



Olika spektroskopiska metoder

- NMR (Nuclear magnetic resonance)
- MS (Mass spectroscopy)
- IR (Infrared spectroscopy)
- UV (Ultraviolet)



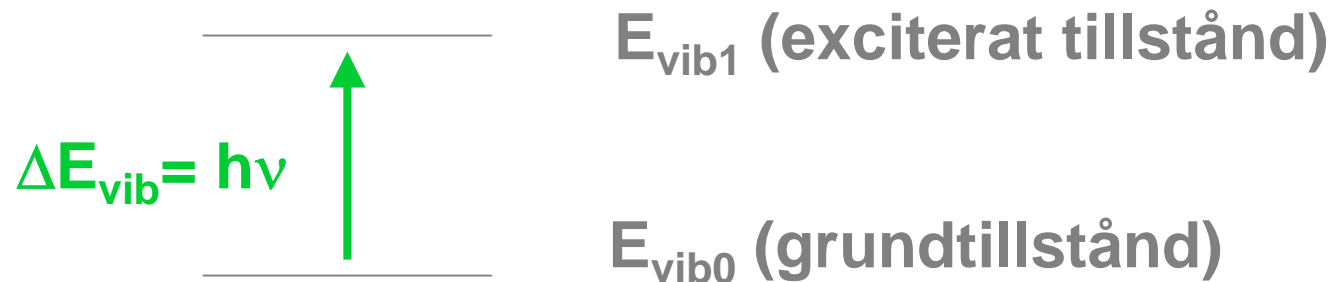
Vad händer med molekylen?

Strålning som absorberas	Effekt på molekylen, information
<i>Ultraviolet – synligt ljus</i> λ , 190–400nm 400–800nm	Elektronerna i molekylen exciteras. Visar närvaro av π -system, konjugerade system, konjugering med icke-bindande elektroner
<i>infrarött ljus</i> λ , 2.5–25 μ m $\bar{\nu}$, 400–4000cm ⁻¹	Bindningarnas vibrations- och rotationsmoment ändras. Visar närvaro av funktionella grupper, med specifika vibrationsfrekvenser.
<i>mikrovågor</i> ν , 9.5*10 ⁹ Hz	Inducerar förändringar i de magnetiska egenskaperna för oparade elektroner.
<i>radiovågor</i> ν , 60–600MHz	Kärnmagnetisk resonans. Förändrar de magnetiska egenskaperna för vissa atomkärnor. Visar vilken kemisk omgivning exv. kol- och väteatomerna befinner sig i.
<i>elektroner</i> 70eV, 6000 kJmol ⁻¹	Jonisering och fragmentering av molekylen. Visar molvikt och i molekylen ingående fragment.



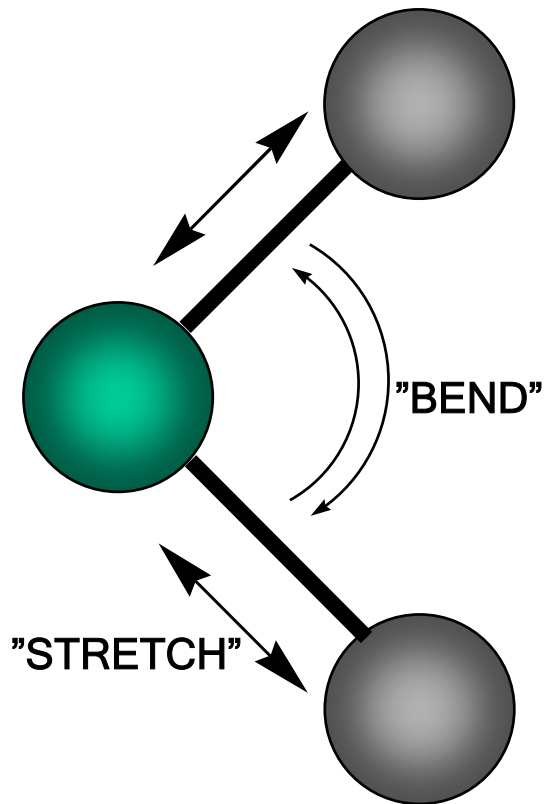
Hur går det till?

- Elektromagnetisk strålning absorberas av bindningarna, som börjar vibrera. Bindningsvibrationen måste ändra bindningens dipolmoment för att vara IR-aktiv!





Hur går det till?



