

# Infrapunaspektroskopia

IHMISEN JA ELINYMPÄ-  
RISTÖN KEMIAA, KE2

## Kertausta sähkömagneettisesta säteilystä

Sekä IR-spektroskopia että NMR-spektroskopia käyttävät sähkömagneettista säteilyä energian lähteenä. Näin ollen sähkömagneettisen säteilyn ominaisuuksien – aalto- ja hiukkasluonteen – ymmärtäminen on tärkeää.

Sähkömagneettisen säteilyn hiukkaset ovat fotoneita, joilla on tietty energiamäärä, **kvantti**. Koska sähkömagneettisella säteilyllä on hiukkasluonteen lisäksi myös aaltoluonnetta, sitä havainnollistetaan myös aallonpituuksilla ja taajuuksilla.

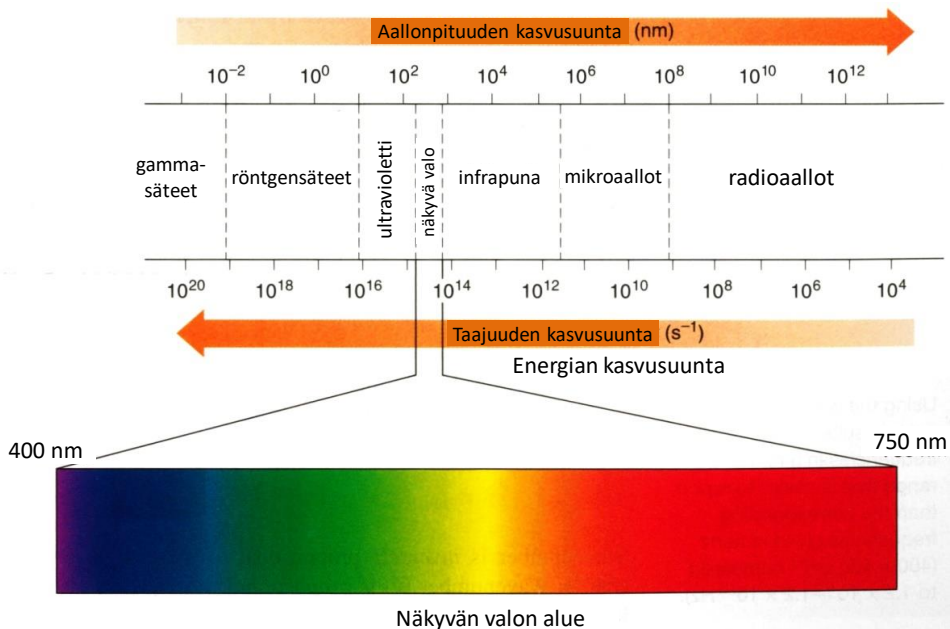
→ Aallonpituus on saman aaltovaiheen välinen etäisyys, siis esim. huipusta seuraavaan huippuun.

→ Taajuus kuvaa sitä kuinka monta aaltoa kulkee havaintokohdan ohi aikayksikköä kohden.

Kaikki sähkömagneettinen säteily kulkee valonnopeudella  $c \approx 3,0 \cdot 10^8$  m/s. Perusyhtälö on ( $\lambda =$  lambda eli aallonpituus ja  $\nu =$  nyy eli taajuus)

$$c = \lambda \nu$$

Havaitse, että aallonpituus ja taajuus ovat kääntäen verrannollisia (koska valonnopeus  $c$  on vakio!)



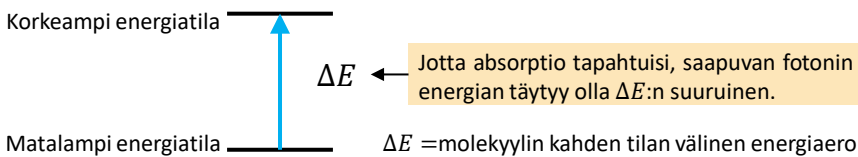
Yhden fotonin energia on suoraan verrannollinen sen taajuuteen:

$$E = h\nu,$$

missä  $h$  = Planckin vakio,  $h \approx 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$  tai  $h \approx 1,58 \cdot 10^{-34} \text{ cal} \cdot \text{s}$  tai  $h \approx 4,13 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$ .

Kun sähkömagneettinen säteily törmää molekyyliin, jotkin aallonpituudet – eivät kaikki – absorboituvat eli imeytyvät. Vain tietyt aallonpituudet absorboituvat koska molekyyllä on vain tietyjä energiatasoja. Molekyylin elektronitilojen, värähtelytilojen ja ytimen spintilojen energiat ovat kvantittuneet eivätkä jatkuvia.

**Huom.** Jotta absorptio tapahtuisi, fotonin energian täytyy olla molekyylin kahden tilan välisen energiaeron suuruinen.



**Huom.** Mitä suurempi on kahden tilan välinen energiaero sitä suurempi energia säteilyllä pitää olla jotta absorptio tapahtuisi. Eli sitä suurempi taajuus ja pienempi aallonpituus.

**Määritelmä** Kemistit käyttävät IR:ää tuntemattoman yhdisteen funktionaalisten ryhmien tunnistamiseen.

**Taustaa** Infrapunaspektroskopiassa energianlähteenä käytetään infrapuna-, eli lämpösäteilyä ( $\lambda = 2,5 - 25 \mu\text{m}$ ). IR-aallot ovat aallonpituudeltaan pidempiä kuin näkyvän valo, eli IR säteilyn taajuus on pienempää kuin näkyvän valon. Taajuudet IR-spektroskopiassa tavallisesti annetaan ns. **aaltolukuina** ( $\tilde{\nu}$ ):

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$

Aaltoluku on siis *kääntäen verrannollinen* aallonpituuteen ja se ilmoitetaan senttimetrin käänteislukuna, eli yksikkönä on  $\text{cm}^{-1}$ . Aaltoluku on *suoraan verrannollinen* taajuuteen  $\nu$ . **Taajuus (ja siten myös energia) kasvavat kun aaltoluku kasvaa.**

