



12. Molekyylin
vuorovaikutus
säteilyn kanssa
kertoo sen
rakenteesta

Sähkömagneettinen säteily

Sähkömagneettinen säteily

- Sähkömagneettisella säteilyllä on eri säteilylajeja, joilla on eri aallonpituus ja energia.
- Sähkömagneettinen säteily virittää molekyylejä.
- Eri säteilylajit aiheuttavat erilaisia virittyneitä tiloja molekyyleihin.

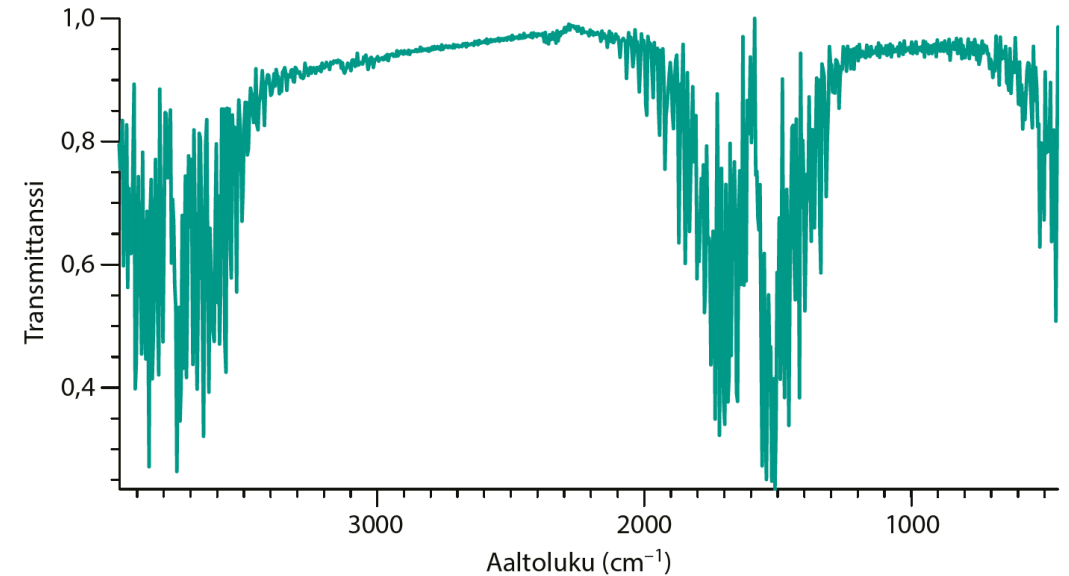
Sähkömagneettisen säteilyn lajeja

Säteilylaji	Aallonpituus nano- metreinä	Mihin säteily vaikuttaa molekyylissä?	Mitä säteily aiheuttaa?
Radioaallot	1 000 000–10 ¹⁷	Molekyylin pyörimisliike	Molekyyli pyörii nopeammin
IR-säteily	700–1 000 000	Molekyylin sidoksien värähdykset	Molekyylin sidokset värähtelevät nopeammin
Näkyvä valo	400–700	Molekyylin elektroni- rakenne	Elektroneja virittyy orbitaaleilta toisille orbitaaleille
Matalaenerginen UV-säteily	100–400		
Korkeaenerginen UV-säteily	10–100		
Röntgen-säteily	0,01–100	Molekyylin rakenne	Molekyylistä irtoaa elektroneja ja mole- kyyli tuhoutuu
Gammasäteily	0,001–0,01		

