

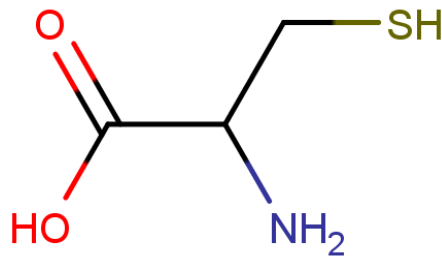
Perjantai 25.5.2018

VASTAA YHTEENSÄ VIITEEN TEHTÄVÄÄN SITEN, ETTÄ OLET VASTANNUT TEHTÄVIIN 1-3!  
MAOL JA LASKINOHJELMISTOT OVAT SALLITTUJA!

1. Monivalinta. Valitse oikea vastaus (vain yksi on oikea).

OIKEAT VASTAUKSET VALITTUNA + PUNAISELLA!

1.1 Mihin yhdisteryhmään alla oleva molekyyli voidaan sijoittaa?



- sulfonihappoihin    
  fenoleihin    
  aldehydeihin    
  **amiineihin**

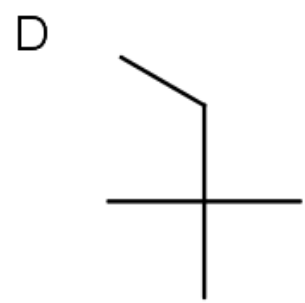
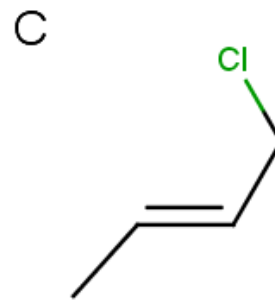
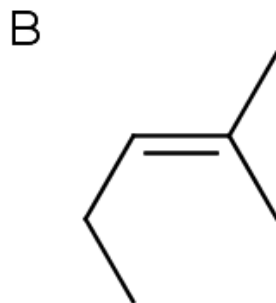
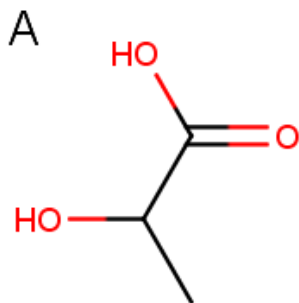
1.2 Mikä bentseeniä koskeva väite on väärin?

- Bentseenin johdannaisten nimeämiseen voidaan käyttää *orto-*, *meta-* ja *para-*liitteitä.  
 Bentseeni on avaruusrakenteeltaan tasomainen.  
 Bentseenin kaikki hiiliatomit ovat  $sp^2$ -hybridisoituneita.  
 **Bentseenissä on  $sp^2$ - ja  $sp^3$ -hybridisoituneita hiiliatomeja, koska voidaan puhua sidoksen delokalisoitumisesta.**

1.3 Kahden  $sp$ - hybridisoituneiden hiiliatomien välillä on

- yksi  $\sigma$ -sidos ja yksi  $\pi$ -sidos.    
  **yksi  $\sigma$ -sidos ja kaksi  $\pi$ -sidosta.**    
  kaksi  $\sigma$ -sidosta ja yksi  $\pi$ -sidos.    
  kaksi  $\sigma$ -sidosta ja kaksi  $\pi$ -sidosta.

1.4 Millä seuraavista yhdisteistä voi esiintyä optista isomeriaa?

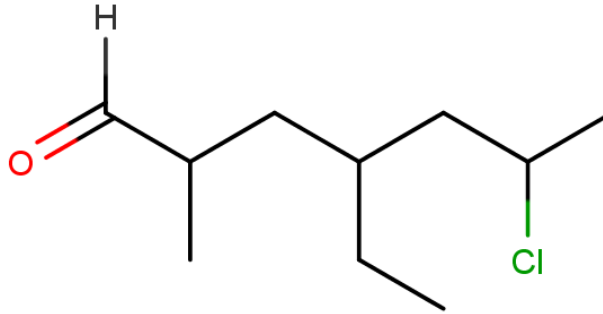


- A**    
  B    
  C    
  D

1.5 Millä seuraavista yhdisteistä voi esiintyä *cis-trans*-isomeriaa?

- 1-buteenilla       **2-buteenilla**       2-metyyli-2-pentanolilla       2-metyyli-2-penteenillä

1.6 Yhdisteen nimi on



- 2-kloori-4-etyyli-6-metyyli-heptanaali.  
 2-kloori-4-etyyli-6-metyyli-heptanoli.  
 6-kloori-4-etyyli-2-metyyli-heptanoli.  
 **6-kloori-4-etyyli-2-metyyli-heptanaali.**

1.7 Mikä seuraavista väittämistä on väärin?

- Kun *s*-orbitaali ja kolme *p*-orbitaalia sekoittuvat keskenään muodostuu *sp*-hybridiorbitaali.**  
 *p*-orbitaalien yhteensulautuminen johtaa aina piisidoksen muodostumiseen hybridisaatiossa.  
 Kovalenttisessa kaksoissidoksessa on piisidos ja sigmasidos.  
 Piisidos on heikompi kuin sigmasidos.

1.8 Mitkä yhdisteparit ovat keskenään isomeerejä?

- propaani – syklopropaani  
 **2-butanoli – metyylipropyylietteri**  
 etanoli – etanaali  
 bentseeni – sykloheksaani

1.9 Liuoksen A konsentraatio on 2,0 mol/l. Tästä valmistetaan liuos B seuraavasti: Liuosta A pipetoidaan mittapipetillä 5,5 cm<sup>3</sup>. Tämä tilavuus laimennetaan 25,0 millilitraksi mittapullossa. Mikä on liuoksen B konsentraatio? MUISTA: 1 dm<sup>3</sup> ≅ 1 l.

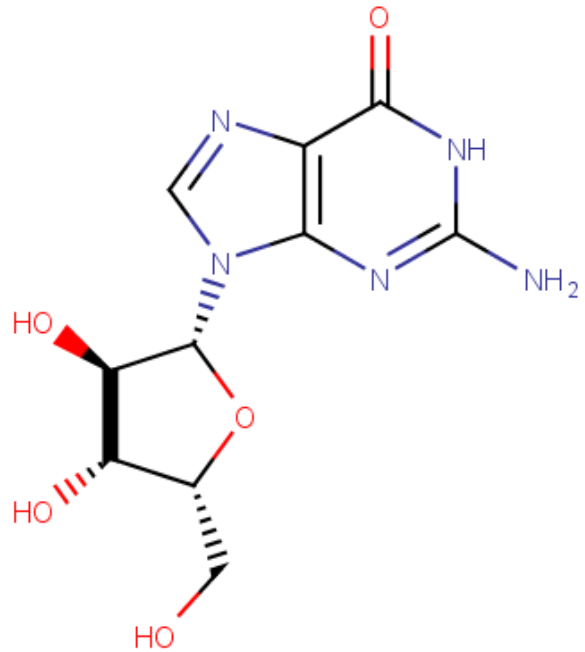
- 0,44 mol/l**       9,1 mol/l       4,4 mol/l       0,015 mol/l

1.10 Miten alleviivattu atomi on hybridisoitunut? H<sub>2</sub>C=CH<sub>2</sub>

- sp*       ***sp*<sup>2</sup>**       *sp*<sup>3</sup>       ei mikään mainituista

1.11 Guanosiini on yksi RNA-molekyylissä esiintyvistä nukleosideista. Guanosiinin molekyylikaava on  $C_{10}H_{13}N_5O_5$ . Eräässä kokeessa tarvittiin guanosiinia 4 moolia. Kuinka monta moolia tyyppiä tuli tällöin kokeeseen?

- 20 mol                       4 mol  
 5 mol                               9 mol



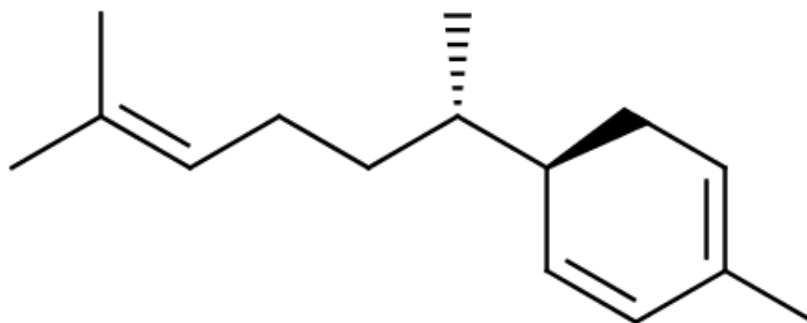
1.12 Erään hiilivedyn molekyylikaava on  $C_5H_{10}$ . Mikä seuraavista väitteistä ei pidä paikkaansa

- Hiilivedyn nimi voi olla 1-penteeni.  
 Hiilivety voi olla rengasrakenteinen.  
 Hiilivety voi sisältää kaksi kaksoissidosta.  
 Hiilivedyissä voi olla sekä *cis-trans*-isomeriaa että optista isomeriaa.

1.13 Mikä seuraavista on stereoisomerian laji?

- paikkaisomeria                       kristalli-isomeria                       optinen isomeria                       funktioisomeria

1.14 Inkiväärin tuoksu johtuu enimmäkseen mm. alla olevassa kuvassa näkyvästä molekyylistä, zingiberenistä. Kuinka monta asymmetristä hiiltä sillä on?



