

Tehtävä 1. Spektrikartta

Sisällysluettelo

Tehtävä 1. Spektrikartta

Spektrikartan laadinta

Pentaani

Pentaanihappo

Pentanaali

Pentanol

1-pentanol

2-pentanol

3-pentanol

syklopentanol

Pentanoni

2-pentanoni

3-pentanoni

Japanilainen spektirikirjasto

Spektriharjoituksia 1

Spektriharjoituksia 2

Spektriharjoituksia 3

Ratkaisut

Esimerkkiratkaisu

Spektriharjoitusten vastaukset

Tehtävä 1. Spektrikartta

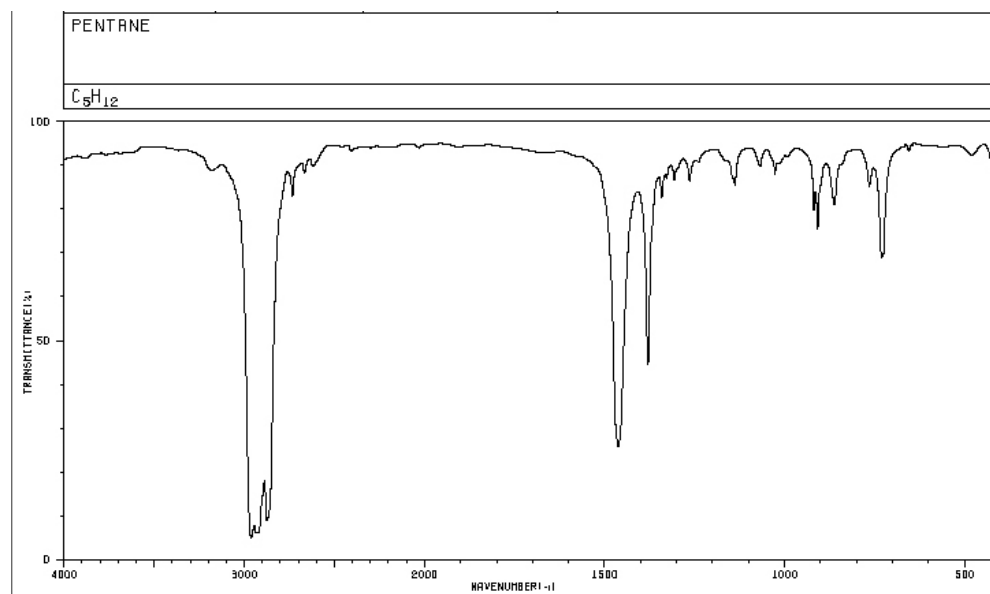
Spektrikartan laadinta

Tunnista yhdisteelle (yhdisteryhmille) tyypilliset spektriviivat (piikit). Tulkitava aineisto löytyy alta. Laadi oma spektritulkintamalli eli graafinen esitys spektripohjasta, johon on piirretty esim. funktionaalisten ryhmien tai molekyylien rakenneosien tyypilliset spektriipiikkien paikat.

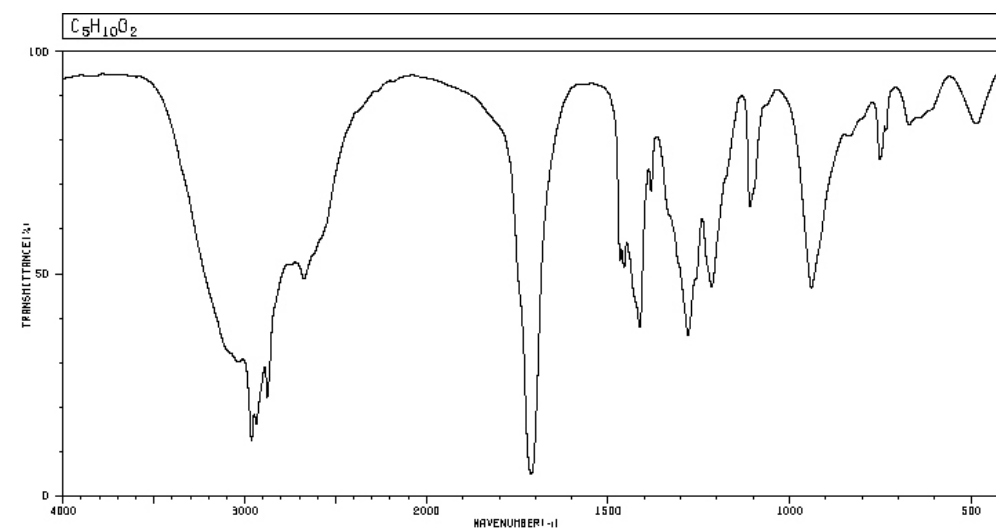
Tässä pohja:

[Spektrikartta.jpg](#)