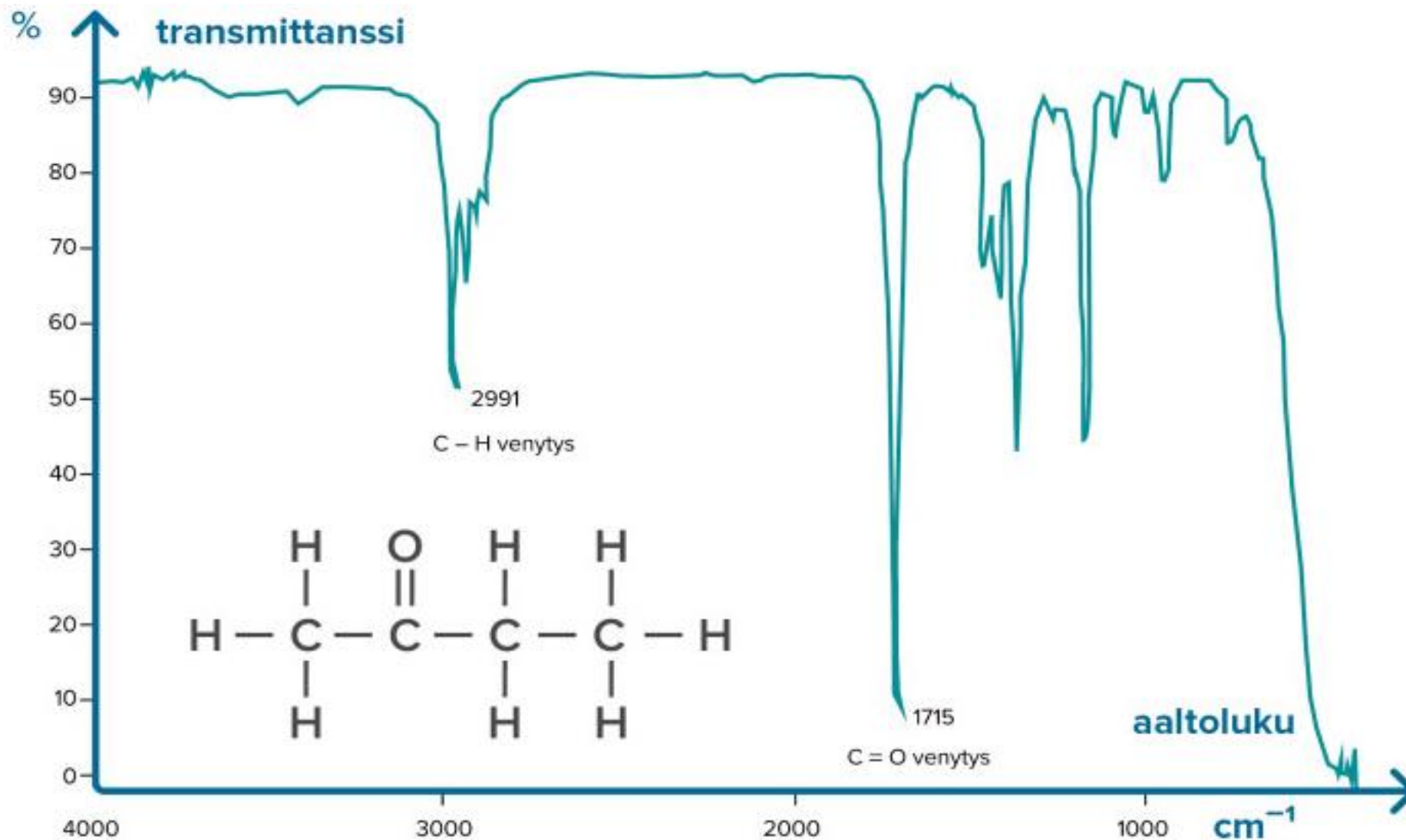
IR-spektroskopiassa tutkitaan molekyylin värähtelyitä

IR-spektroskopia

- IR-spektroskopia perustuu infrapunasäteilyn vuorovaikutukseen molekyylin kanssa.
- Spektriä voidaan käyttää tiettyjen funktionaalisten ryhmien tunnistamiseen (taulukkokirja).
- Spektrin vaaka-akseli kuvaa säteilyn energiaa, joka ilmaistaan aaltolukuna yksikössä cm^{-1} .



Transmittanssi kuvaa, kuinka suuri osa säteilystä läpäisee näytteen.



Kuva 70. Butanonin IR-spektrissä tyypilliset sidosvenytysvärähtelyt näkyvät aaltoluvuilla 2991 cm⁻¹ (C – H-sidos) ja 1715 cm⁻¹ (C=O- sidos). Näiden venytysvärähtelyjen lisäksi erilaiset sidosten taivutusvärähtelyt aiheuttavat piikkejä aaltolukua 1500 cm⁻¹ pienemmällä alueella.