Aaltolukuasteikkoa käyttäen IR-absorptiot tapahtuvat näin ollen välillä

$$4000 \text{ cm}^{-1} - 400 \text{ cm}^{-1}.$$

Esim. aallonpituus  $2,5 \mu\text{m} = 2,5 \cdot 10^{-6} \text{ m} = 2,5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$  vastaa siis

$$\frac{1}{2,5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}} = 4000 \text{ cm}^{-1} \text{ aaltolukua.}$$

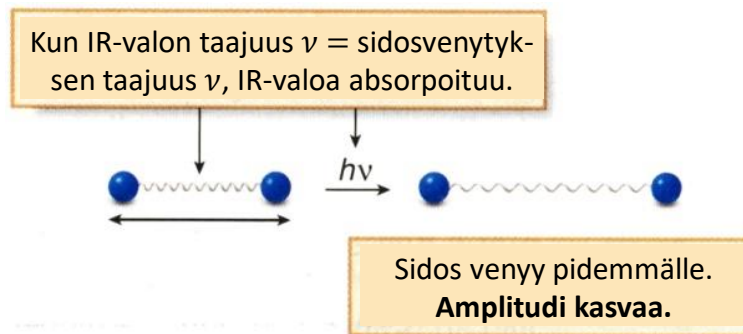
**Huom.** IR-valon absorptio (imeytyminen) aiheuttaa molekyylissä värähtelyliikkeen muutoksia.

Kovalenttiset sidokset eivät ole paikallaan pysyviä (staattisia). Ne ovat pareminkin jousia, missä jousen (sidos) päässä ovat painot (atomit).

Kun kaksi atomia on sitoutuneet toisiinsa, sidos venyy edestakaisin. Kun kolme tai useampi atomi on liittynyt molekyyliksi, sidos voi myös taipua.



Nämä värähtelyt ovat kvantittuneita. Niinpä ne tapahtuvat vain tietyissä taajuuksissa, jotka vastaavat IR-valon taajuuksia. Kun IR-valon taajuus sopii tietyn värähtelytaajuuden kanssa yhteen, IR-valoa absorboituu, aiheuttaen tietyn sidosvärähtelyn amplitudin tai tietyn sidostaivutuksen kasvamisen.



- Erilaiset sidokset värähtelevät eri taajuuksissa, joten ne absorboivat eri IR-valon taajuuksia.
- IR-spektroskopian avulla voidaan molekyylin erilaiset sidokset erottaa toisistaan, niinpä molekyylin funktionaaliset ryhmät voidaan määrittää.

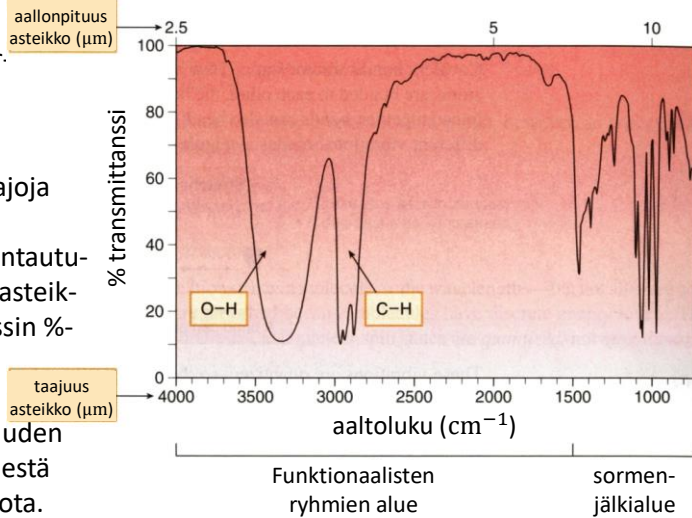
## IR-spektrin luonteenomaisia piirteitä

IR-spektrometrissä IR-valo kulkee näytteen läpi. Taajuudet, jotka vastaavat sidosten värähtelyjä, absorboituu näytteeseen ja jäljelle jäänyt IR-valo kulkeutuu ilmaisimelle. Spektrissä tulostuu läpimenneen IR-valon määrä käytetyn IR-valon aaltoluvun suhteen.

### Esimerkki

Tarkastellaan esimerkiksi ominaisesti 1-propanolin IR-spektriä.

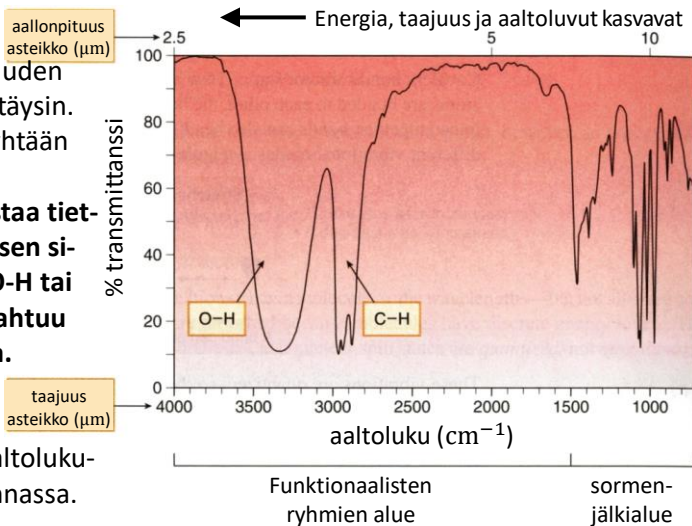
- IR-spektrissä on laajoja spektriviivoja.
- Absorptiopiikit suuntautuvat alas. y-akselin asteikko on transmittanssin %-osuus:  
100 % vastaa sitä, että kyseisen taajuuden valo menee näytteestä läpi. Eli ei absorptiota.



ja 0 % vastaa sitä, että kyseisen taajuuden valo absorptoituu täysin. Eli valoa ei mene yhtään ilmaisimelle.