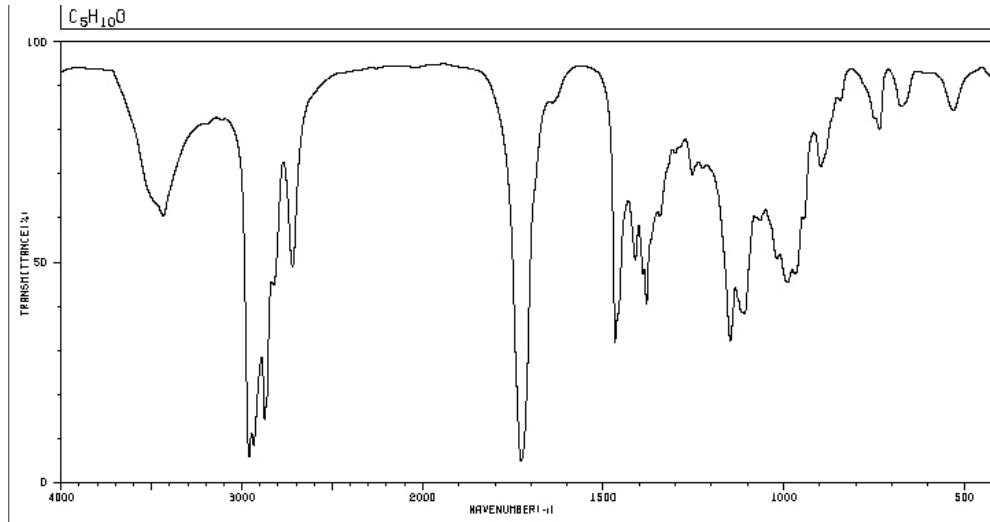
Pentaani



Pentaanihappo

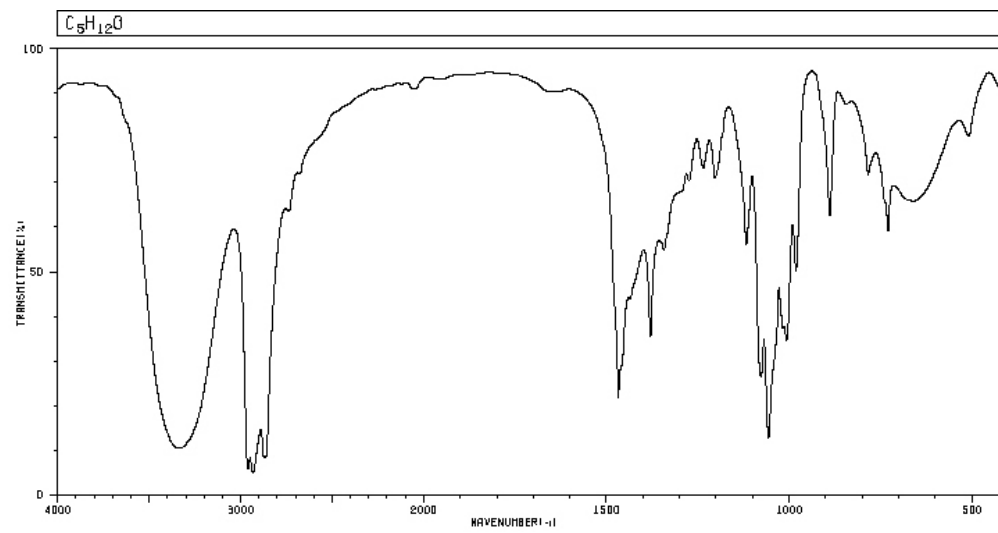


Pentanaali

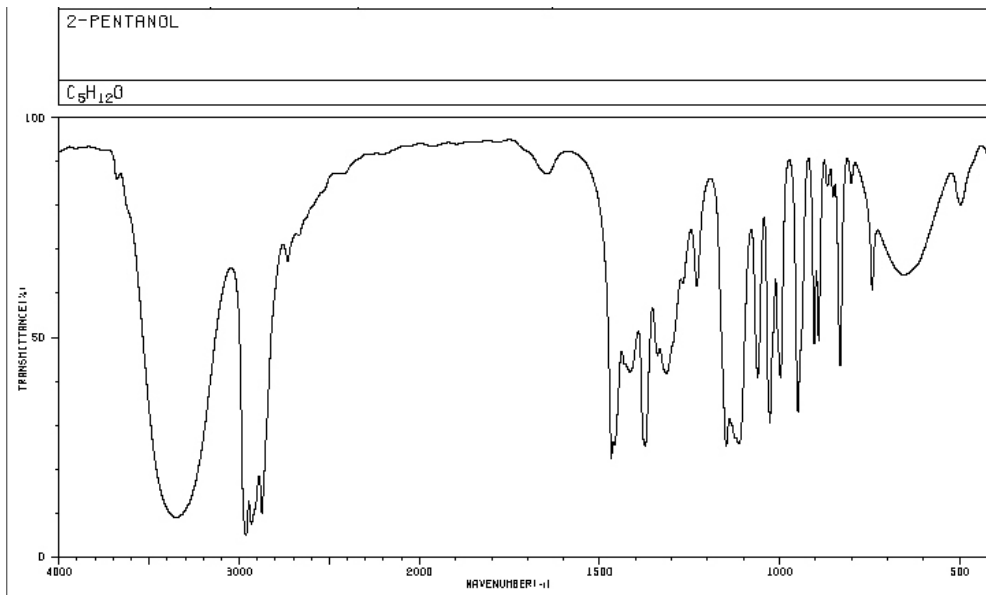


Pentanoli

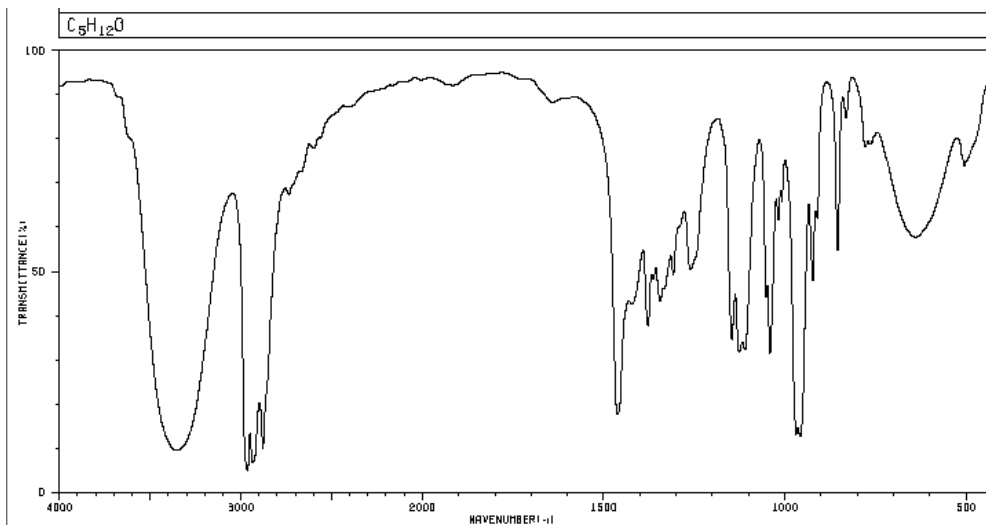
1-pentanoli



