

<https://peda.net/p/myllyviita/spektroskopia>

Spektrometria ja spektroskopia -koulutus

Ari Myllyviita, FM, yhteisöpedagogi (AMK)

**Kemian ja matematiikan lehtori,
Helsingin yliopiston Viikin normaalikoulu**



Aikataulu ja ohjelma



| klo | Teema |
|-------|---|
| 09.00 | Kurssin avaus - kurssin tavoitteet - osallistujien odotukset - aineisto |
| 09.15 | Spektroskopia ja LOPS 2015 ja 2019 |
| 09.30 | Erilaisten menetelmien perusteet Spektrikirjastot opettajan työkaluna |
| 10.00 | Massaspektrometria ja moolimassan määrittäminen |
| 10.30 | TAUKO |
| 10.45 | IR-spektroskopia ja funktionaalisten ryhmien määrittäminen |
| 11.15 | HNMR ja CNMR -spektroskopioiden ja molekyylien atomien (vety ja hiili) erilaiset ympäristöt |
| 11.30 | UV-spektroskopia ja kvantitatiivinen pitoisuuden määrittäminen |
| 12.00 | Kurssin päättäminen |

Aineisto ja reaaliaikainen tieto



Koulutuksen sivusto
(peda.net)

Kemian opetuksen
blogi

Kemian opettajien
vertaisryhmä
(Facebook)

(linkit sähköpostissa
tilaisuuden jälkeen)

Kemian opettajat - vertaisryhmä

Kemian opettajat - vertaisryhmä
Suljettu ryhmä

Tietoja

Keskustelu

Jäsenet

Tapahtumat

Kuvat

Tiedostot

Ryhmän kävijätiedot

Valvo ryhmää

Hae tästä ryhmästä

Pikailiikit

- Matematiikka 20+
- Matematiikan TVT-ryhmä
- Kemian opettajat -vertai...
- Digivoimaa MaFyKe
- Tietokoneet yo-kirj... 20+
- TVT MAOL kouluttajat
- Microsoft Office365... 18
- Tieto- ja viestintätekn... 20+

Tarja Patama
45 min

Miten Marvin Sketchillä saakaan nitror ryhmän vaikka johonkin bentsenirenkaaseen kiinni? 3. kurssilla keksittiin yhtäkkiä monia keinoja, mutta löytyykö nitror ryhmä jostain luettelosta suoraa, ettei tarvitse kikkailla?

Markka Suovanen 5 kommenttia

Tykkää Kommentoi

Ritva Romppanen Laita ensin bentsenirenkaaseen kiinni vaikkapa hiili. Sitten mene hiilen päälle ja kirjoita no2.

Tykkää Vastaa 31 min

Leena Brodikin On siellä se lista ryhmistä, jotka voi liittää. Tietenkin, jos hakee nimellä tnt, niin luulis tulevan.

Tykkää Vastaa 24 min

Petra Luukko 2D:nä ainakin näin - Insert - Groups - Mene hiirellä N:n kohtaan (N=typpi), klikkaa plussasta typpivaihtoehdot esiin - etsi NO - ja klikkaa plussasta sen valikko esiin - valitse NO2 ja klikkaa sulje - mene sen jälkeen siihen kohtaan molekyyliä, mihin haluat ryhmän NO2. (Esim. vaihtaa vedyn tilalle NO2 -ryhmän.)

Tykkää Vastaa 16 min Muokattu

Nelly Heiskanen Joo, sieltä löytyy "template library", jossa muistaakseni "heterocyclic compounds".

Tykkää Vastaa 16 min

Nelly Heiskanen Ainakin näin muistelen löytäneeni ne etsiskellessäni heksaanin tuoli- ja venekonformaatiota.

Tykkää Vastaa 14 min

Ritva Romppanen Marvinissa voi näppäimistöstä suoraan kirjoittaa monia ryhmiä menemällä hiirellä atomin päälle. Ei tarvitse paina monimutkaisesti ryhmää hakea, eikä edes

julkaisu.

EHDOTETUT JÄSENET Pilotta

Kaverit

- Tajja Kujo Lisää jäsen
- Jari Laru Lisää jäsen
- Jake Jarkko Räsänen Lisää jäsen

Näytä lisää

KUVAUS Muokkaa

Kemian opettajaksi valmistuvien ja valmistuneiden verkosto. Tuem... Näytä lisää

TUNNISTEET Lisää merkintöjä

Lisää pari kuvaavaa avainsanaa.

SIJAINNIT

Lisää sijainteja

LUO UUSIA RYHMIÄ

Ryhmien ansiosta jakaminen kavereille, perheenjäsenille ja tiimin jäsenille on helpompaa kuin koskaan.

Luo ryhmä

RYHMIEN VIIMEAIKAISET KUVAT Näytä kaikki

LUKION OPETUSSUUNNITELMAN PERUSTEET 2019



OPETUSHALLITUS
UTBILDINGSSTYRELSEN

Spektroskopia ja LOPS 2015 ja 2019

Opetuksen keskeiset sisällöt (KE3 moduuli, LOPS 2019)



Keskeiset sisällöt

- ***liuoksen valmistus ja laimentaminen sekä standardisuoran sovittaminen pitoisuuden määrittämiseksi***
 - UV-spektroskopian soveltaminen
- ***suhdekaavan ja molekyylikaavan selvittäminen laskennallisesti sekä rakenneisomeri***
 - erilaisen spektrometrisen ja spektroskopisen tiedon soveltamine
- ***tutustuminen spektrien antamaan informaatioon aineen rakenteesta***
 - erilaisen spektrometrisen ja spektroskopisen tiedon soveltaminen

Keskeisiä sisältöjä voidaan tarkastella esimerkiksi seuraavilla kokeellisilla tutkimuksilla: ... liuoksen valmistus ja laimentaminen sekä liuoksen pitoisuuden määrittäminen standardisuoran ja lineaarisen mallin avulla.

- UV-spektroskopian soveltaminen

MAOL:in ”tulkintaohje” opetus- suunnitelman perusteisiin



Tutkimisen taitoja ...

- liuoksen pitoisuuden määrittäminen standardisuoran ja lineaarisen mallin avulla
- joidenkin selvästi erottuvien funktionaalisten ryhmien tunnistaminen IR- ja erilaisten vety-ympäristöjen määrän tunnistaminen H-NMR-spektreistä
- moolimassan arvioiminen MS-spektristä

TVT-taitoja ...

- standardisuoran sovittaminen voidaan tehdä esimerkiksi konsentraatio/absorbanssi tai massa/konsentraatio -dataan

Matemaattisen osaamisen taitoja ...

- suoran sovittamisesta saadun lineaarisen mallin käyttö esimerkiksi tunnettua absorbanssia vastaavan pitoisuuden laskemiseksi

Aineistosta poimittua



Suhdekaava lasketaan alkuaineiden massoista tai näytteen massaprosenttisista koostumuksista, mutta suhdekaavan määrittämistä palamistuotteista ei edellytetä. Molekyylikaava voidaan määrittää käyttämällä MS-spektristä saatavaa moolimassaa.

Spektrien tulkitsemisessa tavoitteena on yhdistää annetut yksinkertaiset molekyylit näiden spektreihin. Tunnistaminen tapahtuu IR- ja H-NMR-spektrien funktionaalisista ryhmistä antaman tiedon avulla.

Spektrometrian käyttöä tarkennetaan tukiaineistossa:

Spektrometrian käsittelyssä paino on spektrien tulkinnalla. opiskelijan pitäisi esimerkiksi tunnistaa moolimassa massaspektristä, mutta fraktioiden tulkintaa ei edellytetä.

- massapektrometria mahdollistaa moolimassan määrittämisen

IR-spektristä opetellaan tunnistamaan yleisiä ja helposti erottuvia sidoksia kuten karbonyylihiilen sidos.

- IR-spektrit mahdollistavat yleisten funktionaalisten ryhmien tunnistamisen, kuten hydroksyyliiryhmän (OH-ryhmä), karbonyyliiryhmän (C=O-ryhmä)

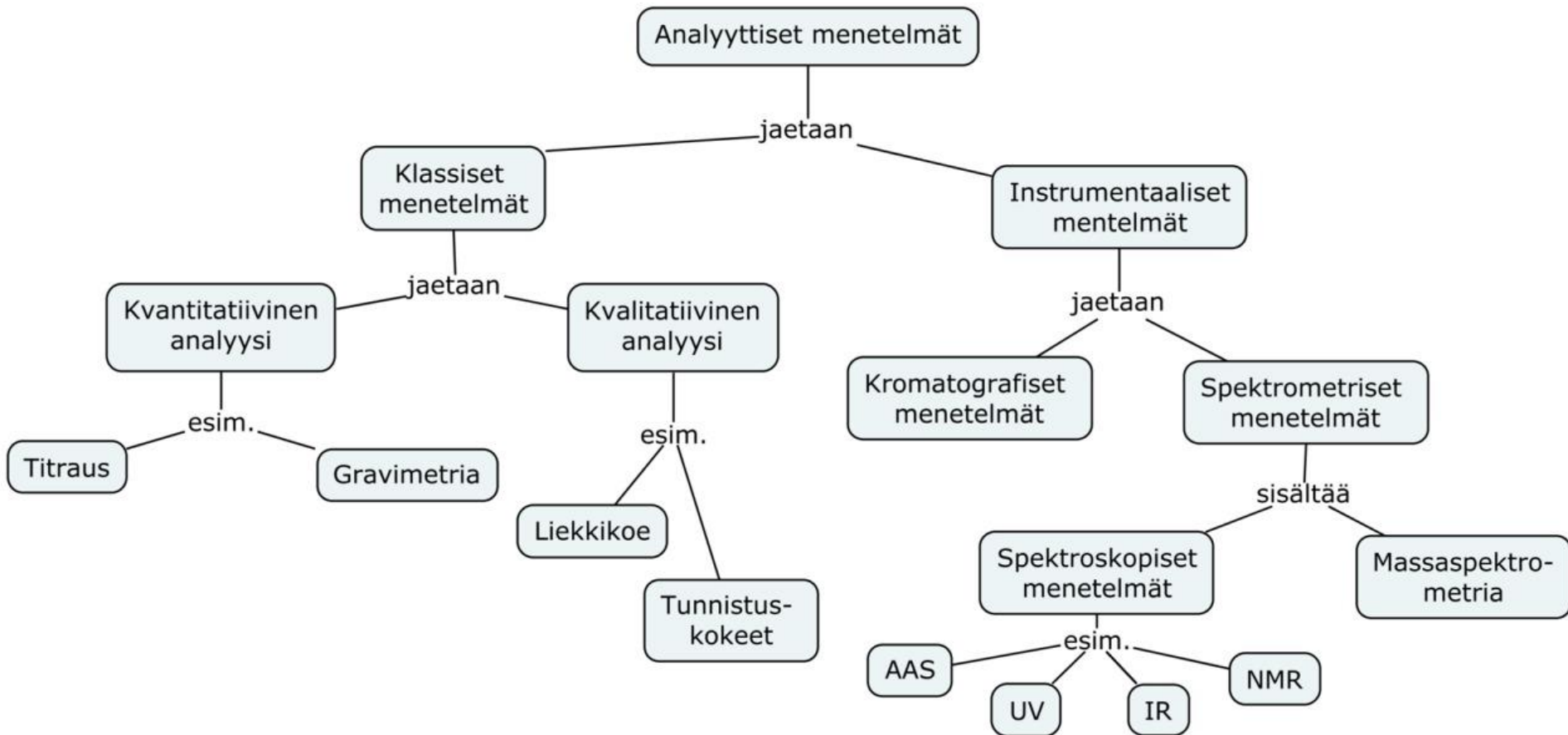
H-NMR-spektristä voidaan käsitellä esimerkkinä jonkin yksinkertaisen yhdisteen kuten etanolin spektrin tulkitseminen. Opiskelijan tulee tunnistaa spektristä erilaisten vety-ympäristöjen määrä ja osata tunnistaa helposti erottuvat funktionaaliset ryhmät.

- HNMR-spektreistä voidaan tulkita tiettyjen vetyjen ympäristöä ja joukko funktionaalisia ryhmiä spektrioppiin sijainnin perusteella

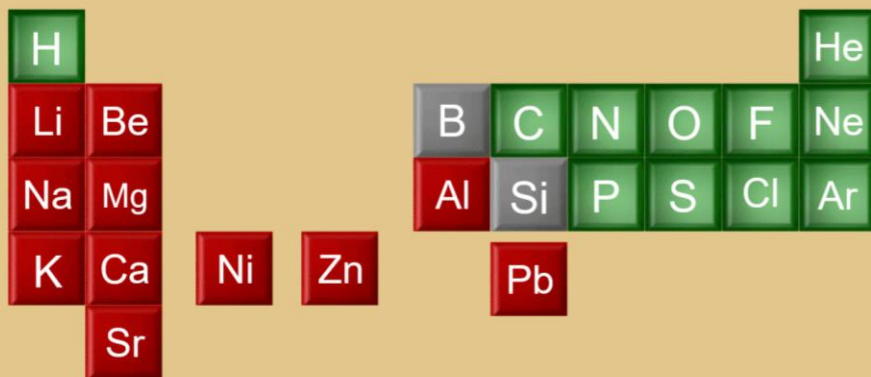


Eri-laisten spektrometristen ja spektroskooppisten menetelmät perusteet

Spektrometria ja spektroskopia



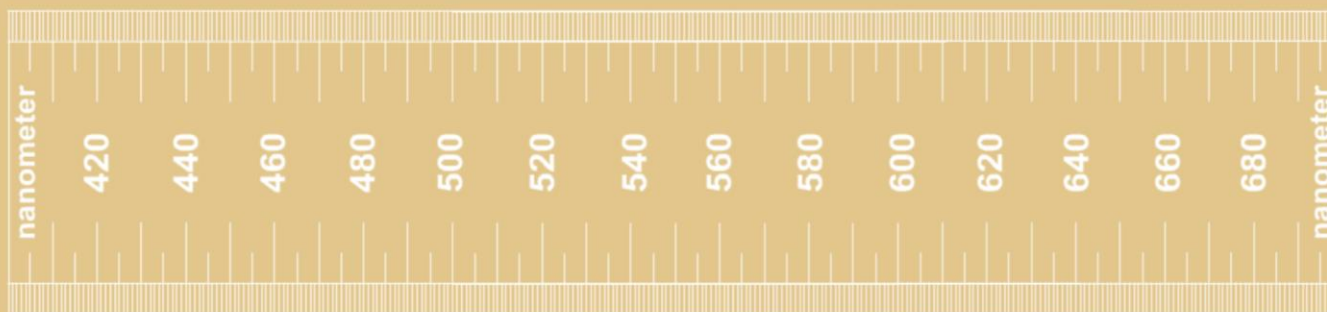
<https://chemicalthinking.xyz/emission/emission.html>



Main Emission Lines (nm)

Hydrogen

656.3, 486.1, 434.0,
410.2





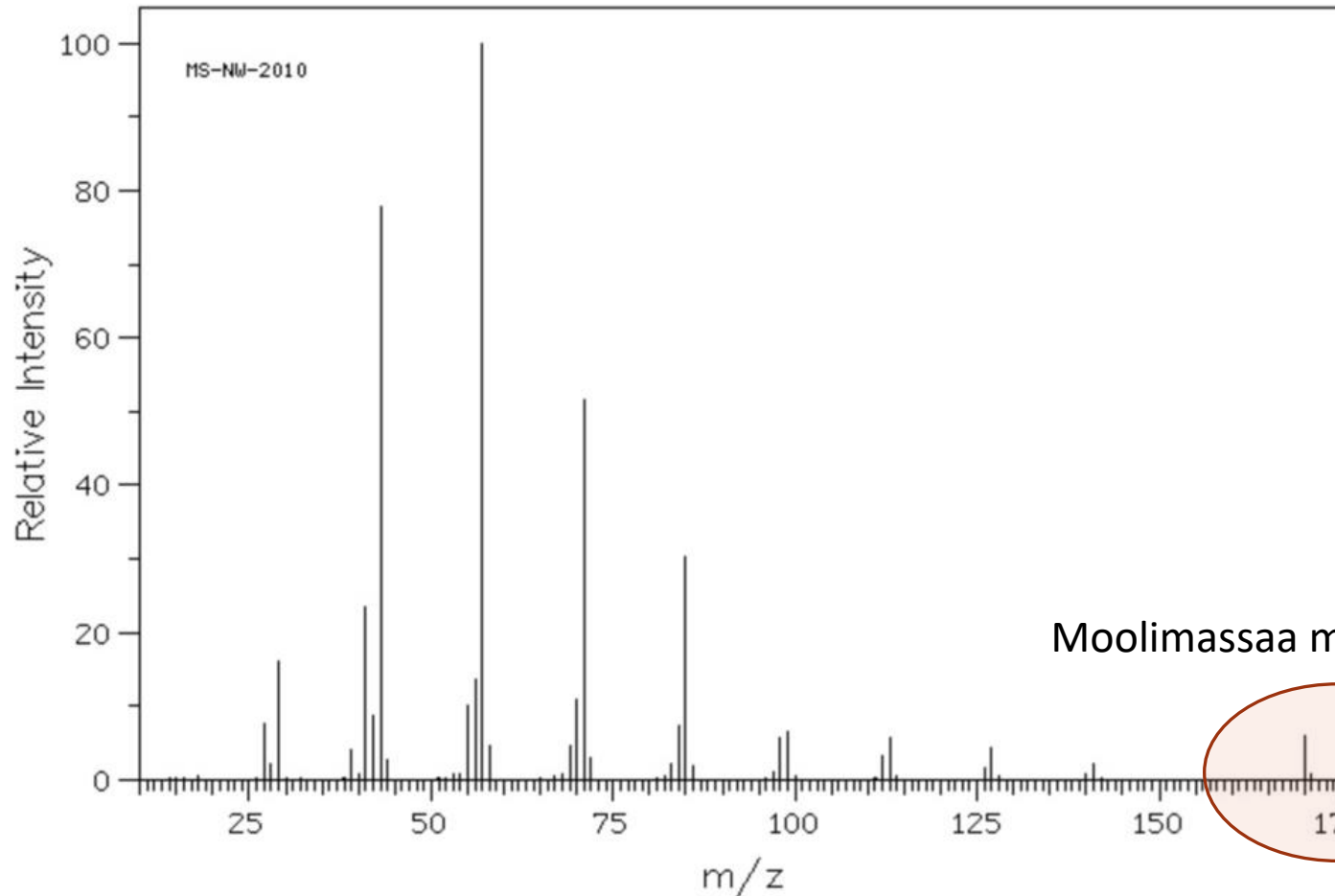
Massaspektrometria

Massaspektrin tulkintaa



nonane
C₉H₂₀

(Mass of molecular ion: 128)

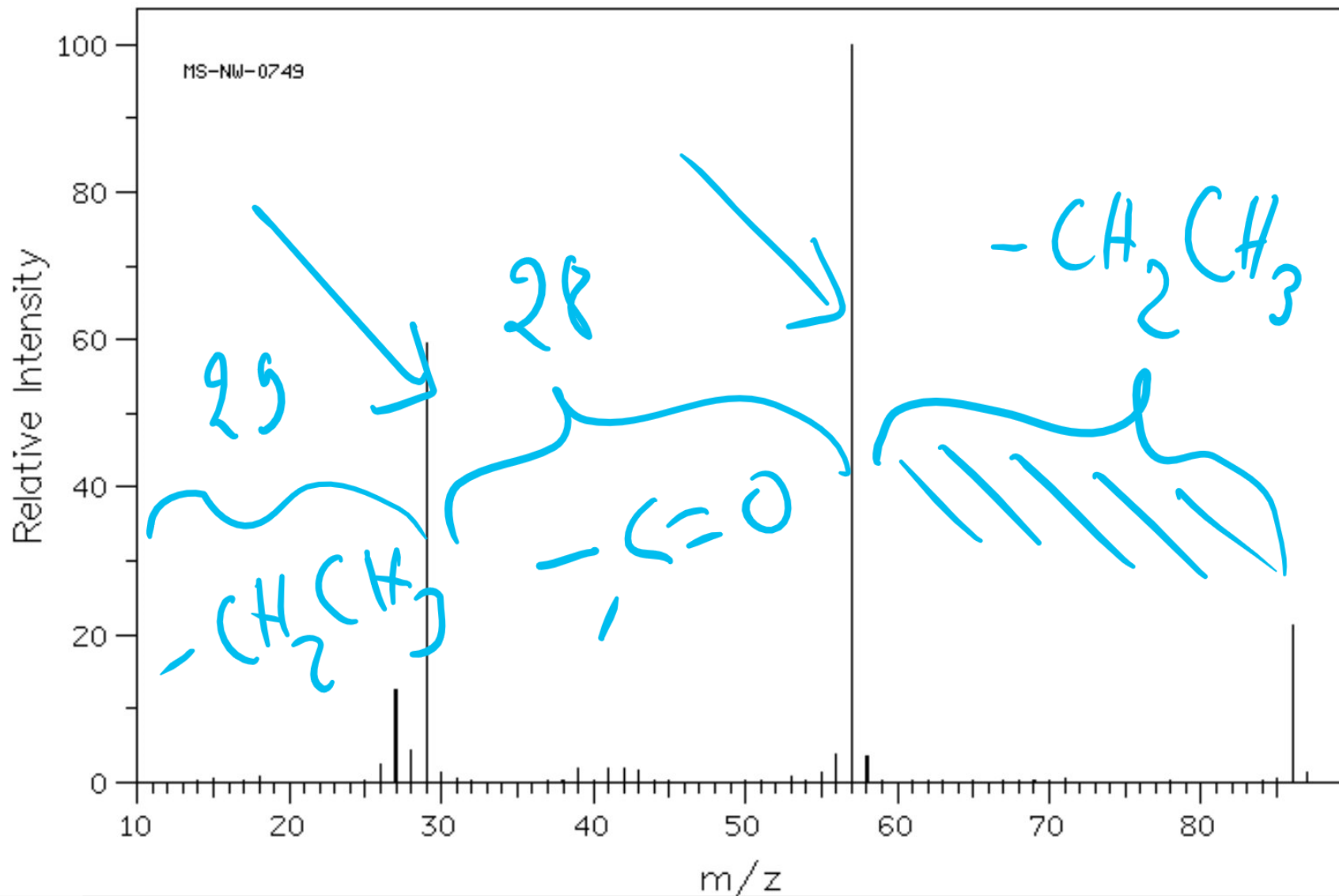


Moolimassaa määrittävä piikki?