- Jokainen piikki vastaa tiettyä sidosta ja jokaisen sidostyyppin (kuten O-H tai C-H) värähtely tapahtuu tietyllä taajuudella.

- IR-spektrissä on sekä aallonpituus- (2,5-25  $\mu\text{m}$ ) että aaltoluku-asteikko vaakasuunnassa.

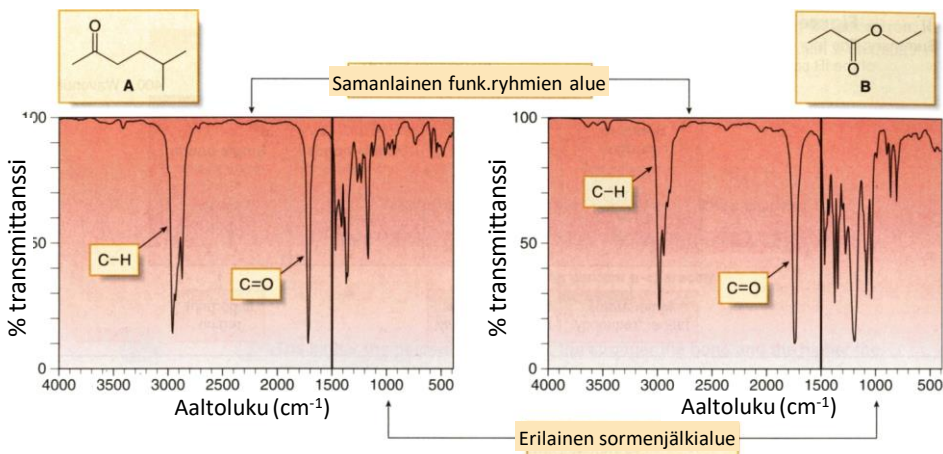


Käsitteellisesti IR-spektri jaetaan kahteen osaan:

- **Funktionaalisten ryhmien alue** esiintyy  $\geq 1500 \text{ cm}^{-1}$ . Funk.ryhmät antavat 1-2 piikkiä tällä alueella tietyillä taajuuksilla.
- **Sormenjälkialue** esiintyy  $< 1500 \text{ cm}^{-1}$ . Tällä alueella on tyypillisesti sekava piikkikokoelma ja se on ainutlaatuinen kullekin yhdisteelle (ns. sormen.).

Yleensä analysoidaan vain **funktionaalisten ryhmien aluetta** ( $\geq 1500 \text{ cm}^{-1}$ ) koska sieltä saadaan kaikkein tärkeimmät rakenteelliset tiedot.

Esimerkiksi IR-spektrit seuraavilla yhdisteillä: 5-metyyli-2-heksanonilla (**A**) ja etyyli-propanaattilla (**B**) näyttävät samanlaisilta funktionaalisten ryhmien alueella. Molemmilla on karbonyylihiili  $\text{C}=\text{O}$  ja useita  $\text{sp}^3$  hybridisoituneita  $\text{C}-\text{H}$  sidoksia. Kuitenkin, koska **A** ja **B** ovat eri yhdisteitä, niiden sormenjälki-alue näyttää hyvin erilaiselta.



## IR absorptiot

Sidoksen muodostavien **atomien massa** ja **sidoslujuus** vaikuttavat siihen, mistä ko. sidoksen IR-absorption piikki löytyy.

- **Sidoslujuus:** Vahvemmat sidokset värähtelevät korkeammilla taajuuksilla, joten tällaiset sidokset värähtelevät suuremmilla aaltoluvuilla  $\tilde{\nu}$ .
- **Atomien massat:** Kevyempien atomien muodostamat sidokset värähtelevät korkeammilla taajuuksilla, joten tällaiset sidokset värähtelevät suuremmilla aaltoluvuilla  $\tilde{\nu}$ .

Näille pääsuuntaviivoille saadaan tukea, kun sidosta ajattelee jouseksi, jonka päihin on asetettu painot. Jousen voimakkuus kuvaa sidoksen voimakkuutta ja painojen massat ovat analogisia atomien massoille.

- Kahdelle jouselle, joilla on päissään yhtä suuret painot (massat ovat siis samat), voimakkaampi jousi värähtelee korkeammilla taajuuksilla.
- Kahdelle yhtävoimakkaalle jouselle se jousi, jolla on päissään kevyemmät painot värähtelee korkeammilla taajuuksilla kuin se jousi, jolla on päissään painavimmat painot.

Näitä ilmiöitä, eli taajuuden vuorovaikutusta massoihin ja sidosvoimakkuuteen kuvaa Hooken laki:  $\tilde{\nu} = k\sqrt{f/m}$

**Hooken laki:**

$$\tilde{\nu} = k \sqrt{\frac{f}{m}}$$

$$\tilde{\nu} = k \sqrt{\frac{f}{m}}$$

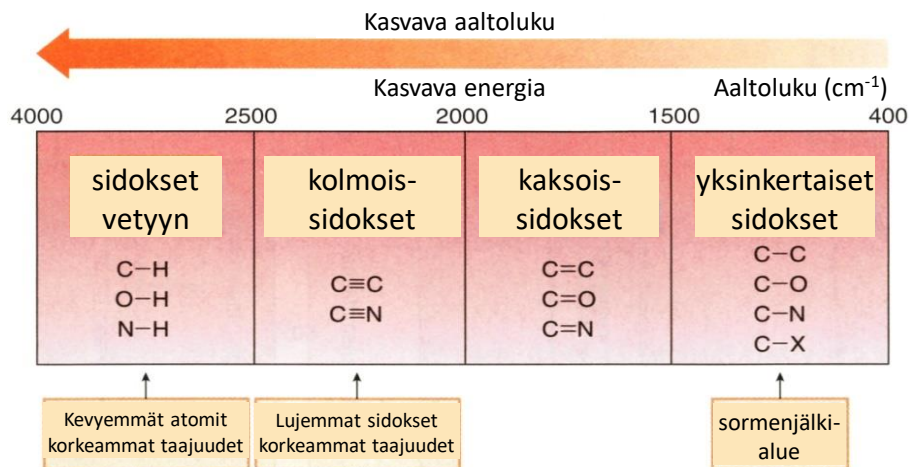
$f$  = voimavakio  
 $m$  = massa  
 $k$  = vakio