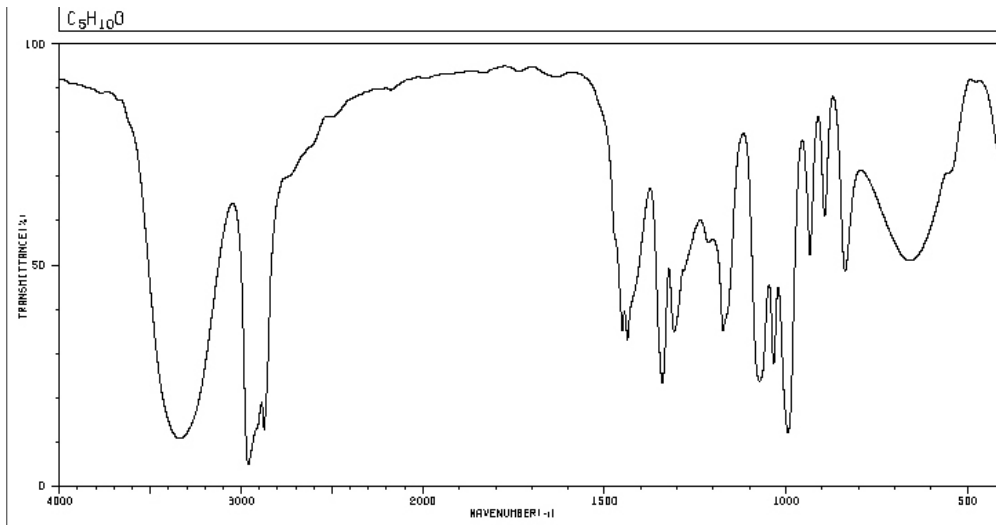
2-pentanoli



3-pentanol

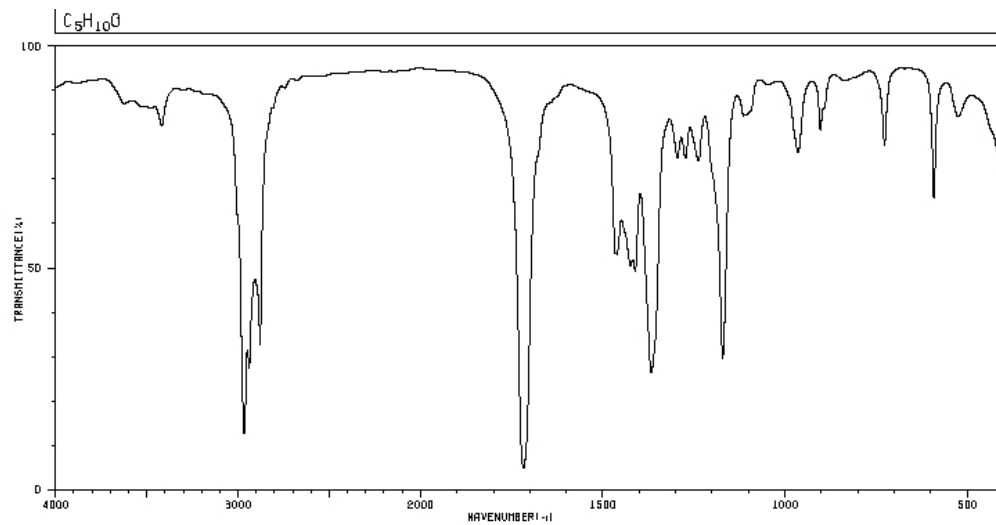


syklopentanol

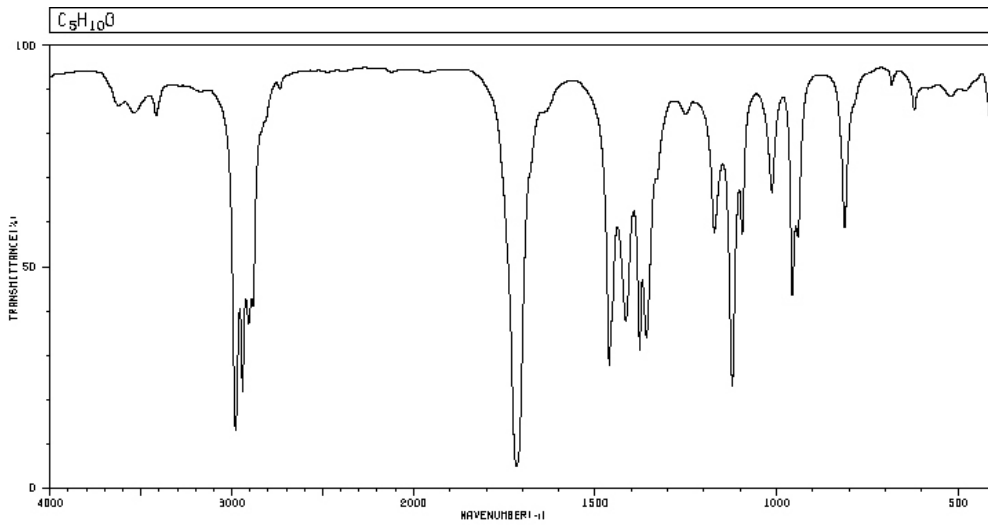


Pentanoni

2-pentanoni



3-pentanoni

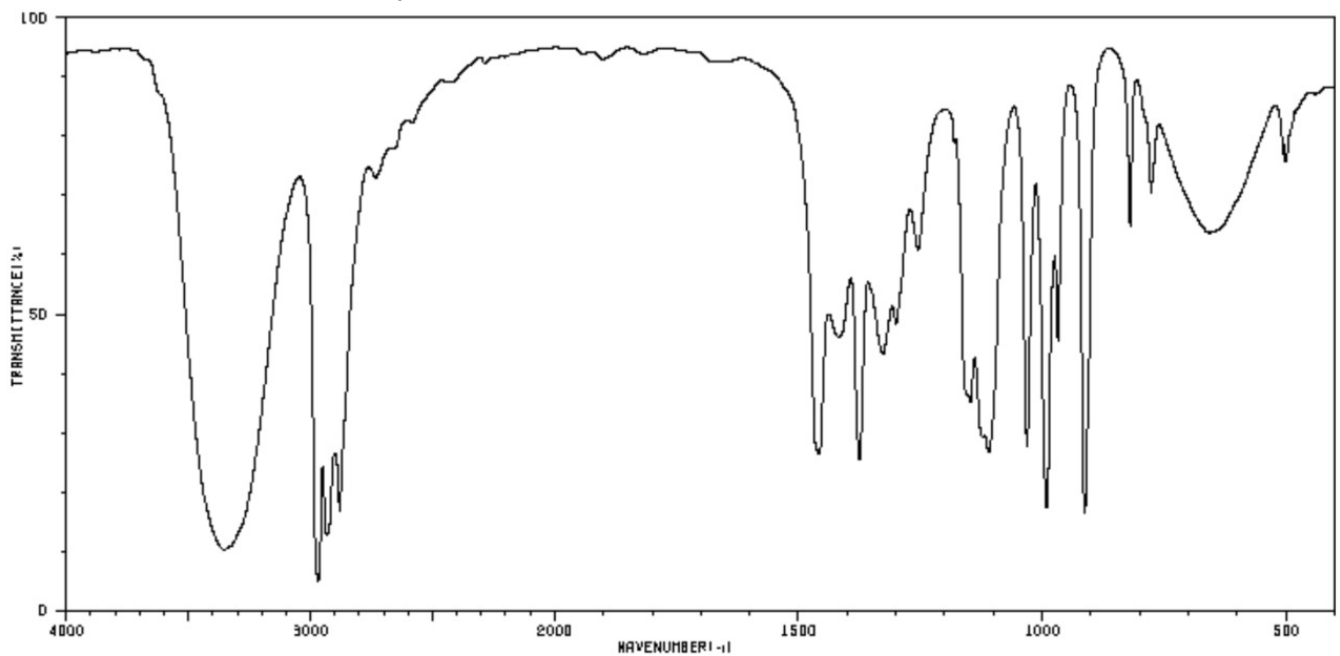


