

2. Suhdekaava ja molekyylikaava





A. Orgaanisten yhdisteiden rakenteita mallinnetaan erilaisilla kaavoilla, molekyylimalleilla ja molekyylimallinnuksella.

B. Orgaanisille yhdisteille tyypillisiä kaavoja ovat **suhdekaava**, **molekyylikaava** ja **rakennekaava**.

-> Rakennekaava on näistä kaikkein täsmällisin. Siitä on mahdollista nähdä, kuinka atomit ovat sitoutuneet toisiinsa.

-> Piirto-ohjelmilla piirretyt rakennekaavat ovat kuitenkin varsin yksinkertaistettuja malleja molekyylien todellisesta, kolmiulotteisesta rakenteesta.

Osaat:

- Laskennallisesti ratkaista yhdisteen suhdekaavan.
- Laskennallisesti ratkaista yhdisteen molekyylikaavan.



Suhde- ja
molekyylikaava

- **Suhdekaava eli empiirinen kaava:** ilmoittaa yhdisteessä olevien alkuaineatomien pienimmän kokonaislukusuhteen.
- **Orgaanisen yhdisteen molekyylikaava** ilmoittaa alkuaineatomien todelliset ainemäärät yhdessä moolissa tarkasteltavaa yhdistettä.

Suhdekaava

- Esimerkki suhdekaavasta CH_2 (teht. pohdi lyhyesti atomien suhdetta)

Hiili- ja vetyatomeja **suhteessa** 1:2

- Suhdekaavaa CH_2 voidaan tulkita myös seuraavasti: yhdisteen vetyatomien **ainemäärä** on kaksinkertainen verrattuna hiiliatomien ainemäärään.

ESIMERKKI 1 SUHDEKAAVAN RATKAISEMINEN
ALKUAINEIDEN MASSOISTA



Esimerkki 1.

- Päivän energiansaannista noin 10–20 % suositellaan saatavaksi proteiineista.
- Proteiinin tarve painokiloa kohden on 1,0–1,3 grammaa, mikä tarkoittaa 50 kilogrammaa painavalle henkilölle noin 60 grammaa proteiinia päivässä. Suomessa proteiinin saanti on yleensä runsasta ja proteiinia saadaan noin 100 g päivässä.
- Kaikki proteiinit rakentuvat aminohapoista. Aminohapot puolestaan sisältävät aina hiiltä, vetyä, happea ja typpeä. Eräs aminohappo sisältää 36,1 grammaa hiiltä, 5,30 grammaa vetyä, 10,5 grammaa typpeä ja 48,1 grammaa happea. Ratkaise aminohapon suhdekaava.

Ratkaisu:

- **MALLIRATKAISU**

- $m(\text{C}) = 36,1 \text{ g}$

- $m(\text{H}) = 5,30 \text{ g}$

- $m(\text{N}) = 10,5 \text{ g}$

- $m(\text{O}) = 48,1 \text{ g}$

- $M(\text{C}) = 12,01 \text{ g/mol}$

- $M(\text{H}) = 1,008 \text{ g/mol}$

- $M(\text{N}) = 14,01 \text{ g/mol}$

- $M(\text{O}) = 16,00 \text{ g/mol}$

- Ratkaistaan alkuaineatomien ainemäärät suureyhtälöstä $n = \frac{m}{M}$ $n = \frac{m}{M}$.
Merkitään välitulokset riittävällä tarkkuudella.

$n(\text{C}) = 36,1 \text{ g} / 12,01 \text{ g/mol} = 3,0058 \text{ mol}$
 $n(\text{C}) = 36,1 \text{ g} / 12,01 \text{ g/mol} = 3,0058 \text{ mol}$
 $n(\text{H}) = 5,30 \text{ g} / 1,008 \text{ g/mol} = 5,2579 \text{ mol}$
 $n(\text{H}) = 5,30 \text{ g} / 1,008 \text{ g/mol} = 5,2579 \text{ mol}$
 $n(\text{N}) = 10,5 \text{ g} / 14,01 \text{ g/mol} = 0,74946 \text{ mol}$
 $n(\text{N}) = 10,5 \text{ g} / 14,01 \text{ g/mol} = 0,74946 \text{ mol}$
 $n(\text{O}) = 48,1 \text{ g} / 16,00 \text{ g/mol} = 3,0063 \text{ mol}$
 $n(\text{O}) = 48,1 \text{ g} / 16,00 \text{ g/mol} = 3,0063 \text{ mol}$

Jaetaan kunkin alkuaineen ainemäärä pienimmällä, tässä tapauksessa typen, ainemäärällä. Merkitään tässäkin vaiheessa välitulokset riittävällä tarkkuudella.