Voimakkaampi sidos → korkeampi taajuus

Pienempi massa → korkeampi taajuus

- Voimavakio  $f$  on sidoksen (jousen) lujuus. Mitä suurempi  $f$ :n arvo, sitä lujuempi sidos ja korkeampi aaltoluku  $\tilde{\nu}$  värähtelylle.
- Massa  $m$  kuvaa atomien massoja (painojen massoja). Mitä pienempi  $m$ :n arvo, sitä korkeampi aaltoluku  $\tilde{\nu}$  värähtelylle.

Tuloksena saadaan, että **sidos absorboi neljässä ennustettavassa IR-spektrin alueessa**. Katso kuvio.




Kuvion tietoja käyttäen tuntemattoman yhdisteen spektrin tulkinta helpottuu. Pidä mielessä kaksi seuraavaa pääkohtaa:

- Sidokset vetyyn absorboivat aina spektrin vasemmassa osassa (korkean aaltoluvun alue). Vedyn massa on niin pieni, että H - Z (missä Z = C, O ja N) sidokset värähtelevät korkeilla taajuuksilla.

- Sidoslujuus pienenee mentäessä suuntaan  $C \equiv C \rightarrow C = C \rightarrow C - C$ , joten värähtelyn taajuus pienenee. Eli absorptioiden suunnat näille sidoksille ovat kohti spektrin oikeaa reunaa.

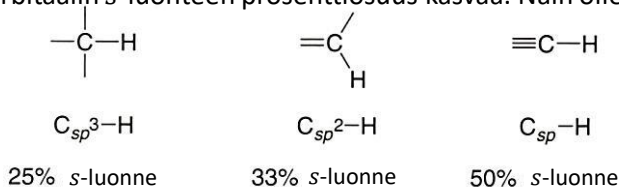
Funktionaalisten ryhmien alue ( $\tilde{\nu} \approx 4\,000 - 1\,500\text{ cm}^{-1}$ ) sisältää vetyyn tulevien yksinkertaisten sidosten absorptiot kuin myös moninkertaisten sidosten absorptiot. Useimmat tämän alueen absorptiot ovat sidosvenymisen seurausta (ennemmin kuin sidostaipumisen). Sormenjälkialue ( $\tilde{\nu} \lesssim 1\,500\text{ cm}^{-1}$ ) sisältää kaikkien muiden yksinkertaisten sidosten absorptiot (paitsi H – Z), tehden siitä alueesta hyvin monimutkaisen ja vaikean analysoida.

Yleisten IR-spektrialueiden lisäksi on myös tärkeää oppia tyypillisimpien sidosten absorptioarvoja. Näissä kannattaa hyödyntää taulukkotietoja.

sidostyyppi	arvioitu $\tilde{\nu}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	voimakkuus/ muoto
O–H	3600–3200	vahva, leveä
N–H	3500–3200	keskivahva
C–H	~3000	
• $C_{sp^3}$ –H	3000–2850	vahva
• $C_{sp^2}$ –H	3150–3000	keskivahva
• $C_{sp}$ –H	3300	keskivahva
$C \equiv C$	2250	keskivahva
$C \equiv N$	2250	keskivahva
C=O	1800–1650 (often ~1700)	vahva
C=C	1650	keskivahva
	1600, 1500	keskivahva

Huomioitavaa on, että jopa vähäiset erot, jotka vaikuttavat sidoslujuuteen, vaikuttavat IR-absorptioon taajuuteen.

Palautetaan mieliin, että C – H sidoksen lujuus kasvaa sitä mukaa kun hiilen hybridiorbitaalin s-luonteen prosenttiosuus kasvaa. Näin ollen:



  
 Kasvava s-luonteen prosenttiosuus  
 Kasvava  $\tilde{\nu}$

- Mitä suurempi on sidoksen s-luonteen prosenttiosuus sitä lujempi on sidos ja sitä korkeampi on absorptioon aaltoluku.

Lopuksi, melkein kaikki molekyylin sidokset antavat jonkinlaisen absorptiopii-kin IR-spektrissä, mutta muutamat erikoistapaukset eivät.

**Jotta sidos IR-absorpoisi, niin värähtelyn aikana pitää dipolimomentilla olla muutosta.** Näin ollen symmetriset ja poolittomat sidokset eivät IR-absorpoi. Esim. 2-butyynin hiili-hiili kolmoissidos ei IR-absorpoi. Se on **IR-passiivinen**.

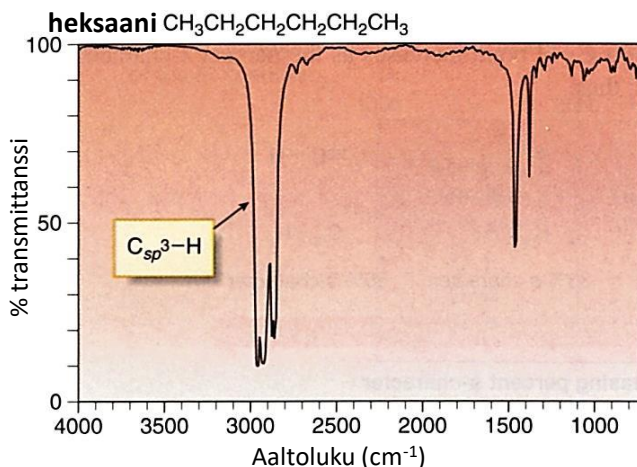
## Esimerkkejä

Tarkastellaan ensin vain hiilivetyjen, sitten happea sisältävien ja lopuksi typpeä sisältävien yhdisteiden IR-spektrejä.