Japanilainen spektrikirjasto

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

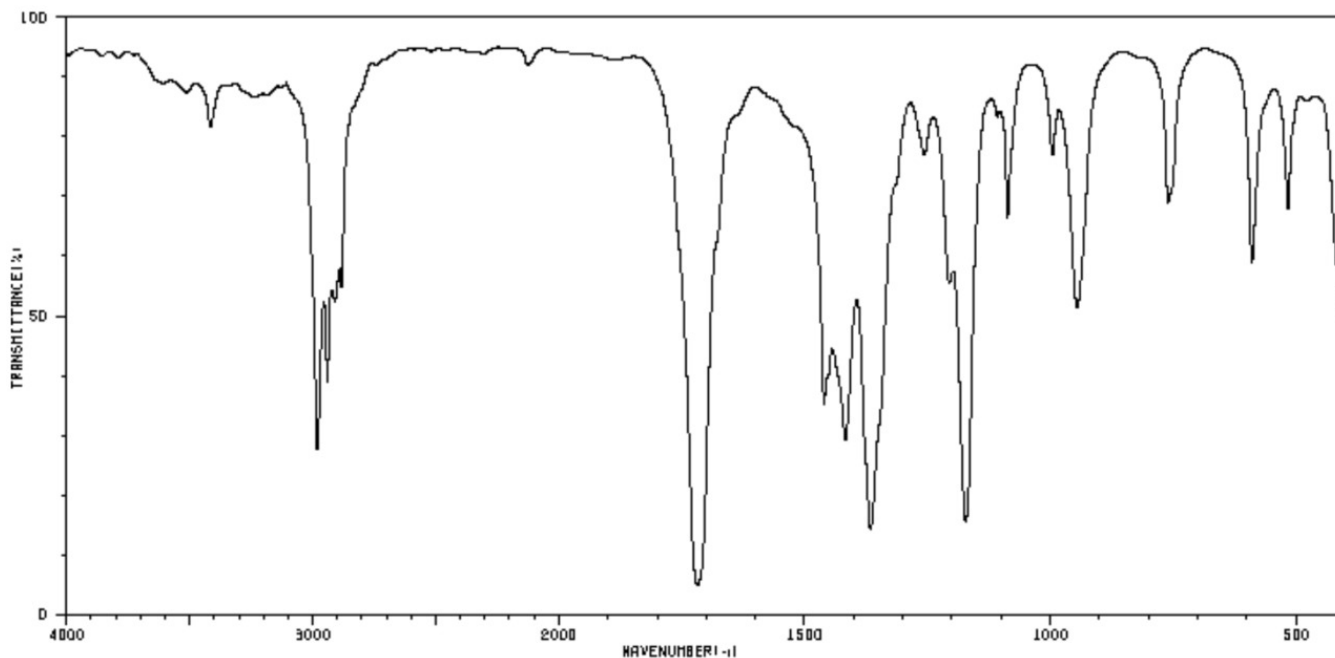
Spektriharjoituksia 1

Aineen molekyylikaava on $C_4H_{10}O$. Alla aineen IR-spektri. Mikä aine on kyseessä?



