

# Aineen rakenteen analyysimenetelmiä

IHMISEN JA ELINYMPÄ-  
RISTÖN KEMIAA, KE2

**Johdantoa :** Olkoon yhdiste valmistettu laboratoriossa tai eristetty jostakin luonnon aineesta, kemistin on tiedettävä yhdisteen rakenne ja ominaisuudet.

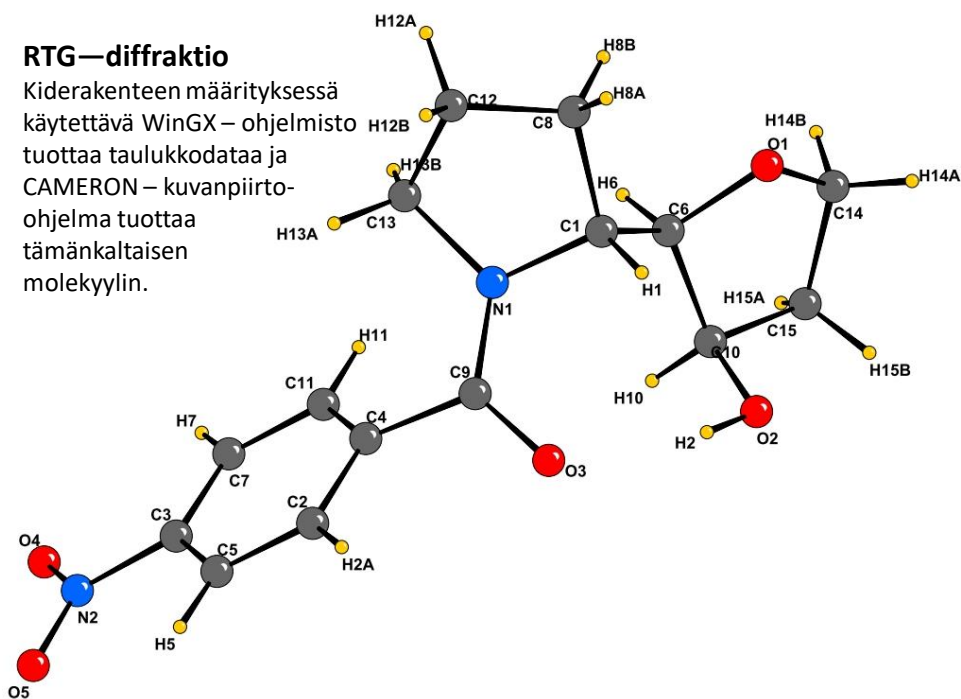
Vielä 1950-luvulla orgaanisen molekyylin rakenteen selvittäminen oli työstä. Se piti sisällään erilaisten fysikaalisten ominaisuuksien mittauksia (sulamis- ja kiehumispisteet, liukoisuus, tiheys, jne.), funktionaalisten ryhmien tunnistamista (kemialliset testit) sekä tuntemattoman yhdisteen muuttaminen toiseksi yhdisteeksi, jonka fys.&kem. ominaisuuksia sitten edelleen tutkittaisiin.

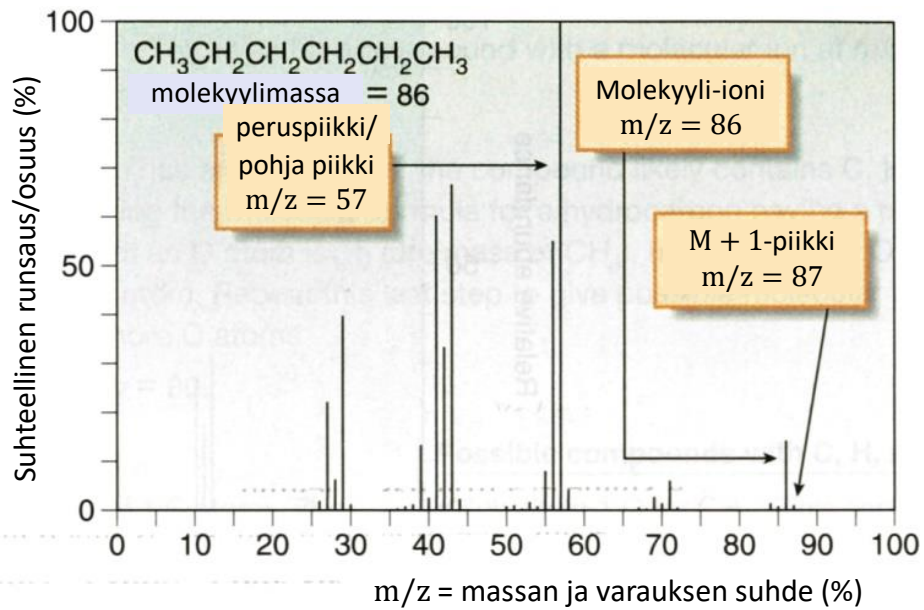
Vaikka tuntemattoman yhdisteen rakenteen selvittäminen on edelleen haastavaa, niin nykyiset menetelmät ovat sitä huomattavasti yksinkertaistaneet. Nykyisten tekniikoiden kautta yhdisteen rakenteen selvittäminen on nopeampaa ja toisaalta yhä monimutkaisempia rakenteita voidaan selvittää.