SDBS-Mass

MS-NW-0749
3-pentanone
C₅H₁₀O

SDBS NO. 529
(Mass of molecular ion: 86)



Elemental Analysis



Molecular weight: 118,176

Exact molecular weight: 118,099379691

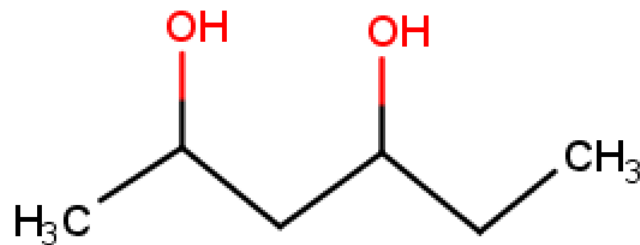
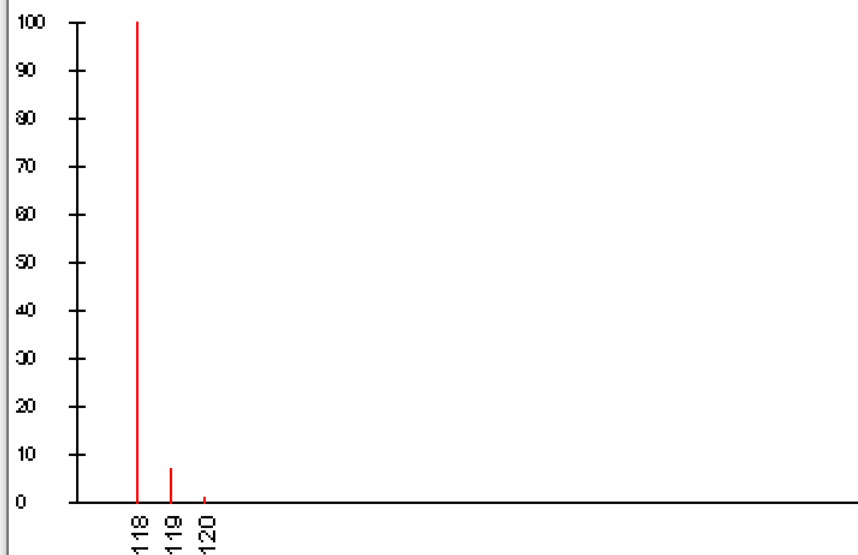
Formula: $C_6H_{14}O_2$

Composition: C (60,98%), H (11,94%), O (27,08%)

Atom count: 22

Mass spectrum [m/z: relative abundance]:

118: 1.00 119: 0.07 120: 0.01





Eri massaspektrejä – C₆H₁₂O – 100 g/mol

SDBS-Mass

MS-NW-1225
3-hexanone

SDBS NO. 4760

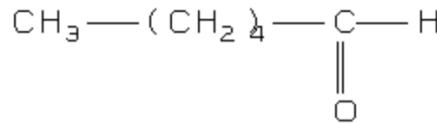
base ion: 100)

SDBS-Mass

MS-NW-0941

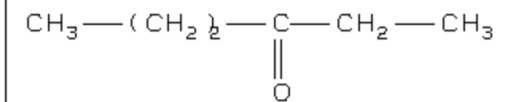
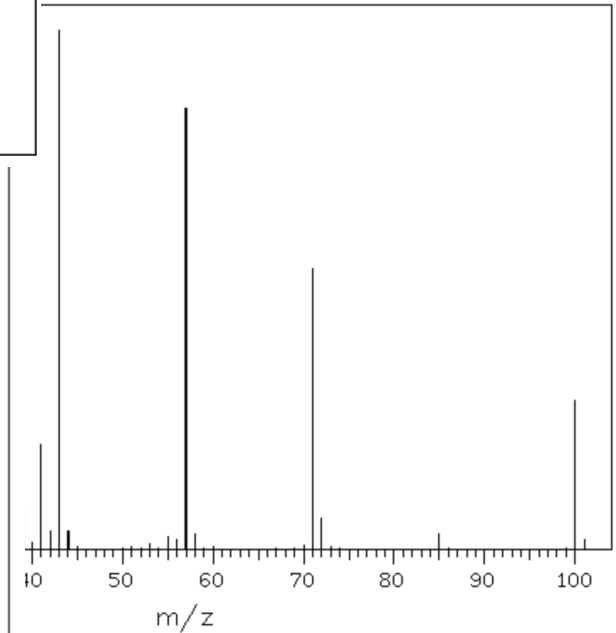
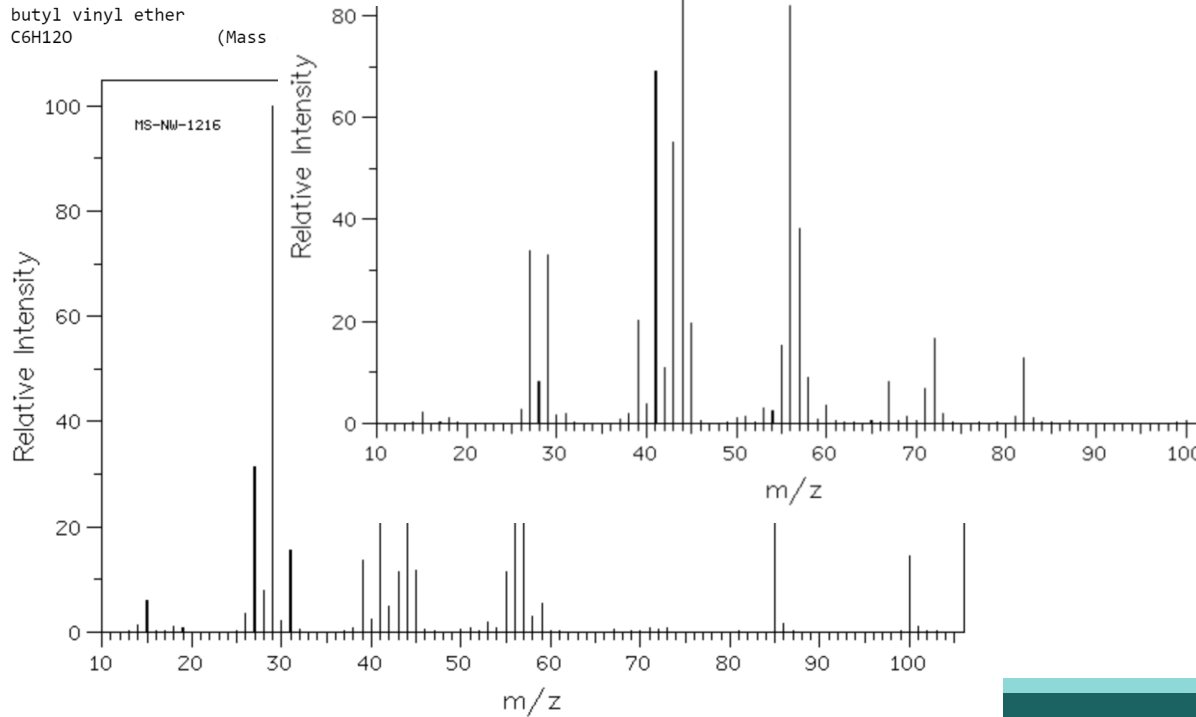
SDBS NO. 1937

molecular



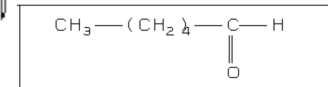
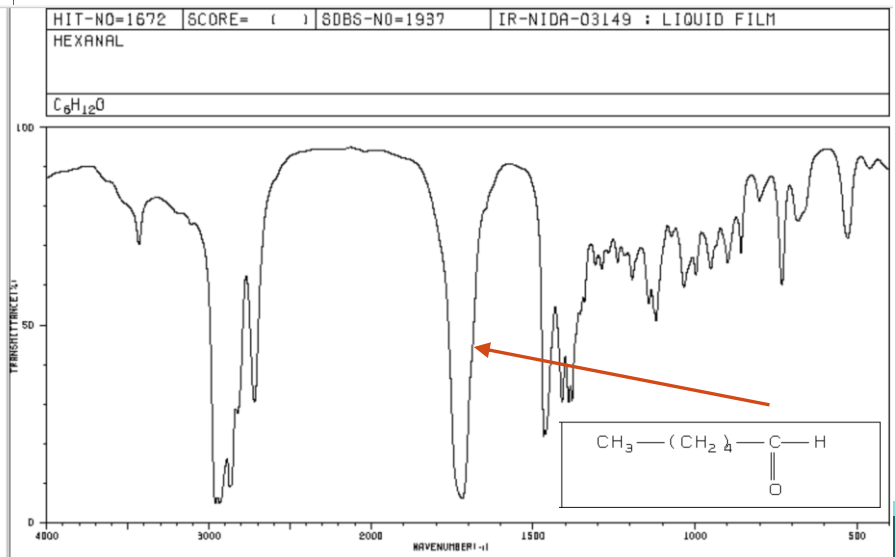
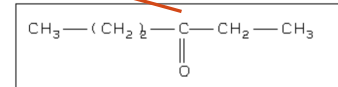
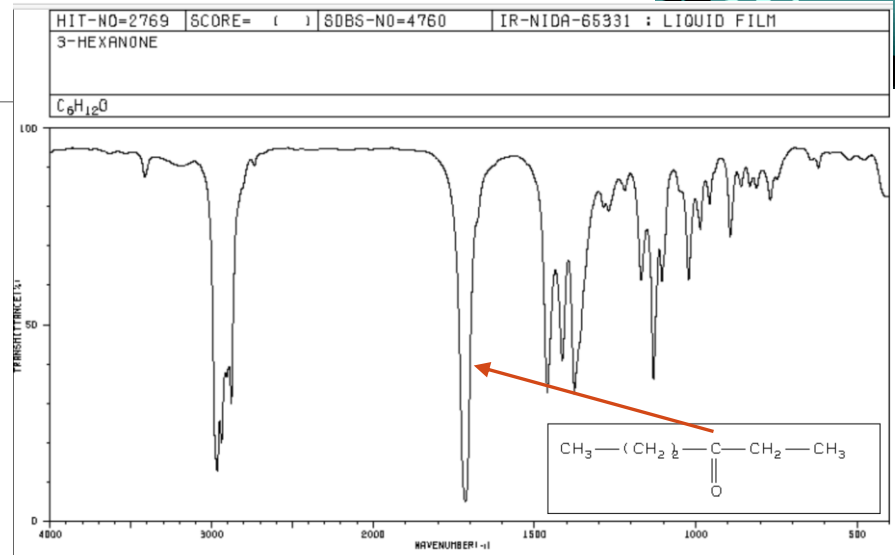
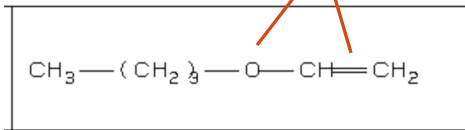
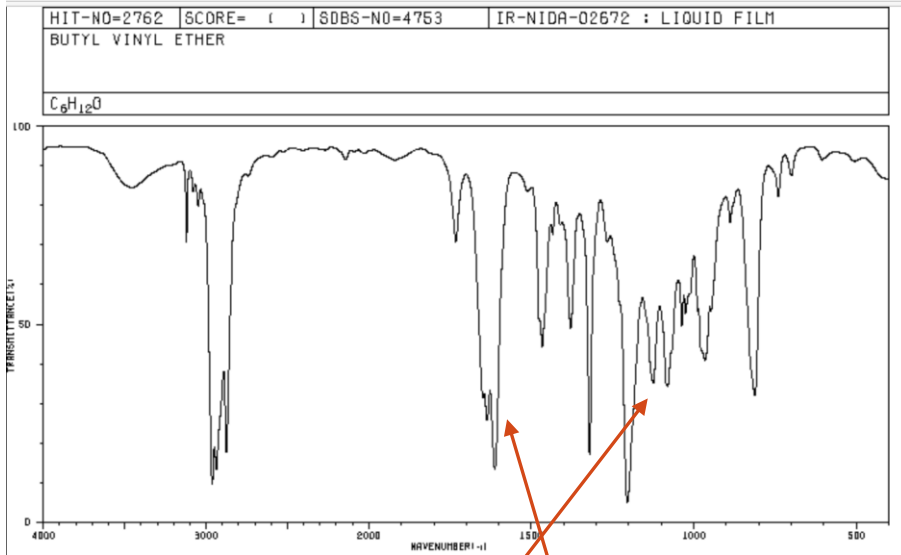
butyl vinyl ether
C₆H₁₂O

(Mass





Eri IR-spektrejä – C₆H₁₂O – 100 g/mol



Tehtäviä – määritä empiirinen kaava



1.tehtävä: C 60,98%, H 11,94%, O 27,08%

2.tehtävä: C 45,70%, H 10,35%, N 13,32%, O 30,43%

3.tehtävä: C 60,00%, H 4,48%, O 35,52%

4.tehtävä: C 63,58%, H 4,67%, O 31,76%

Suhteellinen atomimassa
"moolimassa"

| | | | |
|----------|----------|----------|----------|
| 6 | 7 | 8 | 9 |
| C | N | O | F |
| Hiili | Typpi | Happi | F |
| 12,011 | 14,007 | 15,999 | 1 |
| 11 | 15 | 16 | 19 |

Ratkaisu

1. Lasketaan alkuaineen massa
2. Lasketaan ainemäärät (moolimassa avulla)
3. Lasketaan ainemääräsuhteet
4. Jaetaan pienimmällä ainemäärällä (ko. aineen ainemäärä silloin 1)
5. Pyöristetään ainemääräsuhteet kokonaisluvuiksi

Tehtäviä – määritä molekyylikaava

1.tehtävä: C 60,98%, H 11,94%, O 27,08%

2.tehtävä: C 45,70%, H 10,35%, N 13,32%, O 30,43%

3.tehtävä: C 60,00%, H 4,48%, O 35,52%

4.tehtävä: C 63,58%, H 4,67%, O 31,76%

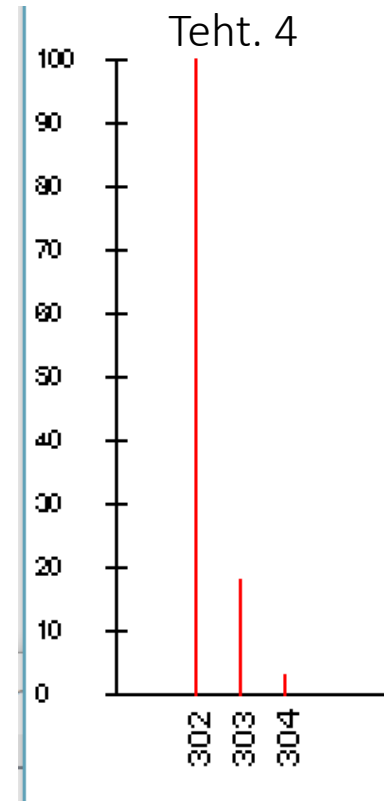
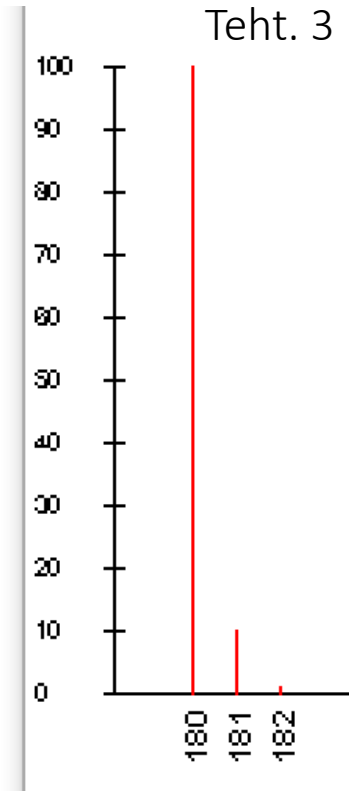
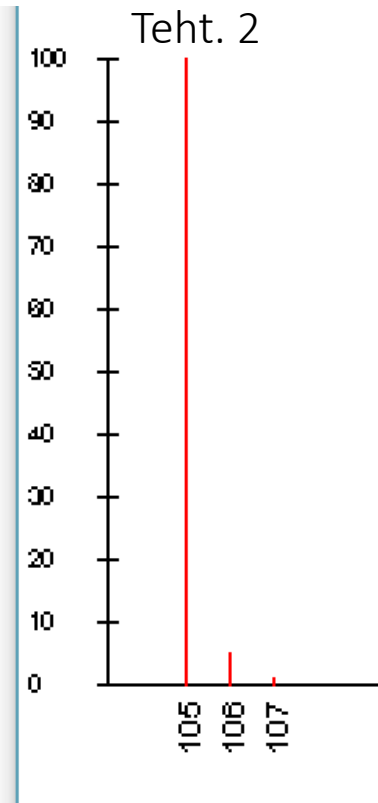
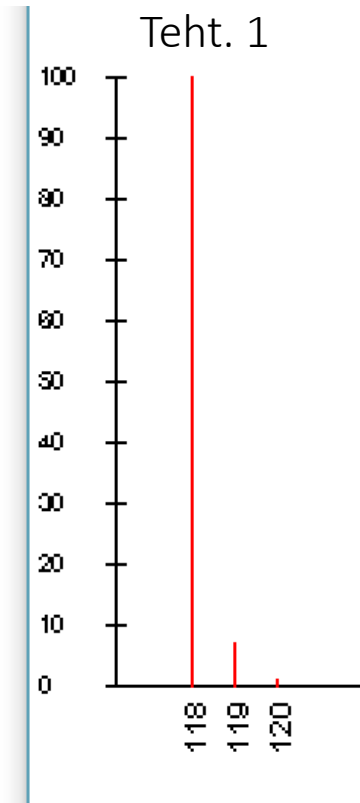


1.tehtävä: C_3H_7O

2.tehtävä: $C_4H_{11}NO_2$

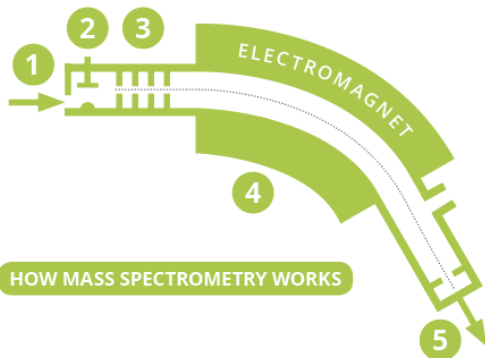
3.tehtävä: $C_9H_8O_4$

4.tehtävä: $C_8H_7O_3$



A GUIDE TO INTERPRETING MASS SPECTRA

Mass spectrometry is an analytical technique that allows us to measure the masses of atoms and molecules. The most important peak in a mass spectrum is the molecular ion peak, which can be used to determine the mass of the molecule, but fragment ions can also provide information on chemical structure.