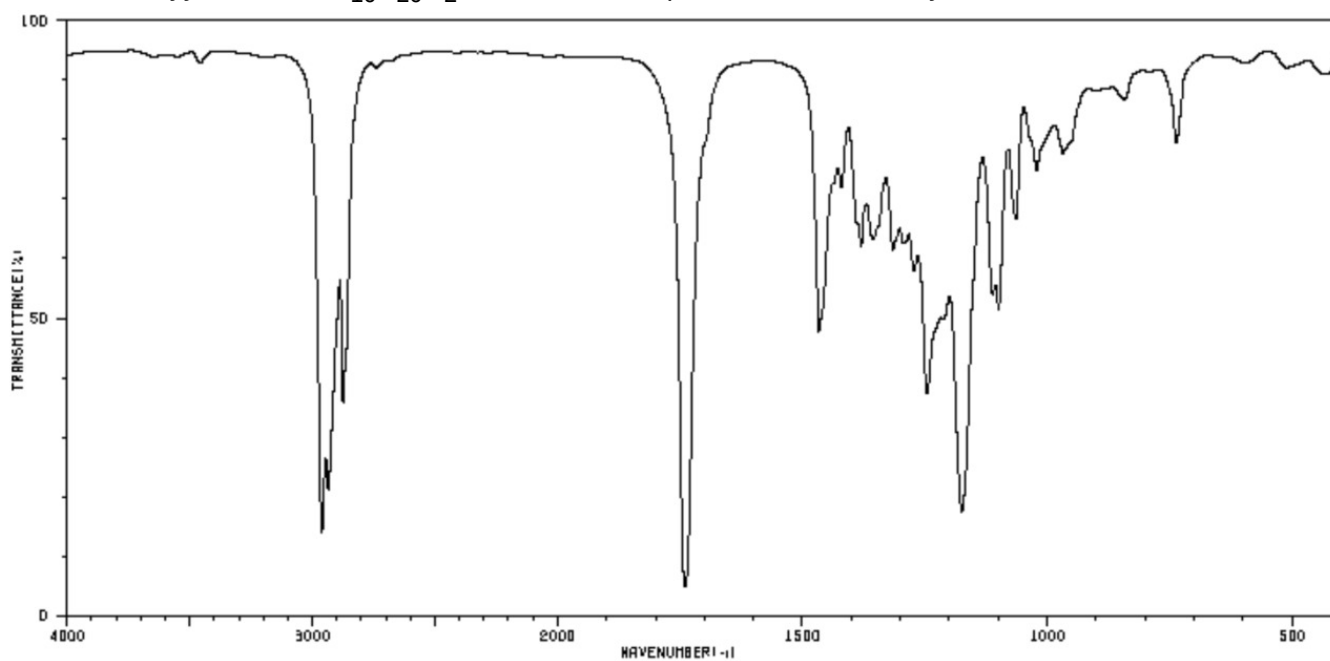
Spektriharjoituksia 2

Aineen molekyylikaava on C_4H_8O . Alla aineen IR-spektri. Mikä aine on kyseessä?



Spektriharjoituksia 3

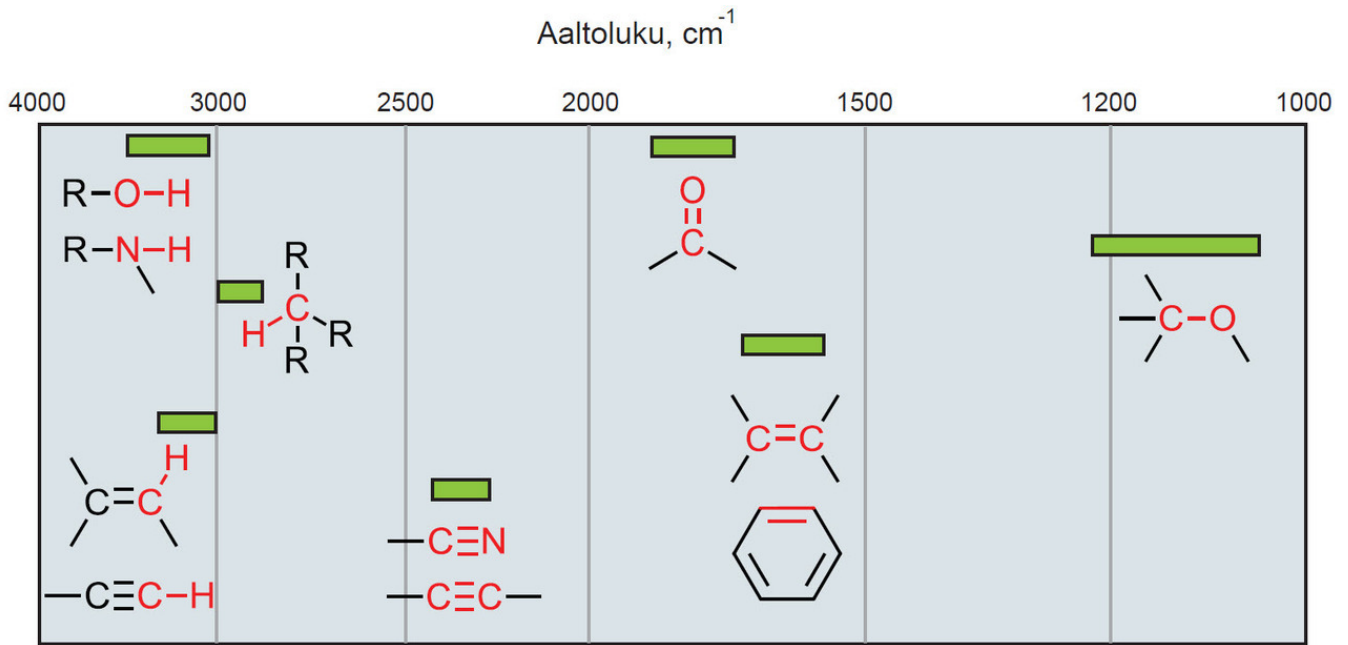
Aineen molekyylikaava on $C_{10}H_{20}O_2$. Alla aineen IR-spektri. Mikä aine on kyseessä?



