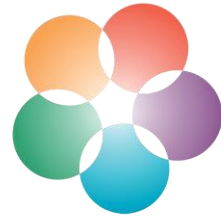
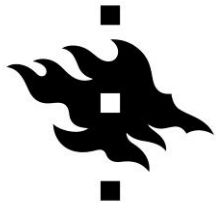




Kemianluokka
Gadolin



LUMA-KESKUS
SUOMI



HELSINGIN YLIOPISTO

Infrapunaspektroskopia

1. Infrapuna-(IR)-spektroskopia

- IR-spektroskopiaa käytetään **yleisesti aineiden tunnistamiseen ja molekyylin rakenteen määrittämiseen** yhdessä muiden spektroskopia menetelmien kanssa
- IR-spektroskopia perustuu **molekyylien vuorovaikutukseen infrapuna-alueen valon kanssa**
- **IR-spektrometri mittaa**, kuinka paljon tutkittavan **aineen molekyylit absorboivat infrapunasäteilyä**
- IR-spektrometriä voidaan käyttää ainoastaan molekyyliin, joissa sidoksien välillä on pysyvä tai hetkellinen dipolimomentti



Molekyylit värähtelevät

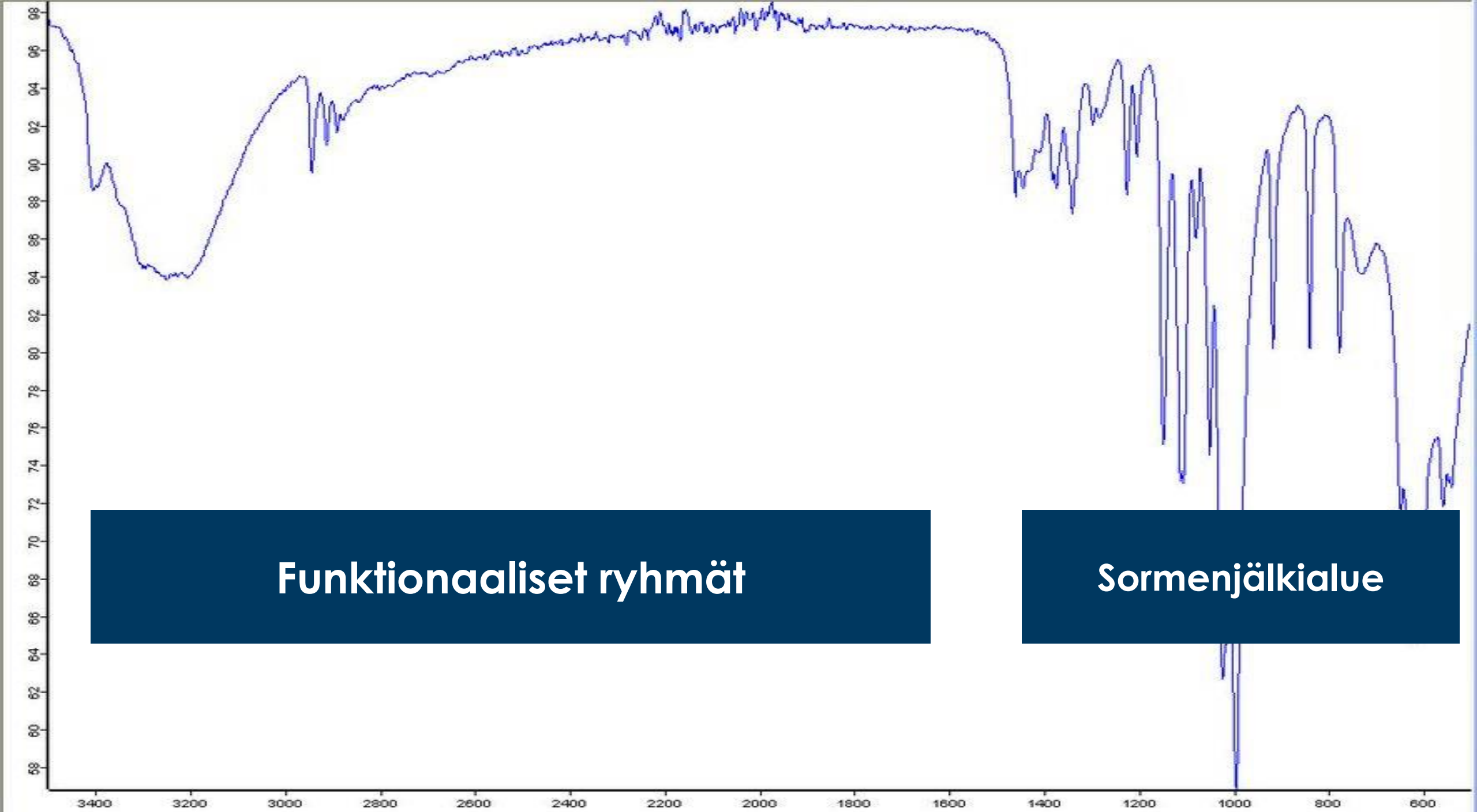
- Molekyyleissä atomien väliset sidokset ovat jatkuvassa värähtelevässä tilassa
- Värähtelyn taajuus on **kullekin sidostyypille ominainen** ja riippuu lämpötilasta
- **IR-säteily absorboituu molekyyliin ja sen sidoksiin**
- Molekyylin absorbanssi ilmoitetaan aaltoluvun funktiona
- Infrapuna-alueella säteilyn absorptio tapahtuu kullekin funktionaaliselle ryhmälle ominaisella aallonpituusalueella



