكيمياوية بمستوى الدبلوم الفني"
الطبعة الاولى، بغداد، 1993م-1414هـ.
4. R. M. Silverstein, G. C. Bassler, and T. C. "Morrill, Spectrometric Identification of Organic Compounds ", 4th ed (New York: Wiley, 1981), 166.
5. Submitted by Matt . " Infrared Absorbance Spectroscopy (IR)" on July 19, 2011.
6. Dr. J. Cooke, Department of Chemistry, University of Alberta" ,Spectroscopy in Inorganic Chemistry (Theory)" 2005.