

Luku 2: Orgaanisten yhdisteiden rakenteiden mallintaminen

1

2.1 Suhdekaava ja molekyylikaava

- ▶ Suhdekaava ilmoittaa yhdisteessä olevien alkuaineatomien pienimmän kokonaislukusuhteen
 - ▶ Esim. CH_2 tai $(\text{CH}_2)_x \rightarrow$ hiilen ja vedyn ainemäärien suhde on 1:2

2

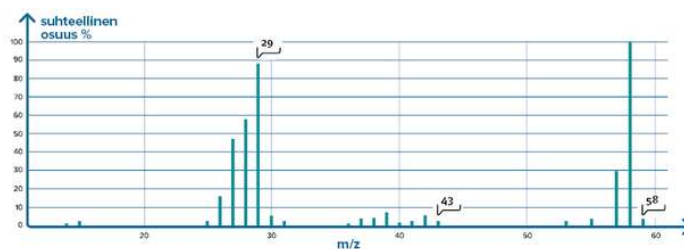
s. 44: 1, 2, 3

2

- ▶ **Esimerkki 3:** Erään amiinin (eli typpiyhdisteen) alkuaineatomien massaprosenttiset osuudet ovat: hiili 48,8 %, vety 13,5 % ja typpi 37,7 %. Ratkaise yhdisteen suhdekaava.

3

- ▶ Molekyylikaava ilmoittaa alkuaineatomien todelliset ainemäärät yhdessä moolissa yhdistettä
 - ▶ Esim. C_2H_4 ja C_3H_6
 - ▶ Molekyyli massa saadaan laskettua, jos tiedetään suhdekaava ja moolimassa
- ▶ **Esimerkki 4:** Erään happea sisältävän orgaanisen yhdisteen suhdekaava on $(C_3H_6O)_x$. Kun yhdistettä tutkittiin massaspektrometrillä, saatiin kuvan 51 mukainen spektri. Spektristä voidaan päätellä, että moolimassa $M = 58$ g/mol. Ratkaise yhdisteen molekyylikaava.



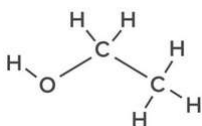
4

2.2 Rakennekaava ja sen esittäminen eri tavoin

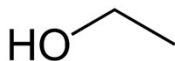
- ▶ Molekyylikaava ei kerro, kuinka atomit ovat sitoutuneet toisiinsa → tarvitaan rakennekaavat
 - ▶ Esim. C_2H_6O voi olla $CH_3 - CH_2 - OH$ tai $CH_3 - O - CH_3$
 - ▶ (Vaihtoehtoinen merkintä: CH_3CH_2OH ja CH_3OCH_3)

5

- ▶ Sidosviivakaava



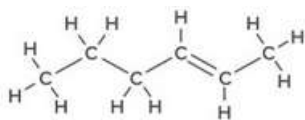
- ▶ Viivakaava



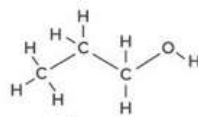
- ▶ vain atomien väliset sidokset ja funktionaaliset ryhmät sekä mahdolliset substituentit
- ▶ Sidosviivojen päissä ja kulmakohdissa on aina hiiliatomi ja tarpeellinen määrä vetyatomeja (hiiliatomeihin liittyneitä vetyatomeja ei merkitä näkyviin)

6

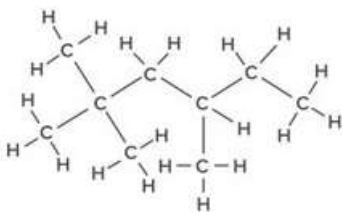
► **Esimerkki:** Muuta molekyylit viivakaavamuotoon.



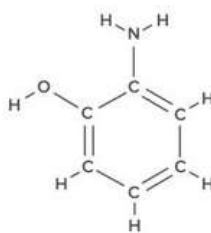
2-hekseeni



1-propanoli



2,2,4-trimetyyliheksaani

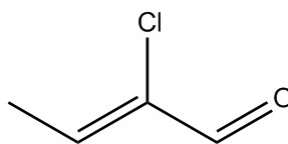
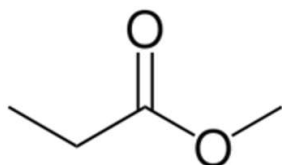
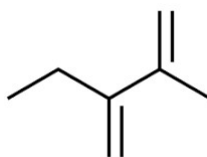


2-aminofenoli

7

7

► **Esimerkki:** Muuta molekyylit sidosviivakaavamuotoon.



8

8