- 0                                       1                                       2                                       3

1.15 Mikä seuraavista ei ole aineen rakenteen analyysimenetelmä?

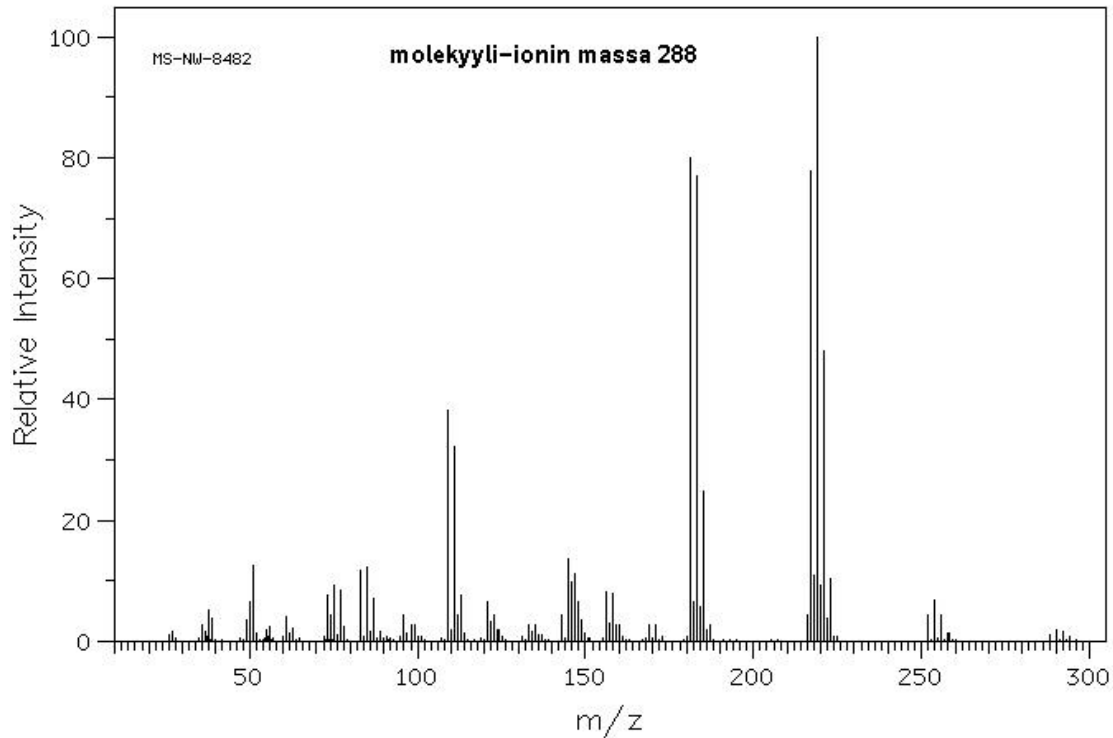
- Röntgenkristallografia                       IR-spektroskopia                       Massaspektrometria                       Ohutlevykromatografia

2. Hyönteismyrkkinä käytettävän orgaanisen yhdisteen massaprocenttinen koostumus on seuraava:

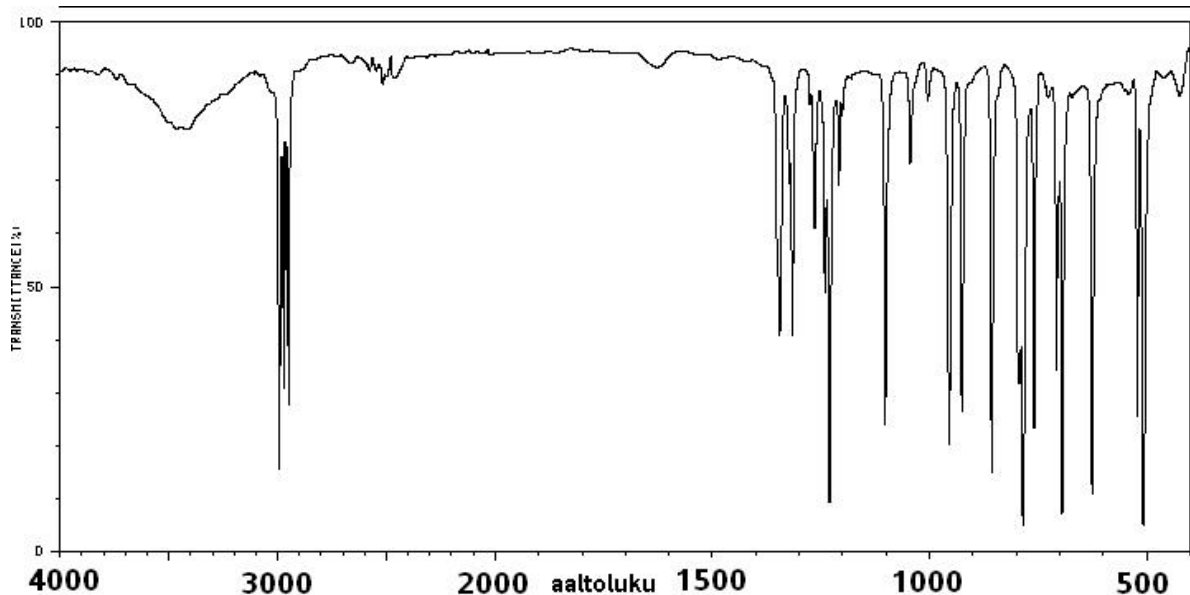
24,779 % hiiltä, 2,0794 % vetyä ja 73,142 % klooria.

a) Mikä on yhdisteen empiirinen kaava? (3p)

b) Mikä on yhdisteen molekyylikaava, kun MS-spektrin tiedot ovat alla olevassa kuvassa. (1p)



c) IR-spektrin (IR-spektri alla) ja rakennemäärityksen nojalla tiedetään, että kaikki hiiliatomit ovat järjestyneet syklisteksi rakenteeksi ja jokaiseen hiileen on liittynyt vähintään yksi kloori. Esitä rakennekaava ja nimeä yhdiste. Käytä MarvinSketch-ohjelmaa ja hyödynnä sitä. (2p)



a) Otetaan tuotetta 100 grammaa. Tällöin

$$m(\text{C}) = 24,779 \text{ g} \Rightarrow n(\text{C}) = \frac{m}{M} = \frac{24,779 \text{ g}}{12,01 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 2,063 \ 197 \dots \text{ mol}$$

$$m(\text{H}) = 2,0794 \text{ g} \Rightarrow n(\text{H}) = \frac{m}{M} = \frac{2,0794 \text{ g}}{1,008 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 2,062 \ 896 \dots \text{ mol}$$

$$m(\text{Cl}) = 73,142 \text{ g} \Rightarrow n(\text{Cl}) = \frac{m}{M} = \frac{73,142 \text{ g}}{35,45 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 2,063 \ 244 \dots \text{ mol}$$

Näin ollen ainemäärien suhde (jaetaan pienimmällä, eli  $n(\text{H})$ :lla)

$$n(\text{C}):n(\text{H}):n(\text{Cl}) \approx 1:1:1$$

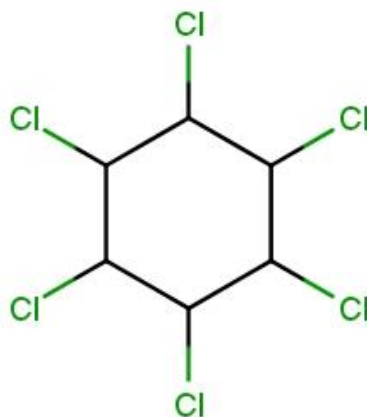
Näin ollen empiirinen kaava on  $(\text{CHCl})_x$ , missä  $x$  on kokonaisluku  $> 0$ .

b) Koska MS-spektristä saadaan molekyyli-ionin massaksi 288, niin jakamalla tämä luku yhden yksikön  $\text{CHCl}$  moolimassalla saadaan  $x$  ratkaistua:

$$x = \frac{288}{48,468} = 5,94 \dots \approx 6$$

Näin ollen yhdisteen molekyylikaava on  $\text{C}_6\text{H}_6\text{Cl}_6$ .

c) Koska kloorin ja hiilen välisen sidoksen IR-absorptio osuu sormenjälkialueelle, niin IR-spektriä käyttäen voidaan todeta yhdisteen sisältävän  $\text{C}_{sp^3} - \text{H}$  sidosten absorptioita. Näin ollen yhdiste olisi (myös tehtävänannon tietoja käyttäen) 1,2,3,4,5,6-heksa-kloorisykloheksaani.



Name: 1,2,3,4,5,6-hexachlorocyclohexane

Molecular weight: 290,81

Formula:  $\text{C}_6\text{H}_6\text{Cl}_6$

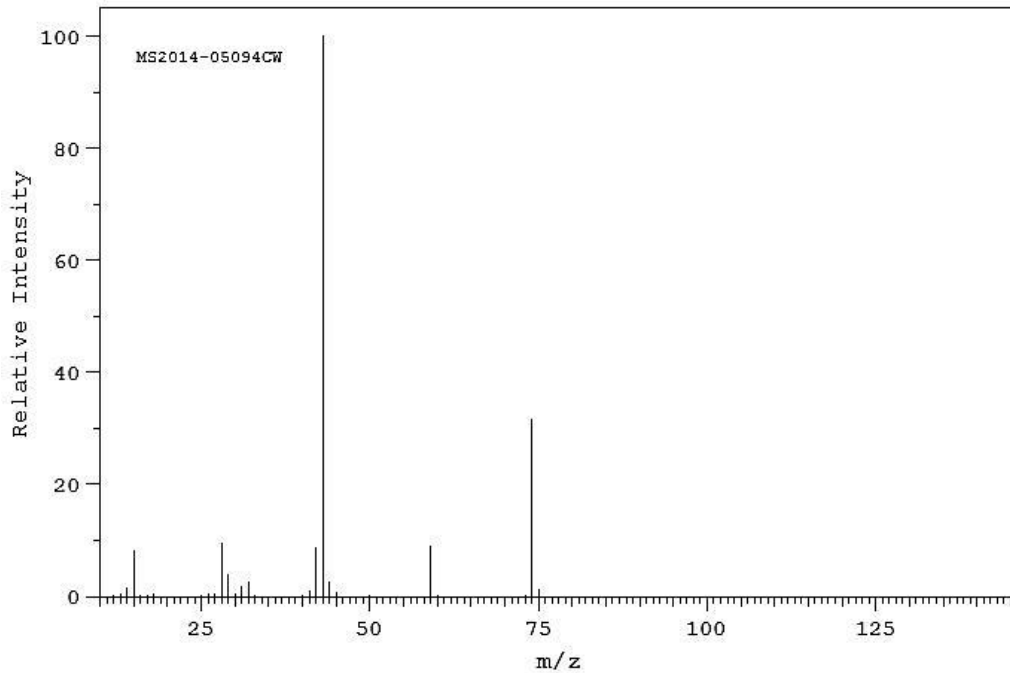
Traditional name: lindane

3. a) Salibandyn pelaaja hikoilee ottelun aikana 2,0 dl hikeä, jonka kaliumionipitoisuus on 4,0 mmol/l.