### Hiilivetyjen IR-absorptiot

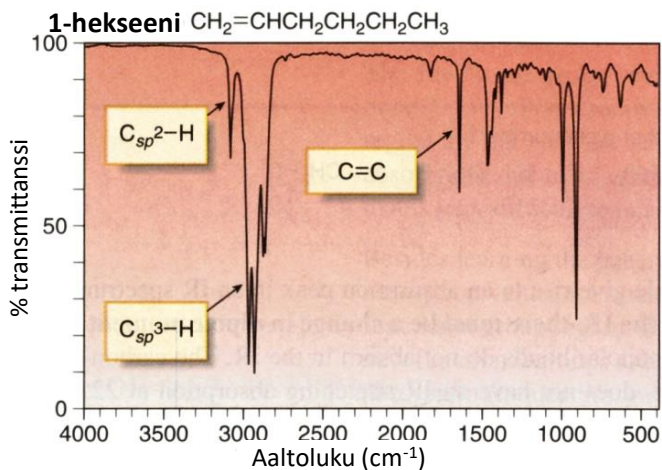
Heksaanin, 1-hekseenin ja 1-heksyynin IR-spektrit havainnollistavat tärkeän eron, joka on luonteenomaista hiilivetyjen IR-spektrialueella yli  $1\,500\text{ cm}^{-1}$ . Vaikka kaikilla kolmella yhdisteellä on C – C sidoksia ja  $sp^3$  hybridisoituneita C – H sidoksia, niin C = C ja C  $\equiv$  C absorptiopiikkien mukaan voidaan välittömästi erotella alkeenit ja alkyynit alkaaneista

Huomioi lisäksi, että C – H absorptiolla alkaaneissa, alkeeneissa ja alkyneissa on luonteenomainen muoto ja paikka IR-spektrissä. Spektrissä usein nähdään  $< 3\,000\text{ cm}^{-1}$  kohdalla laaja ja voimakas piikki  $sp^3$  hybridisoituneista C – H sidoksista, kun taas  $sp^2$  ja  $sp$  hybridisoituneet C – H sidokset absorboivat korkeammilla taajuuksilla.



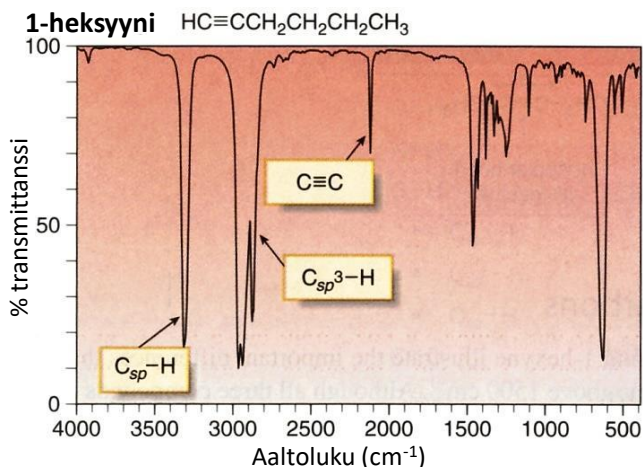
Alkaanilla CH3CH2CH2CH2CH2CH3 (heksaani) on vain yksinkertaisia C – C sidoksia ja  $sp^3$  hybridisoituneita hiiliatomeita. Näin ollen spektristä löytyy vain yksi pääabsorptiopiikki yli  $1\,500\text{ cm}^{-1}$  alueelta, nimittäin C<sub>sp<sup>3</sup></sub> – H absorptio kuta-kuinkin  $3\,000 - 2\,850\text{ cm}^{-1}$  alueelta.





Alkeenilla  $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$  (1-hekseeni) on  $sp^3$  hybridisoituneiden hiiliatomien lisäksi yksi kaksoissidos  $\text{C}=\text{C}$  ja  $\text{C}_{sp^2}-\text{H}$  sidoksia. Näin ollen spektristä löytyy kolme pääabsorptiopiikkiä yli 1 500  $\text{cm}^{-1}$  alueelta:

- $\text{C}_{sp^2}-\text{H}$  absorptio kutakuinkin 3 150 – 3 000  $\text{cm}^{-1}$  alueelta,
- $\text{C}_{sp^3}-\text{H}$  absorptio kutakuinkin 3 000 – 2 850  $\text{cm}^{-1}$  alueelta ja
- $\text{C}=\text{C}$  absorptio kutakuinkin 1 650  $\text{cm}^{-1}$  alueelta.



Alkyyynilla  $\text{CH}\equiv\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$  (1-heksyyini) on  $sp^3$  hybridisoituneiden hiiliatomien lisäksi yksi kolmoissidos  $\text{C}\equiv\text{C}$  ja  $\text{C}_{sp}-\text{H}$  sidoksia. Näin ollen spektristä löytyy kolme pääabsorptiopiikkiä yli 1 500  $\text{cm}^{-1}$  alueelta:

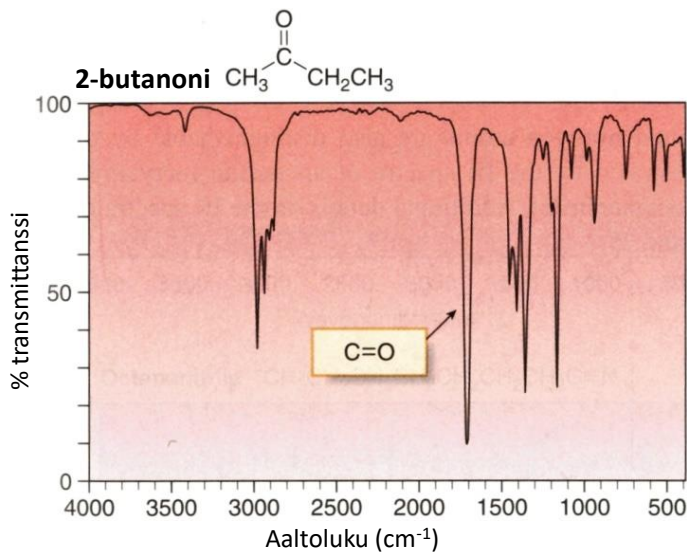
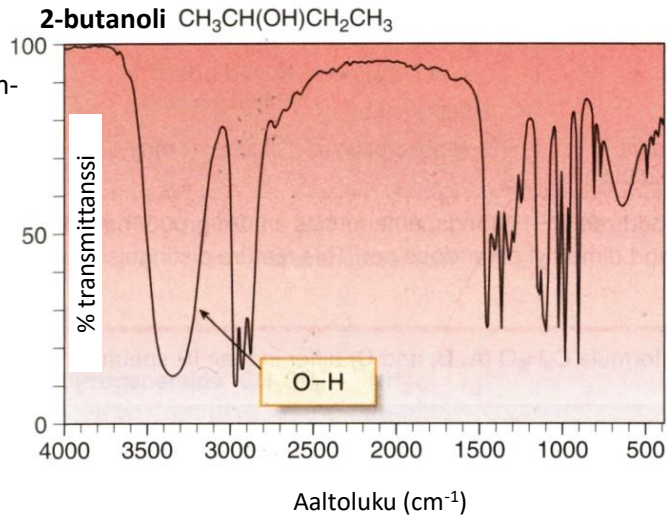
- $\text{C}_{sp}-\text{H}$  absorptio kutakuinkin 3 300  $\text{cm}^{-1}$  alueelta,
- $\text{C}_{sp^3}-\text{H}$  absorptio kutakuinkin 3 000 – 2 850  $\text{cm}^{-1}$  alueelta ja
- $\text{C}\equiv\text{C}$  absorptio kutakuinkin 2 250  $\text{cm}^{-1}$  alueelta.

## Happea sisältävien yhdisteiden IR-absorptiot

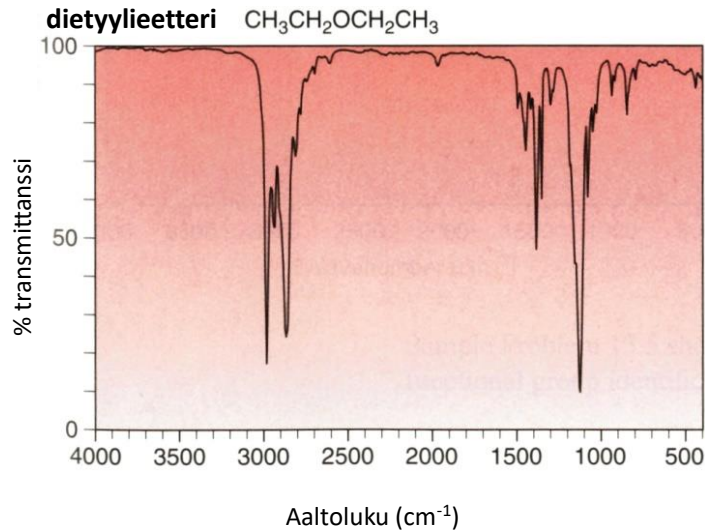
Happea sisältävien yhdisteiden tärkeimmät IR absorptioalueet esiintyvät  $3\,600 - 3\,200\text{ cm}^{-1}$  alueella (OH-ryhmä) sekä noin  $1\,700\text{ cm}^{-1}$  ( $\text{C}=\text{O}$ ). Seuraavat esimerkit valaisevat asiaa. Kohdan  $\sim 3\,000\text{ cm}^{-1}$  piikki jokaisessa spektrissä johtuu  $\text{C}_{sp^3} - \text{H}$  sidoksesta.

**2-butanoli**  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}_3$

2-butanolin alkoholiryhmä antaa voimakkaan piikin  $3\,600 - 3\,200\text{ cm}^{-1}$  alueella. Muista, että kohdan  $\sim 3\,000\text{ cm}^{-1}$  piikki johtuu  $\text{C}_{sp^3} - \text{H}$  sidoksesta.



2-butanonin  $\text{C}=\text{O}$  antaa voimakkaan piikin  $\sim 1\,700\text{ cm}^{-1}$  alueella. Spektripiikin tarkka sijainti riippuu karbonyylinen hiilen laadusta, esim. onko karbonyylinen hiili osa rengsarakennetta tai onko muita kaksoissidoksia lähellä. Muista, että kohdan  $\sim 3\,000\text{ cm}^{-1}$  piikki johtuu  $\text{C}_{sp^3} - \text{H}$  sidoksesta.



Dietyylieetterillä ei ole OH-ryhmää eikä karbonyylistä hiiltä  $\text{C}=\text{O}$ , joten ainoa yli  $1500\text{ cm}^{-1}$  piikki on kohdassa  $\sim 3000\text{ cm}^{-1}$  ja se johtuu  $\text{C}_{\text{sp}^3}-\text{H}$  sidoksesta. Siis yhdisteet, joissa on happea (happiatomi), mutta ei OH tai  $\text{C}=\text{O}$  absorptiopiikkejä ovat eettereitä!