Menetelmiä ovat mm.: RTG-diffraktio, MS (massaspektrometria), IR (infrapunaspektroskopia), NMR (ydinmagneettinen resonanssispektroskopia).

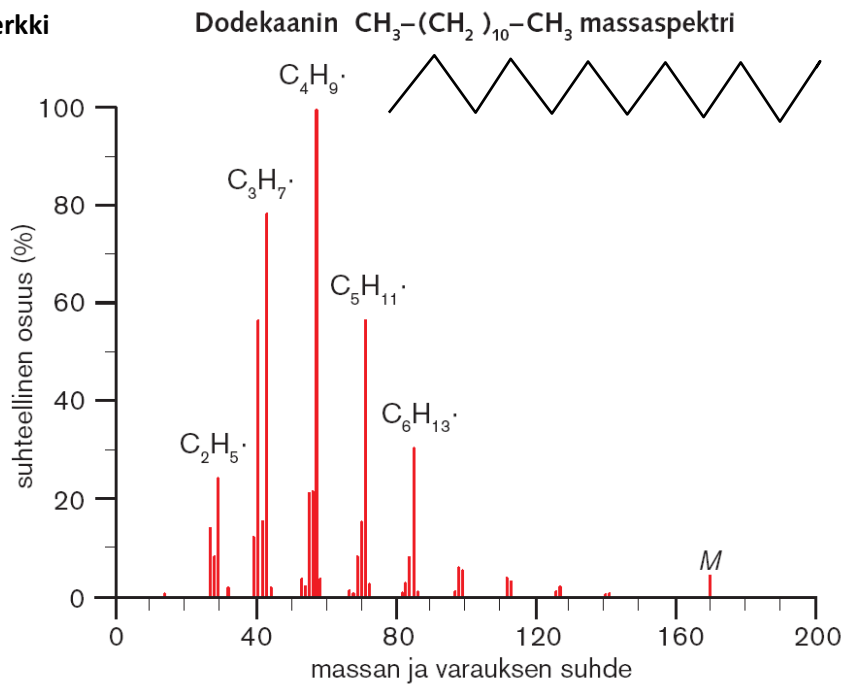
## RTG—diffraktio

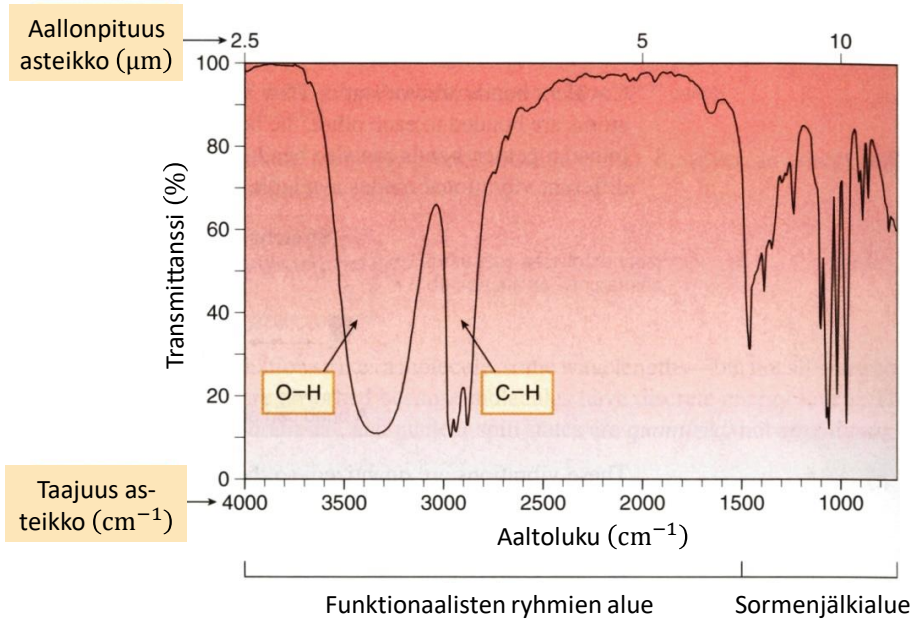
Kiderakenteen määrittämisessä käytettävä WinGX – ohjelmisto tuottaa taulukko- ja CAMERON – kuvanpiirto-ohjelma tuottaa tämänkaltaisen molekyylin.