Ratkaisut

Esimerkkiratkaisu

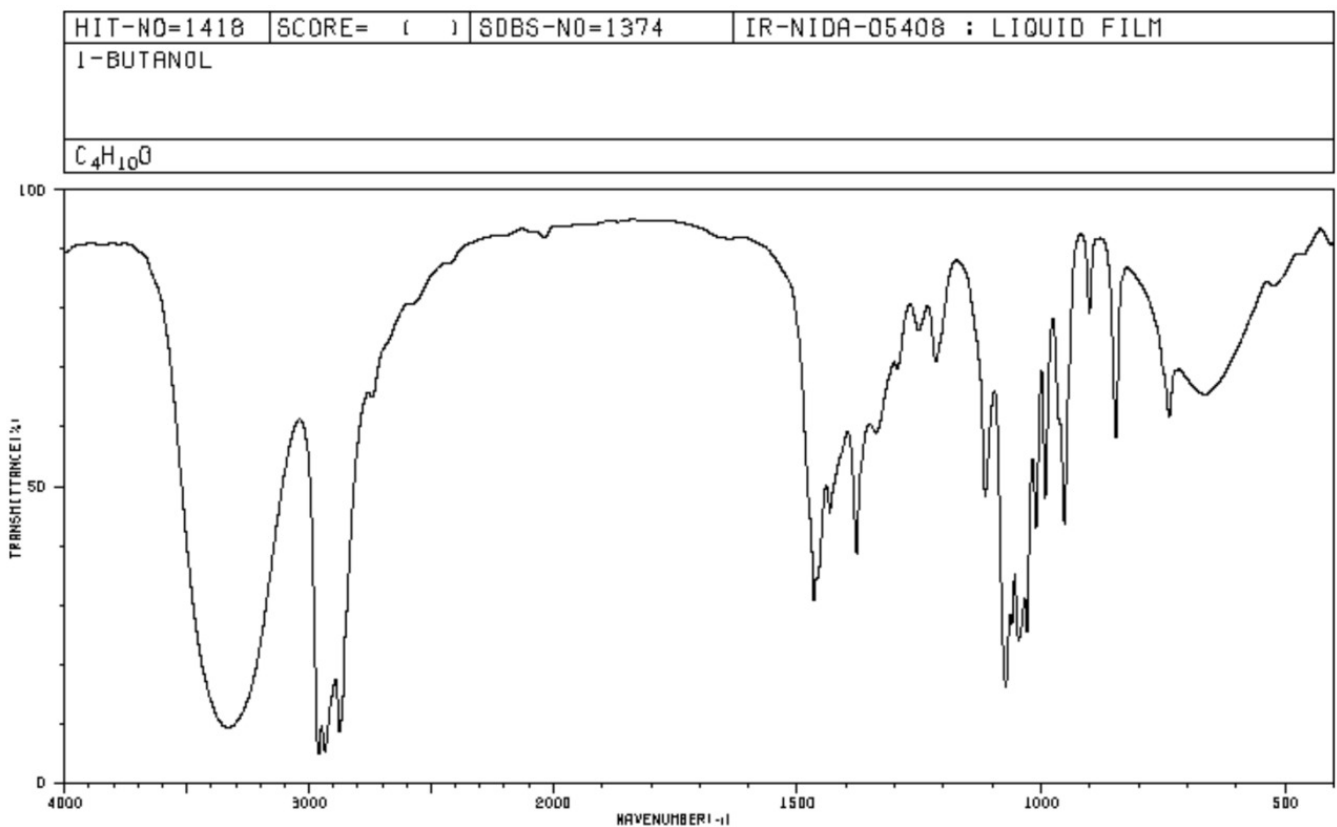
Esimerkki Orbitaali 2- teoksesta. Ratkaisu voi olla muunkinlainen.