IR-spektri

- Jokaisella yhdisteellä on sille tunnusominaisen, yleensä paljon yksityiskohtia sisältävä **IR-spektrinsä**
- Spektrin perusteella voidaan päätellä, mitä atomeja ja atomiryhmiä näytteessä on ja millaisia sidoksia atomien välillä on
- IR-spektrissä huomioita kiinnitetään absorptiopiikin paikkaan, intensiteettiin ja muotoon
- IR-spektrin tulkinnan helpottamiseksi, spektri voidaan jakaa kahteen alueeseen:
 - Funktionaalisten ryhmien juovat ($> 1500 \text{ cm}^{-1}$)
 - Sormenjälkialue ($< 1500 \text{ cm}^{-1}$)





Funktionaaliset ryhmät

Sormenjälkialue

IR-spektri ja funktionaaliset ryhmät

- Helposti tunnistettavissa on karbonyylin venytysvärähdys, aaltoluvulla n. 1700, joka on vahva signaali ja voidaan merkitä taulukkoon 1700 cm^{-1} (s)
- Muita helposti tunnistettavia ryhmiä ovat hydroksyyli-ryhmät, kaksois- ja kolmoissidokset ja aromaattisuus



Sidos	Yhdistetyyppi	Aaltoluku (cm ⁻¹)
C-H	alkaani, alkeeni, aromaattinen	2850 – 3100
C-H	alkyyini	3300
C-O	alkoholi, esteri, eetteri	1050 – 1410
C=O	aldehydi, ketoni, karboksyylihappo, esteri	1700 - 1750
O-H	alkoholi, fenoli	3200 – 3600 (leveä)
N-H	amiinit ja amidit	3300 - 3500
C=C	alkeeni	1610 - 1680
C≡C	alkyyini	3300
C-N	amiinit ja amidit	1180 - 1360
C≡N	nitriilit	2210 – 2280

IR-spektrin tulkinnan ABC

- A) Piikkien etsintä spektristä
- B) Piikkien analysointi
- C) Aaltoluvun etsintä taulukosta



