

# Ihmisen ja elinympäristön kemiaa

Orgaaniset yhdisteet – Rakenteiden  
mallintaminen ja rakennetutkimus

# Suhdekaava ja molekyylikaava

- ▶ Suhdekaavan avulla ilmaistaan eri alkuaineiden atomien suhteellinen osuus molekyyllissä. Esim.  $(C_3H_{10}N_2)_x$ , eli jokaista kolmea hiiliatomia kohden on 10 vety ja 2 typpi atomia. X on jokin kokonaisluku.
- ▶ Molekyylikaava ilmaisee alkuaineiden todellisen määrän molekyyllissä.

- ▶ Kun hiilivetyä poltettiin, muodostui 192g  $CO_2$ :ta ja 78,6g  $H_2O$ :ta. Määritä yhdisteen suhdekaava.
- ▶ Ratkaistaan hiilen ja vedyn ainemäärät.

$$n(C) = n(CO_2) = \frac{m(CO_2)}{M(CO_2)} = \frac{192g}{44,01 \text{ g/mol}} = 4,362644 \dots mol$$

$$n(H) = 2 \cdot n(H_2O) = 2 \cdot \frac{m(H_2O)}{M(H_2O)} = 2 \cdot \frac{78,6g}{18,016 \text{ g/mol}} = 8,725577 \dots mol$$

- Lasketaan ainemäärien suhde hiileen nähden.

$$\frac{n(C)}{n(C)} = 1$$

$$\frac{n(H)}{n(C)} = \frac{8,725577...mol}{4,362644...mol} = 2,000065914 \approx 2$$

$$n(C):n(H) = 1:2$$

- Suhdekaava on  $(CH_2)_x$

- ▶ Massaspektrin mukaan yhdisteen moolimassa on noin  $116 \text{ g/mol}$ . Yhdisteen suhdekaava on  $(C_3H_6O)_x$ . Selvitä yhdisteen molekyylikaava.
- ▶ Lasketaan yhdisteen  $(C_3H_6O)$  moolimassa:

$$(3 \cdot 12,01 + 6 \cdot 1,008 + 16,00) \text{ g/mol} = 58,078 \text{ g/mol}$$

$$2 \cdot 58,078 \text{ g/mol} = 116,156 \text{ g/mol} \approx 116 \text{ g/mol}$$

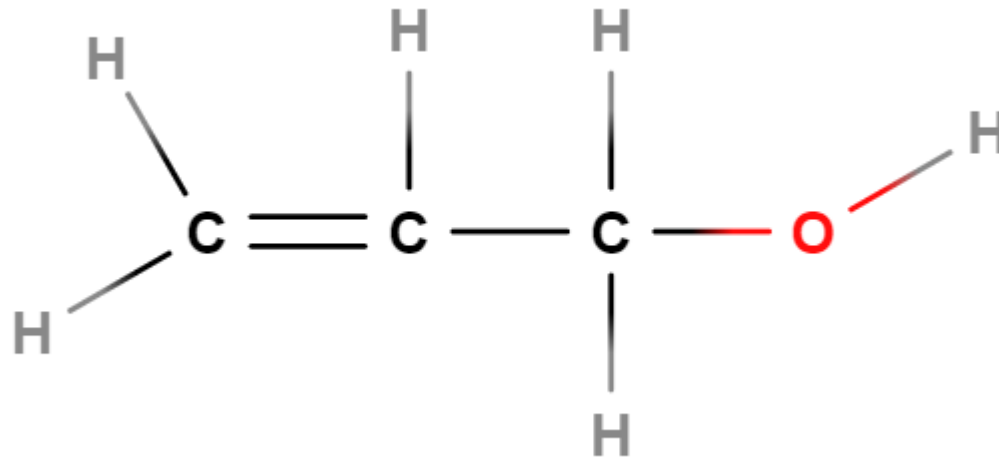
- ▶  $x=2$
- ▶ Yhdisteen molekyylikaava on  $C_6H_{12}O_2$

# Rakennekaavan mallintaminen

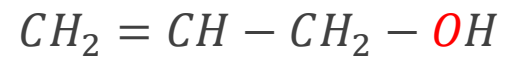
- ▶ Yhdisteen rakennekaavasta ilmenee alkuaineiden määrät ja niiden väliset sidokset.
- ▶ Pelkkä molekyylikaava ei usein riitä kuvaamaan molekyyliä, koska kahdella tai useammalla eri molekyylillä voi olla sama molekyylikaava.
  - ▶ Esimerkiksi sekä etanolin ja dimetyylieetterin molekyylikaava on  $C_2H_6O$
- ▶ Rakennekaava voidaan mallintaa usealla tavalla.