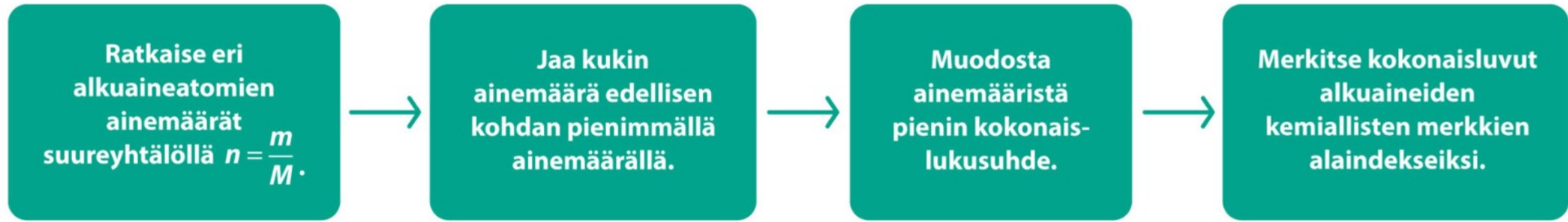
$n(\text{C})n(\text{N}) = 3,0058 \text{ mol} / 0,74946 \text{ mol} = 4,0106$
 $n(\text{C})n(\text{N}) = 3,0058 \text{ mol} / 0,74946 \text{ mol} = 4,0106$
 $n(\text{H})n(\text{N}) = 5,2579 \text{ mol} / 0,74946 \text{ mol} = 7,0156$
 $n(\text{H})n(\text{N}) = 5,2579 \text{ mol} / 0,74946 \text{ mol} = 7,0156$
 $n(\text{N})n(\text{N}) = 0,74946 \text{ mol} / 0,74946 \text{ mol} = 1,0000$
 $n(\text{N})n(\text{N}) = 0,74946 \text{ mol} / 0,74946 \text{ mol} = 1,0000$
 $n(\text{O})n(\text{N}) = 3,0063 \text{ mol} / 0,74946 \text{ mol} = 4,0113$
 $n(\text{O})n(\text{N}) = 3,0063 \text{ mol} / 0,74946 \text{ mol} = 4,0113$

Suhdeluvut eivät ole täsmälleen kokonaislukuja, koska lähtöarvot ovat kokeellisesti määritettyjä likiarvoja. Lähtöarvojen tarkkuuden perusteella suhdeluvut voidaan kuitenkin pyöristää kokonaisluvuiksi, joten $n(\text{C}):n(\text{H}):n(\text{N}):n(\text{O}) = 4:7:1:4$.

Vastaus: Aminohapon suhdekaava on $\text{C}_4\text{H}_7\text{NO}_4$.

Orgaanisten yhdisteiden suhde- ja molekyylikaavoissa alkuaineet merkitään seuraavassa järjestyksessä: ensin hiili, sitten vety ja lopuksi muut alkuaineet niiden kemiallisen merkin mukaisessa aakkosjärjestyksessä.





Esimerkki:

SUHDEKAAVAN RATKAISEMINEN YHDISTEEN MASSAPROSENTTISESTA KOOSTUMUKSESTA



Biogeeniset amiinit ovat typpiyhdisteitä, joita esiintyy pieninä pitoisuuksina luonnostaan useissa ruoka-aineissa. Suurina pitoisuuksina ne saattavat aiheuttaa äkillisiä allergian kaltaisia oireita. Erään amiinin alkuainekoostumus massaprosentteina on: hiiltä 48,8 %, vetyä 13,5 % ja loput typpeä. Ratkaise yhdisteen suhdekaava.

VIHJE:

Valitaan yhdisteen massaksi 100,0 grammaa. Massaprosenttisen koostumuksen perusteella tämä massa sisältää eri alkuaineatomeja seuraavasti:

$$m(\text{C}) = 48,8 \text{ g}$$

$$m(\text{H}) = 13,5 \text{ g}$$

$$m(\text{N}) = m(\text{amiini}) - m(\text{C}) - m(\text{H}) = (100,0 - 48,8 - 13,5) \text{ g} = 37,7 \text{ g}$$

Ratkaistaan alkuaineatomien ainemäärät suureyhtälöstä $n = m/M$.

$$n(\text{C}) = 48,8 \text{ g} / 12,01 \text{ g/mol} = 4,0633 \text{ mol}$$

$$n(\text{H}) = 13,5 \text{ g} / 1,008 \text{ g/mol} = 13,393 \text{ mol}$$

$$n(\text{N}) = 37,7 \text{ g} / 14,01 \text{ g/mol} = 2,6909 \text{ mol}$$

Jaetaan kunkin alkuaineen ainemäärä pienimmällä, tässäkin tapauksessa typen, ainemäärällä.

$$n(\text{C})/n(\text{N})=4,0633 \text{ mol}/2,6909 \text{ mol}=1,5100$$

$$n(\text{H})/n(\text{N})=13,393 \text{ mol}/2,6909 \text{ mol}=4,9771$$

$$n(\text{N})/n(\text{N})=2,6909 \text{ mol}/2,6909 \text{ mol}=1,0000$$

Tässä vaiheessa ainemäärien suhde on: $n(\text{C}):n(\text{H}):n(\text{N}) = 1,5100:4,9771:1,0000$.

Huomaa, että luku 1,5100 ei ole riittävällä tarkkuudella kokonaisluku, eli sitä ei pyöristetä kokonaisluvuksi 2.

Ratkaisua jatketaan kertomalla kaikki luvut kahdella ja pyöristetään näin saadut luvut kokonaisluvuiksi.

$n(\text{C}):n(\text{H}):n(\text{N}) = 3,0200:9,9542:2,0000$ $n(\text{C}):n(\text{H}):n(\text{N}) = 3:10:2$. Yhdisteen suhdekaava on $\text{C}_3\text{H}_{10}\text{N}_2$.

Vastaus: Suhdekaava on $\text{C}_3\text{H}_{10}\text{N}_2$.

HUOM!

Suhdekaava CH_2 voidaan esittää myös merkinnällä $(\text{CH}_2)_x$. Tässä merkinnässä x tarkoittaa, että molekyylikaavassa hiili- ja vetyatomeja on jonkin positiivisen kokonaislukukertoimen x mukaisesti. Esimerkiksi yhdisteille:

1. $\text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow x = 2$ ja 2. $\text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow x = 3$.