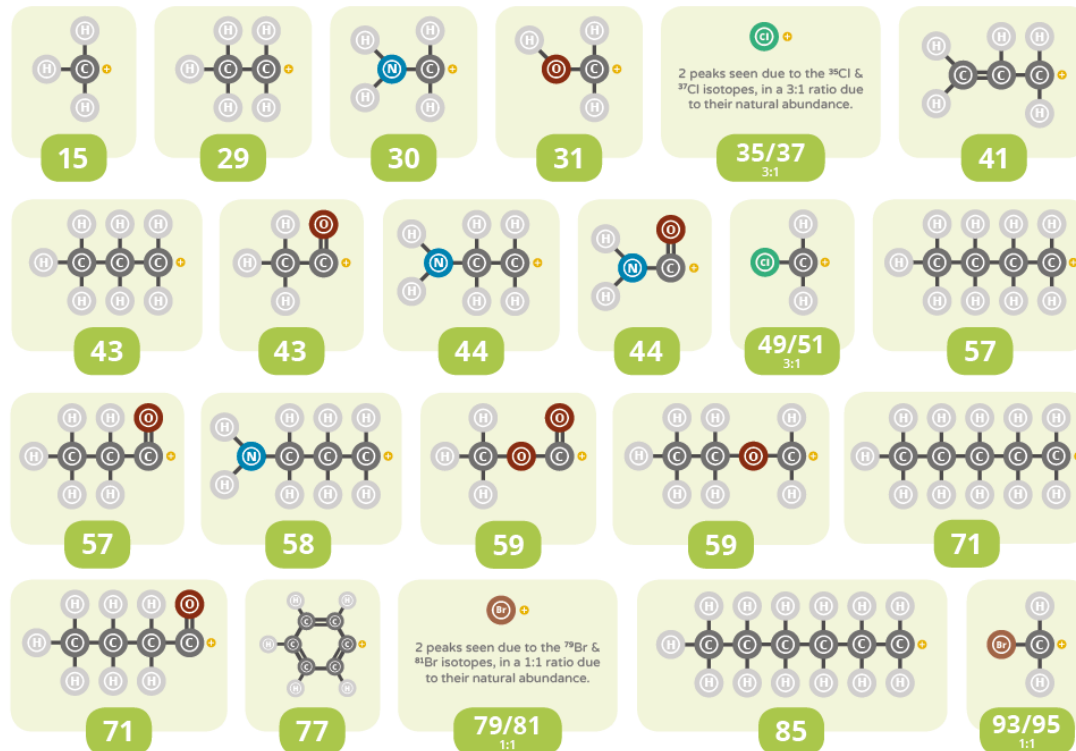
1 The sample is introduced to the mass spectrometer. Only very small samples are required. A heater is often present to vapourise the sample.

2 An electron gun ionises molecules in the sample by knocking out electrons, producing positive ions. Some molecules break into smaller ions & fragments.

3 The positive ions generated are passed through an electric field which accelerates them into a magnetic field generated by an electromagnet.

4 As the positive ions pass through the magnetic field, they are deflected. Lighter ions are deflected more than heavier ions, as are those with higher charges.

5 The positive ions hit a charged plate & accept electrons, creating a signal. The more ions that hit, the greater the signal. The output is a complex stick diagram.



Above are shown a selection of common fragment ions seen in mass spectra, along with their masses. Note that the structures shown are general representations, and it can also be possible for isomeric structures (those with the same constituent atoms, but a different structure) to cause the peaks in spectra. There are also many more fragments possible than those shown, but knowledge of these should suffice to interpret spectra of most simple molecules.



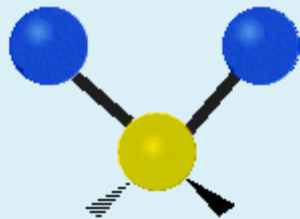
© COMPOUND INTEREST 2015 - WWW.COMPOUNDCHEM.COM | Twitter: @compoundchem | Facebook: www.facebook.com/compoundchem
This graphic is shared under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives licence.



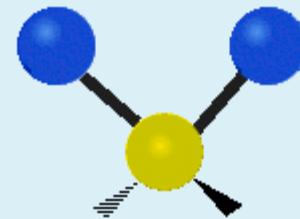


IR-spektroskopia

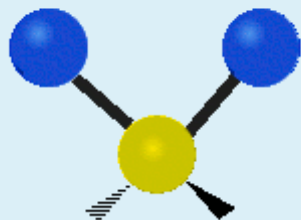
IR-spektroskopian perusteita



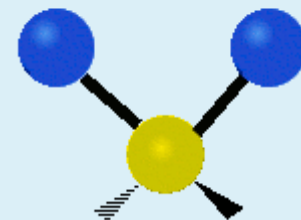
Epäsymmetrinen venytys



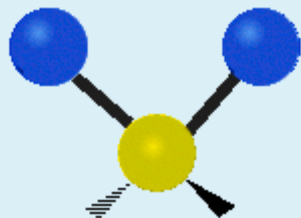
Keinuva (rocking)



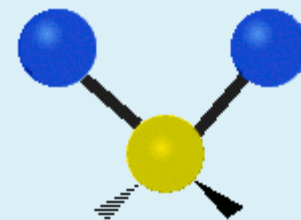
Sakset (scissoring)



Symmetrinen venytys



Epäsymmetrinen heiluri (twisting)



Symmetrinen heiluri (wagging)

Spektrikirjasto

<http://sdfs.db.aist.go.jp>



Spectral Database for
Organic Compounds SDFS

Japanese

Introduction

Disclaimer

HELP

Contact

What's New

RIO-DB

FAQ

LINK

AIST

SDFS Compounds and Spectral Search

Compound Name:

match partial

Molecular Formula:

C, H, then the other elements are alphabetical order, "%," for the wild card

Molecular Weight:

 to

Numbers between left and right columns
Up to the first place of a decimal point

CAS Registry No.:

"%," for the wild card.

SDFS No.:

"%," for the wild card.

Atoms:

C(Carbon) to

H(Hydrogen) to

N(Nitrogen) to

O(Oxygen) to

F(Fluorine) to

Cl(Chlorine) to

Br(Bromine) to

I(Iodine) to

S(Sulfur) to

P(Phosphorus) to

Si(Silicon) to

Numbers between left and right columns.

Spectrum:

Check the spectra of your interest.

- MS IR
 ¹³C NMR Raman
 ¹H NMR ESR

IR Peaks(cm⁻¹):

Allowance ±

"," or space is the separator for multiple peaks.

Use "-", to set a range.. eg. 550-750,1650 3000-

Transmittance < %

¹³C NMR Shift(ppm):

Allowance ±

"," is the separator for multiple shifts, eg. 129.3,18.4,...

No shift regions:

Range defined by two numbers separated by a space, eg. 110 78,...

¹H NMR Shift(ppm):

Allowance ±

No shift regions:

MS Peaks and intensities:

Mass and its intensity are a set of data separated by a space, eg. 110 22,...

Haku nimellä (engl), molekyylipainolla tai eri alkuaineiden atomien lukumäärän mukaan

Search

Clear

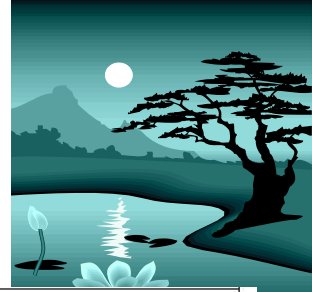
Hit: 20hit

Sort by: Molecular Weight

Ascending Order

Result Display type: with Structures

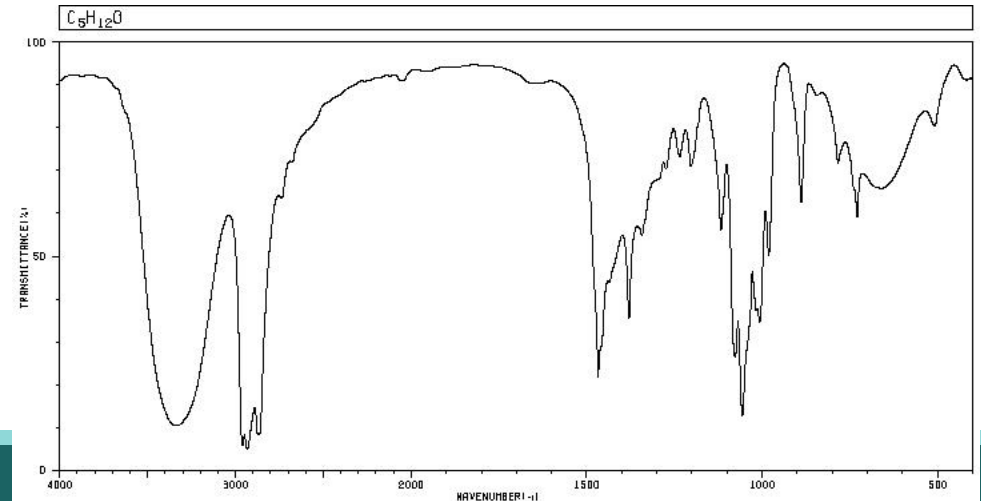
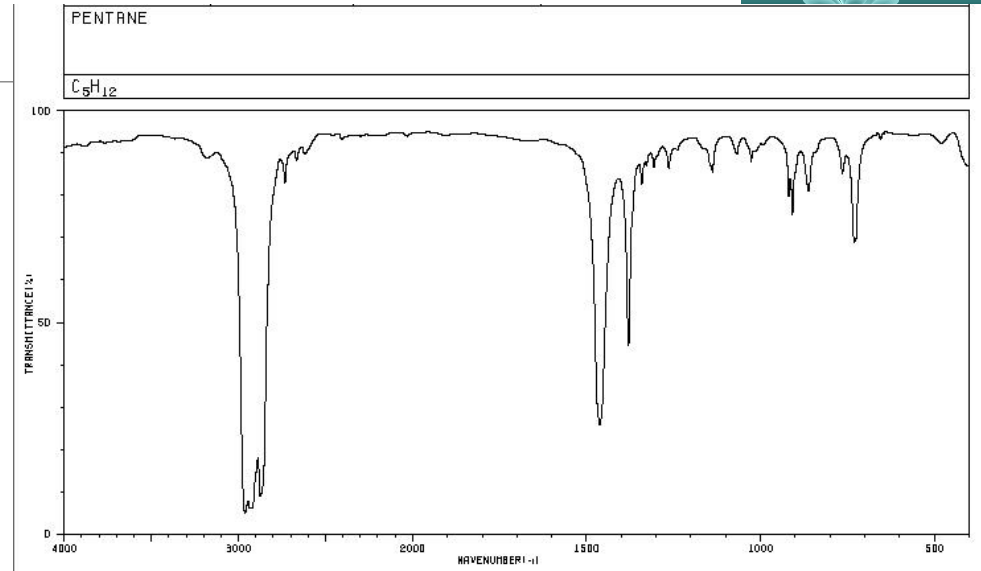
Työ 1 – Spektrikartan laadinta



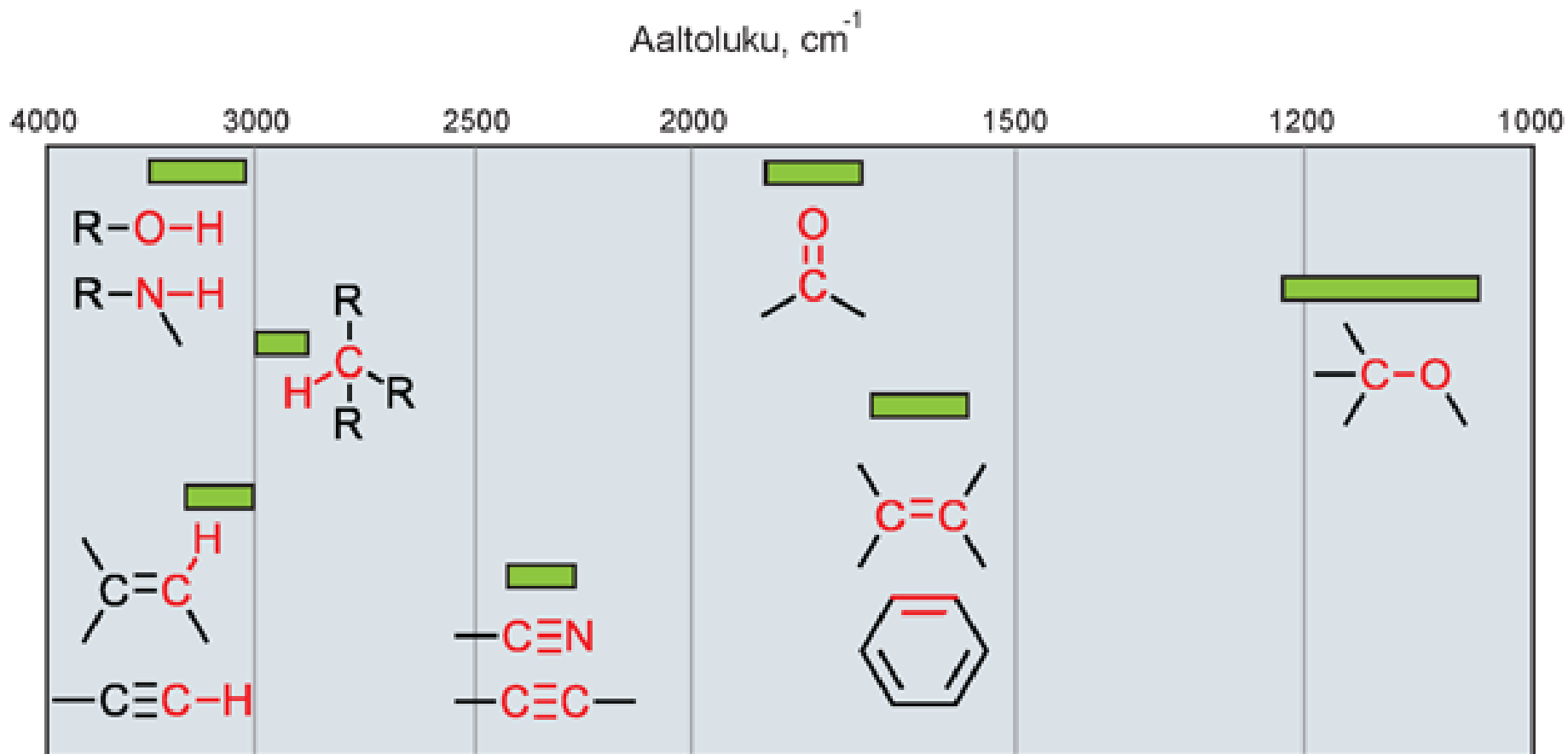
Tunnista yhdisteelle (yhdisteryhmälle) tyypilliset spektriviivat (piikit).
Aineisto alla.

Laadi oma **spektritulkintamalli - graafinen esitys spektripohjasta**, johon on piirretty esim. funktionaalisten ryhmien tai molekyylien rakenneosien tyypilliset spektripiikkien paikat.