► Sidosviivakaava:

- Täsmällisen rakennekaava, jossa näytetään kaikki atomit ja sidokset.



- ▶ Tiivistetty sidosviivakaava:
  - ▶ Vedyn sidoksia ei merkitä erikseen.
  - ▶ Usein yksinkertaiset sidokset voidaan jättää myös merkitsemättä.



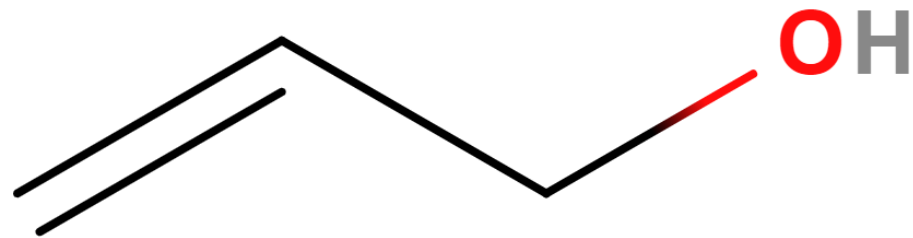
tai

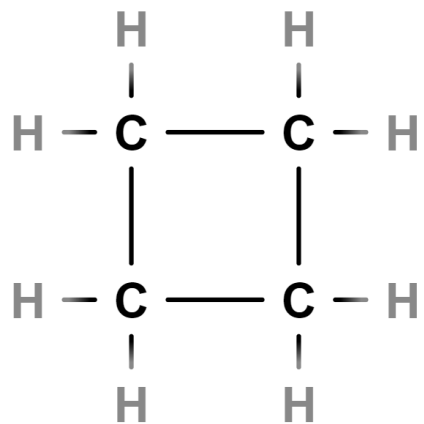




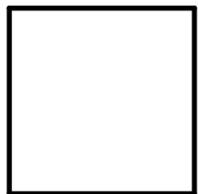
▶ Viivakaava:

- ▶ Viivakaavassa esiin piirretään vain sidokset (pois lukien hiili-vety-sidokset) ja muut alkuaineet kuin hiili ja vety.
- ▶ Viivakaavasta käy helposti selville yhdisteen funktionaalinen ryhmä.

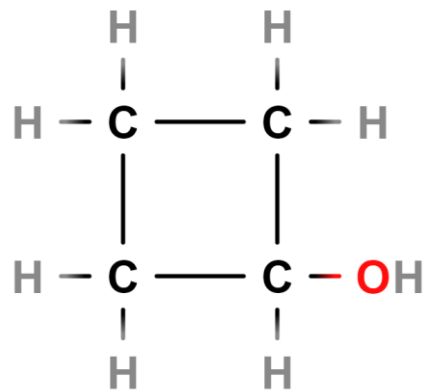




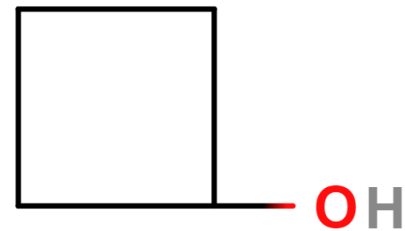
=



Syklobutaani



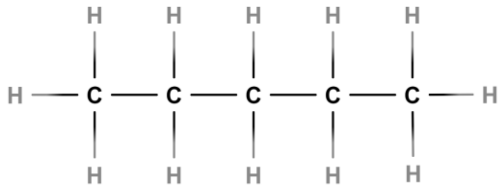
=



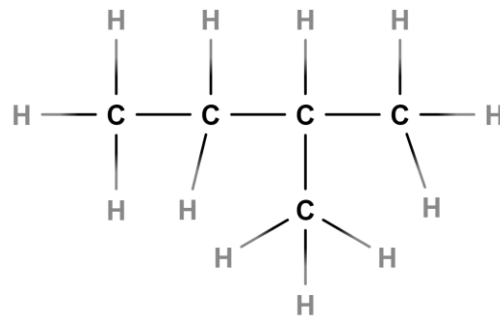
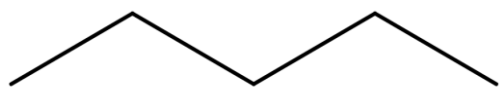
Syklobutanoli