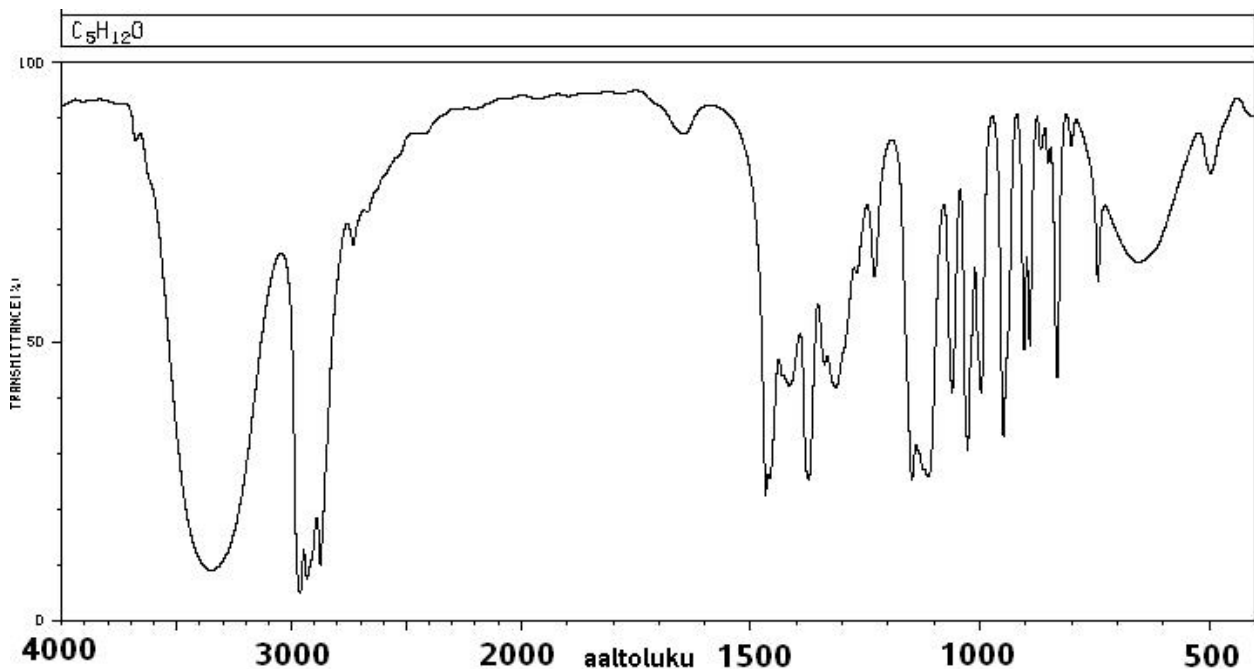
Kuinka monta milligrammaa kaliumioneja pelaaja menettää ottelun aikana? (1p)

b) Selitä laskujen kera kuinka valmistat 250 millilitraa 0,5-molaarista NaOH-liuosta. Käytössäsi on peruslabravälineet ja kiinteää NaOH. Menetelmät, laskut ja välineet tulee olla vastauksessa. (2p)

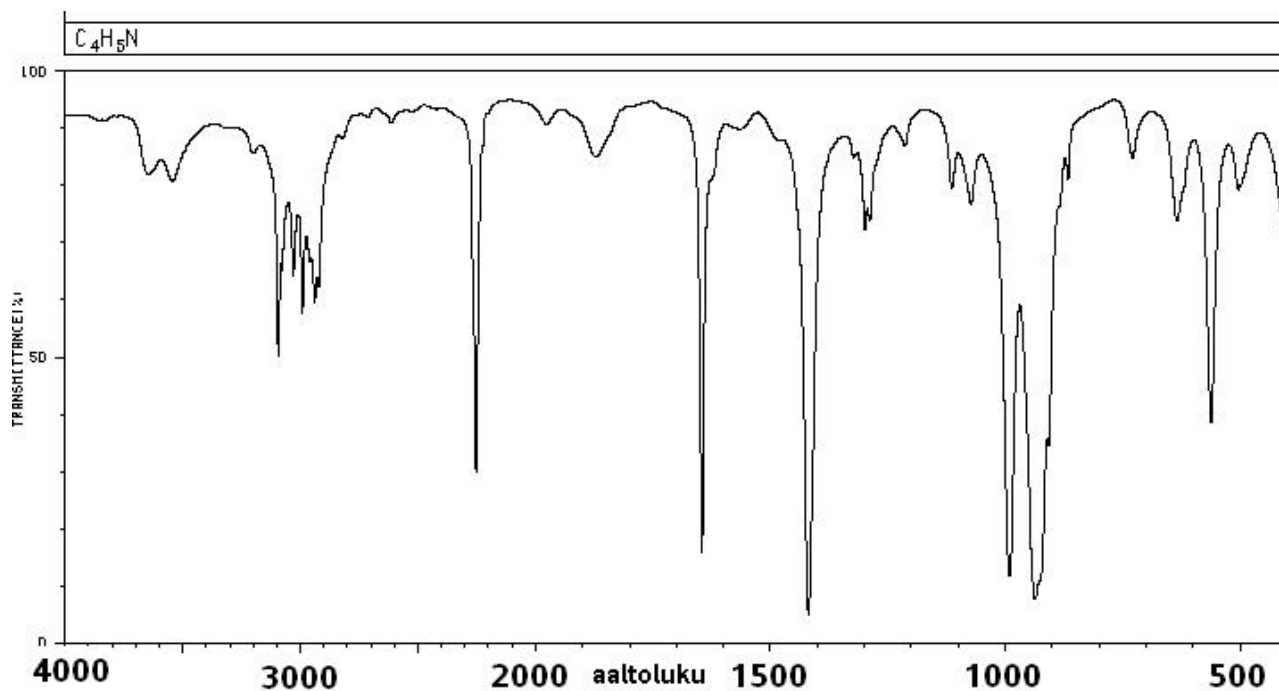
c) Määritä MS-spektristä yhdisteen moolimassa. Perustele. (1p)



d) Päätele IR-spektrin kautta mitä funktionaalisia ryhmiä yhdisteellä on. Yhdisteen molekyylikaava on  $C_5H_{12}O$ . (1p)



e) Päättele IR-spektrin kautta mitä funktionaalisia ryhmiä yhdisteellä on. Yhdisteen molekyylikaava on  $C_4H_5N$ . (1p)



a) Tiedetään tilavuus ja konsentraatio  $\rightarrow$  voidaan ainemäärä määrittää ja sitä kautta massa. Siis

$$n(K^+, \text{hiki}) = c \cdot V = 0,004 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 0,2 \text{ l} = 0,008 \text{ mol}$$

$$\Rightarrow m(K^+, \text{hiki}) = n \cdot M = 0,008 \text{ mol} \cdot 39,10 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 0,03128 \text{ g} = 31,28 \text{ mg}.$$

b) Lasken ensin kuinka paljon pitää punnita kiinteää NaOH:a. Saan

$$n(\text{NaOH}) = c \cdot V = 0,5 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 0,25 \text{ l} = 0,125 \text{ mol}$$

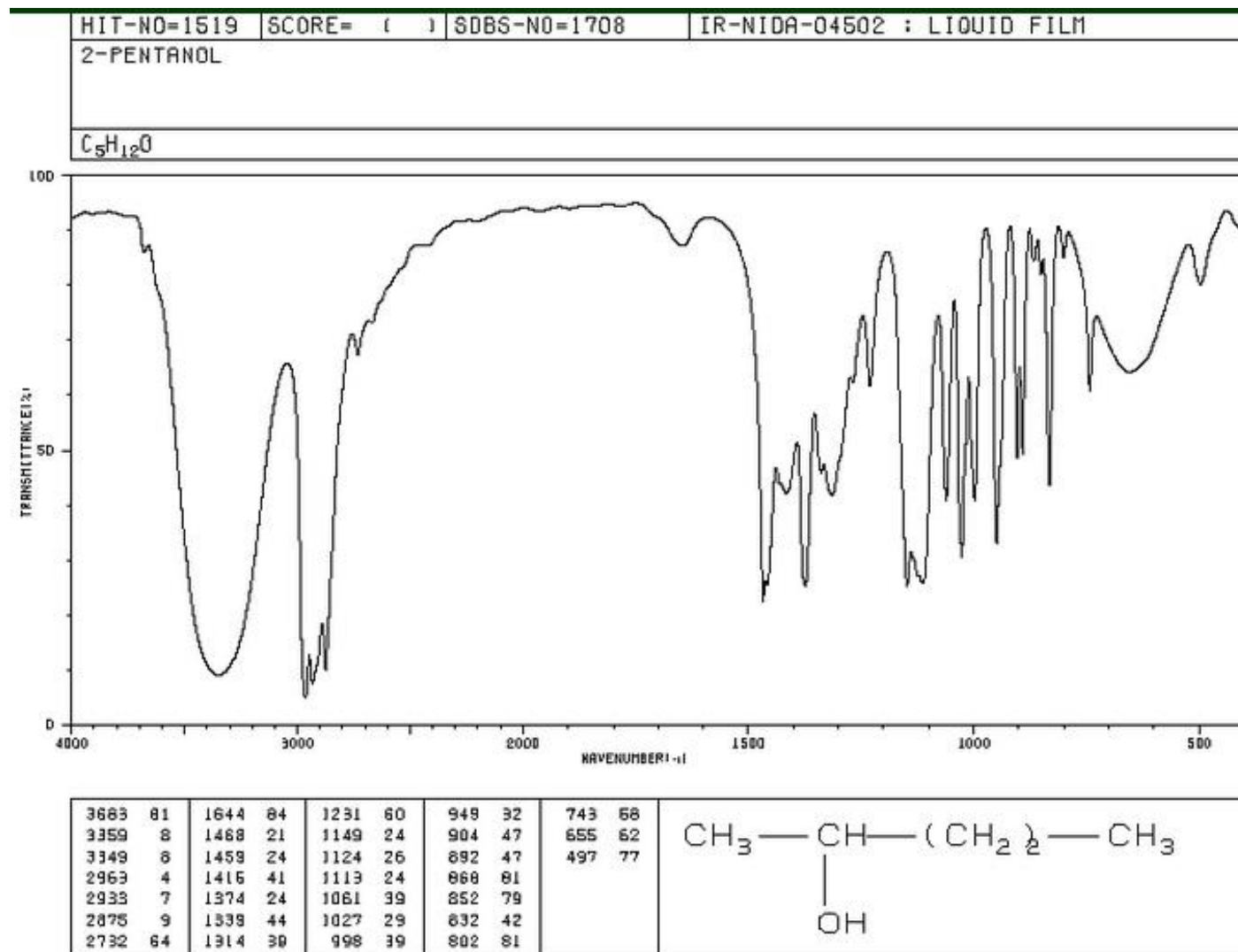
$$\Rightarrow m(\text{NaOH}) = n \cdot M = 0,125 \text{ mol} \cdot 39,998 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 4,99975 \text{ g} \approx 5 \text{ g}.$$