NMR-spektroskopia kertoo ytimien ympäristöistä

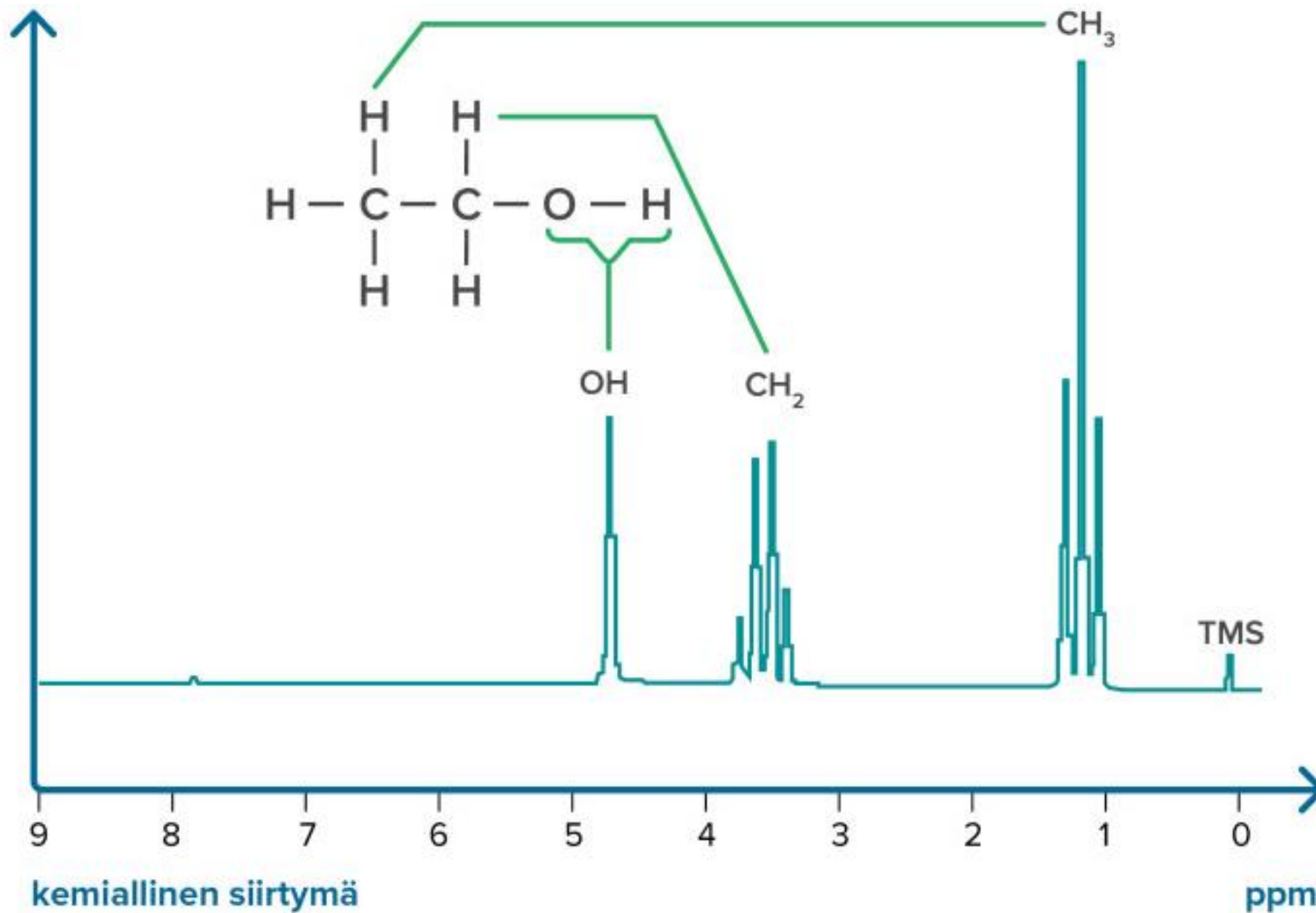
NMR-spektroskopia

- Perustuu atomiytimien vuorovaikutukseen säteilyn kanssa voimakkaassa magneettikentässä.
- Spektrin piikit kuvaavat ytimiä erilaisissa kemiallisissa ympäristöissä.
- Spektrin vaaka-akseli kuvaa kemiallista siirtymää eli sitä, kuinka paljon ytimen kemiallinen ympäristö poikkeaa vertailuaineesta.

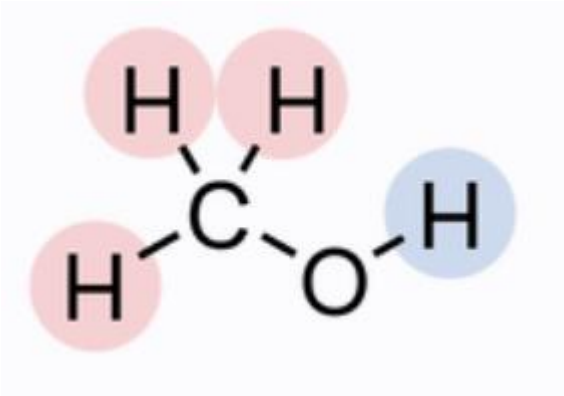


Magneettikuvaus on yksi NMR-tekniikan tärkeä sovellus.

Protoni – NMR eli ^1H - NMR kertoo, kuinka vedyt ovat sitoutuneet yhdisteessä

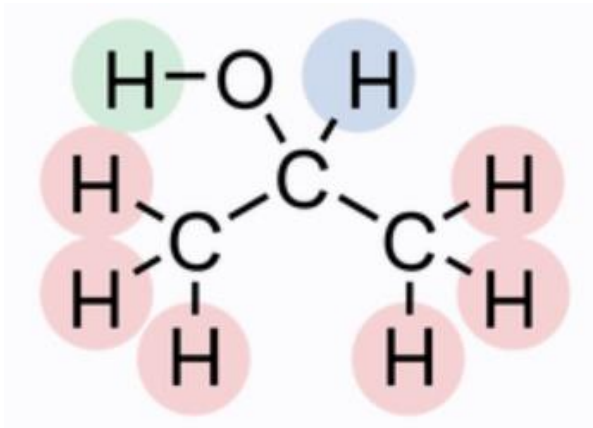


Kuinka monta piikkiä on metanolin ^1H - NMR –spektrissä?



Vetyjä on kahdessa erilaisessa ympäristössä, joten piikkejä on kaksi.

Kuinka monta piikkiä on 2-propanolin ^1H - NMR –spektrissä?



Vetyjä on kolmessa erilaisessa ympäristössä, joten piikkejä on kolme.