# Rakenneisomeria

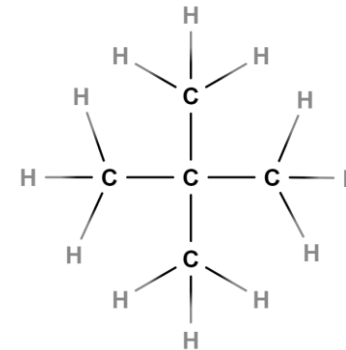
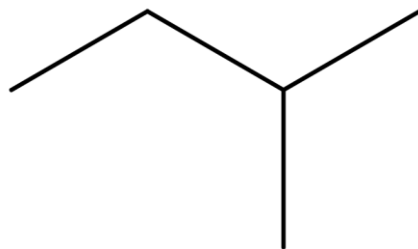
- ▶ Kahdella eri yhdisteellä voi olla sama molekyylikaava, mutta niiden rakenne eroavat toisistaan. Tällöin puhutaan **rakenneisomeriasta**.
- ▶ Esimerkiksi yhdisteellä  $C_5H_{12}$  on kolme rakenneisomeriaa. [**Runko- tai ketjuisomeria**]



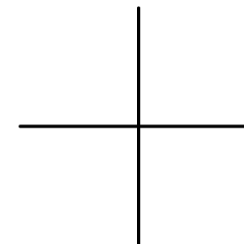
Pentaani



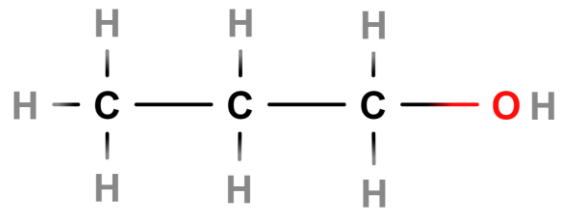
2-metyylibutaani



2,2-dimetyylipropaani

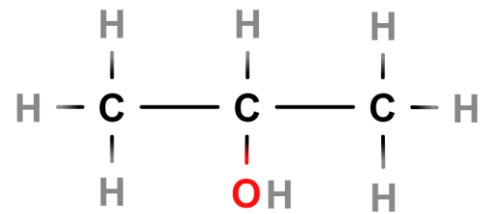


- **Paikkaisomeriassa** yhdisteen funktionaalinenryhmä tai substituenttien paikka vaihtelee.



1-propanoli

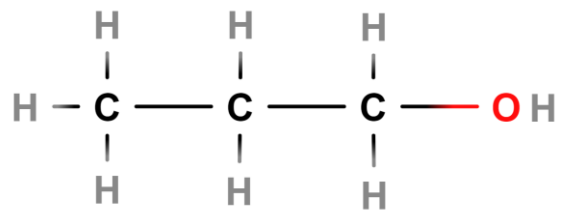
primäärinen alkoholi



2-propanoli

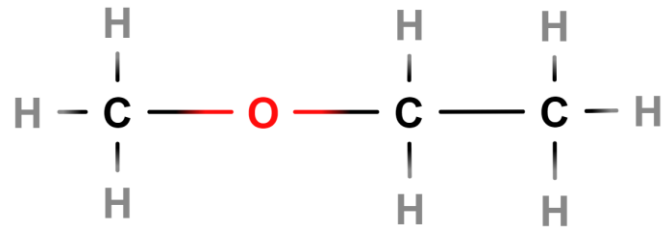
sekundäärinen alkoholi

- **Funktioisomeriassa** yhdisteiden funktionaaliset ryhmät eroavat toisistaan. Tällöin kemialliset ominaisuudetkin vaihtelevat merkittävästi.



1-propanoli

alkoholi



etyylimetyylieetteri

eetteri

# Aineen rakenteen analyysimenetelmät

- ▶ **Röntgendiffraktio**
  - ▶ Paljastaa aineen hilarakenteen
- ▶ **Massaspektrometri**
  - ▶ Kertoo tarkasti yksittäisten molekyylien massan
- ▶ **Infrapunaspektrometria**
  - ▶ Paljastaa yhdisteessä olevat sidostyypit
  - ▶ Esim. C=O spektri on erilainen kuin C-H tai C=C välillä
- ▶ **Ydinmagneettinen resonanssispektrometria (NMR)**
  - ▶ Kertoo vetyatomien kemiallisen ympäristön