Sitten punnitsen noin 5 grammaa NaOH:a ja siirrän sen suppilon avulla 250 millilitran mittapulloon, jonka pohjalle olen laittanut hieman tislattua vettä. Sitten lisään tislattua vettä yli puolen välin ja liuotan kiinteän NaOH:n kokonaan. Lopuksi täytän merkkiin asti tislattulla vedellä ja ravistelen vielä huolella. Lopuksi siirrän liuoksen esim. ruiskupulloon ja teen tarvittavat merkinnät pullon kylkeen. Tiskaan astiat.

c) Yhdisteen moolimassa saadaan molekyyli-ionin lukuarvosta. Siis 74.

d) Koska yhdisteessä on hiiltä, vetyä ja happea, ja koska yhdisteessä ei ole voimakasta piikkiä aaltoluvun  $\sim 1700\text{ cm}^{-1}$  kohdalla eli ei karbonyylistä hiiltä ja koska yhdisteen molekyylikaava on  $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$  eli yhdisteessä ei ole kaksois- tai kolmoissidoksia, niin vaihtoehdot funktionaaliseen ryhmään ovat oikeastaan vain hydroksyyli-ryhmä. Absorptiopiikki aaltoluvun  $\sim 3000\text{--}2800\text{ cm}^{-1}$  kohdalla tulee sidoksesta  $\text{C}_{sp^3} - \text{H}$ .

Kyseessä 2-pentanol.

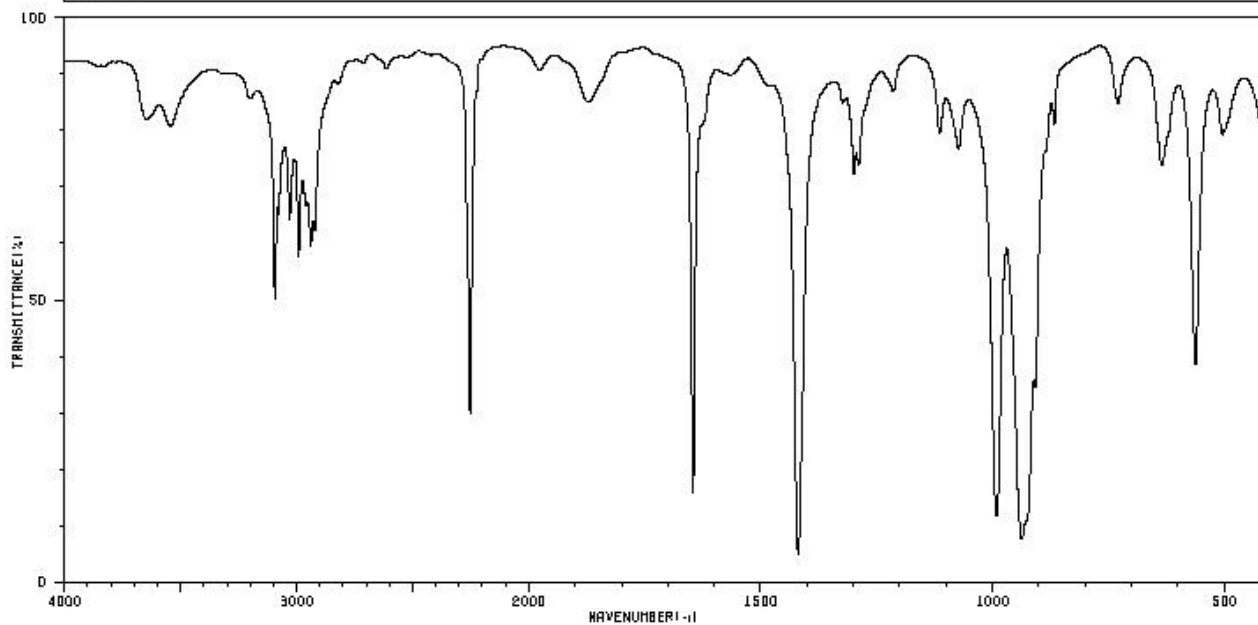


e) Yhdisteessä on hiiltä, vetyä ja typpeä. Nyt yhdisteessä on voimakas piikki aaltoluvun  $\sim 1650\text{ cm}^{-1}$  kohdalla, samoin aaltoluvun  $\sim 2250\text{ cm}^{-1}$  kohdalla. Absorptiopiikki aaltoluvun  $\sim 3000\text{--}2800\text{ cm}^{-1}$  kohdalla tulee sidoksesta  $\text{C}_{sp^3} - \text{H}$ . Vaihtoehdot funktionaaliseksi ryhmiksi ovat alkenyyli-ryhmä eli kaksoissidos (aaltoluvusta  $\sim 1650\text{ cm}^{-1}$ ) ja syano-ryhmä eli  $\text{C} \equiv \text{N}$  (aaltoluvusta  $\sim 2250\text{ cm}^{-1}$ ).

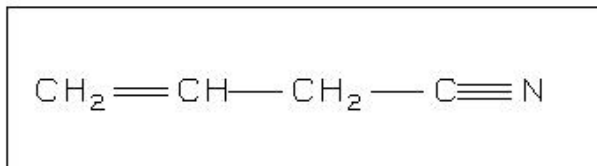
Kyseessä on allyyli-syanidi.



HIT-NO=2363	SCORE= ( )	SDBS-NO=3792	IR-NIDA-01537 : LIQUID FILM
ALLYL CYANIDE			
C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N			

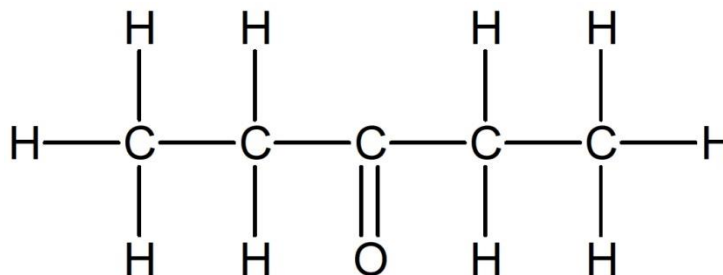


3645	79	2968	64	1299	70	908	39
3545	77	2939	57	1289	70	867	79
3199	81	2922	60	1214	84	730	81
3094	47	2262	28	1114	77	636	70
3077	62	1870	81	1073	74	563	37
3030	82	1645	15	991	11	505	77
2991	65	1419	4	937	7	500	77



4. a) Piirrä yhdisteelle (kuva alla)

- i) yksi paikkaisomeeri,                      ii) yksi ketjuisomeeri,                      iii) yksi funktioisomeeri.  
 iv) Nimeä kaikki piirtämäsi yhdisteet. (3p)



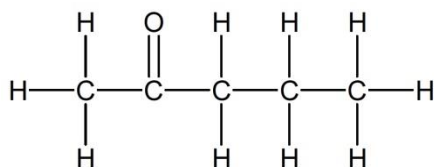
b) Piirrä seuraavat yhdisteet ja vastaa kysymyksiin:

- i) 2-bromi-heksaani; Onko yhdisteessä kiraliakeskusta?  
 ii) 6-etyyli-5,3-dimetyyli-2-oktanoli; Onko alkoholi primäärinen, sekundäärinen vai tertiäärinen?

iii) *cis*-4-amino-sykloheptanoli; Kuinka avaruudellinen sidosten suuntautuminen tulee piirtää tasokuviossa?

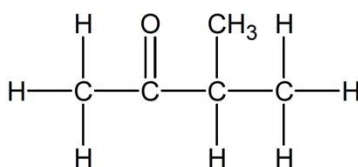
iv) Määritä edellä annettujen yhdisteiden molekyylikaava ja laske/määritä (voit siis hyödyntää ohjelmistoja) yhdisteiden moolimassa. (3p)

a) i)



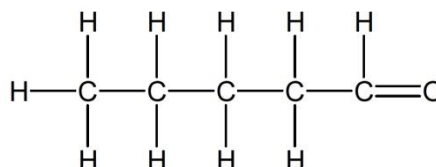
2-pentanoni

ii)



3-metyyli-2-butanoni

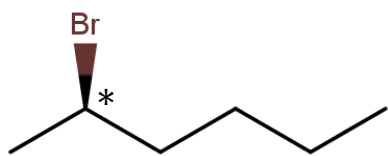
iii)



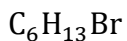
pentanaali

Muita paikka- tai ketjuisomeerejä ei ole, koska kolmiulotteinen tarkastelu. Koska yhdisteessä on vain yksi happi, niin kolmas funktioisomeeri voisi olla eetterit tai alkoholit, mutta tällöin olisi vetyjä liian vähän tai yksi hiili liikaa.

b)

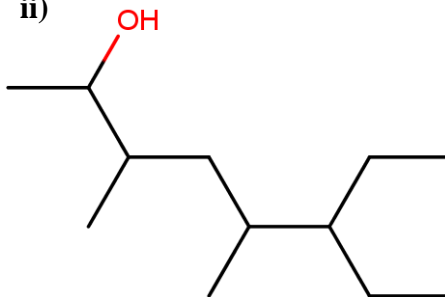


On yksi kiraliakeskus eli asymmetrinen hiili. Merkitty \*:lla.

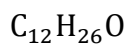


$$M(C_6H_{13}Br) = 165,064 \frac{g}{mol}$$

ii)

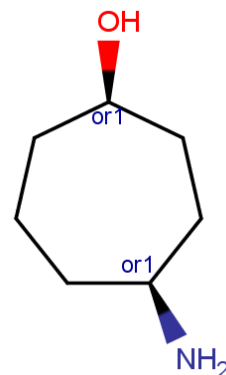


Alkoholi on sekundäärinen.