<https://peda.net/p/myllyvii ta/spektroskopia/data>

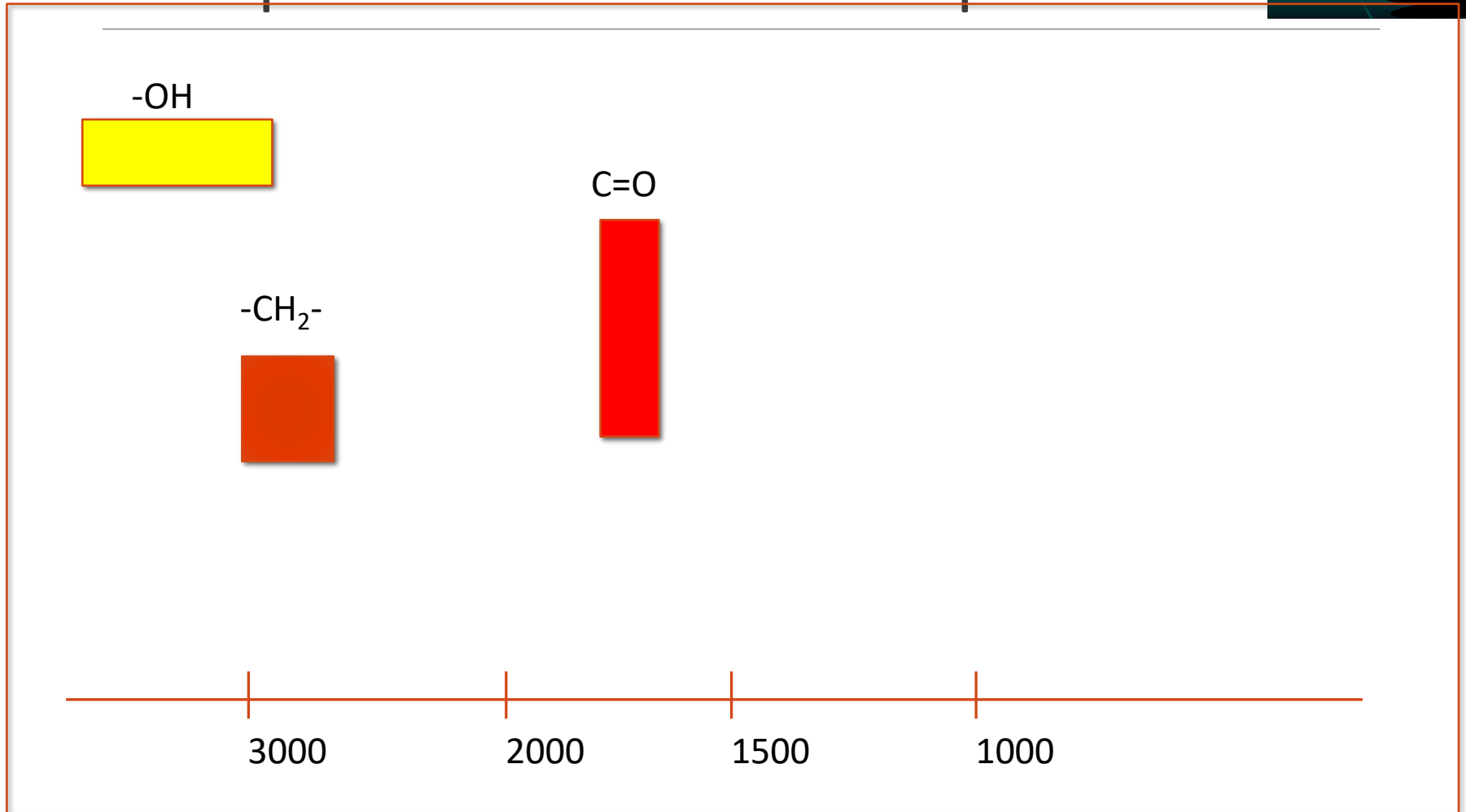


IR-spektroskopiaa



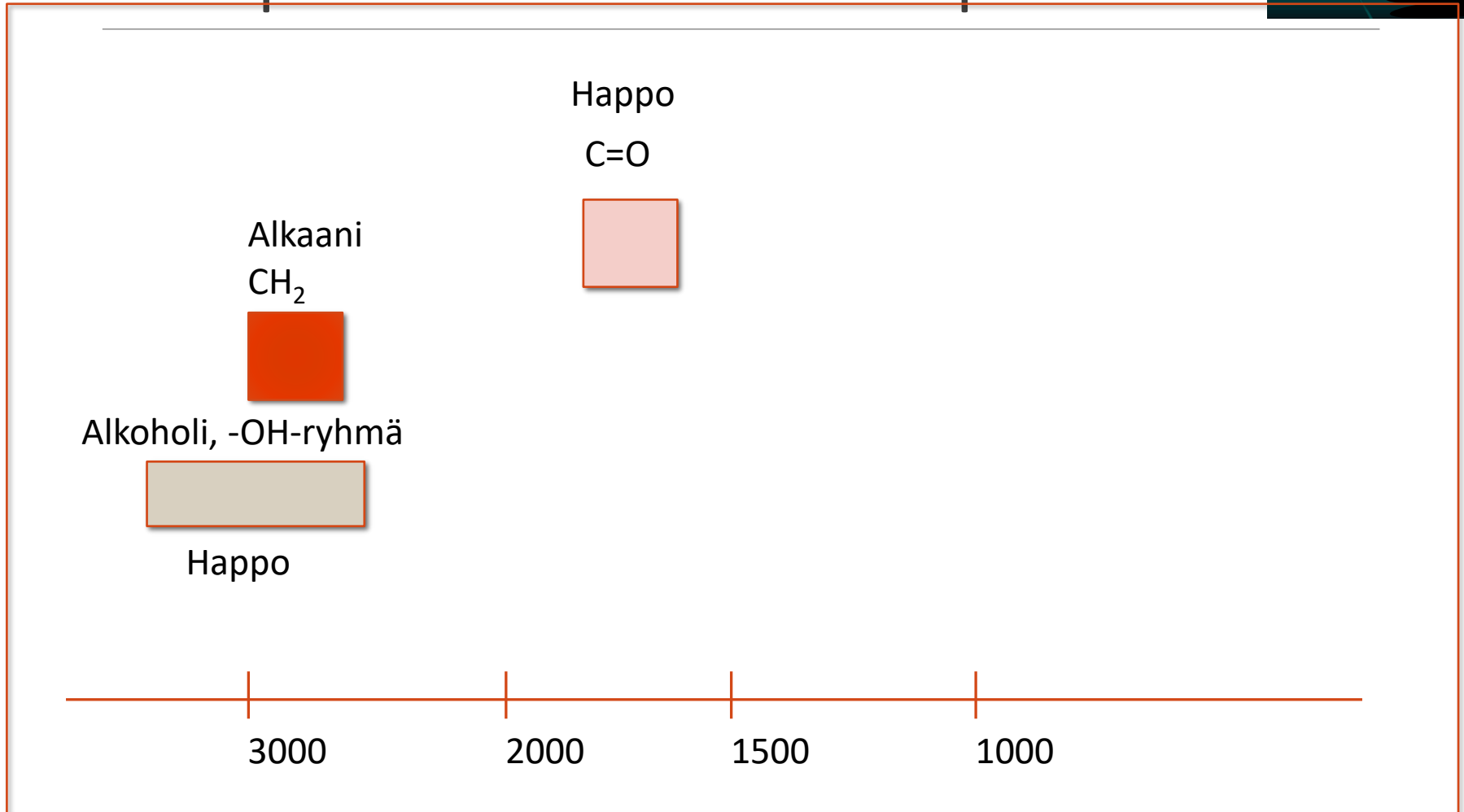


IR-spektrin tulkinta-apuväline

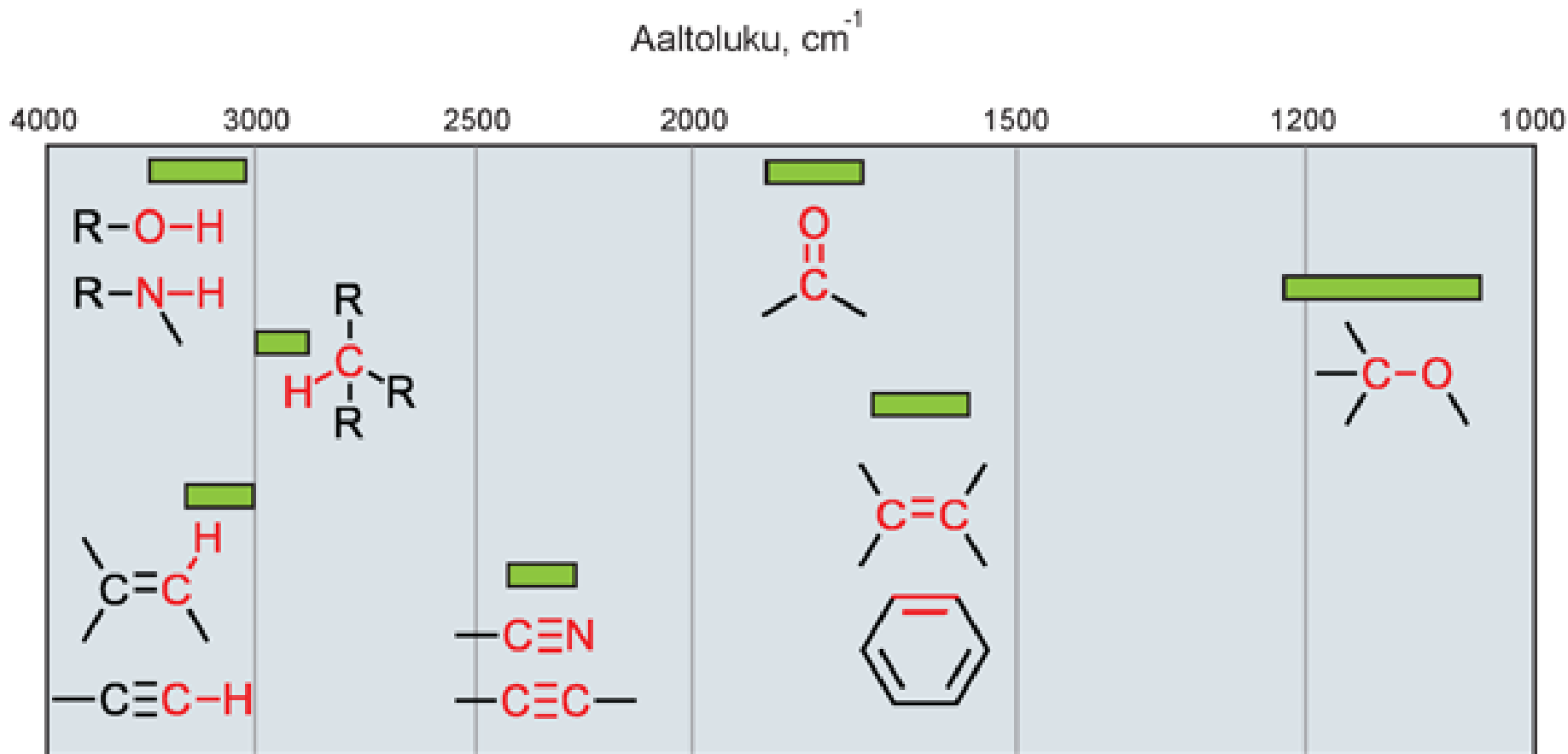


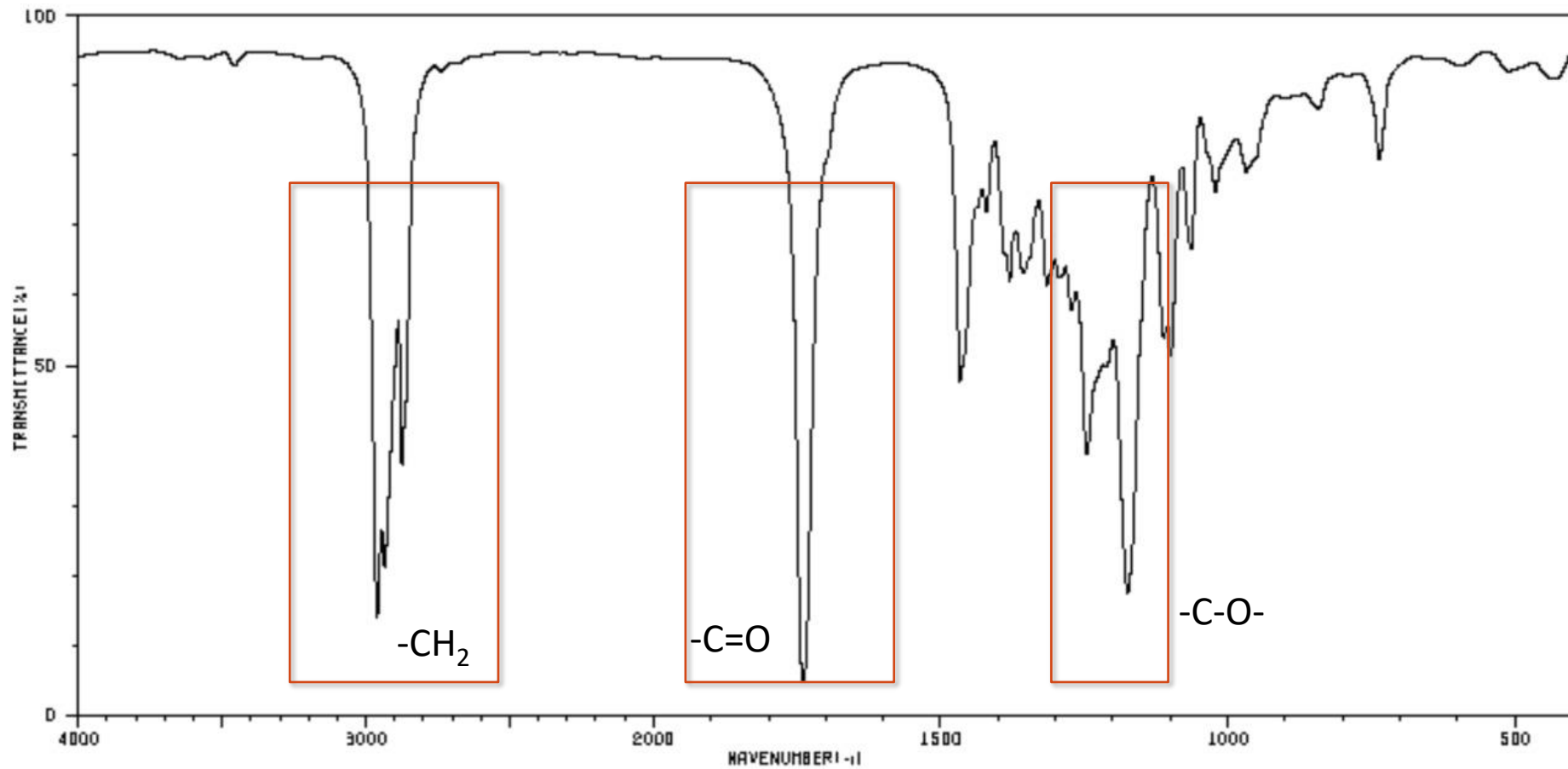


IR-spektrin tulkinta-apuväline



IR-spektroskopiaa





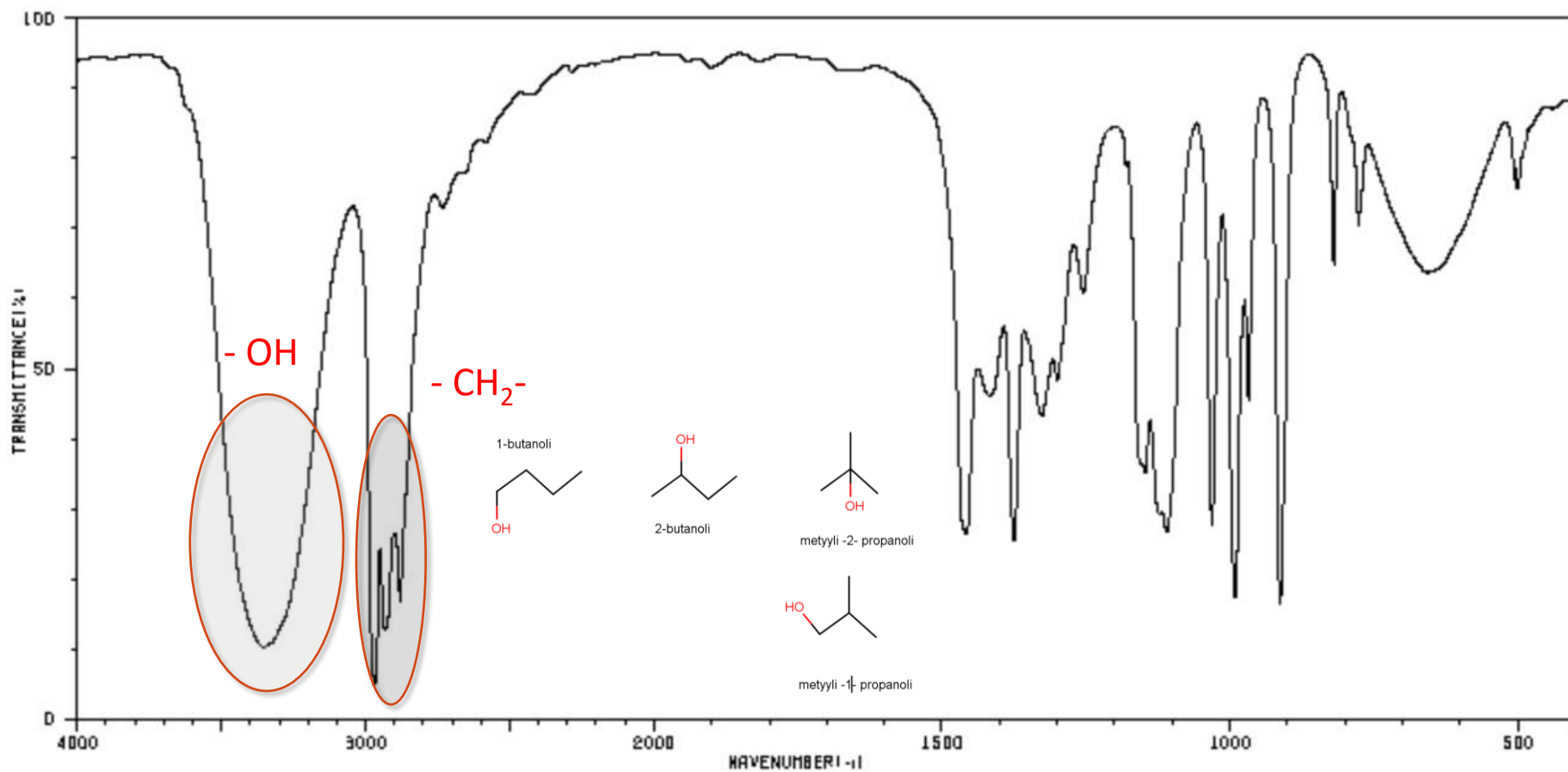
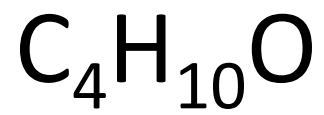
IR-spektritulkintaa

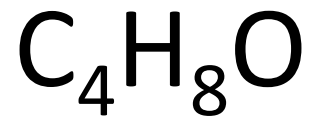
Spektrien tulkinta

Orgaanisten sidosten venytysvärähtelyjen tyypillisiä alueita IR-spektroskopiassa

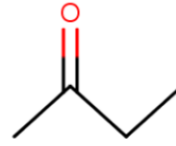
| Sidos | Yhdistetyyppi | Aaltoluku cm^{-1} |
|--------------|--|----------------------------|
| C - I | jodialkaani | 490–620 |
| C - Br | bromialkaani | 500–600 |
| C - Cl | kloorialkaani | 600–800 |
| C - F | fluorialkaani | <u>1 000–1 400</u> |
| C - O | alkoholi, esteri, eetteri | <u>1 050–1 410</u> |
| C = C | alkeeni | <u>1 610–1 680</u> |
| C = O | aldehydi, ketoni, karboksyylihappo, esteri | <u>1 700–1 750</u> |
| C \equiv C | alkyyini | <u>2 100–2 260</u> |
| O - H | karboksyylihappo | <u>2 500–3 300</u> |
| C - H | alkaani, alkeeni, aromaattinen | <u>2 850–3 100</u> |
| C - H | alkyyini | $\approx 3\ 300$ |
| O - H | alkoholi, fenoli | <u>3 200–3 600</u> |



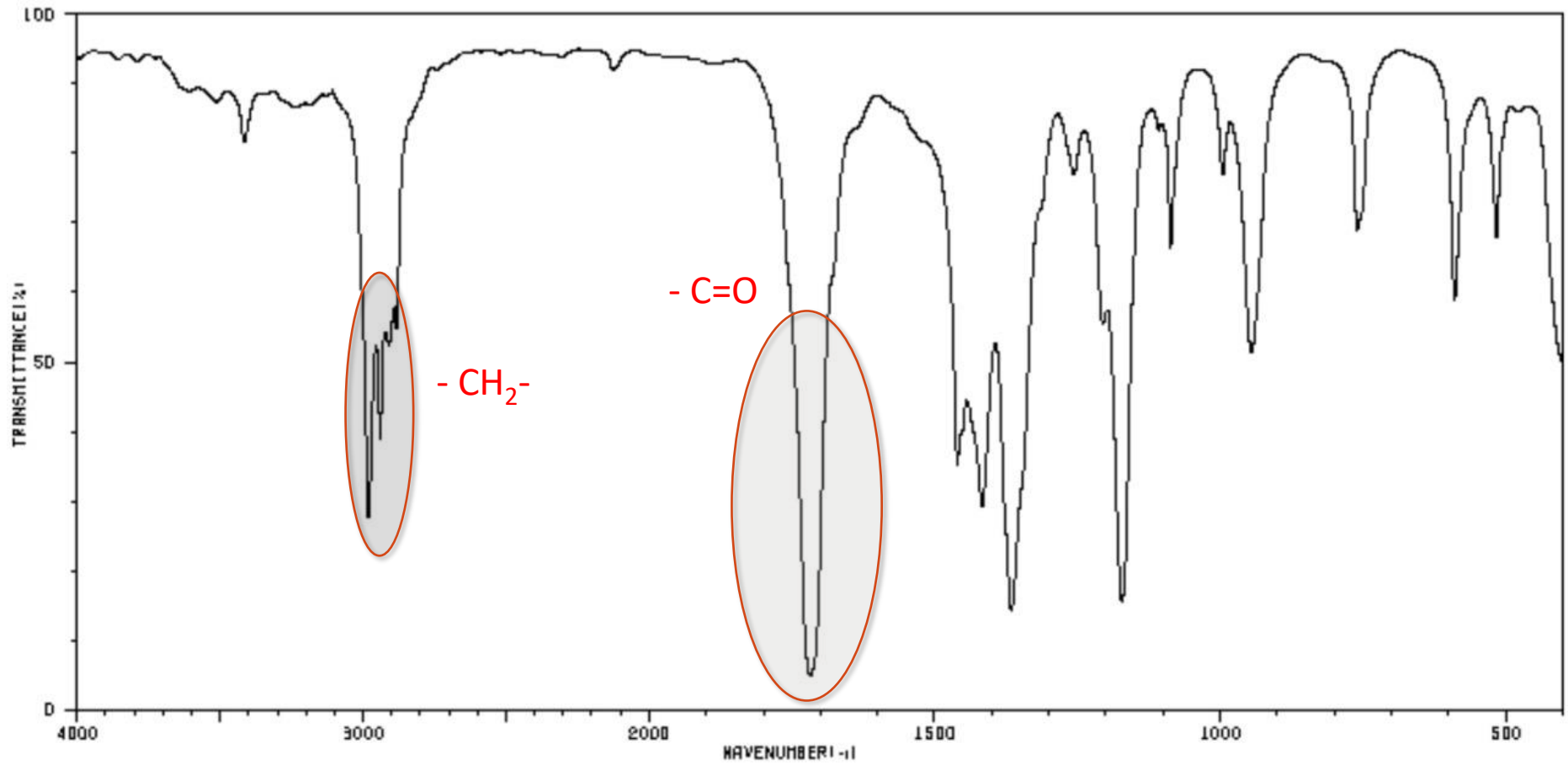
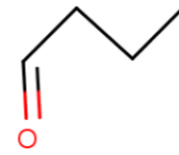


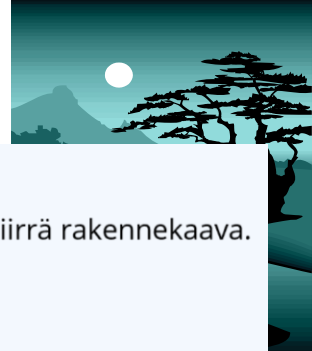


butanoni



butanaali



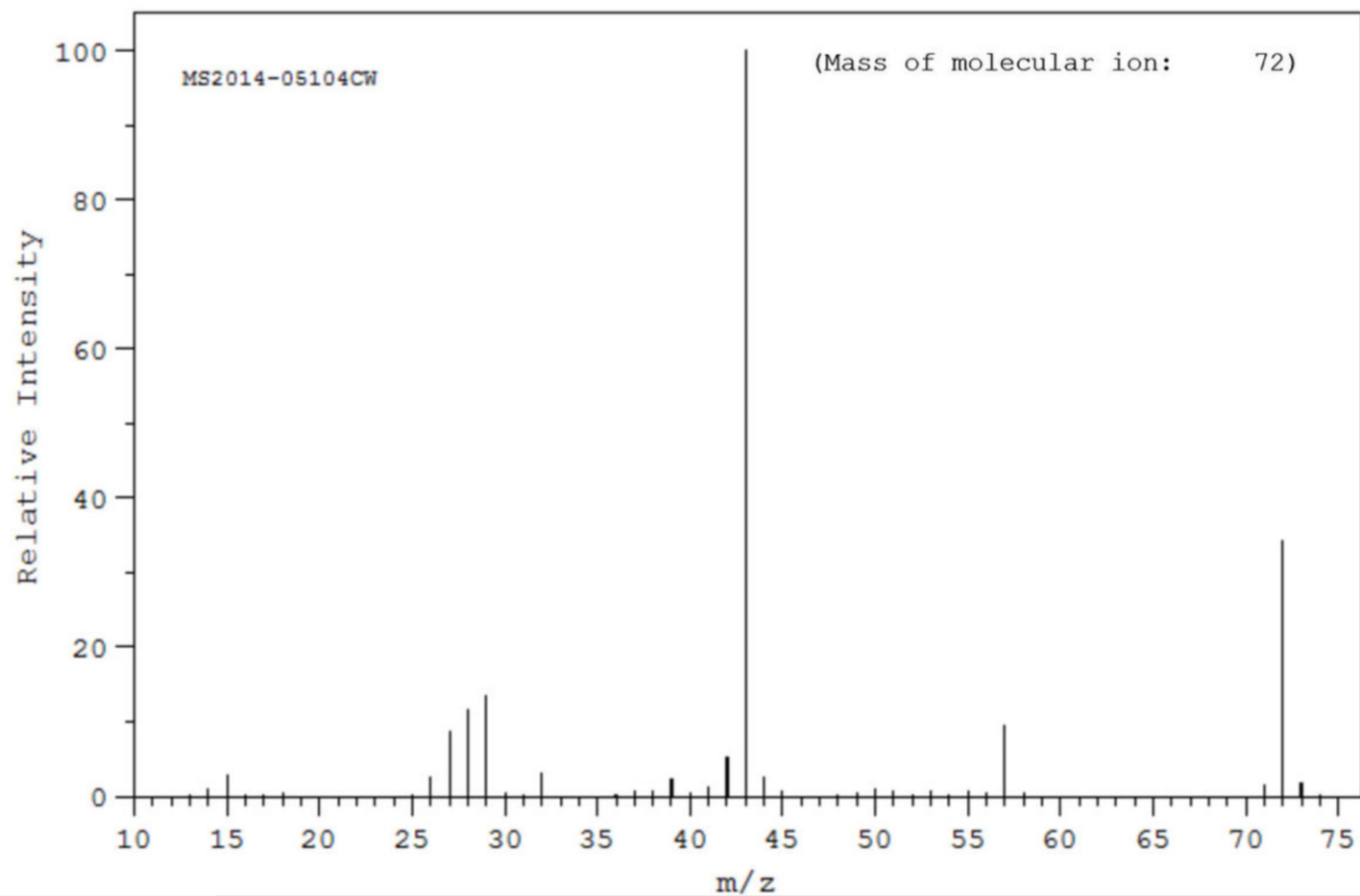


Tunnista aine ja esitä rakennekaava

Tiedetään yhdisteen alkuaineiden osuudet molekyyllissä. Alla lisäksi aineen massaspektri ja IR-spektri. Tunnista aine ja piirrä rakennekaava.