Infrapuna-(IR)-spektroskopia

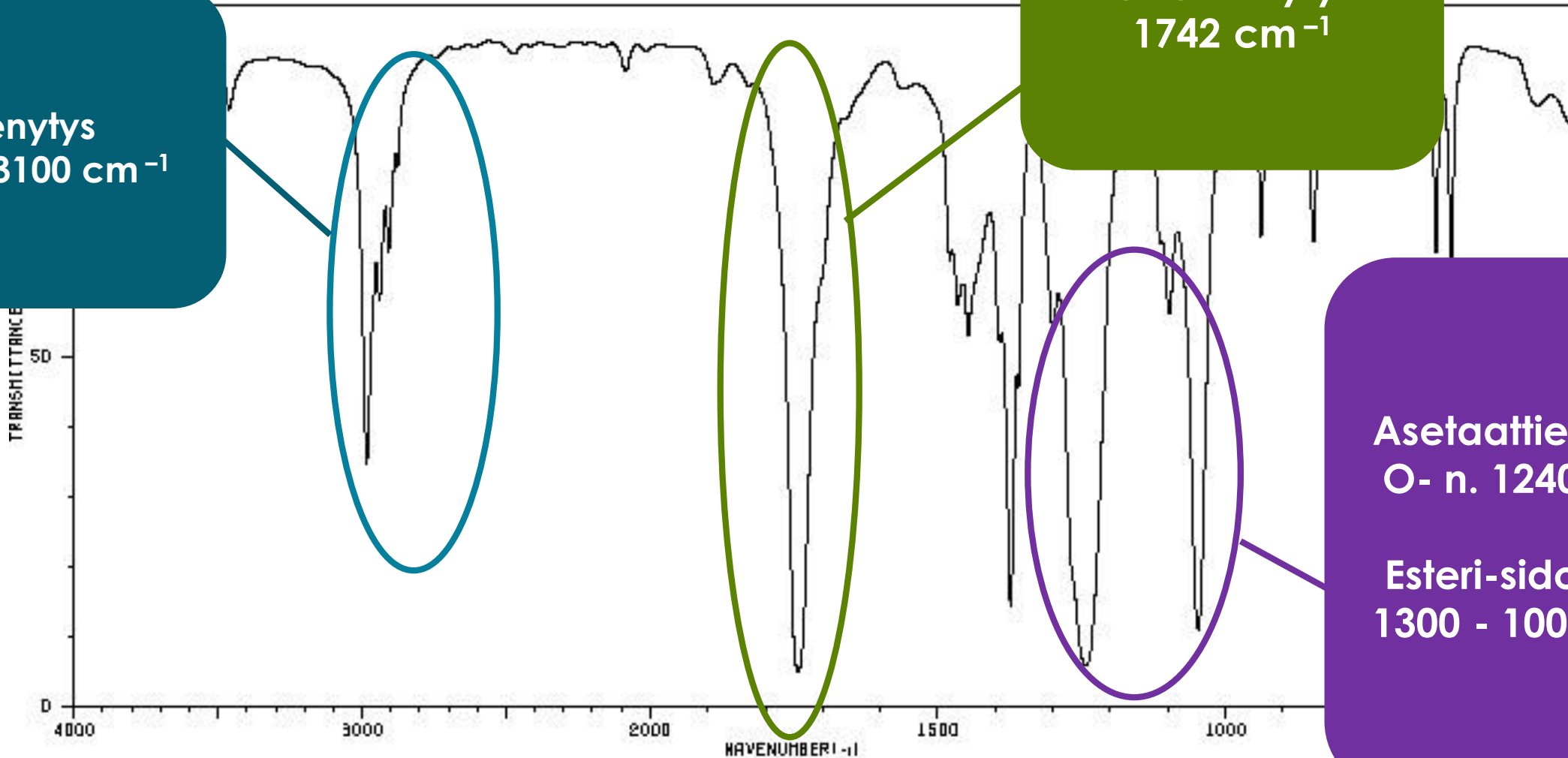
- Tarkastellaan Etyyliasetaatin IR-spektriä