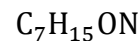


$$M(C_{12}H_{26}O) = 186,328 \frac{g}{mol}$$

iii)



Tasossa olevat sidokset pelkillä viivoilla, tasosta katsojaan päin vahvennetulla viivalla ja tasosta poispäin katkoviivalla.



$$M(C_7H_{15}ON) = 129,2 \frac{g}{mol}$$

5. a) Selitä poolisuuden ja molekyylien välisten sidosten avulla (piirrä kuvia vastauksesi tueksi), miksi
- butanaalin kiehumispiste on alhaisempi (76 °C) kuin 1-butanolin (118 °C).
  - metaanihappo HCOOH liukenee hyvin veteen, mutta steariinihappo  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{16}\text{COOH}$  ei liukene.

Liitä kuvat ko. molekyyleistä vastaukseesi. (2p)

b) Selitä

i) kuinka pii-sidos syntyy ja ii) mitä tarkoitetaan avaruusisomerialla, anna esimerkkejä. (2p)

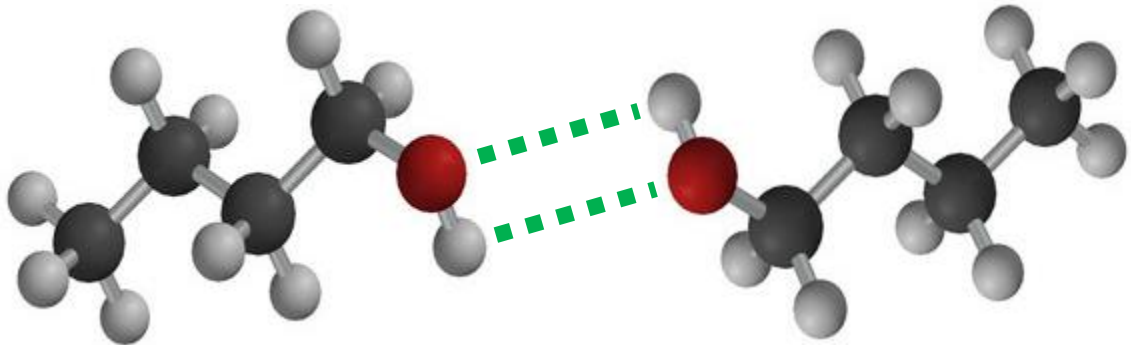
c) Molekyylin kolmiulotteinen rakenne voi olla hyvinkin erilainen riippuen atomien ja sidosten tarkemmasta luonteesta. Piirrä kohtien i) - ii) molekyylit ja vastaa kemiallisesti perustellen.

i) Kuinka suuri sidoskulma on hiilidioksidissa? Entä vedessä? Mistä ero johtuu?

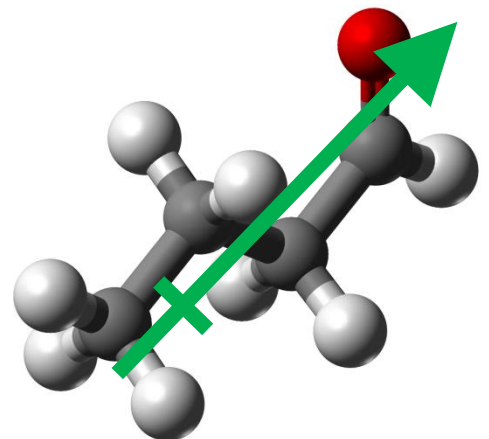
ii) Miksi ammoniakissa on suurempi sidoskulma kuin vedessä? (2p)

a) i) Molemmat yhdisteet ovat neljän hiilen molekyyliä.

- 1-butanoli on primäärinen alkoholi, eli sillä on hydroksyyli-ryhmä, -OH, hiiliketjun päässä. Tämän ryhmän kautta 1-butanoli muodostaa vetysidoksia toisiin 1-butanolimolekyyleihin. Eli 1-butanolimolekyylien välille syntyy vahvoja molekyylien välisiä vetysidoksia.



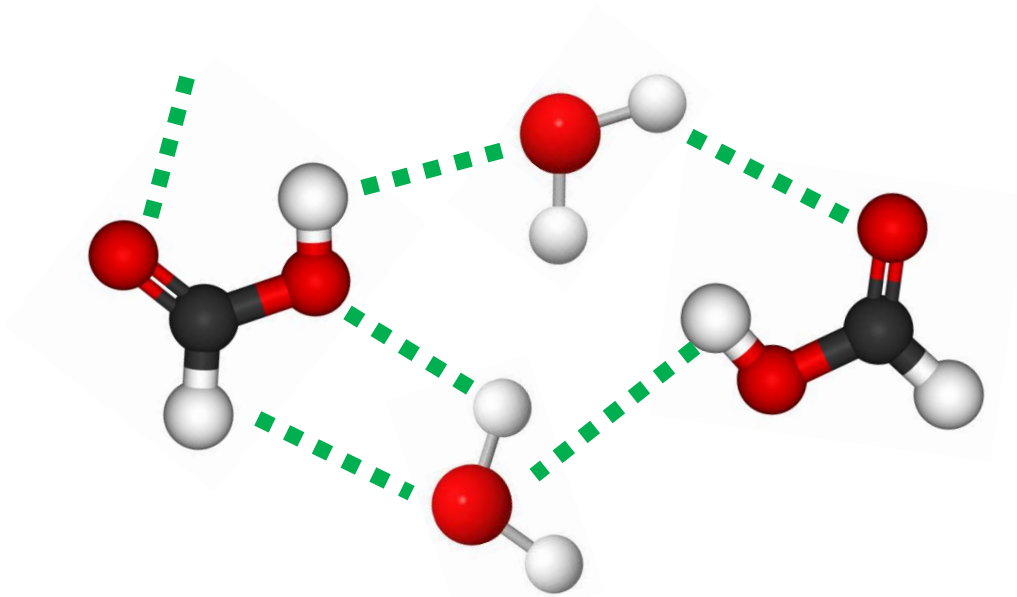
- Butanaalissa on karbonyylinen hiili, eli kaksoissidos  $\text{C}=\text{O}$ , hiiliketjun päässä. Tämän aldehydiryhmän, -CHO, kautta butanaali on poolinen molekyyli. Syntyy siis dipoli. Huom. hiiliketjun pituus 4 kpl "ei tuhoa" poolisuutta. Butanaalimolekyylien välille syntyy dipoli-dipolisidoksia, jotka ovat heikompiä kuin vetysidokset.



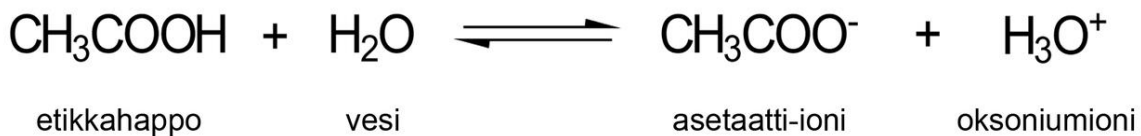
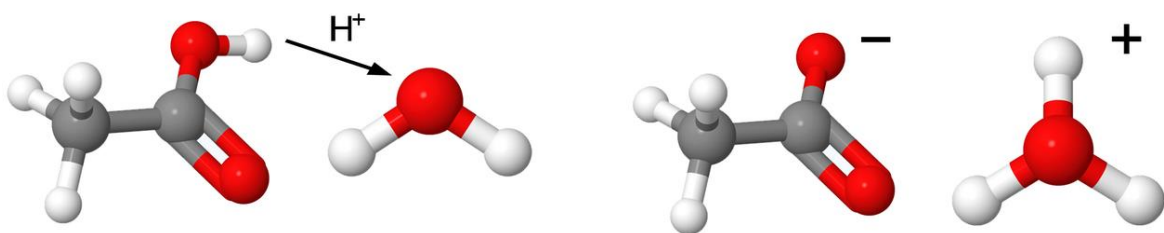
Näin ollen butanaali kiehuu alemmassa lämpötilassa kuin 1-butanoli.

ii) Molemmat yhdisteet ovat karboksyylihappoja (sama funktionaalinen ryhmä -COOH), hiiliketjun pituus on eri.

- Metaanihappo, HCOOH, on koostunut pienistä, poolisista molekyyleistä. Happoryhmän kautta metaanihappo-molekyylit voivat vetysidoksin vuorovaikuttaa vesimolekyylien kanssa, joten metaanihappo liukenee hyvin veteen. Itseasiassa metaanihappo reagoi osittain veden kanssa luovuttaen protonin eli vetyionin.

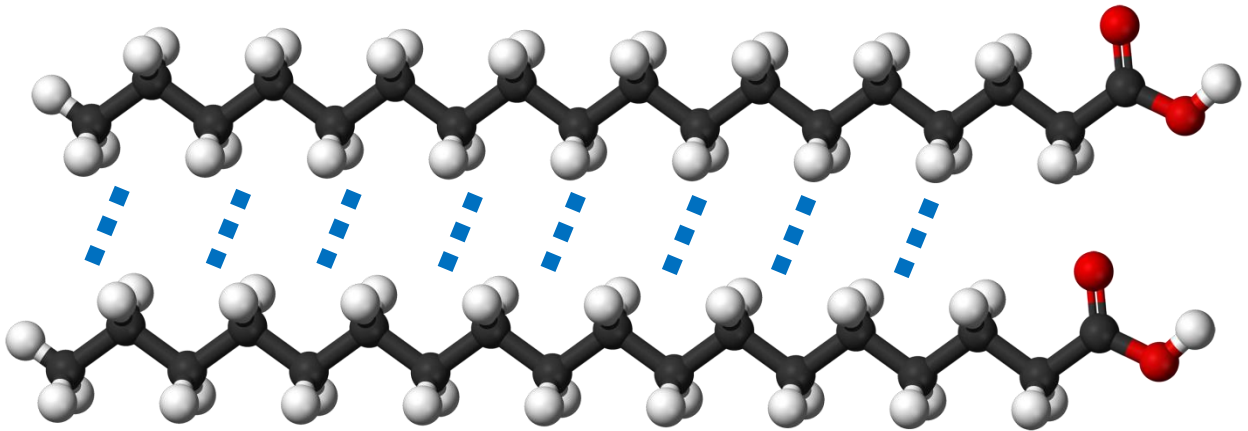


Reaktio veden kanssa:



- Steariinihappossa on pitkä pooliton hiiliketju, joka ns. ”tuhoaa” happoryhmän poolisuuden. Steariinihappo on näin ollen pooliton (hyvin heikosti poolinen), vain dispersiivoimia. Näin ollen steariinihappomolekyylit vuorovaikuttaa heikosti tai ei lainkaan poolisen veden kanssa. Vesimolekyylit eivät

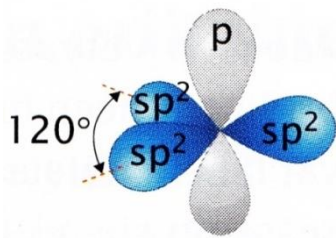
pääse tunkeutumaan pitkien, poolittomien hiilivetyketjujen väliin. Steariinihappo ei näin ollen liukene veteen.