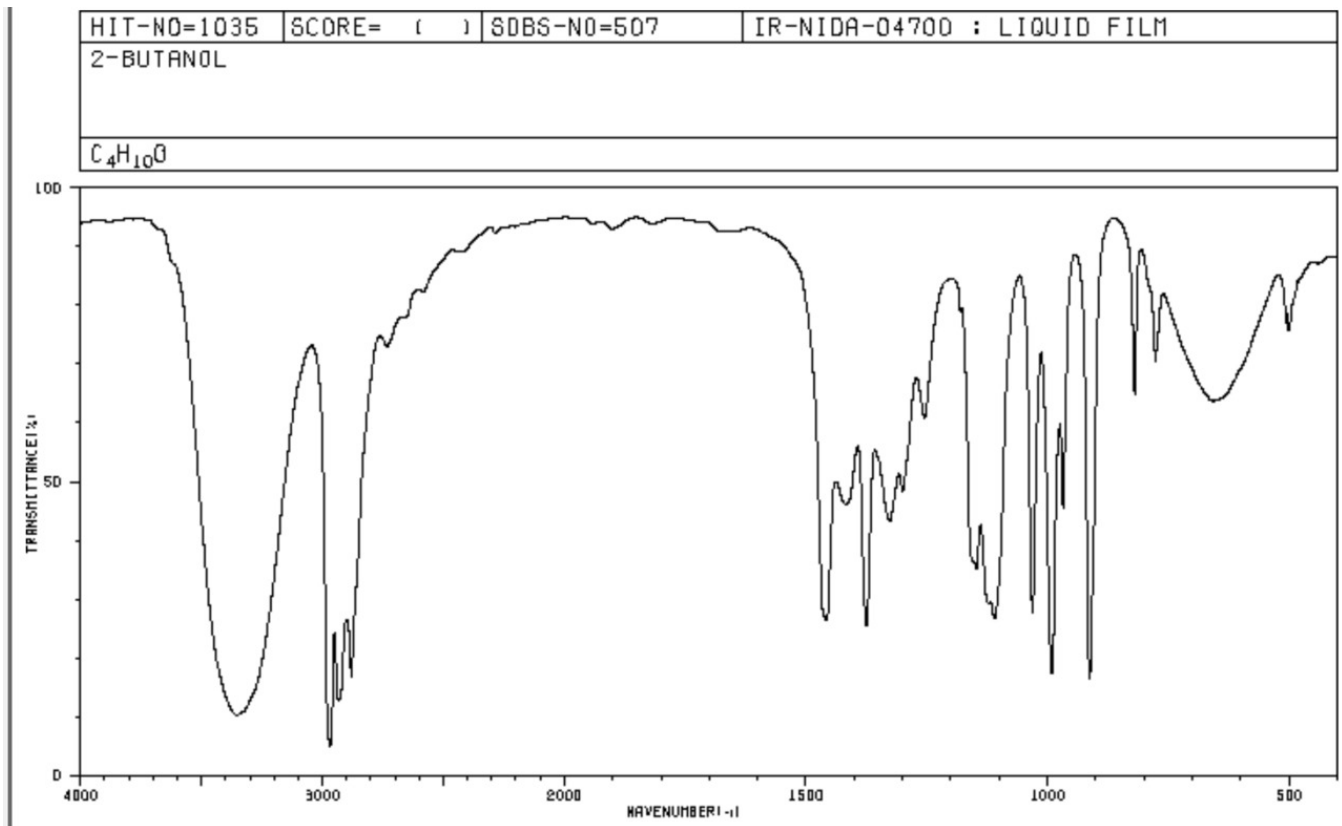


Spektriharjoitusten vastaukset

1. harjoitus

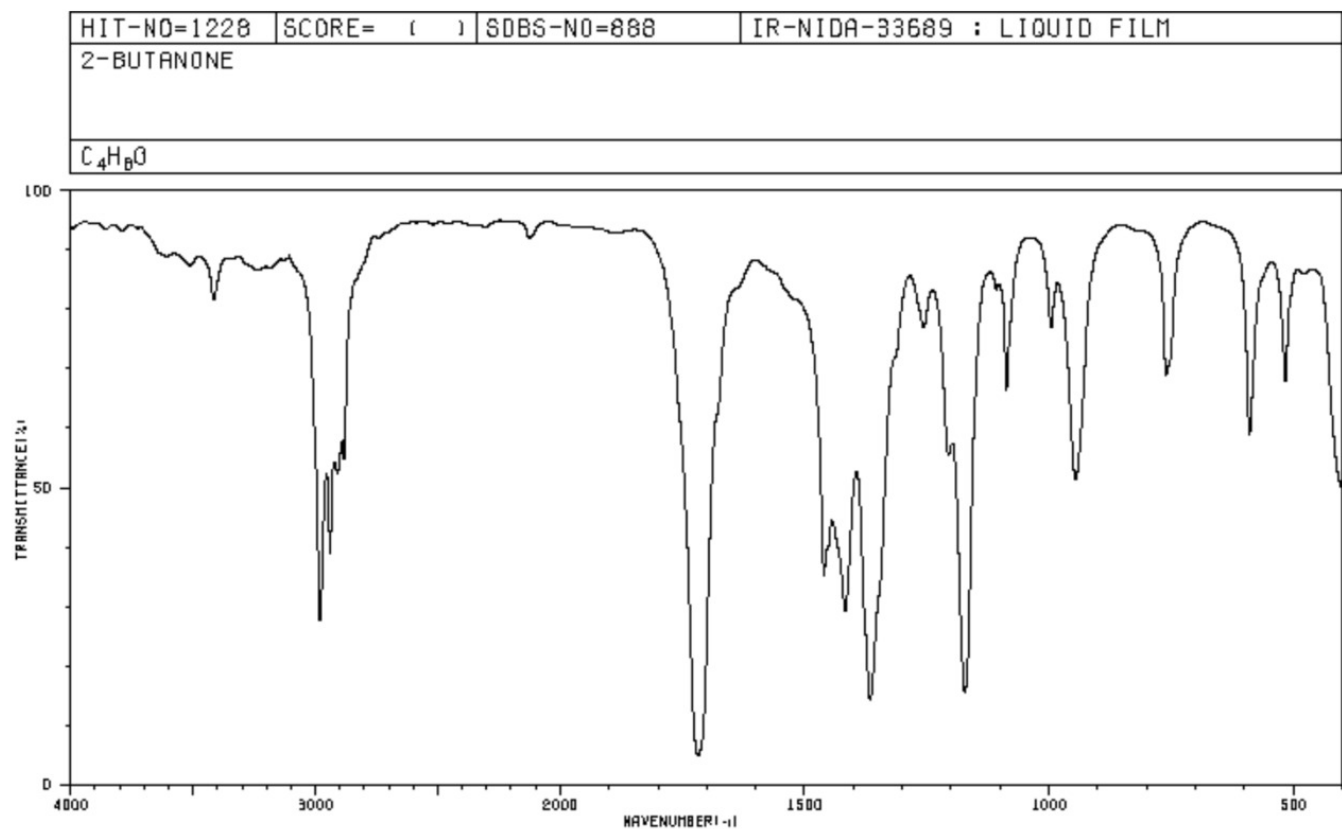
2-butanoli, huomioi OH-ryhmän piikki eli kyseessä alkoholi, vetyjen määrä viittaa siihen, ettei rungossa ole kaksoissidoksia tai rengasrakenteita. Vertaamalla 1-butanolin ja 2-butanolin spektrejä, huomataan, että kyse on 2-butanolista.



