

Orgaanisen yhdisteen tunnistaminen

Aineen koostumus ja rakenne voidaan selvittää erilaisilla analyyseillä. Nykyisin analyytit tehdään usein erilaisilla spektrometrillä. Nämä menetelmät hyödyntävät elektronien siirtymisessä tapahtuvia energiamuutoksia. Spektrometriassa tutkitaan miten tutkittava aine absorboi (=sitoo) tai emittoi (=lähettää) sähkömagneettista säteilyä.

Taulukko 1.

Tekniikka	Periaate	Sovellus
Atomiabsorptiospektrometria	Atomin absorptio	Metallien kvantitatiiviseen määrittämiseen
UV-VIS -spektrometria	Molekyylien absorptio	Alkuaineiden ja molekyylien kvantitatiivisen määrittämiseen
IR-spektrometria	Molekyylien absorptio	Soveltuu ennestään tunnettujen orgaanisten yhdisteiden tunnistamiseen. Jokaisella orgaanisella yhdisteellä on sille ominainen infrapunaspektrinsä, jonka perusteella se voidaan tunnistaa
NMR-spektrometria	Atomiytimen absorptio	Orgaanisten yhdisteiden rakennemäärittämiseen
Massaspektrometria	Molekyylin pilkkoutuminen	Soveltuu orgaanisten yhdisteiden tunnistamiseen ja yhdisteiden pitoisuuden määrittämiseen. Suuren erotuskyvyn massaspektrometrillä voidaan määrittää erittäin tarkasti tutkittavan yhdisteen molekyylimassa

1. Massaspektrometri, MS (mass spectrometry).

Massaspektrometrillä tutkitaan orgaanisia aineita. Sillä voidaan mm. selvittää suhteellinen atomi- tai molekyylimassa. Käyttö perustuu siihen että molekyylin pilkkoutuminen on ennakoitavissa. Propani $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$ ($M_r=44$) voi pilkkoutua ioneiksi CH_3 ($M_r = 15$) ja CH_3CH_2 ($M_r = 29$). Tällöin näiden piikit näkyvät myös massaspektrikuvassa.

Etanoli voi hajota seuraavaksi osiksi ja siten kuvassa on myös niistä piikkejä:

CH_3 (Mr = 15)

CH_3CH_2 (Mr = 29)

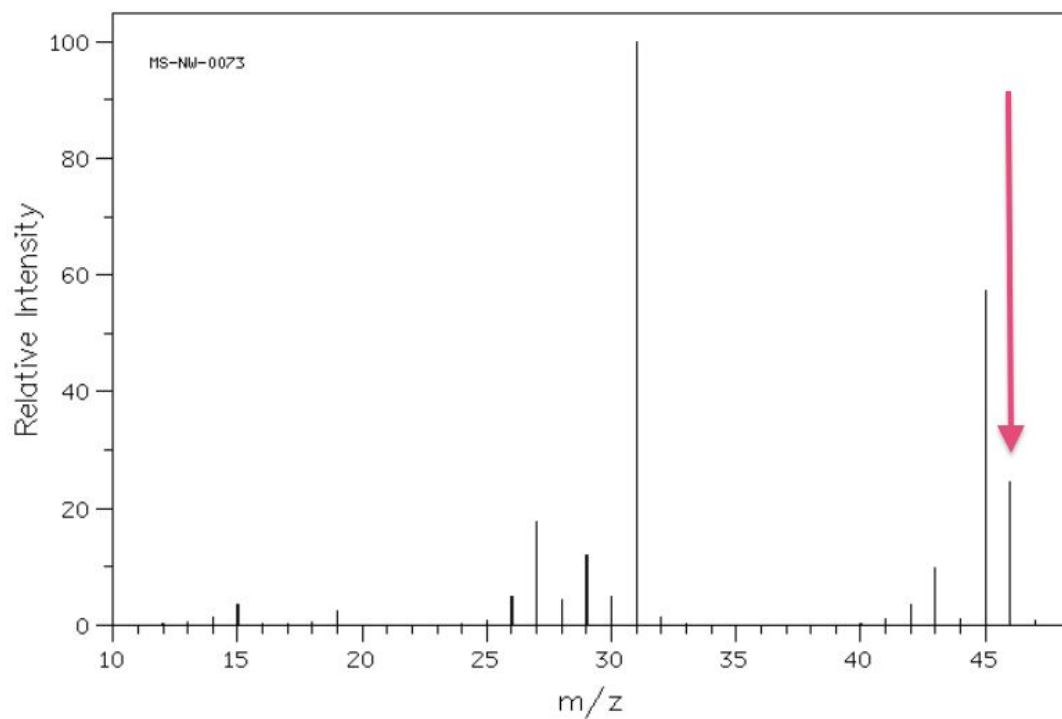
CH_3O (Mr = 31)