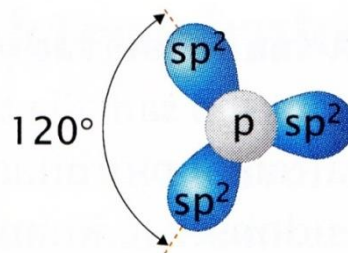
b) i) Pii-sidos syntyy kun hybridisoitumattomat  $2p$ -atomiorbitaalit sulautuvat yhteen kaksiosaiseksi sidos-orbitaaliksi.

### Määritelmä, piisidos:

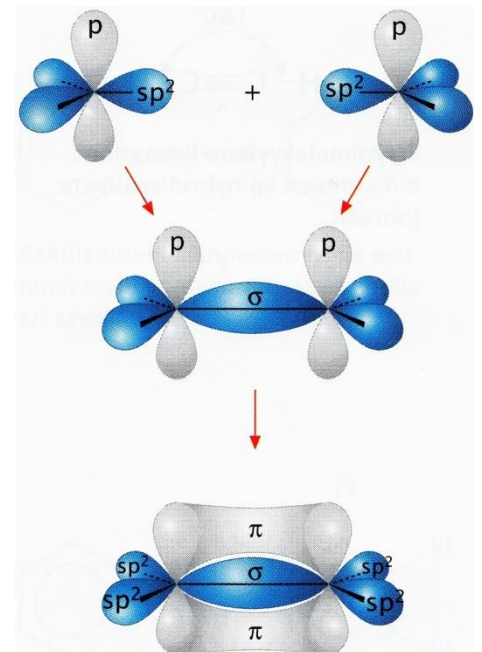
Tason suhteen symmetristä sidosta, jossa atomiorbitaalit ovat sivuttain sulautuneet yhteen sidosorbitaaliksi, kutsutaan  $\pi$ -sidokseksi.



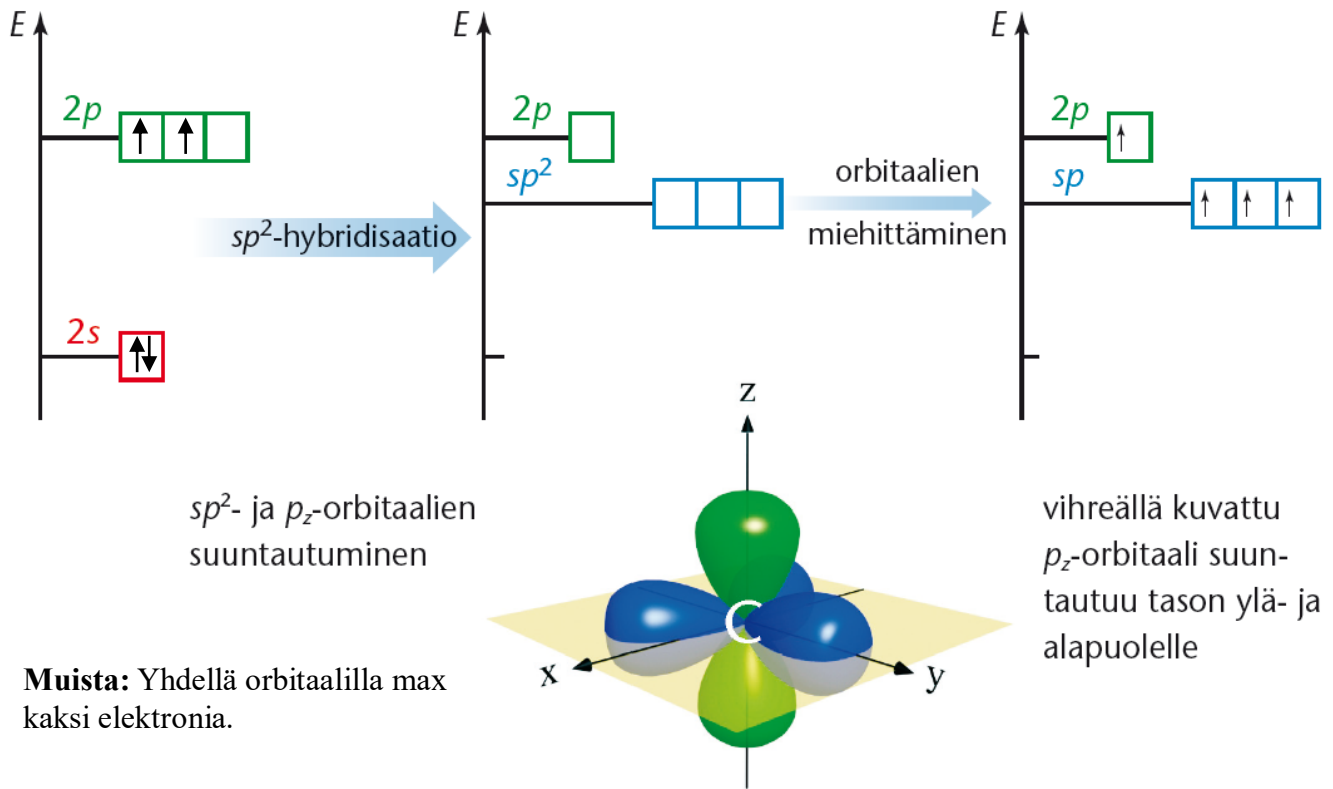
malli sivulta



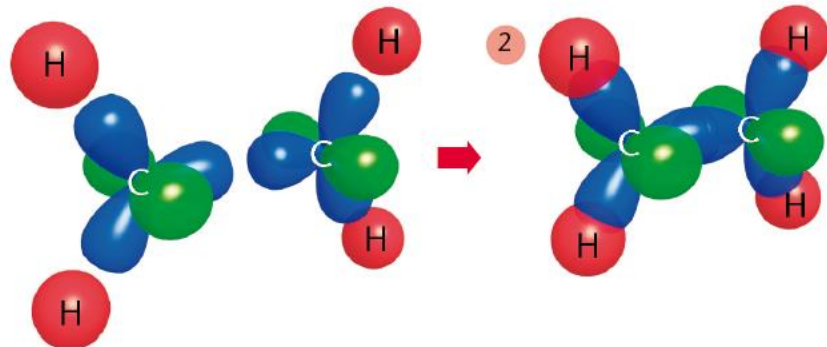
malli päältä



Hybridisoitumaton atomiorbitaali  $sp^2$ -hybridisaatiossa.

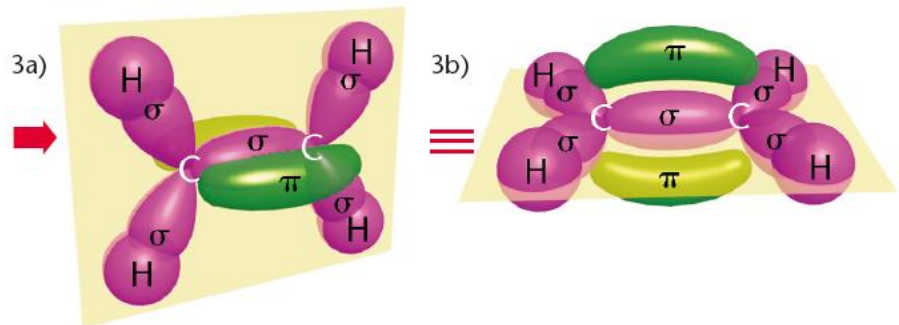


1 Hiilen  $sp^2$ - ja vetyjen s-orbitaalit

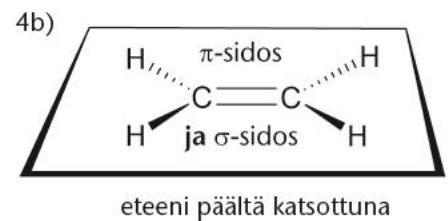
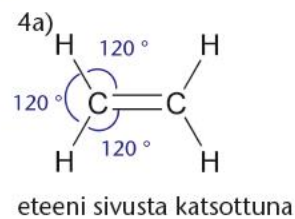


3 Muodostuneet  $\sigma$ - ja  $\pi$ -sidokset

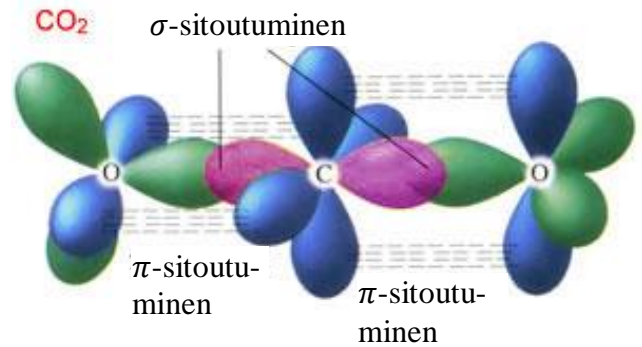
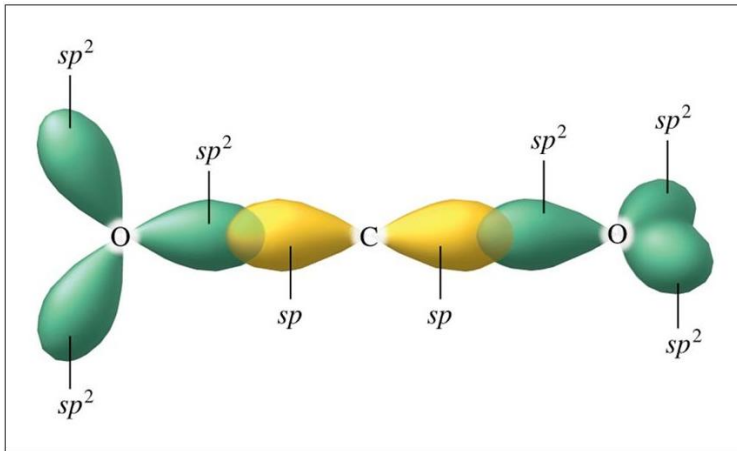
Huomaa, että vihreällä merkitty  $\pi$ -sidos koostuu kahdesta osasta.