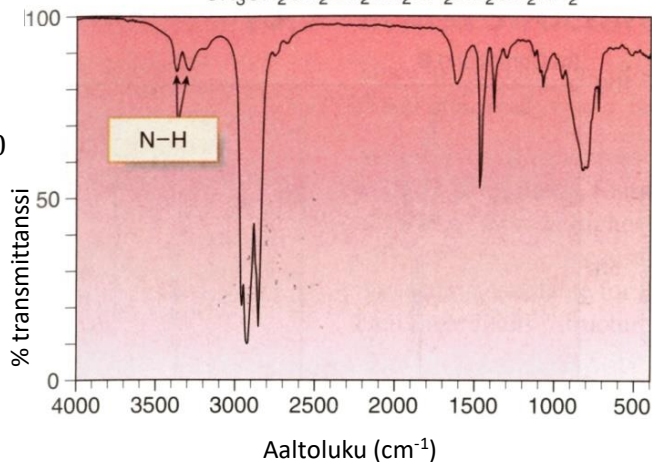
### Typpeä sisältävien yhdisteiden IR-absorptiot

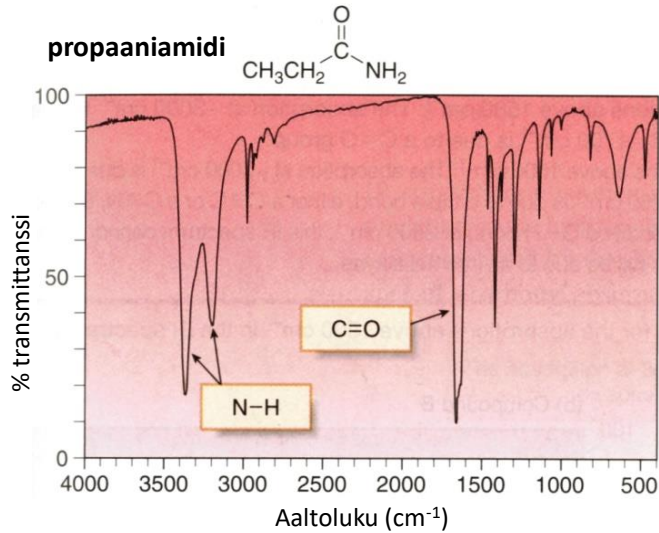
Myös typpeä sisältävät yleisimmät yhdisteet (typpeä sisältävät funktionaaliset ryhmät) ovat löydettävissä niiden IR absorptioalueista (yli  $1500\text{ cm}^{-1}$  alueelta). Tarkastellaan esimerkein amiinin, amidin, ja nitriliin IR-spektrejä.

#### oktyyliamiini $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$

Amiinin  $\text{N}-\text{H}$  sidos antaa kaksi heikkoa absorptiopiikkiä  $3300$  ja  $3400\text{ cm}^{-1}$  kohtiin.

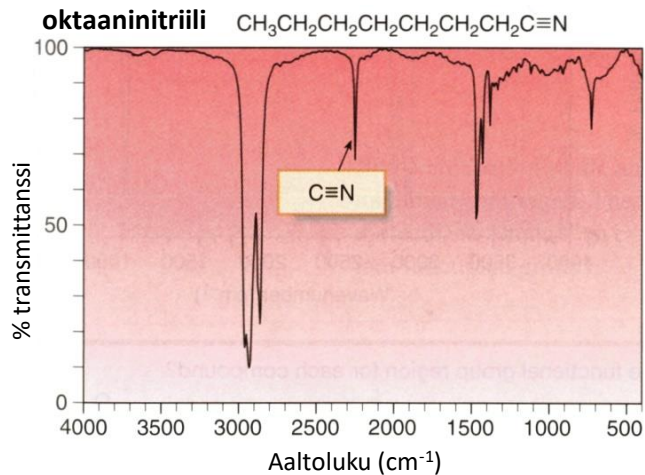
Muista, että kohdan  $\sim 3000\text{ cm}^{-1}$  piikki johtuu  $\text{C}_{\text{sp}^3}-\text{H}$  sidoksesta.





Amidilla on kaksi piikkiä yli 1 500 cm<sup>-1</sup> alueella: C = O -ryhmä antaa piikin 1 660 cm<sup>-1</sup> kohdalla ja N - H sidos antaa kaksi absorptiopeikkiä 3 200 ja 3 400 cm<sup>-1</sup> kohtiin.

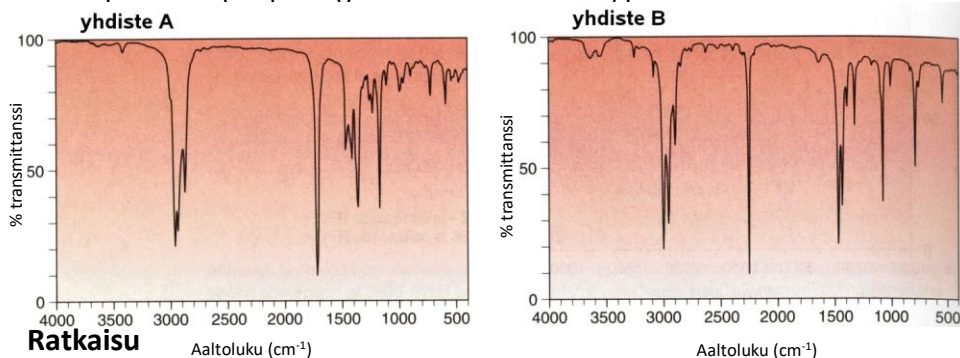
Nyt kohdan ~3 000 cm<sup>-1</sup> piikki (C<sub>sp<sup>3</sup></sub> - H sidos) on heikko.



Oktaaninitriilin C ≡ N ryhmä antaa kolmoissidoksille tyypilliselle alueelle ~2 250 cm<sup>-1</sup> absorptiopeikin.

Huomaa, että kohdan ~3 000 cm<sup>-1</sup> piikki (C<sub>sp<sup>3</sup></sub> - H sidos) on jälleen voimakas.

**Harjoitteleesimerkki** Mistä funktionaalisista ryhmistä alla olevien yhdisteiden **A** ja **B** absorptiopiikit (yli 1 500  $\text{cm}^{-1}$  alueella) johtuvat?