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2$ (Mr = 43)

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}$ (Mr = 45)

$\text{CH}_3\text{CH}_3\text{O}$ (Mr = 46)

MS-NW-0073 SDBS NO. 1300
ethyl alcohol
C2H6O (Mass of molecular ion: 46)



Kuva1. Etanolin massapektri

2. Infrapunaspektrometri, IR (infra red spectrometry).

Infrapunaspektillä tutkitaan alkuaineiden välisiä sidoksia. Molekyylit värähtelevät luonnostaan tietyllä taajuudella. Jotta näytteeseen tuotu säteily voisi absorboitua, täytyy säteilyn värähdellä samalla taajuudella kuin näytemolekyylillä luonnostaan värähtelee

Absorboitu säteilyenergia voimistaa näytemolekyylin värähtelyä. IR-säteilyn molekyylissä aikaansaamat värähdykset voidaan jakaa karkeasti kahteen pääluokkaan: venytyksiin ja taivutuksiin. Venytyksiä on kahdenlaisia: symmetrisissä venytyksissä kaikki tietyn atomin sidokset muihin atomeihin venyvät tai kutistuvat samanaikaisesti. Epäsymmetrisissä venytyksissä taas tietyn atomin sidokset muihin atomeihin venyvät ja kutistuvat eri tahtiin. Taivutukset puolestaan voivat tapahtua neljällä tavalla. Kaksi samaan atomiin liittynyttä atomia voivat taipua toisiaan kohti ja erilleen saksimaisesti (scissoring). Molekyylin osa voi heilua molekyylin tasossa (rocking) tai molekyylin tasosta poiketen (wagging). Molekyylin osa voi kiertyä sen sidoksen suhteen, joka yhdistää sen loppuosaan molekyylillä (twisting). Kaikki nämä värähdykset voivat sitoa säteilyä ja täten jättää jälkensä IR-spektriin.

Alkoholin O–H sidos absorboi eri alueella kuin karboksyylihapon O–H. Kullekin sidostyypille luonteenomaiset aaltoluvut, joilla ne absorboivat IR-säteilyä, on koottu taulukoihin, joiden avulla spektristä voidaan tunnistaa eri funktionaalisia ryhmiä. Aaltoluvun lisäksi IR-spektrin piikit voivat olla joko hyvin teräviä tai leveitä ja pyöreitä. IR-spektri tulostetaan tavallisimmin niin, että piikit näyttävät olevan ylösalaisin. Vertaamalla tutkittavan näytteen IR-spektrin sormenjälkialuetta spektrikirjastoihin yhdisteen rakenne voidaan tunnistaa.

Taulukko 2.

Funktionaalinen ryhmä, joka aiheuttaa absorptioon	Aaltoluku / cm^{-1}	Piikin muoto
C-H	2800-3100	terävä
O-H	3200-3550 (alkoholi)	leveä
O-H	2500-3300 (karboksyylihapon OH-ryhmä)	leveä
C=O	1680-1750	terävä
N-H	3300-3500	terävä
C-H	1180-1360	
sormenjälkialue	-1500	vaihtelee