CH-venytys
2800-3100 cm^{-1}

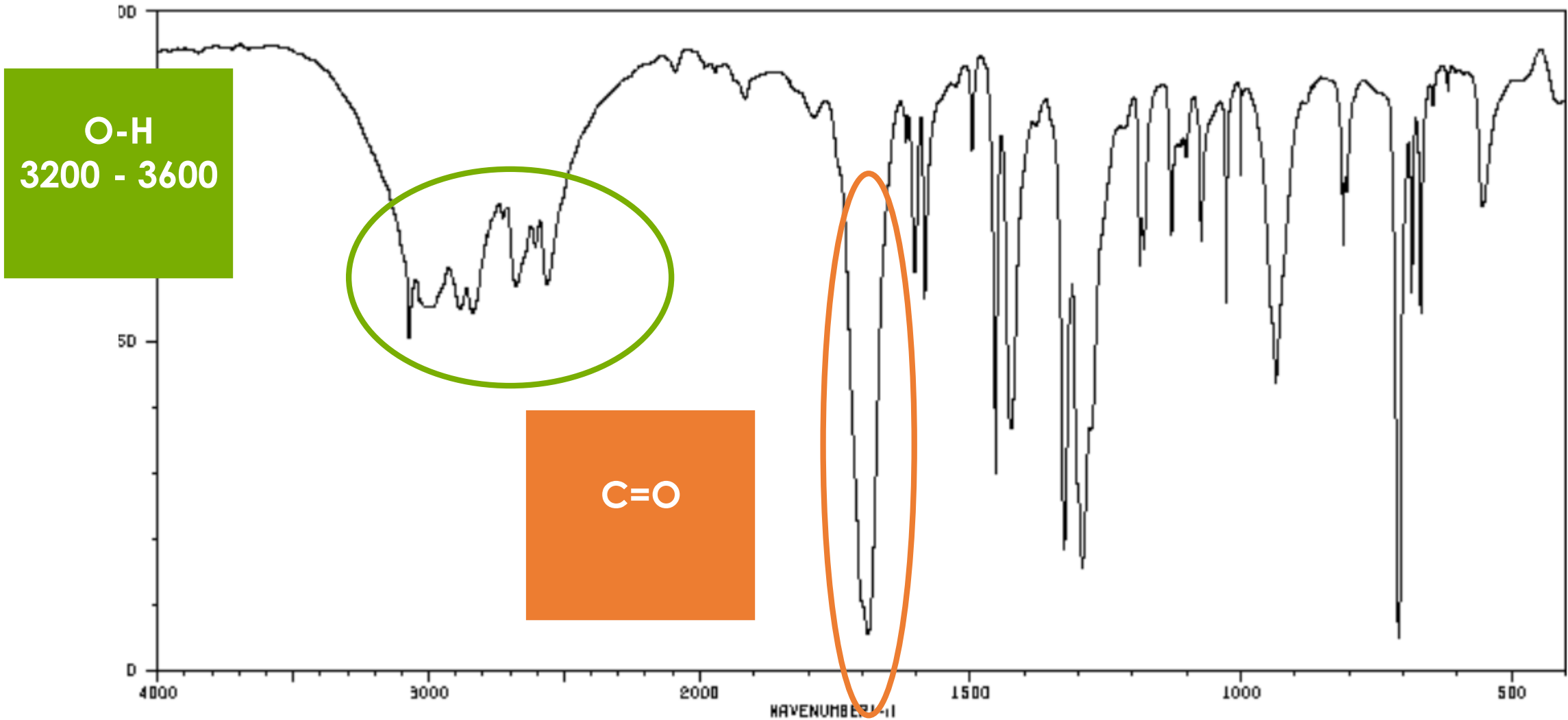
C=O venytys
1742 cm^{-1}

Asetaattien C-C-
O- n. 1240 cm^{-1}

Esteri-sidos C-O
1300 - 1000 cm^{-1}



Harjoittele IR-spektrin tulkintaa: Bentsoehapon IR-spektri



Lisätietoa IR-spektroskopiasta

NIST Chemistry Webbook –*sivustolta voi hakea dataa ja spektrejä eri molekyyleille*

<https://webbook.nist.gov/chemistry/name-ser/#>

Chemical Education Digital Library - *IR-mallinnusta verkossa*

<http://www.chemeddl.org/resources/models360/models.php>



Kemianluokka
Gadolin



LUMA-KESKUS
SUOMI



HELSINGIN YLIOPISTO

Tekijät:

Veera Sinikallio

Saara Salminen

Vilja Kämppi