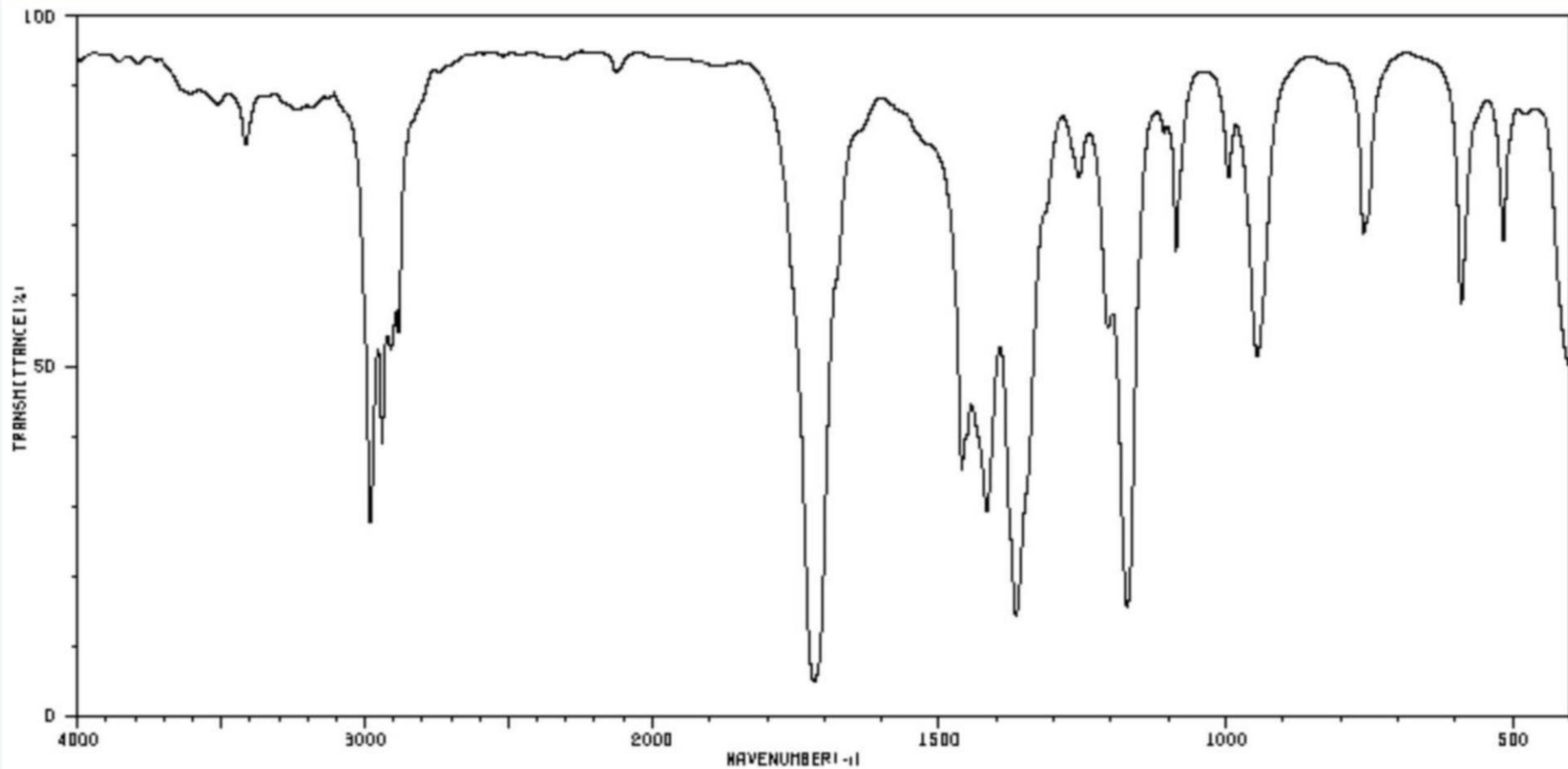
Alkuaineosuudet: hiili C 66,7%, vety H 11,1% ja happi O 22,2% (massaprosentteja).

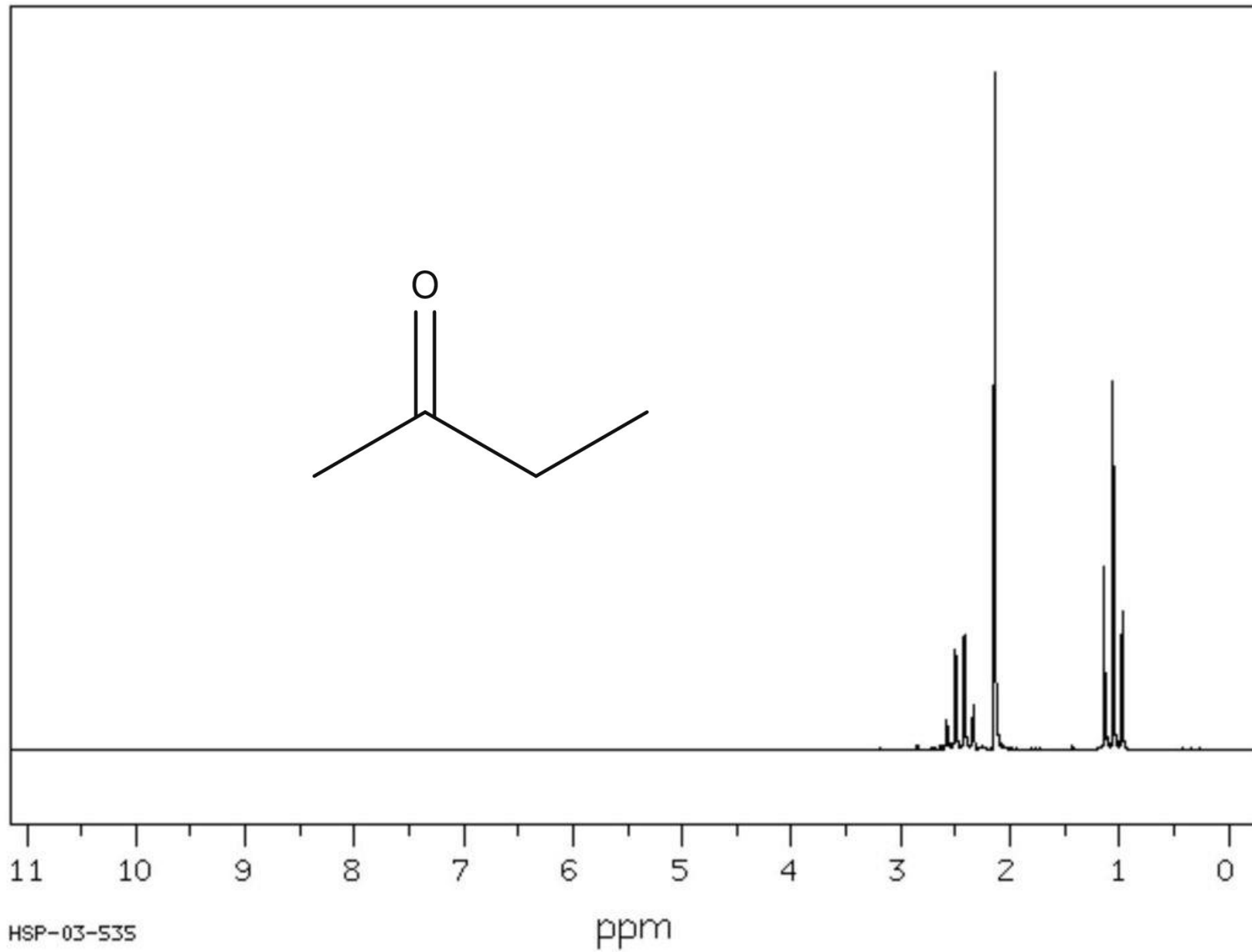
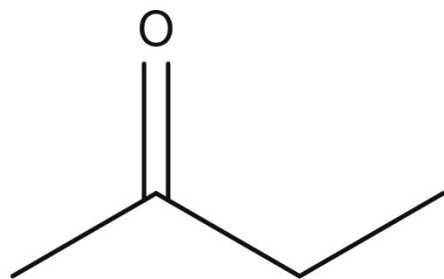
Massaspektri:





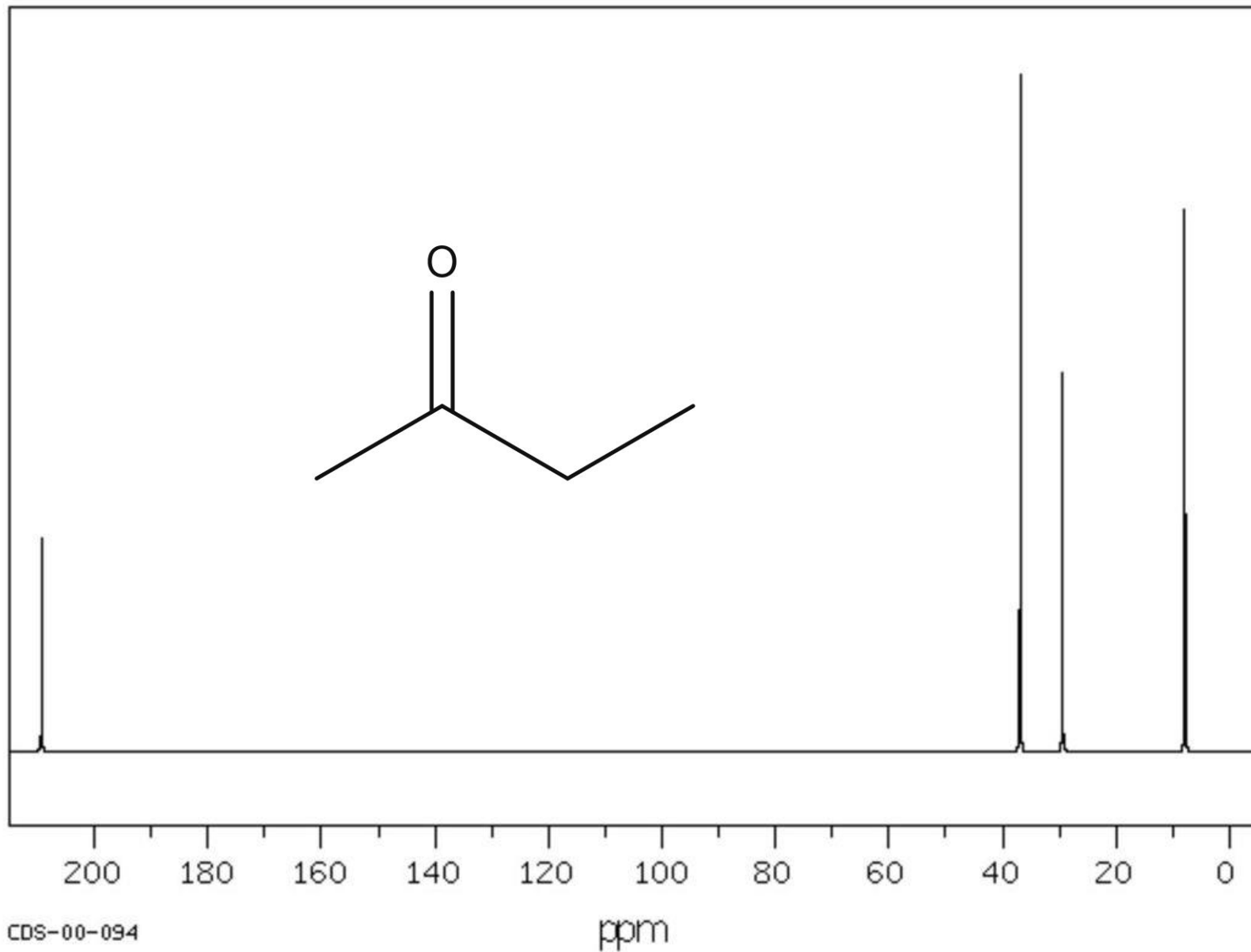
IR-spektri:





HSP-03-535

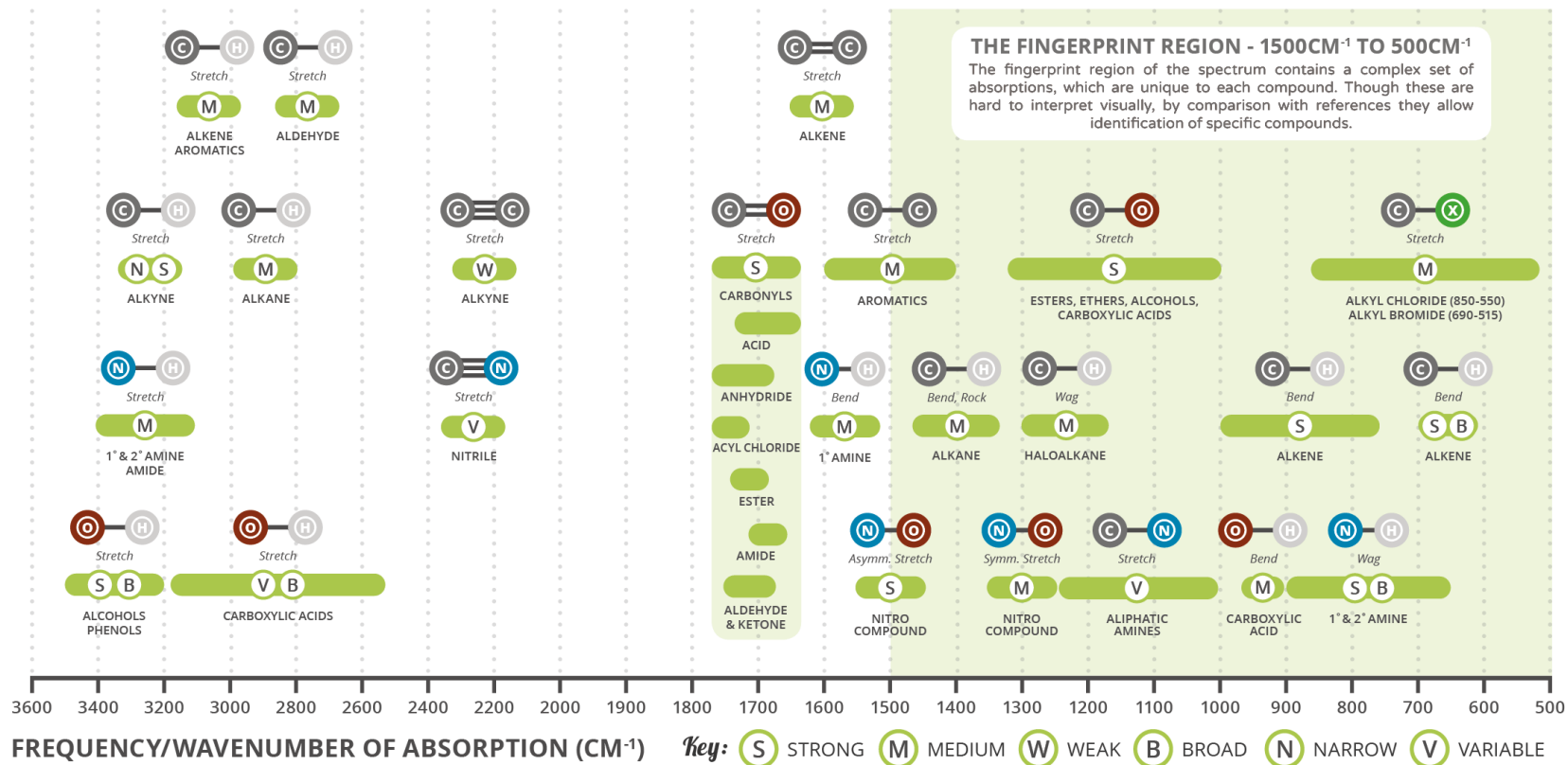
ppm



CDS-00-094

ANALYTICAL CHEMISTRY - INFRARED SPECTROSCOPY

Commonly referred to as IR spectroscopy, this technique allows chemists to identify characteristic groups of atoms (functional groups) present in molecules.



Infrared frequencies make up a portion of the electromagnetic spectrum. If a range of infrared frequencies are shone through an organic compound, some of the frequencies are absorbed by the chemical bonds within the compound. Different chemical bonds absorb different frequencies of infrared radiation. There are a number of characteristic absorptions which allow functional groups (the parts of a compound which give it its particular reactivity) to be identified. This graphic shows a number of these absorptions.



© COMPOUND INTEREST 2015 - WWW.COMPOUNDCHEM.COM | Twitter: @compoundchem | Facebook: www.facebook.com/compoundchem
 This graphic is shared under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives licence.



Opettajalle:

Miten valmistelen spektroskopiaa
hyödyntävän työn

Molekyylin rakennekaavan määrittämistehtävä



Millaista molekyyliä haluat opiskelijoiden käsittelevän? Voi olla ajankohtainen / henkilökohtainen / tietyyntyyppinen (helppo, alkoholi, flavonoidi tms.) yhdiste, kts.

- 1. Molekyylin rakentaminen MarvinSketch –ohjelmalla
 - Saamme rakennekaavan piirrettynä (lopputulos)
 - Ohjelma antaa alkuaineiden prosentuaalisen koostumuksen (lähtötiedot)
 - Ohjelma antaa myös auttavan massaspektrin (MS-spektri)
- 2. Laaditaan tehtävänanto, esim. *Aine sisältää hiiltä C (81.07%), vetyä H (4.54%), ja happea O (14.40%), määritä aineen rakennekaava. Aineen massaspektri on ohessa.*

Haetaan spektrit esim. SDBS-spektrikirjastosta, myös MarvinSketch –ohjelma ja Molview.org –ohjelma antavat spektrejä.

- 3. Hae spektri osoitteesta <http://sdfs.db.aist.go.jp> (SDBS-spektrikirjasto), mikä mahdollistaa moolimassan määrittämisen molekyylille
- 4. Hyödynnetään lisätieto esim. funktionaalisen ryhmän tai ryhmien olemassaolosta

1. Molekyylin rakentaminen MarvinSketch-ohjelmalla, lähtötietojen keruu

(2-fenyylidikromoni tai 2-fenyyl-1-bentsopyraani-4-oni)



The screenshot displays the MarvinSketch 17.4.3 interface. The main window shows the chemical structure of 2-phenylchromone. The 'Elemental Analysis Options' dialog box is open, with the following settings:

- Type:
 - Molecular weight
 - Exact molecular weight
 - Formula
 - Dot-disconnected formula
 - Mass spectrum
 - Composition
 - Atom count
- Recognize formula in pseudo labels
- Use D / T symbols for Deuterium / Tritium
- Single fragment mode

The 'Elemental Analysis' window shows the following results:

- Molecular weight: 222,243
- Exact molecular weight: 222,068079562
- Formula: $C_{15}H_{10}O_2$
- Dot-disconnected formula: $C_{15}H_{10}O_2$
- Composition: C (81.07%), H (4.54%), O (14.40%)
- Atom count: 27
- Mass spectrum [m/z: relative abundance]:
222: 1.00 223: 0.16 224: 0.02

The mass spectrum graph shows a base peak at m/z 222 and smaller peaks at m/z 223 and 224. The chemical structure of 2-phenylchromone is also shown at the bottom of the Elemental Analysis window.