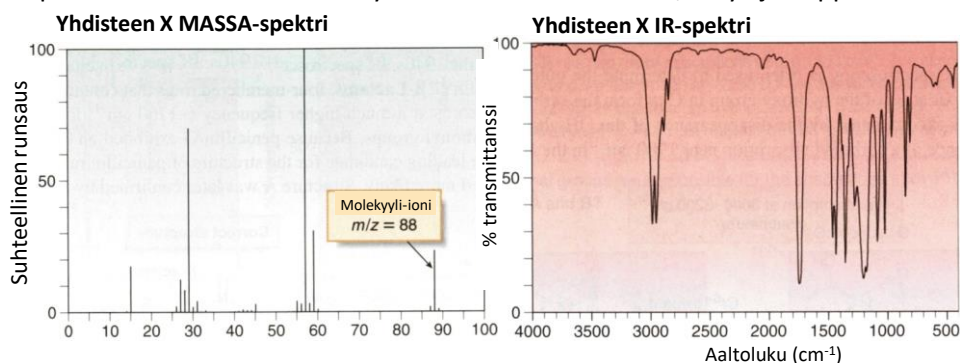


**Ratkaisu**

**A:** Yhdisteellä **A** on kaksi pääpiikkiä yli 1 500  $\text{cm}^{-1}$  alueella. Absorptiopiikki  $\sim 3\,000\ \text{cm}^{-1}$  johtuu  $\text{C}_{\text{sp}^3} - \text{H}$  sidoksista ja absorptiopiikki  $\sim 1\,700\ \text{cm}^{-1}$  johtuu  $\text{C} = \text{O}$  ryhmästä.

**B:** Yhdisteellä **B** on kaksi pääpiikkiä yli 1 500  $\text{cm}^{-1}$  alueella. Absorptiopiikki  $\sim 3\,000\ \text{cm}^{-1}$  johtuu  $\text{C}_{\text{sp}^3} - \text{H}$  sidoksista ja absorptiopiikki  $\sim 2\,250\ \text{cm}^{-1}$  johtuu kolmoissidoksesta, joko  $\text{C} \equiv \text{C}$  tai  $\text{C} \equiv \text{N}$ . Koska spektrissä ei ole piikkiä  $\text{C}_{\text{sp}} - \text{H}$  sidoksesta  $\sim 3\,300\ \text{cm}^{-1}$  alueelta, kolmoissidos ei voi olla hiiliketjun päässä ( $\text{HC} \equiv \text{CR}$ ), mutta kolmoissidos voi olla hiilirungon keskellä.

**Harjoitteleesimerkki** Mitä tietoja voidaan saada yhdisteen massa- ja IR-spektreistä? Voidaan olettaa yhdisteen sisältävän hiiltä, vetyä ja happea.



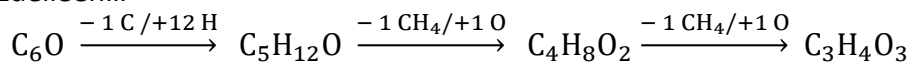
**Vaihe 1** Käytä molekyyli-ioniä mahdollisten molekyylikaavojen määrittämisessä. Käytä tarkkaa massaa (kun tiedossa) molekyylikaavan määrittämisessä.

Hyödynnetään menetelmää, jolla saadaan mahdolliset molekyylikaavat, joiden molekyyli-ionille  $m/z = 88$ . Menetelmä selitetty MS:n yhteydessä.

Nyt koskatiedetään yhdisteen sisältävän C, H ja O atomeita kannattanee ensin sijoittaa yksi O yhden  $\text{CH}_4$  tilalle. Siis

$$\frac{88}{12} \approx 7 \rightarrow \text{C}_7\text{H}_4 \xrightarrow{-1\ \text{CH}_4/+1\ \text{O}} \text{C}_6\text{O}$$

Edelleen...



Siis hylkäämällä vaihtoehdot  $\text{C}_7\text{H}_4$  ja  $\text{C}_6\text{O}$  saadaan kolme mahdollista molekyylikaavaa yhdisteelle **X**.

Mikäli korkearesoluutinen massaspektridata olisi ollut käytettävissä, niin molekyylikaava olisi voitu määrittää suoraan. Nimittäin jos molekyyli-ionin tarkka massa olisi ollut 88,0580, niin yhdisteen **X** molekyylikaava olisi  $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$  (jonka tarkka massa on 88,0524). Vertailun vuoksi  $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$ :n tarkka massa on 88,0888 ja  $\text{C}_3\text{H}_4\text{O}_3$ :n tarkka massa on 88,0160.

**Vaihe 2** Laske yhdisteen tyydyttymättömyysaste.

- Yhdisteen  $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$  max.-määrä H atom. on  $2n + 2 = 2 \cdot 4 + 2 = 10$
- Koska yhdisteellä on vain kahdeksan vetyä, sillä on kaksi vähemmän kuin maksimimäärä.
- Näin ollen koska jokainen tyydyttymättömyysaste poistaa kaksi vetyä, niin yhdisteen **X** tyydyttymättömyysaste on yksi. Eli yhdiste **X** on joko rengasrakenteinen tai sisältää yhden kaksoissidoksen ( $\pi$ -sidos).

**Vaihe 3** Määritä mitkä funktionaaliset ryhmät näkyvät spektristä.

- Kaksi pääpiikkiä IR-spektrissä yli  $1\,500\text{ cm}^{-1}$  alueella johtuvat  $\text{C}_{sp^3}-\text{H}$  sidoksista ( $\sim 3\,000 - 2\,850\text{ cm}^{-1}$ ) ja lisäksi  $\text{C}=\text{O}$  -ryhmästä ( $1\,740\text{ cm}^{-1}$ ). Näin ollen tyydyttymättömyysaste johtuu kaksoissidoksesta  $\text{C}=\text{O}$ .

Massaspektrometria ja IR-spektroskopia antavat arvokasta mutta rajoitunutta tietoa tutkittavasta yhdisteestä. Vaikka MS ja IR -spektrit paljastavat yhdisteen **X** molekyylikaavaksi  $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$  sisältäen karbonyylisen hiilen, niin lopullisen rakennekaavan määrittämiseksi tarvitaan lisää tietoa. Esimerkiksi vetyjen laatu. Tähän vastauksen antaa H-NMR.