**MS**

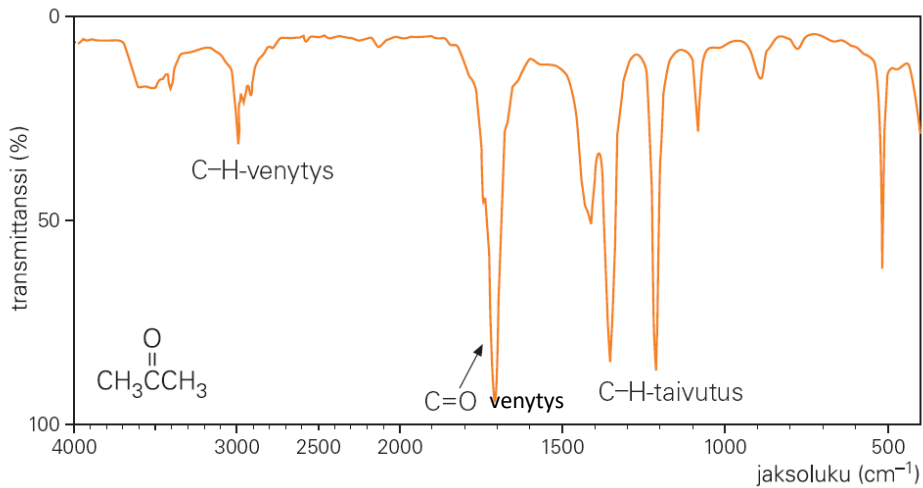
Tuloksena saadaan spektri, josta voidaan lukea ns. "lohkeavia" osia (fragments)

**Esimerkki**

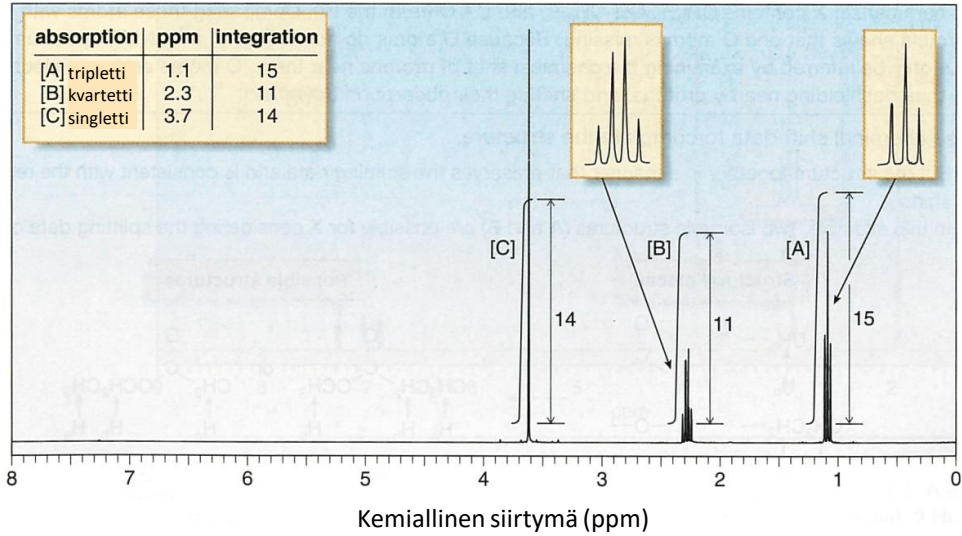


**IR** Tuloksena saadaan spektri, josta voidaan lukea funktionaalisten ryhmien tyypilliset värähdys- ja taivutusalueet sekä sormenjälkialue.