**2. harjoitus**

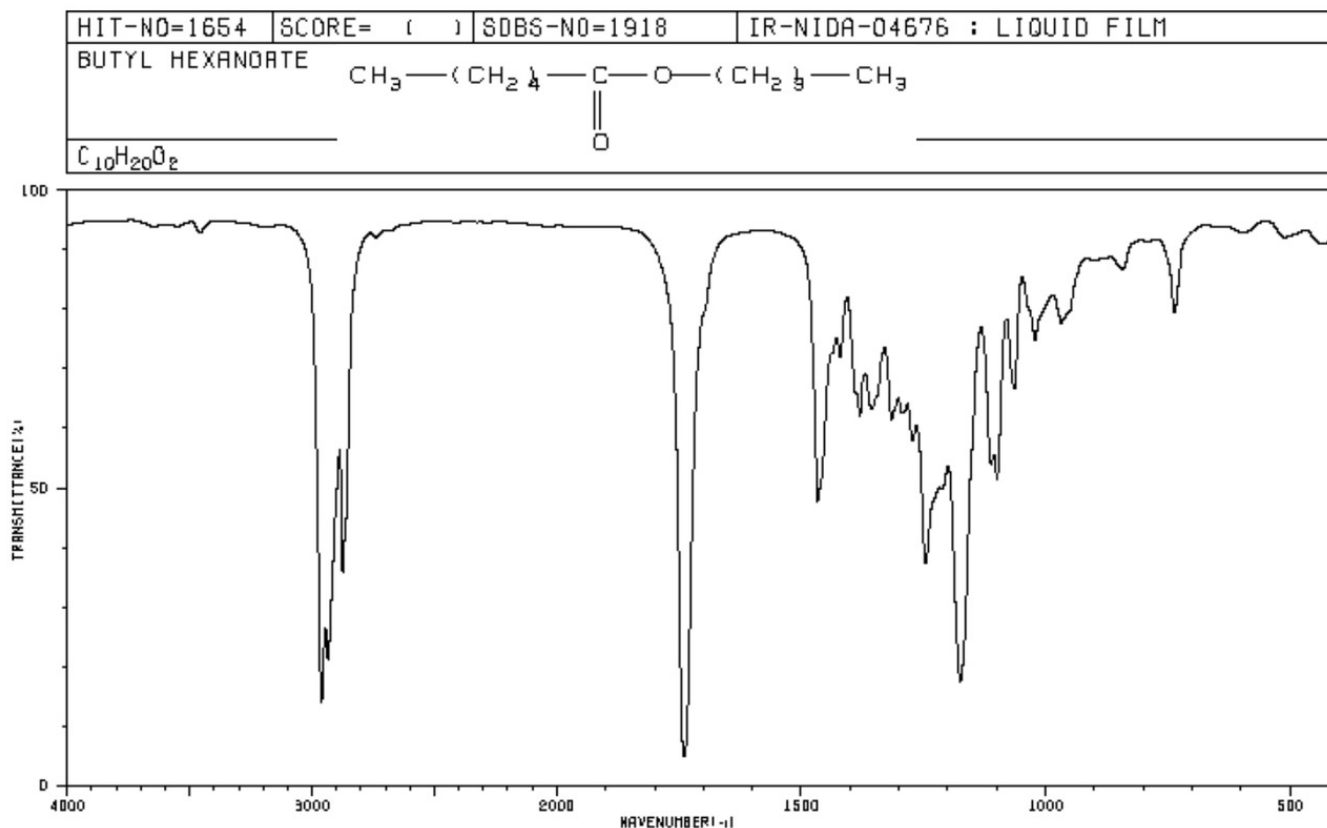
2-butanoni, ainoan hapen täytyy olla karbonyylihappi (C=O) eli kyse on joko ketonista tai aldehydistä.

Vertailemma taas mahdollisia spektrejä huomataan, että kyse on 2-butanonista. Toinen mahdollinen olisi voinut olla butanaali.

**3. harjoitus**

Butyyliheksanaatti. Spektristä voi päätellä on ainakin karbonyyliryhmä. Molekyylikaava toteaa, että on

kaksi happea, joten oletus voisi olla, että kyseessä olisi silloin joko karboksyylihappo. Mutta spektrissä ei ole OH-ryhmän tyypillistä piikkiä, kyse ei ole karboksyylihaposta. Seuraava vaihtoehto on esteri. Spektristä huomataan, että siinä on C-O -sidos, joten esteri voisi olla mielekäs vaihtoehto. Tämän jälkeen taas vertaillaan eri spektrejä.



Huomioi ...