2. Tehtävänanto



Aine sisältää hiiltä C (81.07%), vetyä H (4.54%), ja happea O (14.40%), määritä aineen rakennekaava. Aineen massaspektri on ohessa.

massaspektri

Laskut – suhdekaavan määrittäminen (laskeminen)



$n = m/M$, oletetaan massaksi 100 g

$$\text{C: } 81,07\text{g} / 12,01 \text{ g/mol} = 6,7502 \text{ mol}$$

$$\text{H: } 4,54\text{g} / 1,008 \text{ g/mol} = 4,5039 \text{ mol}$$

$$\text{O: } 14,40\text{g} / 16,00 \text{ g/mol} = 0,9000 \text{ mol}$$

$$\text{C: } 6,7502 / 0,900 \rightarrow 7,500 \rightarrow 15$$

$$\text{H: } 4,5039 / 0,900 \rightarrow 5,004 \rightarrow 10$$

$$\text{O: } 0,9000 / 0,900 \rightarrow 1,000 \rightarrow 2$$

C : H : O = 15:10:2 eli
suhdekaava on $\text{C}_{15}\text{H}_{10}\text{O}_2$

Massaspektrit



MarvinSketch:

Molview:

Elemental Analysis

Molecular weight: 222,243

Exact molecular weight: 222,068079562

Formula: $C_{15}H_{10}O_2$

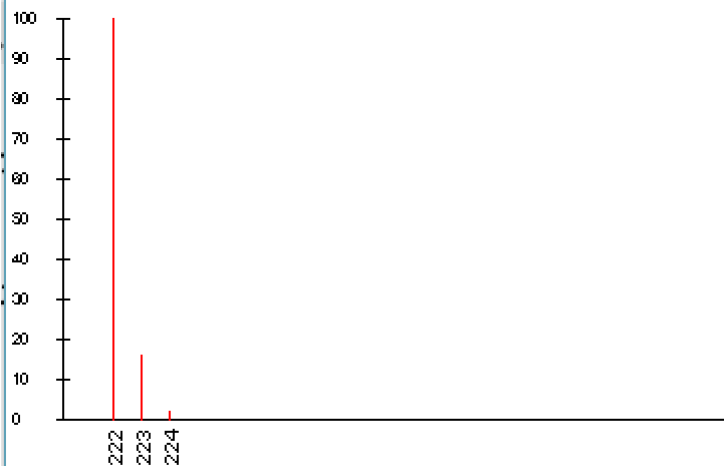
Dot-disconnected formula: $C_{15}H_{10}O_2$

Composition: C (81.07%), H (4.54%), O (14.40%)

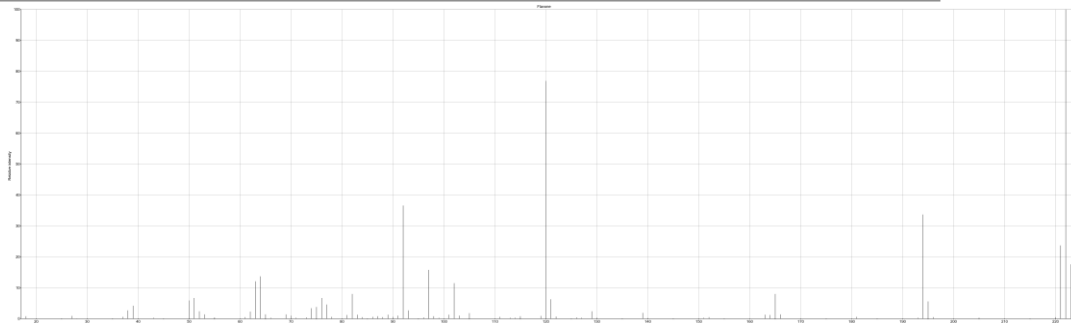
Atom count: 27

Mass spectrum [m/z: relative abundance]:

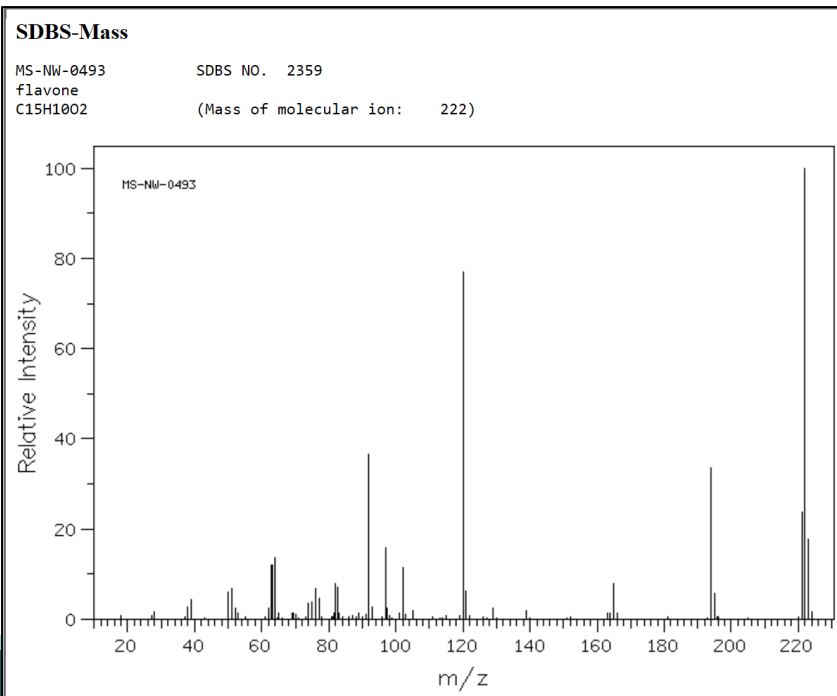
222: 1.00 223: 0.16 224: 0.02



×



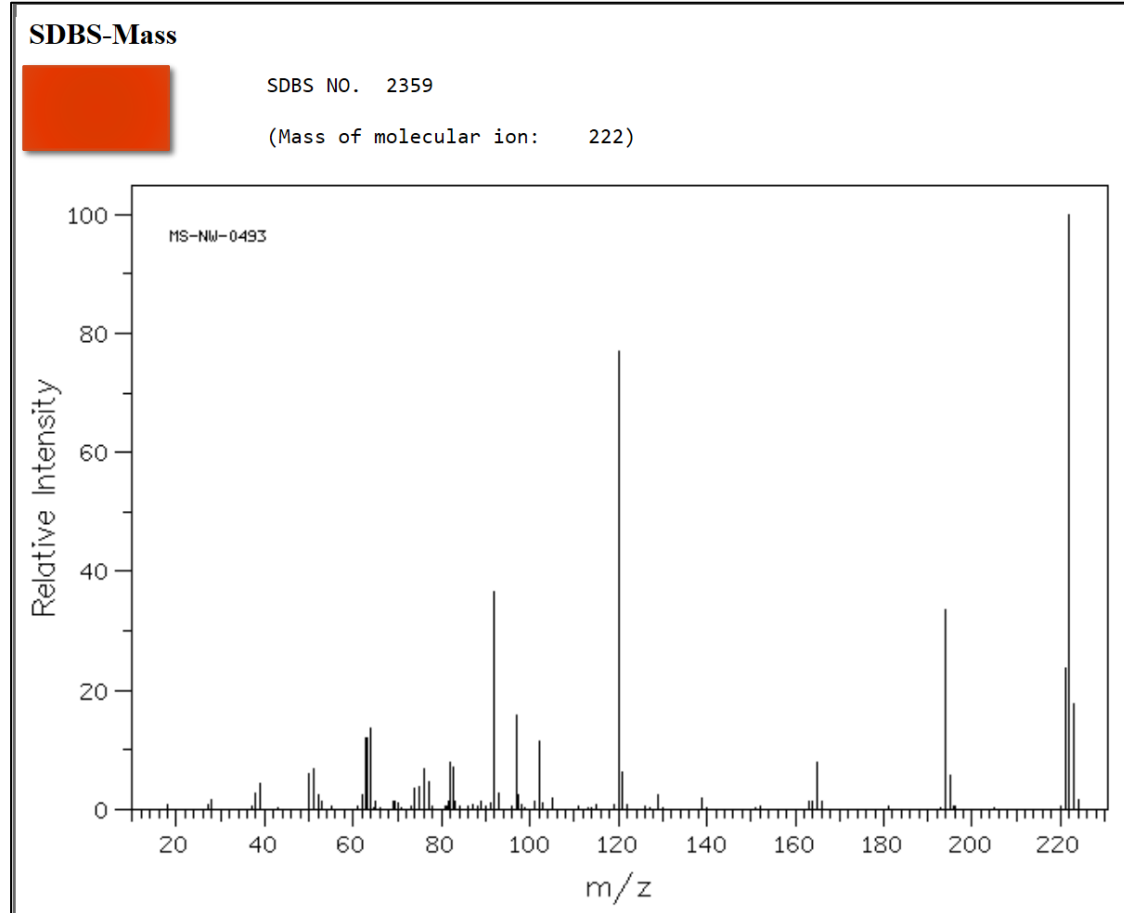
SDBS:



2. Tehtävänanto



Aine sisältää hiiltä C (81.07%), vetyä H (4.54%), ja happea O (14.40%), määritä aineen rakennekaava. Aineen massaspektri on ohessa.



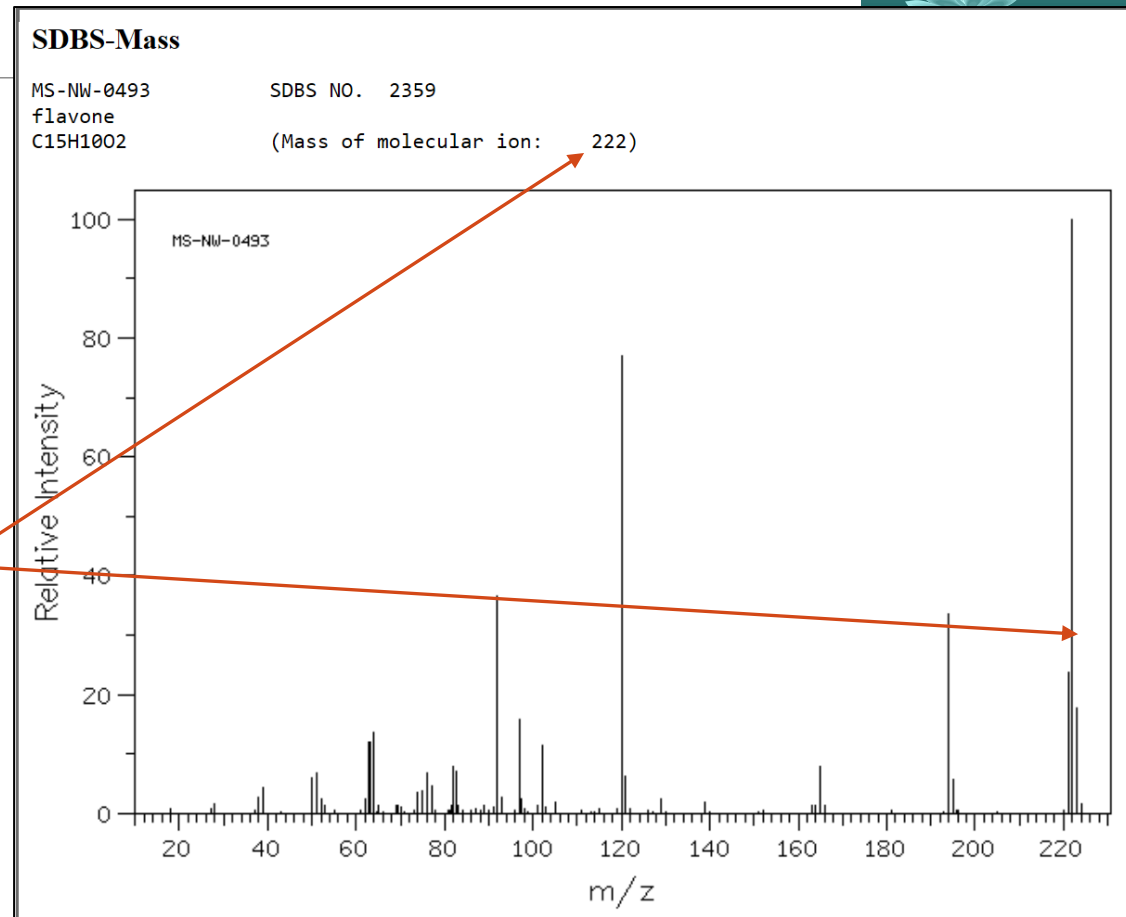
3. Molekyylikaavan määrittäminen



Molekyylikaavan määrittäminen vaatii empiirisen kaavan (suhdekaavan) ja moolimassan tuntemisen

Massaspektri antaa moolimassan.

Tehtävässä moolimassa on 222 g/mol eli empiirinen kaava on sama kuin molekyylikaava.



Funktionaalisen ryhmän tunnistaminen

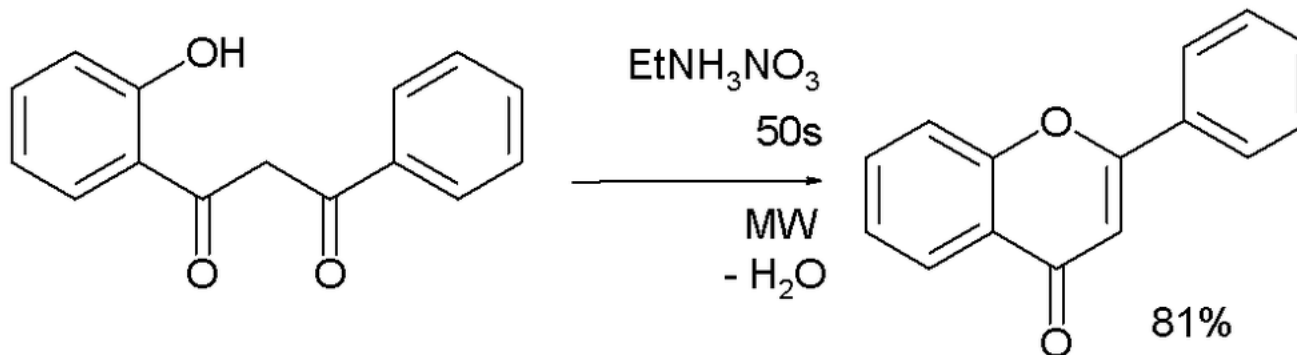


(tässä tapauksessa) *IR-spektri osoittaa selkeästi karbonyyliryhmän olemassaolon*, tähän voisi viitata antamalla IR-spektrin (vaihtoehto 1), ...

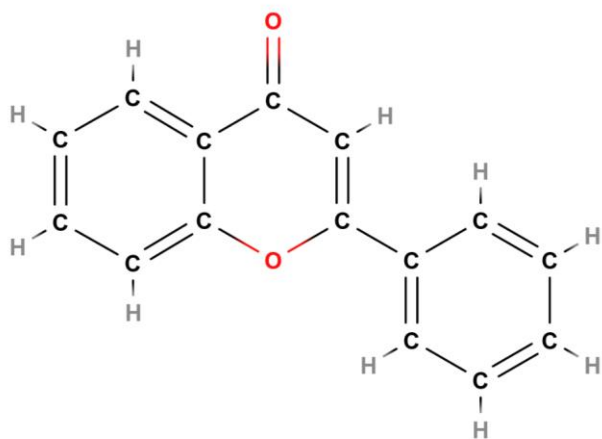
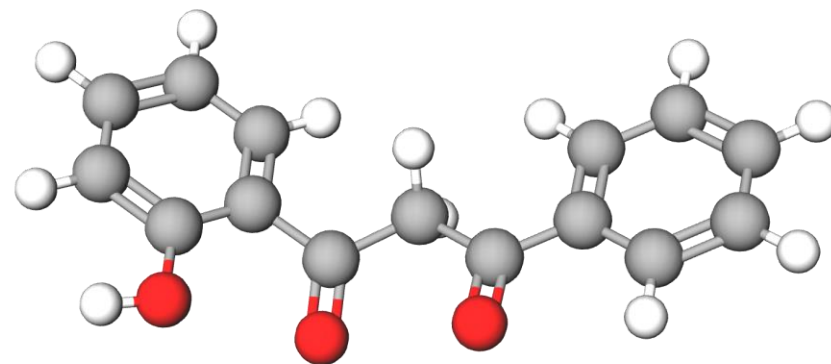
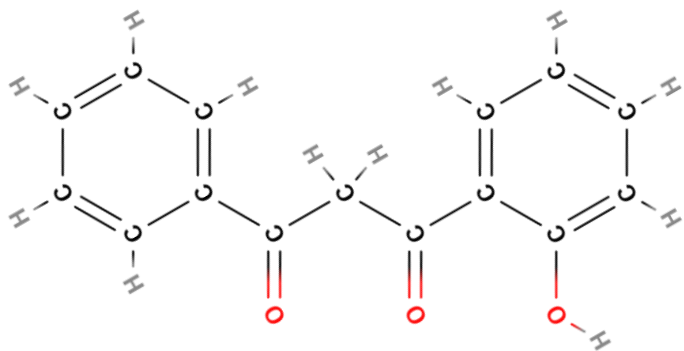
Yhdisteellä on UV-spektri, joka viittaa kromoforien (väriä tuottava osa) olemassa oloon → aromaattinen, pitkät delokalisoituneet ketjut...

- Hiiliatomien lukumäärä suhteessa vetyatomien määrään → aromaattinen (tai kaksois- ja kolmoissidoksia)

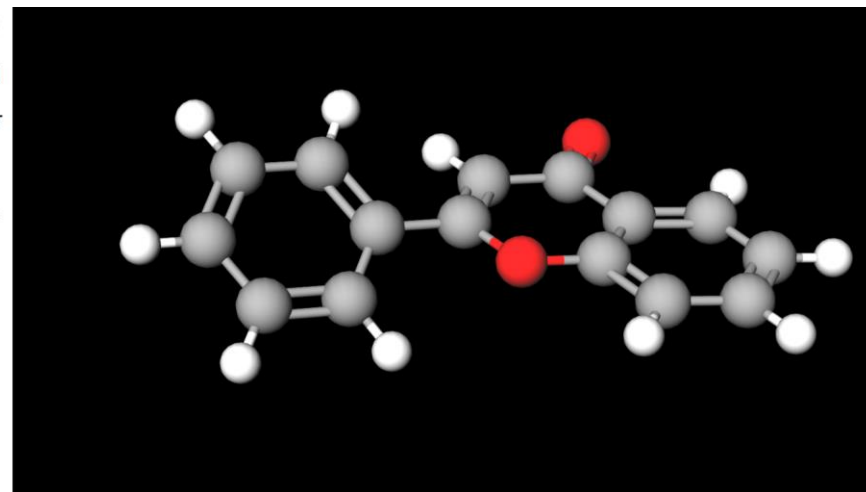
Lähtöaineena on jonkinlainen 1,3-diaryylidiketoni (kuva alla, reaktion lähtöaine) ja todetaan että molekyylien sisäisen reaktion jälkeen IR-spektri osoittaa, että reaktiotuotteella ei ole hydroksyyliiryhmää ja karbonyyliryhmiä ei ole kuin yksi ja delokalisoitunut tila leviää pitemmälle molekyyliin ...



Molview-kuvat



F
Cl
Br
I
...

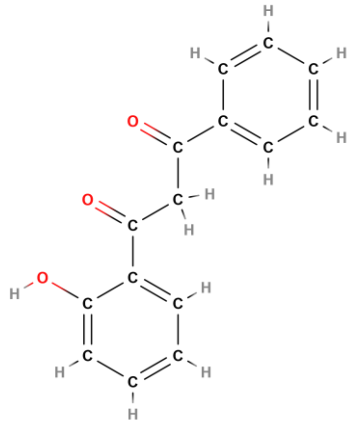


2. Tehtävänanto



Aine sisältää hiiltä C (81.07%), vetyä H (4.54%), ja happea O (14.40%), määritä aineen rakennekaava. Aineen massaspektri on ohessa.

IR-spektri osoittaa, että yhdisteellä on yksi karbonyyliryhmä ja yksi eetteriryhmä (fenolinen). Lähtöaine on yhdiste, jonka rakennekaava on viereinen.

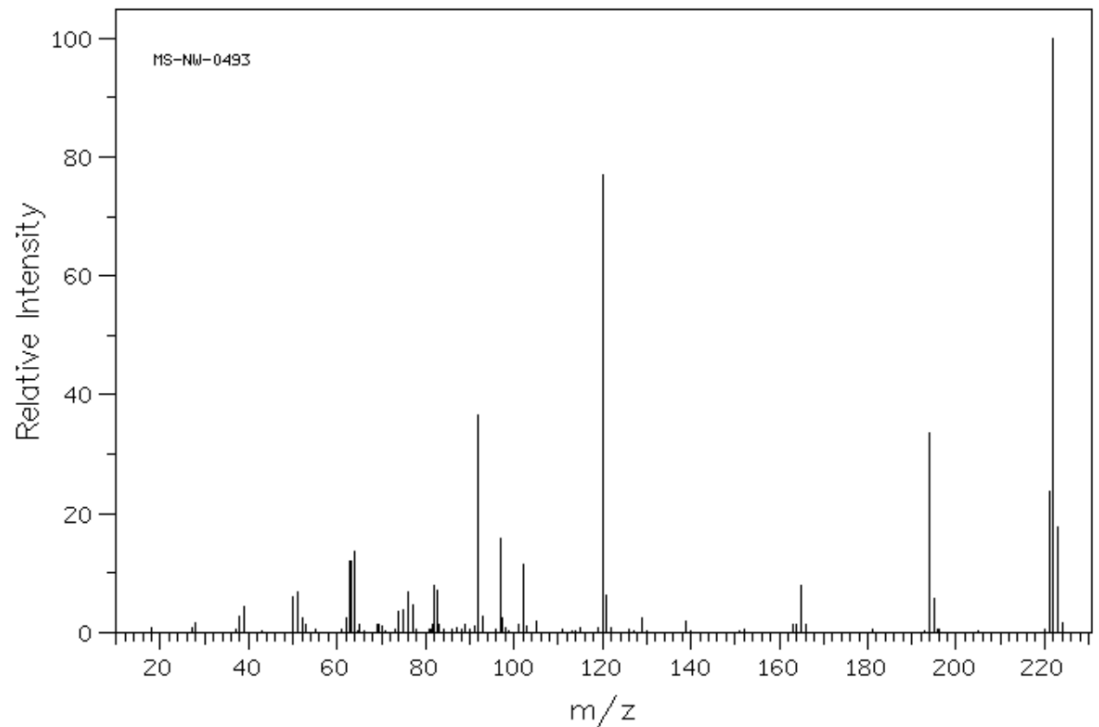


...