ethyl alcohol

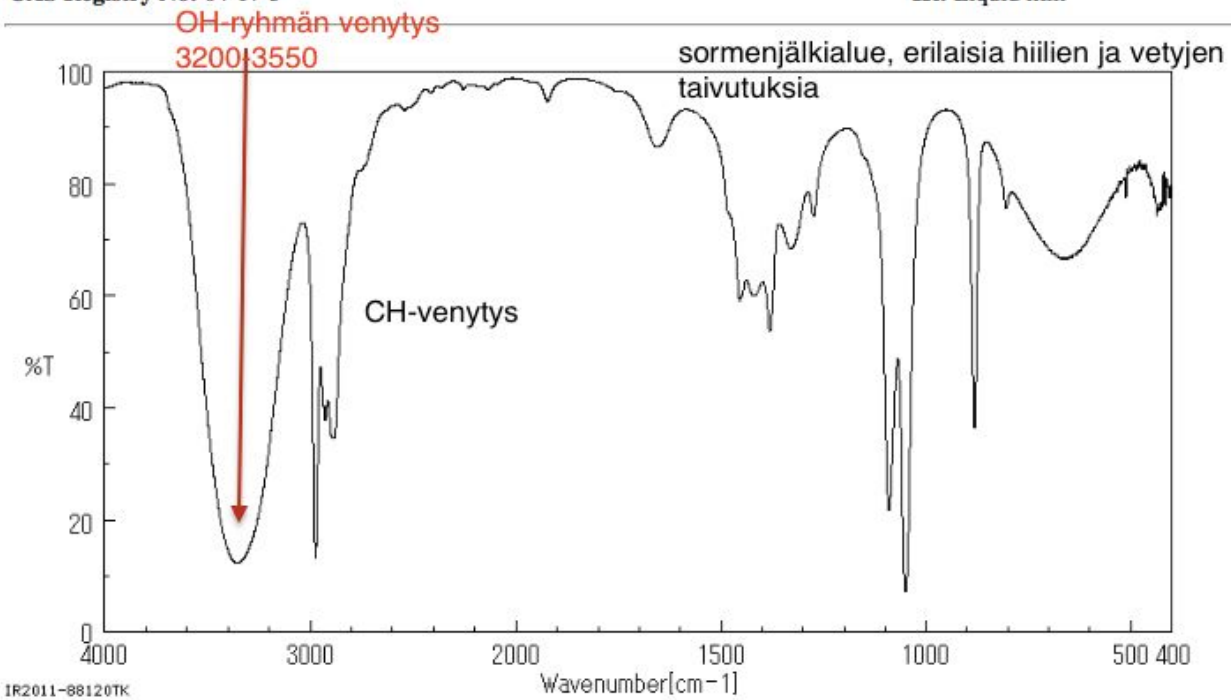
Molecular Formula: C_2H_6O

SDBS No.: 1300

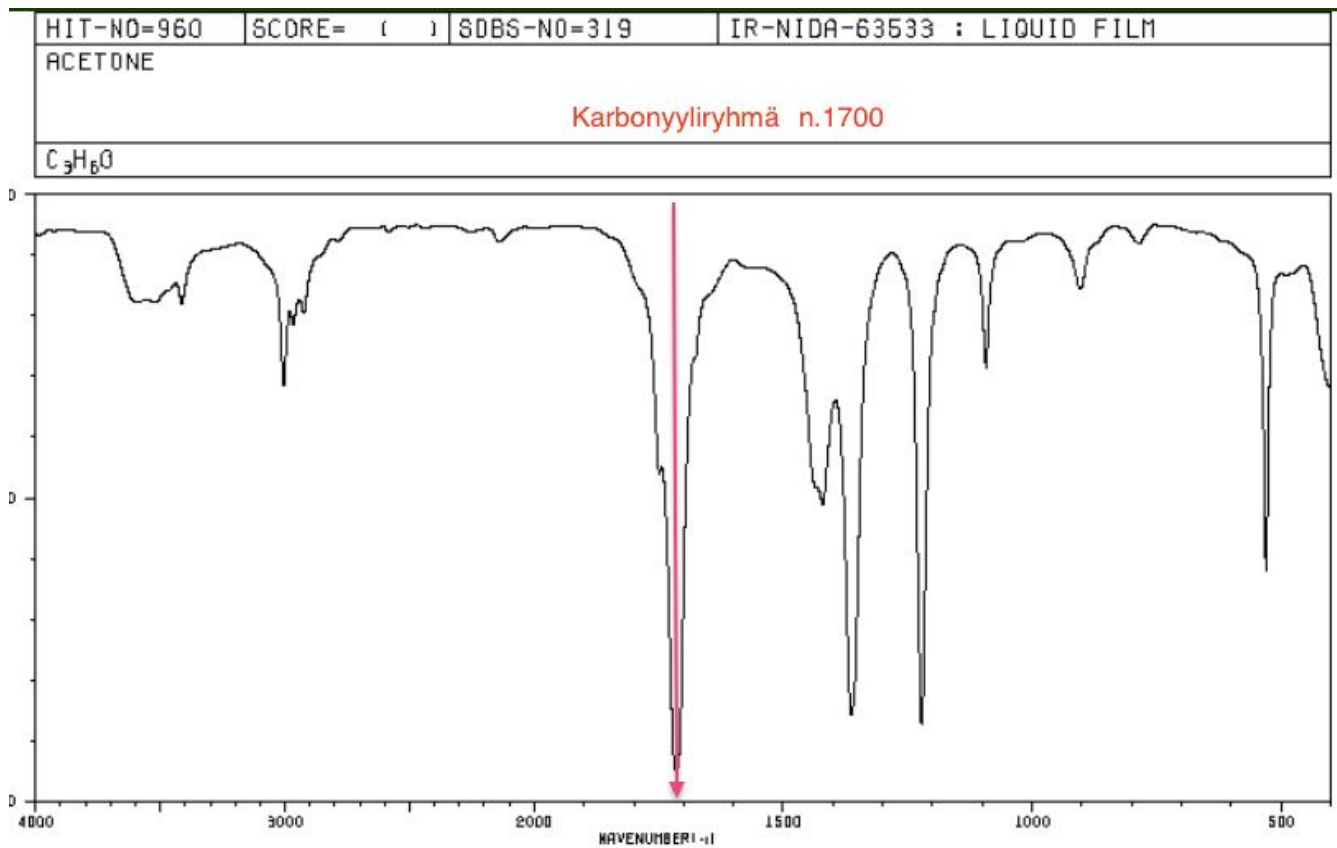
Spectral Code: IR2011-88120TK

CAS Registry No: 64-17-5

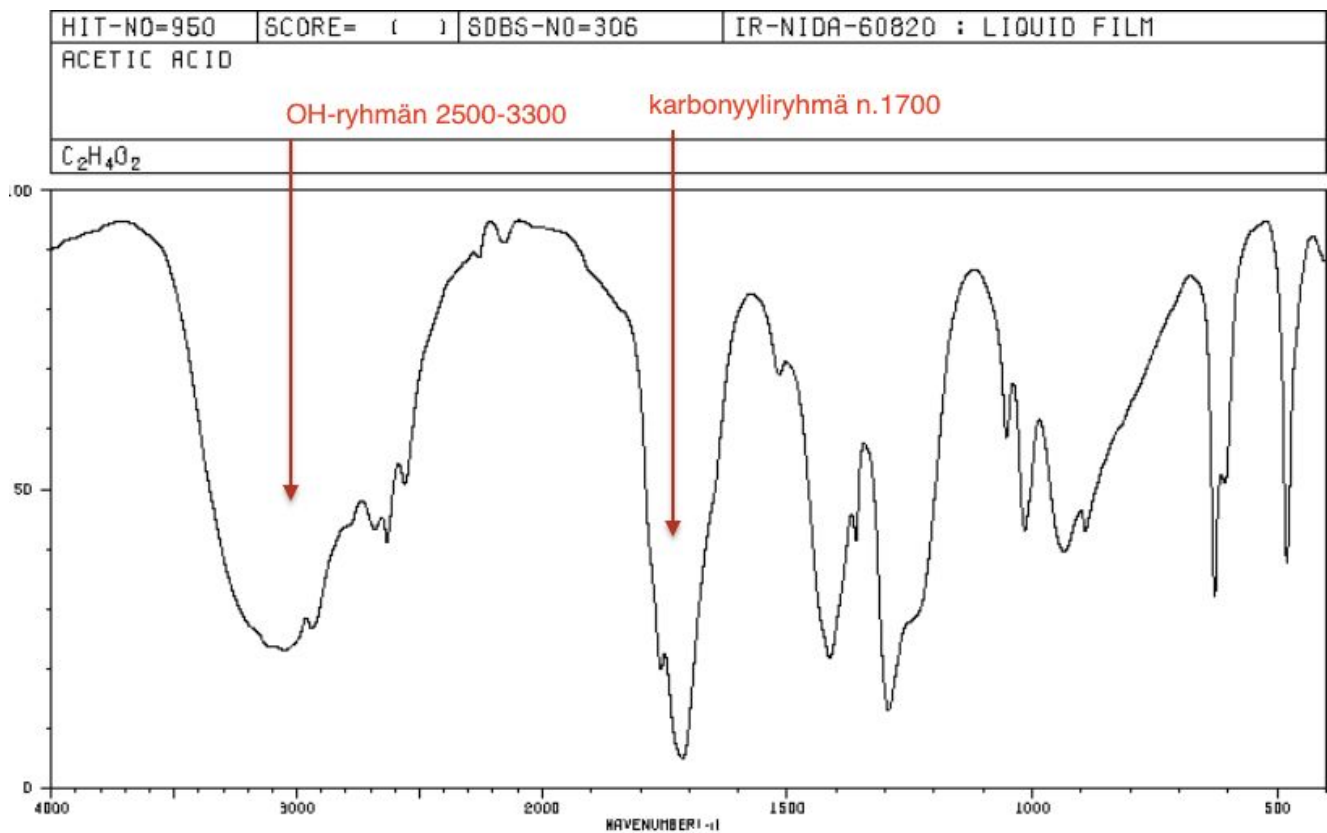
IR: Liquid film



Kuva 2. Etanolin IR-spektri



Kuva 3. Asetonin eli propanonin IR-spektri



Kuva 4. Etikkahapon eli etaanihapon IR-spektri

Lähteet:

<http://www03.edu.fi/oppimateriaalit/laboratorio/> (luettu 18.6.2017)

http://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi (luettu 18.6.2017)

<http://virtuaali.tkk.fi/fi/orgaaninenkemialabraopas/metodit/reakseuranta/IR/IR.htm> (luettu 18.6.2017)

http://epublications.uef.fi/pub/urn_nbn_fi_uef-20120950/urn_nbn_fi_uef-20120950.pdf (luettu 18.6.2017)

http://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi (luettu 18.6.2017)