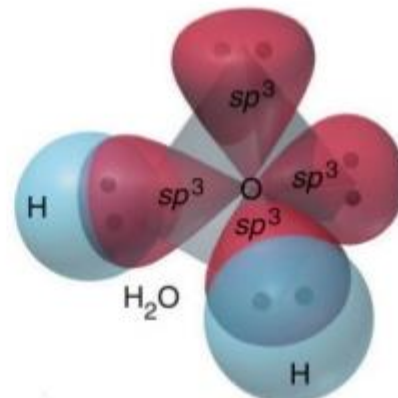
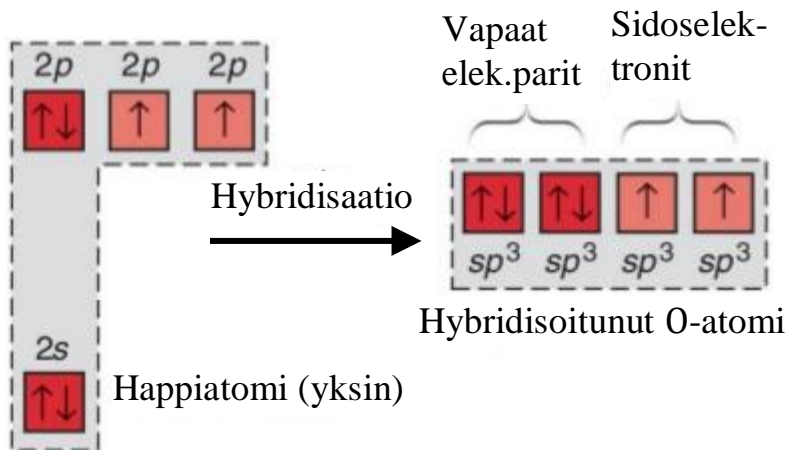
4 Rakennekaavat



c) i) Hiilidioksidi on ns. sauvamainen molekyyli, eli hiilen ja hapen väliset sidokset muodostavat 180 asteen kulman (katso kuvat). Hiili on  $sp$ -hybridisoitunut (2 x kaksoissidos, yht. 4 sidosta OK) ja molemmat hapet ovat  $sp^2$ -hybridisoituneita (1 x kaksoissidos, yht. 2 sidosta OK + 2 x vapaa elektronipari, jotka ovat päässä vihreän orbitaalin alueella).

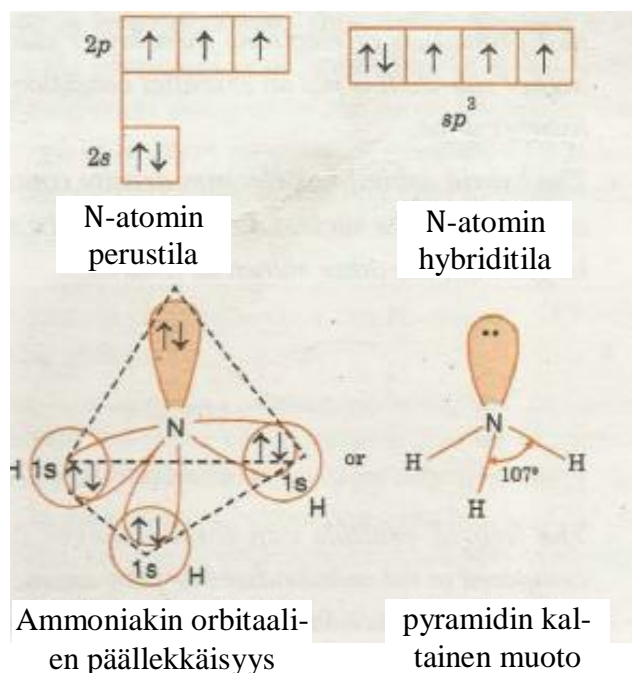
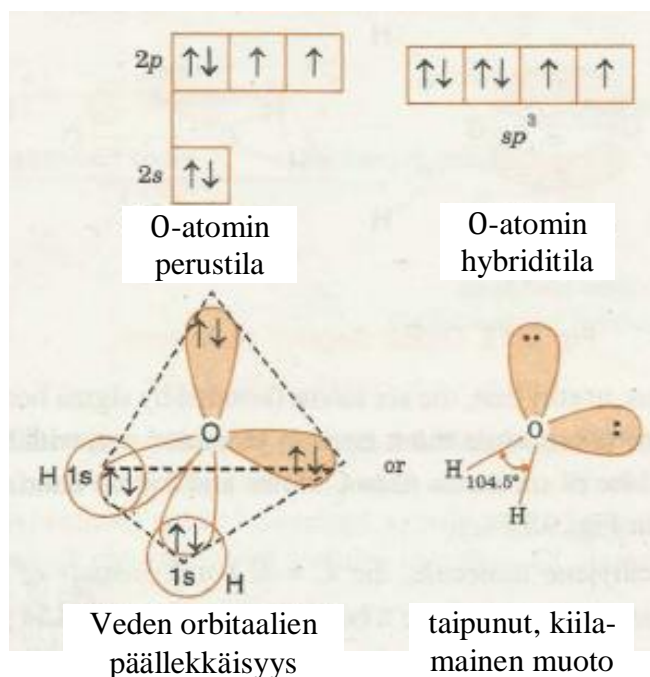
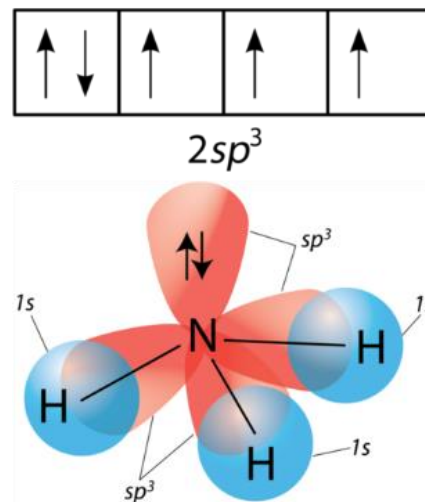


Vesi molekyyli on ns. kiilamainen, eli hapen ja vetyjen väliset sidokset muodostavat kulman, jonka suuruus on noin 105 astetta. Syy johtuu siitä, että hapella on kaksi vapaata elektroniparia, joten sähköiset hylkimisvoimat pakottavat sidokset (elektroneja!!) taipumaan. Happi on  $sp^3$ -hybridisoitunut, eli 2 x yksinkertainen sidos, yht. 2 sidosta OK + 2 x vapaa elektronipari (ja vety ei hybridisoidu).



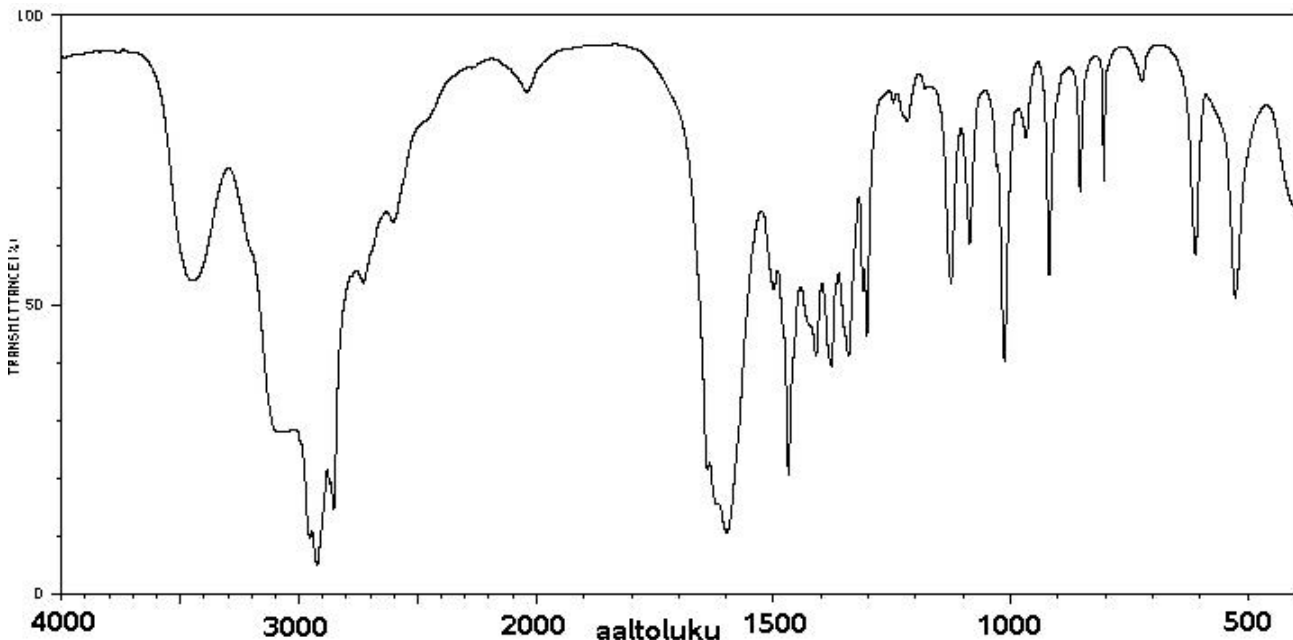
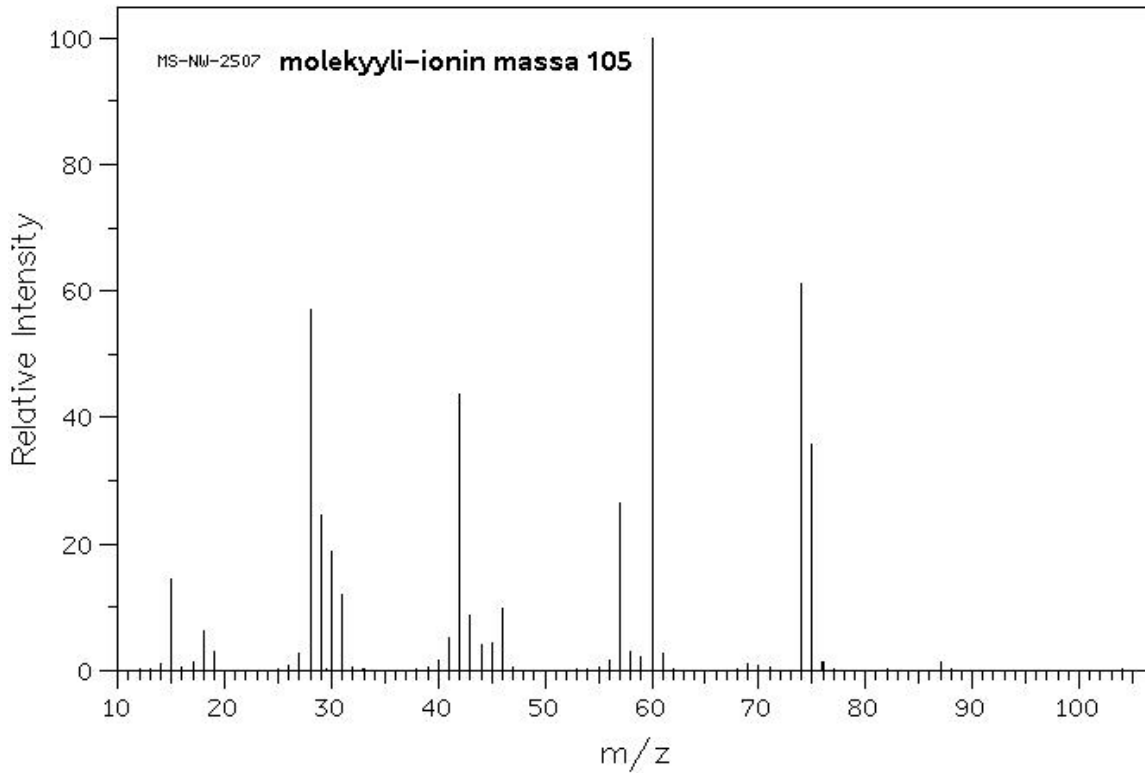
Ero johtuu siis siitä mitkä atomit ja kuinka ne ovat hybridisoituneet tarkasteltavassa molekyylissä on.