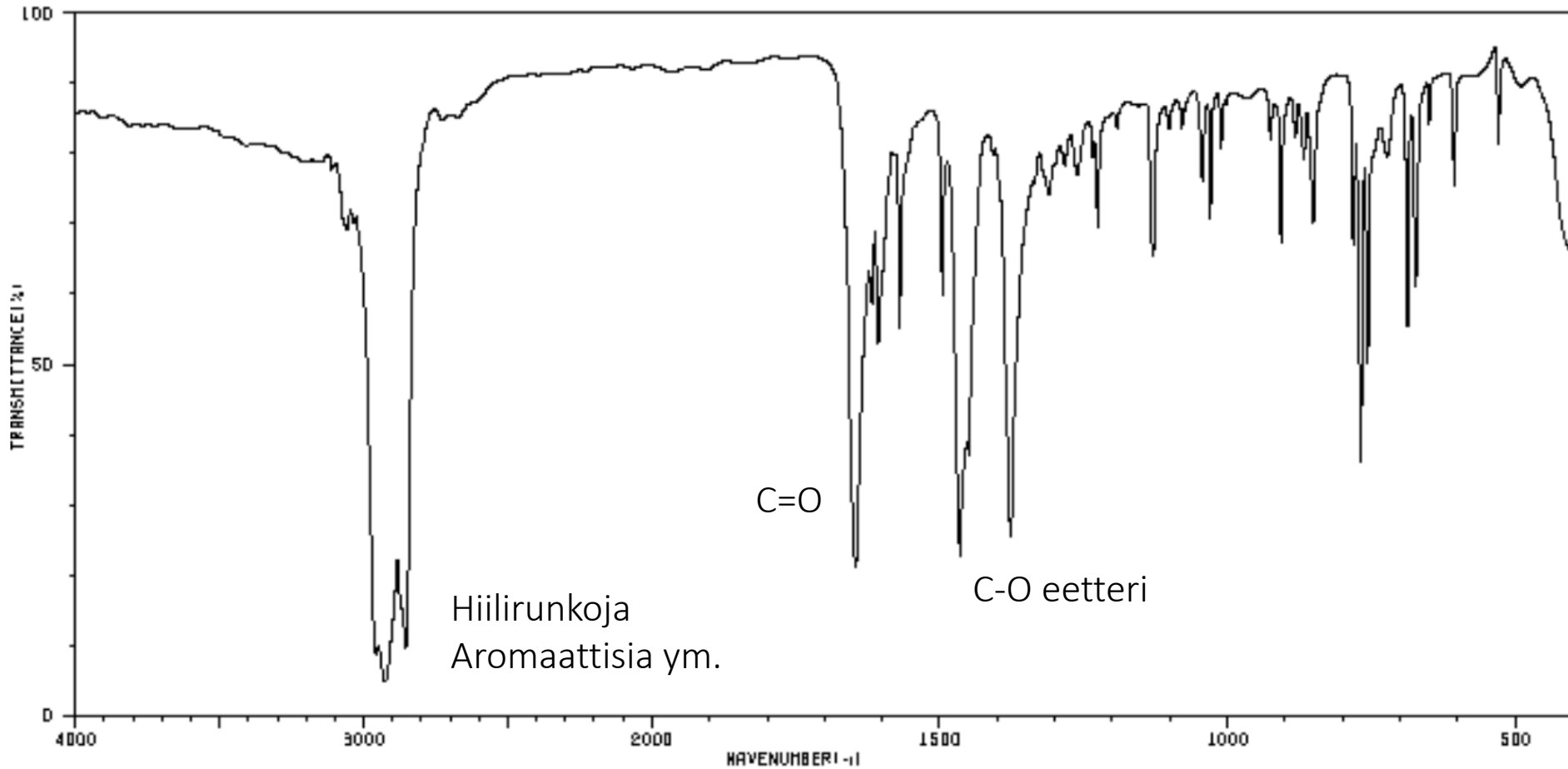
SDBS-Mass

SDBS NO. 2359

(Mass of molecular ion: 222)



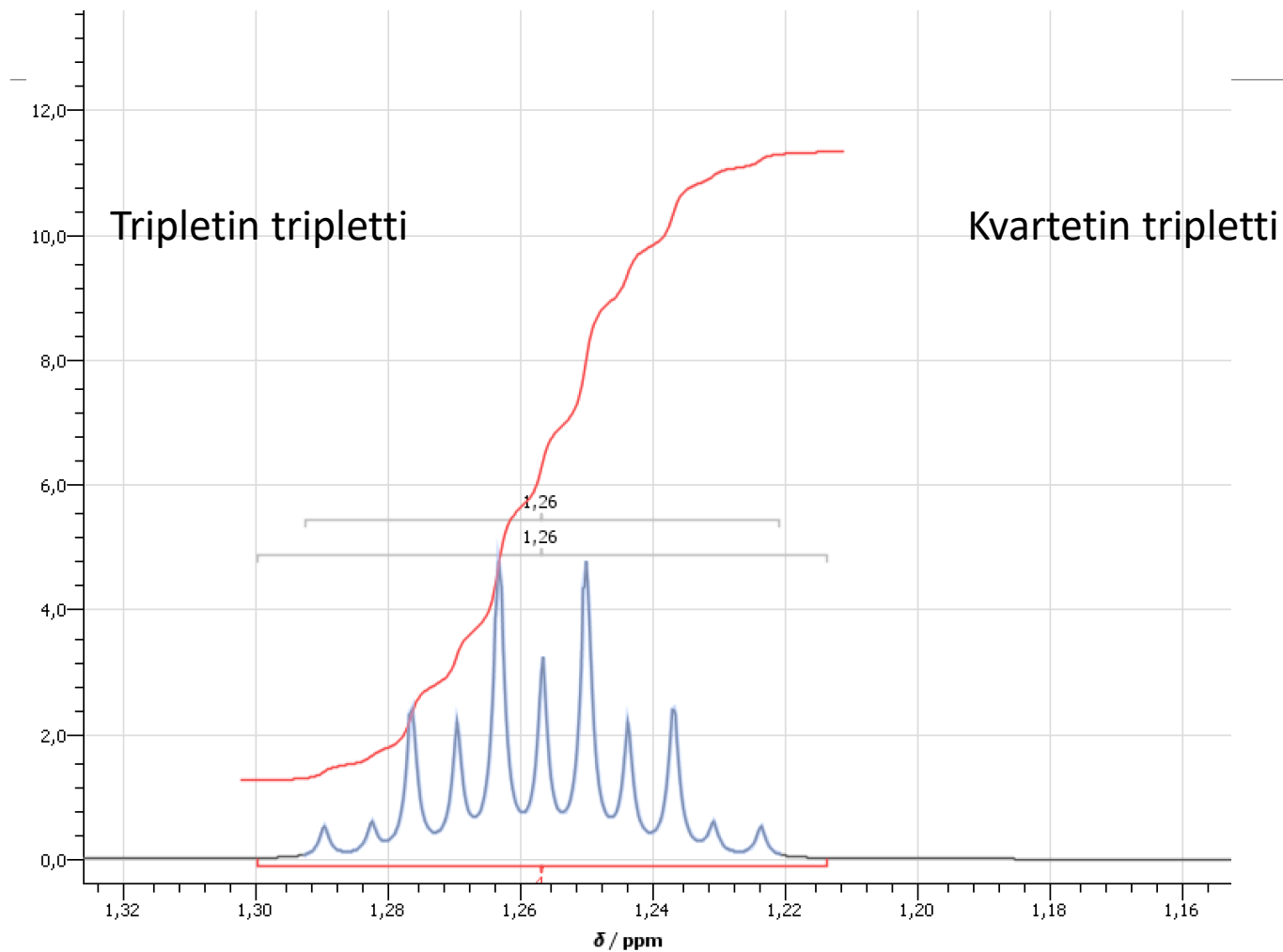
IR-spektri





NMR-spektroskopia

NMR-spektriesimerkkejä



Spektrien tulkintaa

(MAOL-taulukko, v2013, s. 148)



Tyypillisiä kemiallisia siirtymiä ^1H NMR-spektrissä suhteessa tetrametyylisilaaniin (TMS).

| H-ytimen ympäristö | Selite | Kemiallinen siirtymä ppm |
|---|--------------------------------|--------------------------|
| R-CH_3 | Primäärinen | 0 – 4 |
| R_2CH_2 tai R_3CH | Sekundäärinen tai tertiäärinen | 1,5 – 4,5 |
| ROH | Alkoholi | 0,5 – 8 |
| RNH_2 | Amiini | 1 – 6 |
| $\text{C}\equiv\text{C-H}$ | Alkyyni | 2,5 – 3 |
| XC-H | Alkyylihalidi (X=Br, Cl, I, F) | 2,5 - 4,5 |
| $\text{C}=\text{C-H}$ | Alkeeni | 4 – 8 |
| Ar-H | Aromaattinen yhdiste | 6 – 10 |
| RCHO | Aldehydi | 8 – 10 |
| RCOOH | Karboksylihappo | 9 - 13 |

Pentaani

2-Pentanol

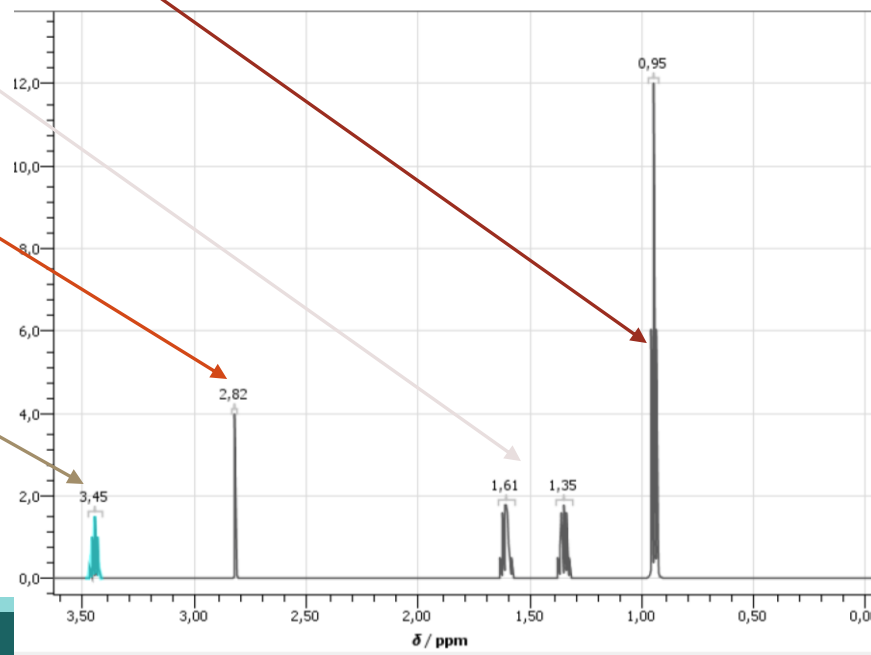
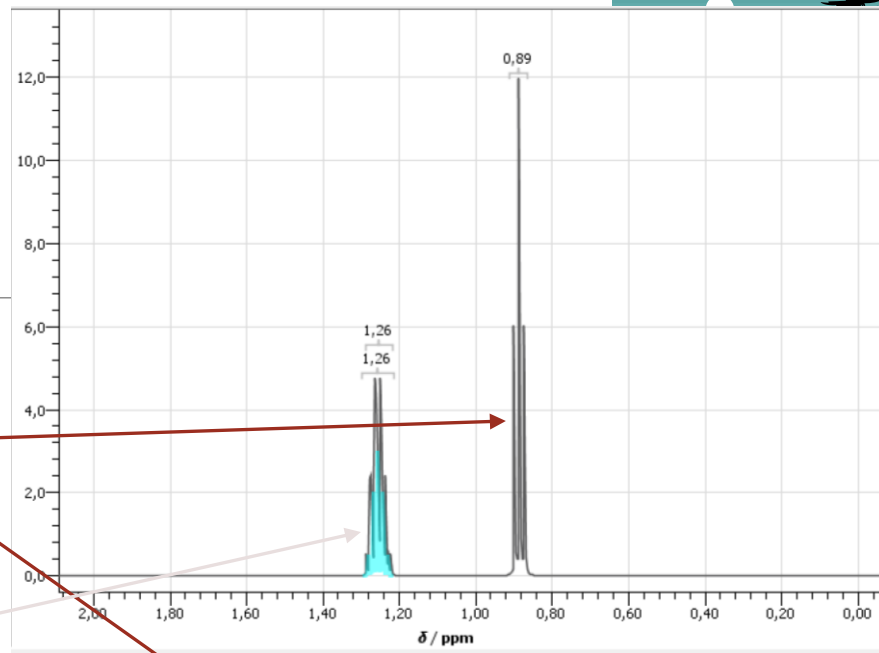
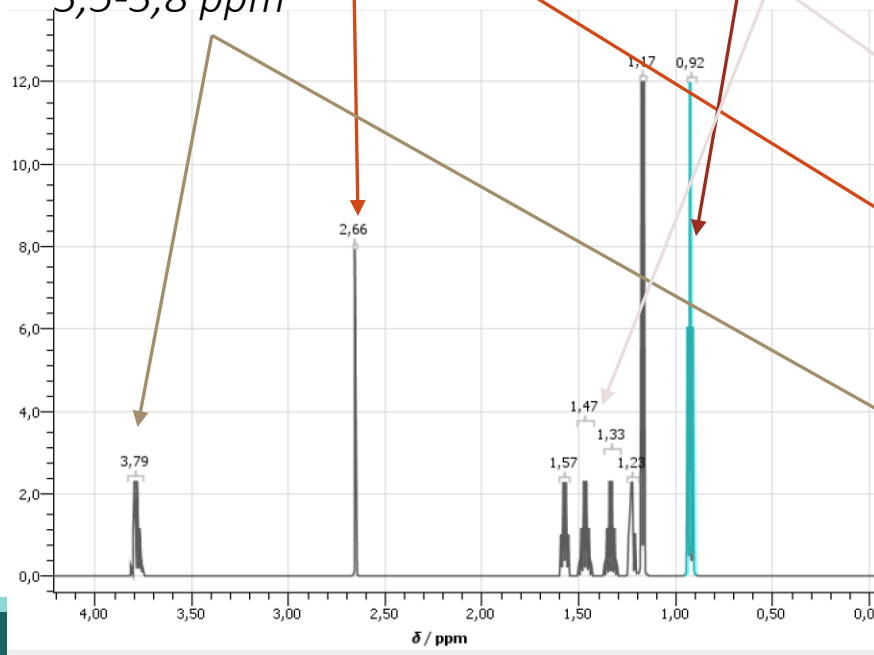
3-Pentanol

CH₃-ryhmä,
0,9 ppm

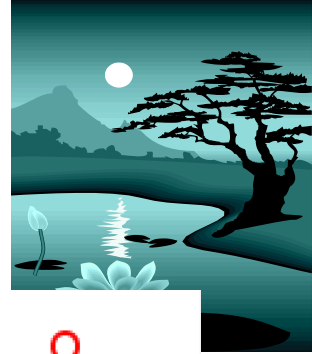
OH-ryhmä, 2,7 ppm

CHOH-ryhmä,
3,5-3,8 ppm

CH₂-ryhmä,
1,2-1,6 ppm

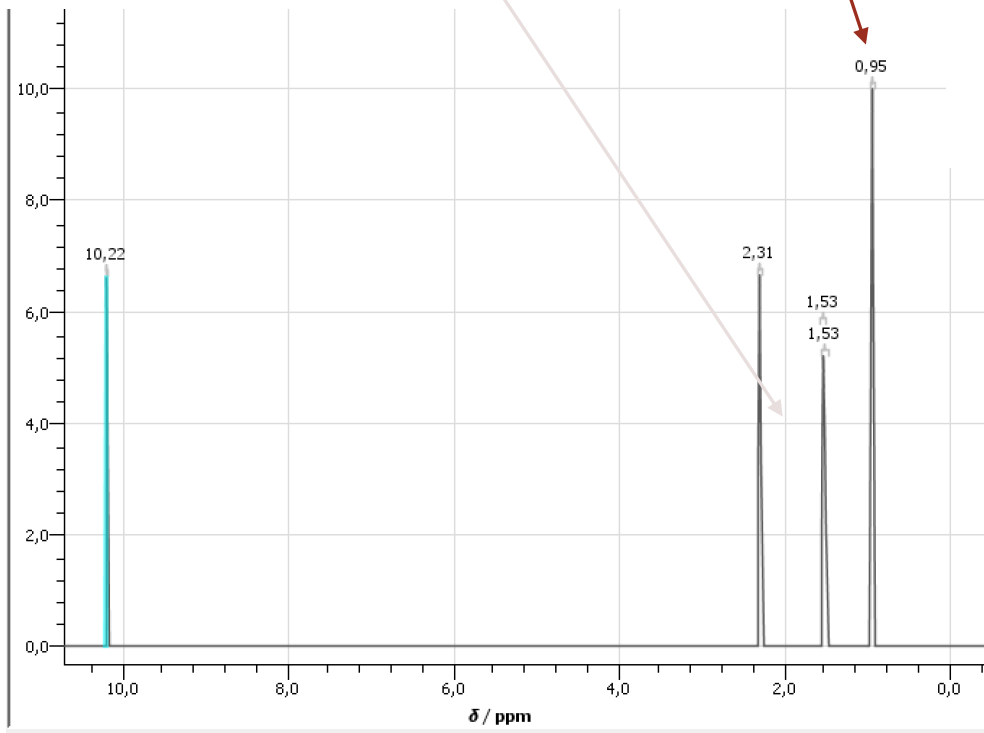
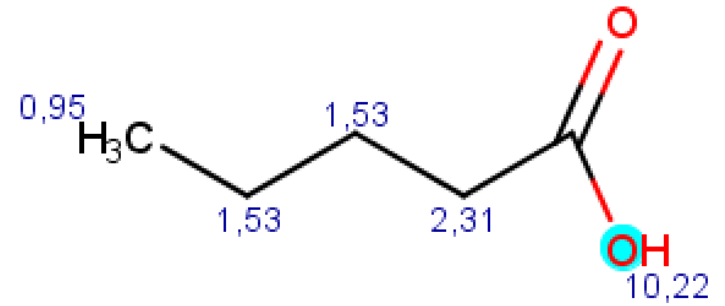