**Esimerkki** Asetonin IR-spektri.

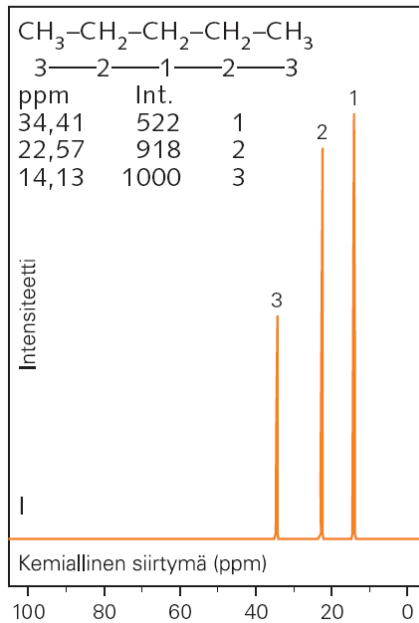


**NMR** Tuloksena saadaan spektri, josta voidaan lukea erilaisia vetyjä (hiiliä) ja niiden määriä.

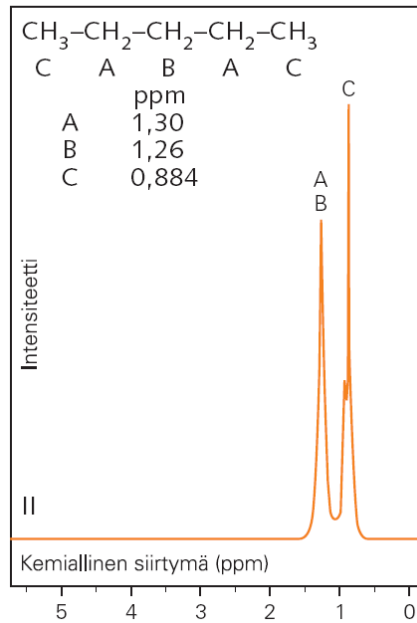


**Esimerkki** Pentaanin  $^{13}\text{C}$ - ja  $^1\text{H}$ -NMR-spektrit .

$^{13}\text{C}$  NMR (15 MHz)



$^1\text{H}$  NMR (90 MHz)



## Sanastoa ja käsitteitä

**Spektri** Tarkoittaa sähkömagneettisen säteilyn voimakkuuden (intensiiteetin) tai muiden ilmiöiden, suureiden tms. jakaumaa aallonpituuden, taajuuden tai muun muuttujan suhteen. → joku kuvaaja, jota tulkitaan ☺.

**Spektroskopia ja Spektrometria** Spektroskopia ja spektrometria ovat päällekkäisiä käsitteitä. "Skopia" tietysti viittaa katsomiseen, "metria" mittaamiseen. Olennaista spektroskopian ja spektrometrian käsitteissä on, että niissä on kysymys spektristä, joka tarkoittaa säteilyn, tai yleisemmin jonkin systeemin energian jakautumista systeemin vapausasteiden kesken.

**Spektrometri ja spektroskooppi** Spektrin määrittämis- tai havainnointilaitte.

**Kristallografia** Tarkoittaa yleisesti kide tiedettä.

**Diffraktio** On ilmiö, jossa aallon muoto muuttuu, kun sen kulkuun on vaikuttanut jokin kappale, esim. rako tai kide (aalto "taipuu/heijastuu").

**Rönt.diffraktio** On ilmiö, jossa röntgensäteily diffraktoituu kiteestä.

**Rönt.kristallografia** Tarkoittaa kiderakenteen tutkimista röntgendiffraktion avulla.