ii) Vedessä siduskulma oli siis noin 104,5 astetta ja ammoniakissa se on noin 107 astetta. Ammoniakissa typpi on  $sp^3$ -hybridisoitunut, eli 3 x yksinkertainen sidos, yht. 3 sidosta OK + 1 x vapaa elektronipari (ja vety ei hybridisoidu). Ammoniakissa on suurempi siduskulma kuin vedessä koska yksi vety tietysti ottaa myös oman tilan avaruudessa ja ammoniakkin yksi vapaa elektronipari ei saa taipumista niin paljon aikaan kuin veden kaksi vapaata elektroniparia. Katso kuvat alla.



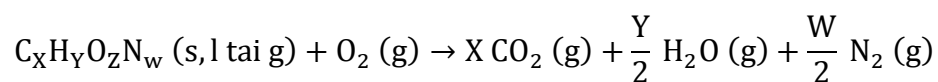
6. Alkuaineanalyysin perusteella orgaaninen yhdiste sisälsi hiiltä, vetyä, typpeä ja happea. Polttoanalyysissä 1,279 gramman suuruinen näyte tätä yhdistettä tuotti 1,60 grammaa hiilidioksidia ja 0,77 grammaa vettä. Typpianalyysissä 1,625 gramman suuruinen näyte tätä yhdistettä tuotti 0,216 grammaa typpeä. Määritä perustellen yhdisteen molekyylikaava ja päättele mikä aminohappo (Marvinsketch -> Edit -> Template Library-> Amino Acids) on kyseessä, kun MS- ja IR-spektrit ovat alla. Huom! Funktionaaliset ryhmät tulee myös perustella.





1) Kun hiiliyhdiste palaa täydellisesti (happia on riittävästi eli ylimäärin) muodostuu hiilidioksidi ja vettä.

Siis



Tällöin stoikiometrisistä kertoimista saadaan

$$n(C) = n(CO_2) = \frac{m}{M} = \frac{1,60 \text{ g}}{44,01 \text{ g/mol}} = 0,036 \text{ 355 ... mol}$$

$$n(\text{H}) = 2 \cdot n(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot \frac{m}{M} = 2 \cdot \frac{0,77 \text{ g}}{18,016 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,085 479 \dots \text{ mol}$$

ja

$$m(\text{C}) = n \cdot M = 0,036 355 \dots \text{ mol} \cdot 12,01 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 0,436 628 \dots \text{ g}$$

$$m(\text{H}) = n \cdot M = 0,085 479 \dots \text{ mol} \cdot 1,008 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 0,086 163 \dots \text{ g}$$

Tarkistetaan oliko yhdisteessä happea tai muita alkuaineita? On, koska typen polttoanalyysistä saadaan

$$m(\text{N}) = m(\text{näyte}) \cdot m\%(\text{N}) = 1,279 \text{ g} \cdot \frac{0,216 \text{ g}}{1,625 \text{ g}} = 0,586 199 \dots \text{ g}$$

niin lopuksi happi

$$m(\text{O}) = m(\text{yhdiste}) - m(\text{C}) - m(\text{H}) - m(\text{N}) = 1,279 \text{ g} - 0,6920 \dots \text{ g} = 0,586 \dots \text{ g}$$

Sitten vielä puuttuvat ainemäärät:

$$\Rightarrow n(\text{N}) = \frac{m}{M} = \frac{0,170 \dots \text{ g}}{14,01 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,012 134 \dots \text{ mol} \quad \text{ja} \quad n(\text{O}) = \frac{m}{M} = \frac{0,586 \dots \text{ g}}{16,00 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,036 637 \dots \text{ mol}$$

Näin ollen yhdisteen alkuaineiden C, H, O ja N moolisuhteet (pienin on  $n(\text{N}) = 0,012 \dots \text{ mol}$ )

$$n(\text{C}):n(\text{H}):n(\text{O}):n(\text{N}) \stackrel{\text{jaetaan pie-}}{\approx} \stackrel{\text{nimmällä}}{\approx} 3:7:3:1$$

Siis, yhdisteen suhde- eli empiirinen kaava on  $(\text{C}_3\text{H}_7\text{O}_3\text{N})_x$ .

2) Edelleen koska MS-spektristä saadaan tietoon molekyyli-ionin massa 105 ja koska yhden yksikön  $\text{C}_3\text{H}_7\text{O}_3\text{N}$  molekyyli­massa on

$$3 \cdot 12,01 + 7 \cdot 1,008 + 3 \cdot 16 + 14,01 = 105,096 ,$$

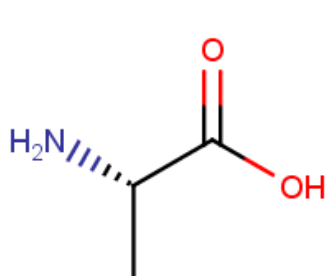
niin  $x = 1$ . Siis yhdisteen molekyyli­kaava  $\text{C}_3\text{H}_7\text{O}_3\text{N}$ .

3) IR-spektristä saadaan seuraavat tiedot:

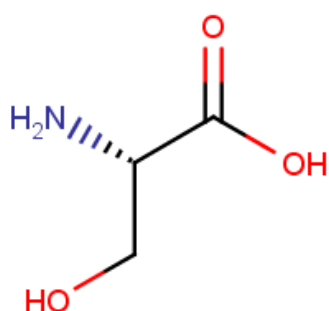
- aaltoluvun  $\sim 1 600 \text{ cm}^{-1}$  kohdalla oleva voimakas piikki viittaa joko hiilen ja typen väliseen kaksoissidokseen (alkenyyliryhmä) tai sitten amidiin (muista yhdisteessä yksi tyyppi). Amidin tapauksessa tulisi olla myös aaltoluvun  $\sim 3 400 - 3 200 \text{ cm}^{-1}$  kohdalla oleva piikki.

- Toisaalta koska aaltoluvun  $\sim 2\,500 - 3\,500\text{ cm}^{-1}$  kohdalla on laaja piikki, niin se viittaa karboksyyli-ryhmään. Lisäksi aaltoluvun  $\sim 3\,400\text{ cm}^{-1}$  kohdalla on piikki, niin se voisi olla hydroksyyli-ryhmästä.
- Aaltoluvun  $\sim 3\,000 - 2\,850\text{ cm}^{-1}$  kohdalla oleva voimakas piikki tulee siis  $C_{sp^3} - H$  sidoksesta.
- Lopuksi myös aminoryhmällä tulisi olla aaltoluvun  $\sim 3\,500 - 3\,300\text{ cm}^{-1}$  kohdalla on kaksi piikkiä.

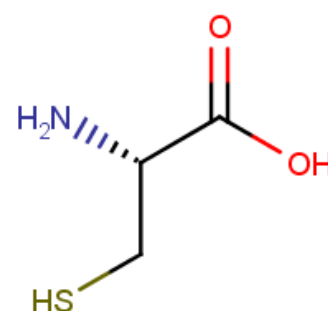
4) Katsotaan MarvinSketch:n kirjastomolekyyleistä, mihin aminohappoon kaikki yllä olevat tiedot voisi sijoittaa. Etsitään kaikki kolmen hiilen aminohapot ja päätellään, mikä aminohappo voisi olla kyseessä.



L-alaniini



L-seriini



L-kysteiini

Näistä kysteiini ei voi tulla kyseeseen koska siinä on rikkiä, samoin alaniini sulkeutuu pois koska happea on vain kaksi kappaletta.

**VAST:** Seriini vaikuttaisi olevan (molekyylikaavan nojalla) etsitty aminohappo. Sen funktionaaliset ryhmät täsmäävät IR-spektriin, vaikkakin aminoryhmän kaksi piikkiä jääkin hieman karboksyyli-ryhmän alle..