Pentaanihappo

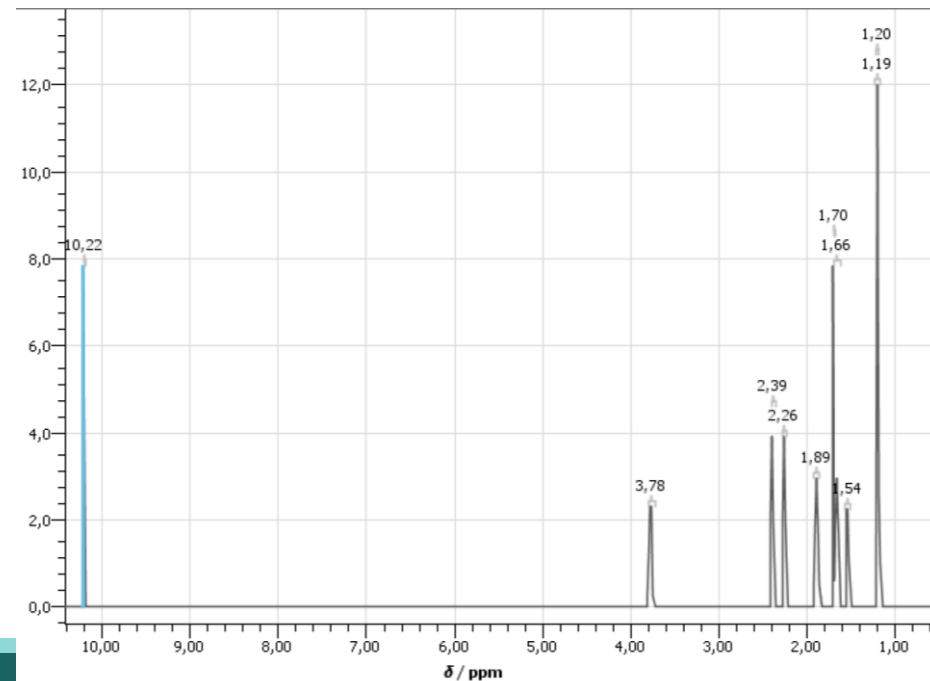
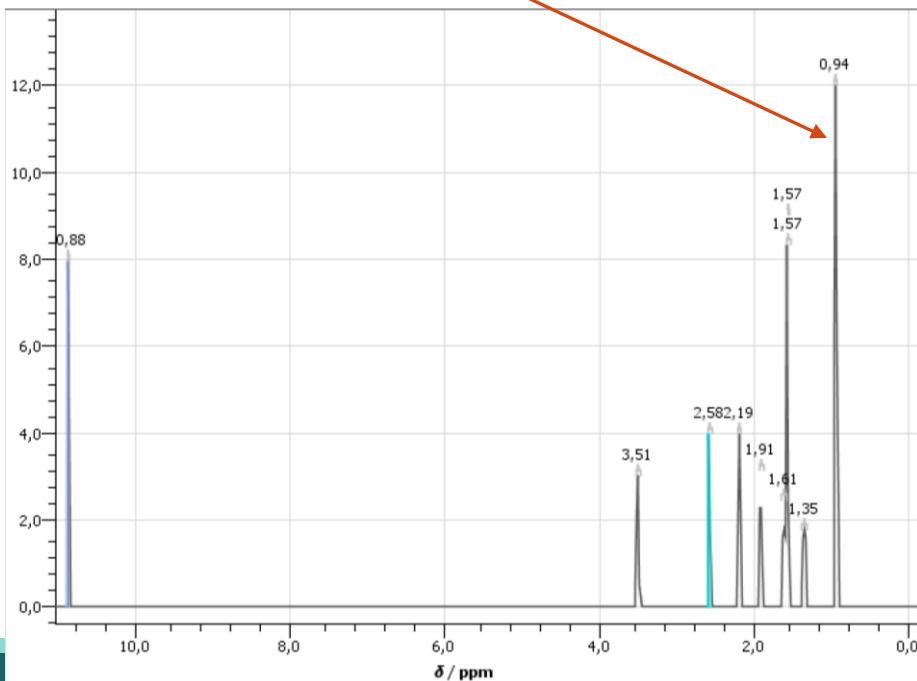
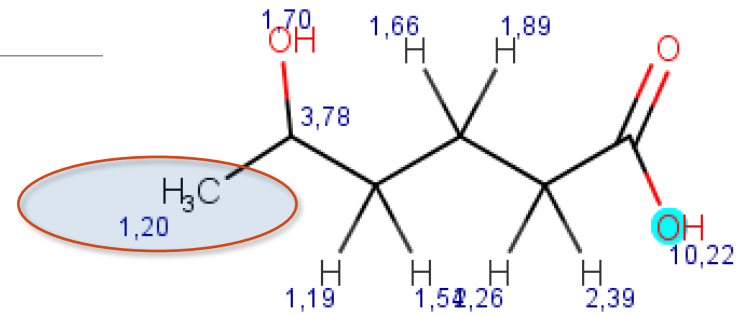
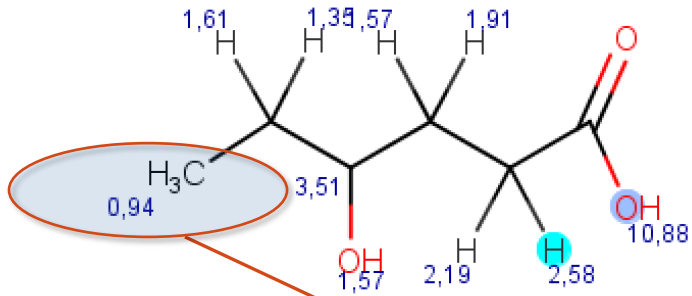


CH₃-ryhmä,
0,9 ppm

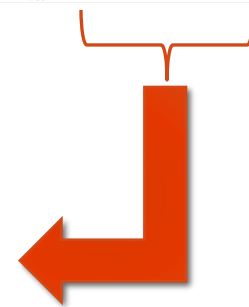
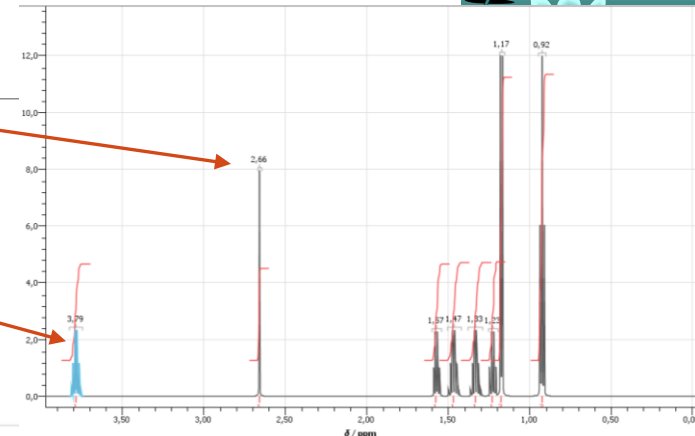
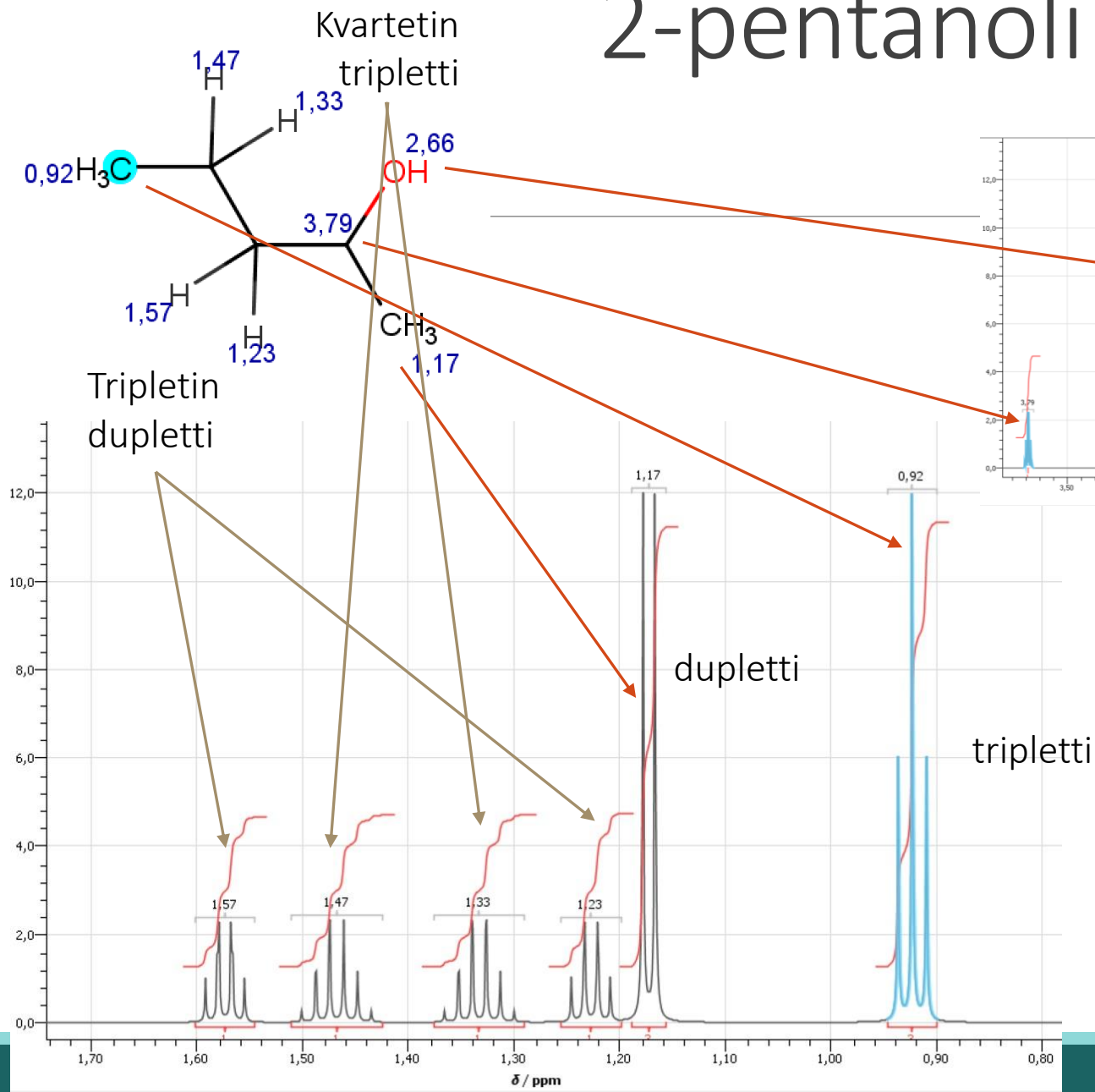
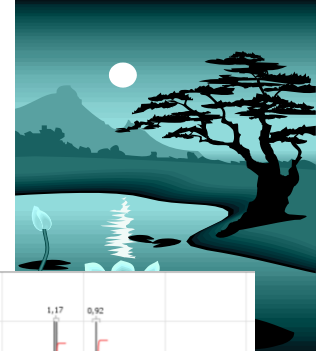
CH₂-ryhmä,
1,5-2,3 ppm



Mikä ero molekyyleissä?



2-pentanol



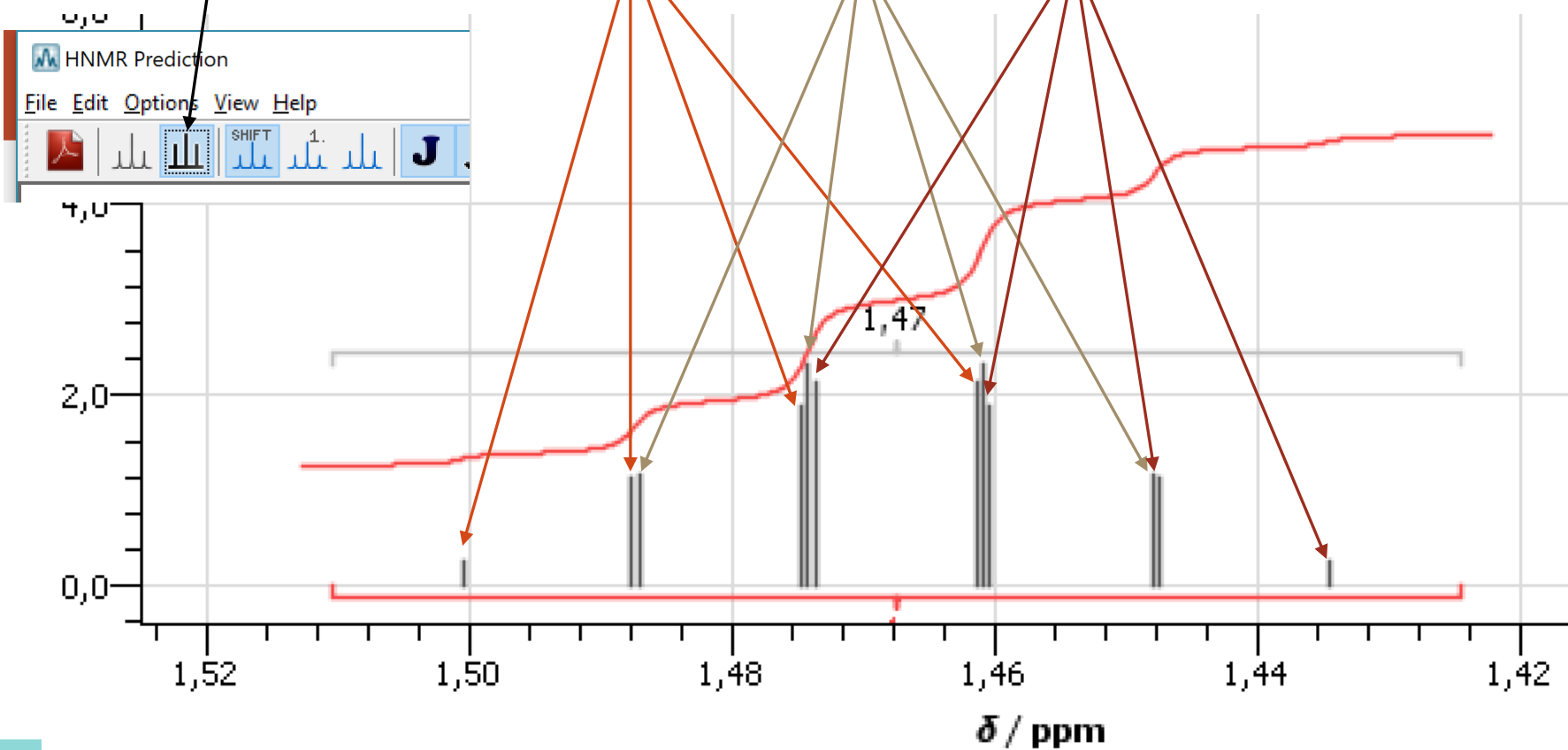
2-pentanolin tarkempi tulkinta



Kvartetin tripletti

Line spectrum

1.kvartetti / 2.kvartetti / 3.kvartetti





UV-spektroskopia ja standardisuoran
käyttö pitoisuuden määrittämisessä

PhET simulointi



0.05

Transmittance
 Absorbance

Wavelength: 511 nm

preset variable

cm 1 2

Solution: ■ $K_2Cr_2O_7$: Potassium dichromate ▲

Concentration: 193 μM 0 500

Kvantitatiivinen mittaus UV-spektrofotometrillä



1. VAIHE

Valmista kaksi ”eriväristä” standardisuolaliuosta

- Kuparisulfaatti-liuos (0,01 M)
- Kobolttinitraatti –liuos (0,01 M)

Valmista ko. liuoksista kaksi uutta liuosta laimentamalla niitä niin, että saadaan konsentraatiot 0,005 M ja 0,002 M

Ota spektrofotometri käyttöön

- <https://schoolstore.fi/mittaaminen/>
- tee kalibrointi puhtaalla vedellä (kyvetti täytetään vedellä)

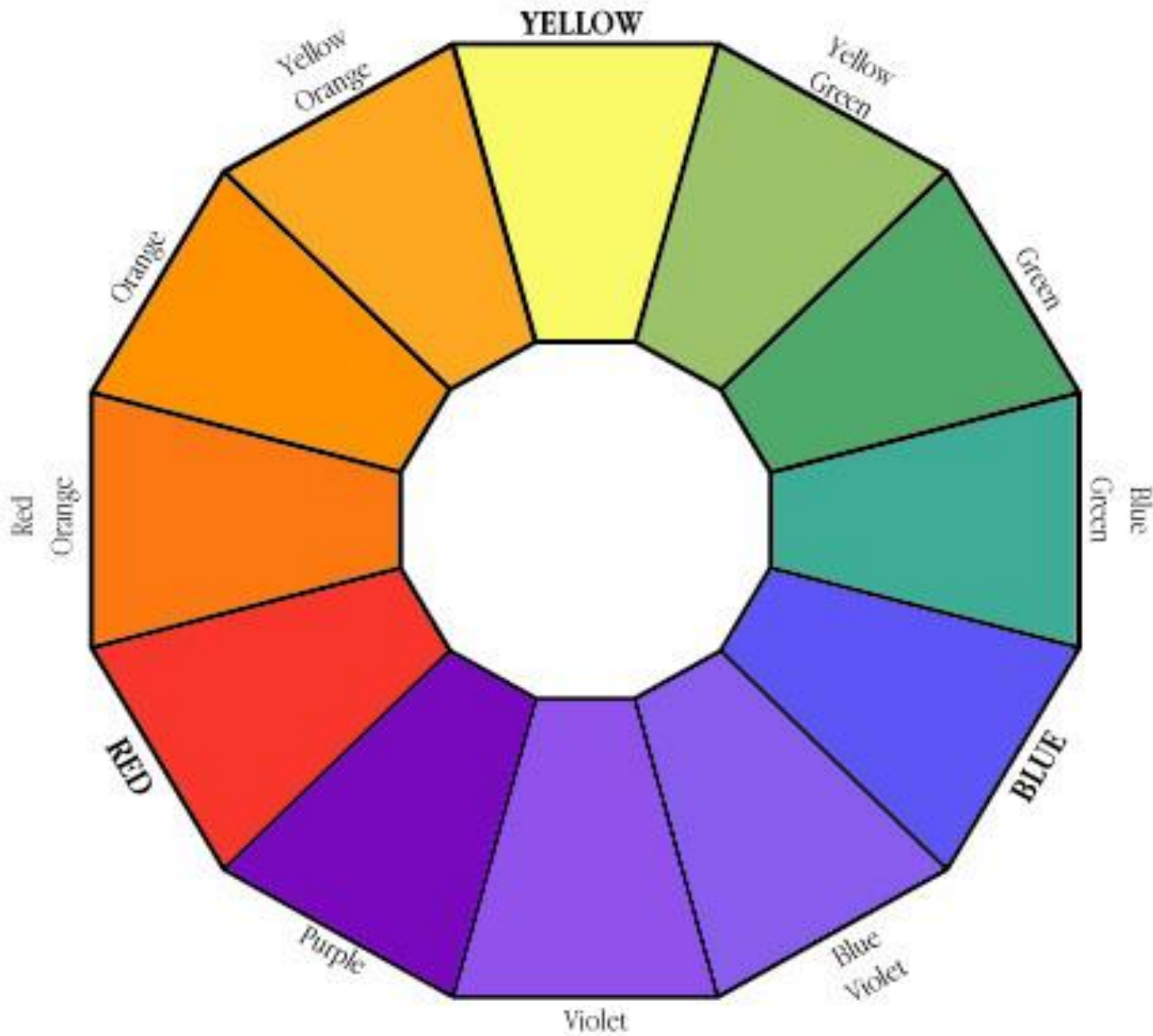
2. VAIHE

Aja vertailuspektrit (Vis-spektri) alkuperäisistä liuoksista

Valitse spektristä kohta, josta määrität absorbanssin

Mittaa absorbanssit kaikilla liuoksilla em. kohdasta

Laadi graafinen esitys, jossa on absorbanssi konsentraation suhteessa (standardisuora)

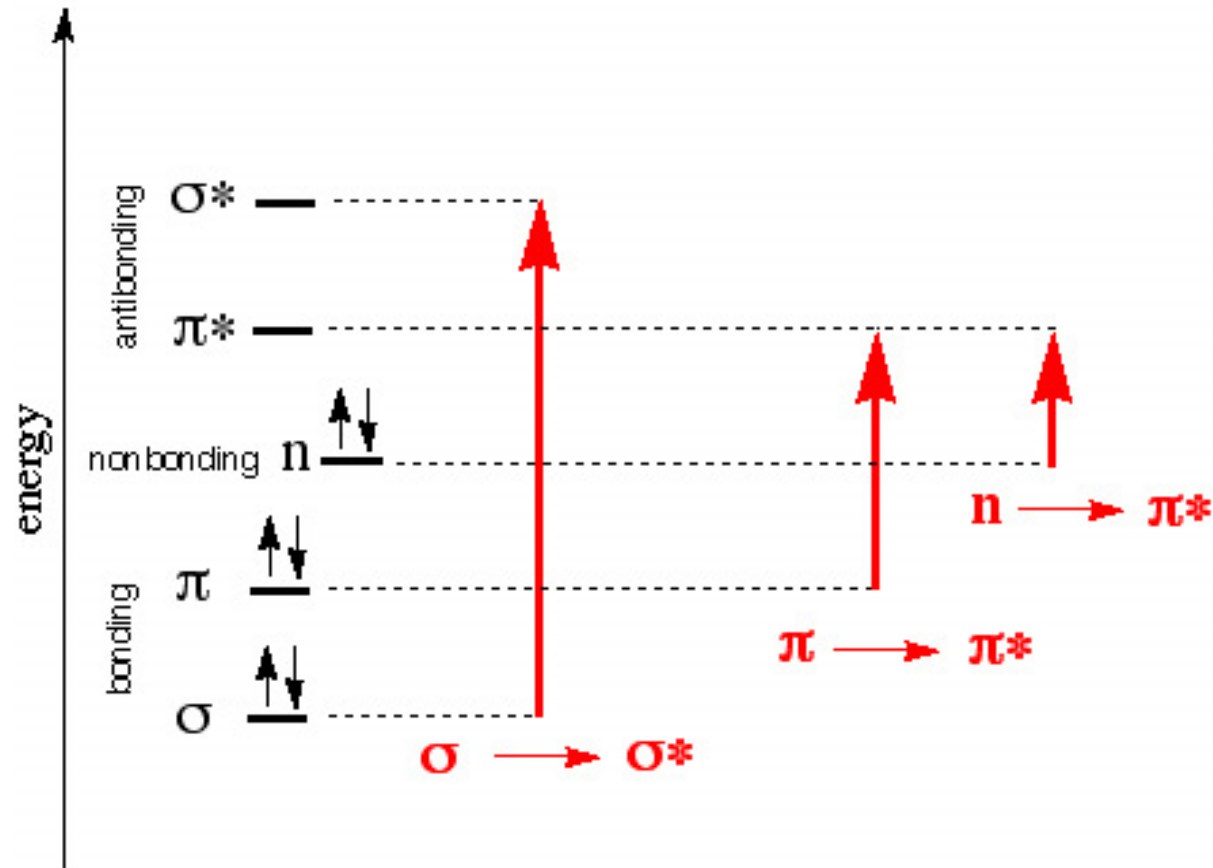


UV-VIS-
spektrien
tulkinnasta

UV-spektroskopian teoriaa



Syvennytään eri orbitaaleilla olevien elektronien virittäytymiseen





LISÄTIETOA, YHTEYSTIEDOT

Ari Myllyviita

Email: ari@myllyviita.fi

www: www.myllyviita.fi

Blogi: www.myllyviita.fi/kemia

Twitter: myllyviita

Facebook: myllyviita