- Sträckningssvängningar:
 - Högre energi
 - $4000-1430\text{cm}^{-1}$
- Böjningssvängningar:
 - Lägre energi
 - $1430-400\text{cm}^{-1}$



Hookes lag

- Hookes lag beskriver rörelsen av en fjäder. Ekvationen kan appliceras på två atomer i en bindning.

$$\nu = k \sqrt{f \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}}$$

ν = vibrationsfrekvens

k = konstant

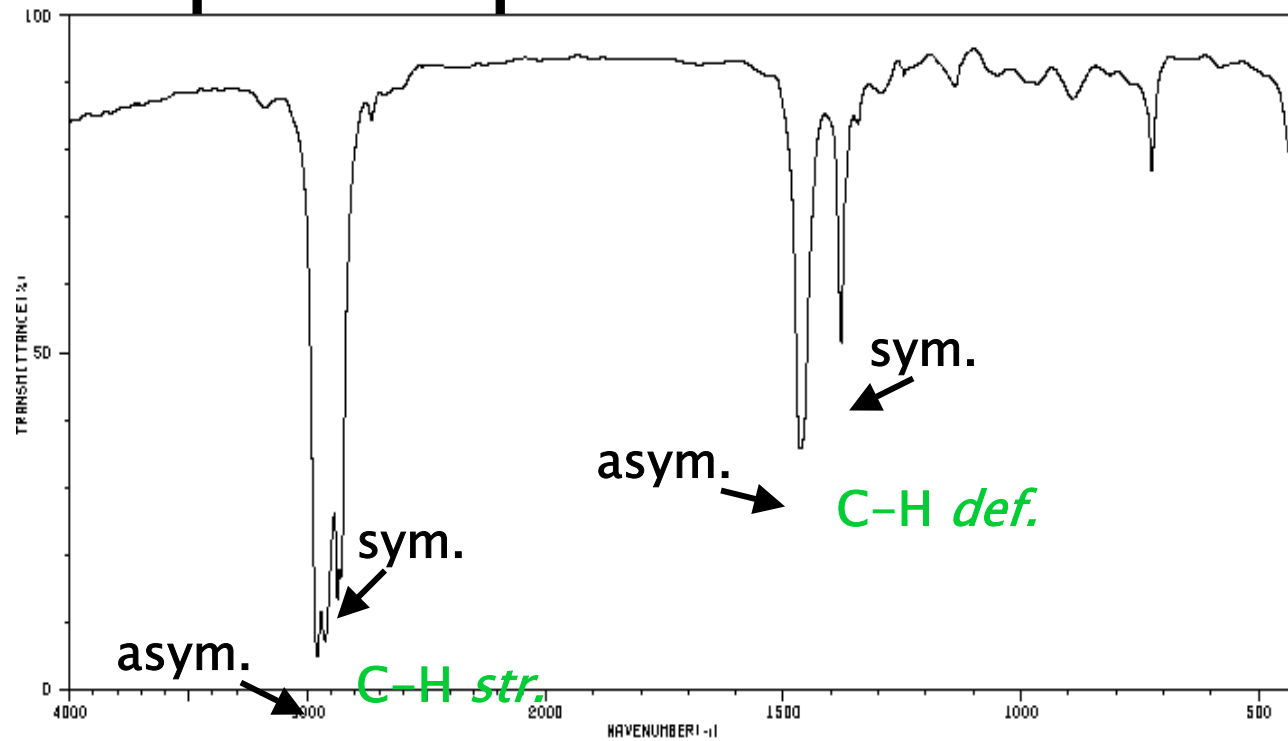
f = kraftkonstant, styrkan hos fjädern, (bindningen)

$m_1 m_2$ = massan för de fästade vikterna (atomerna)



Hur ser det ut?

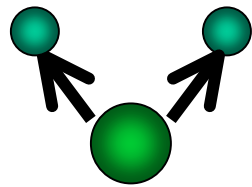
- Absorptionsspektrum för hexan.



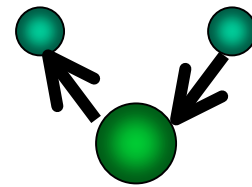


Olika typer av svängningar

- Sträckningar (*stretching*)

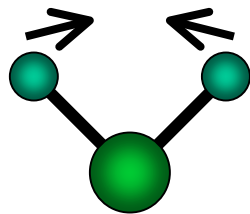


symmetrisk

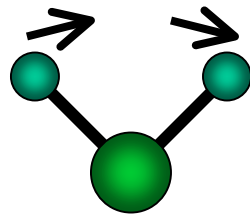


asymmetrisk

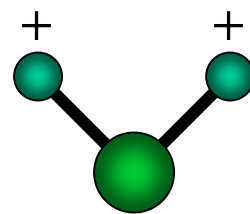
- Böjningar (*bending*) eller deformationer



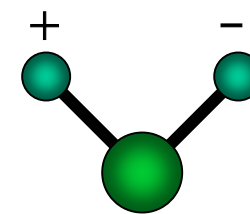
scissoring



rocking



wagging



twisting

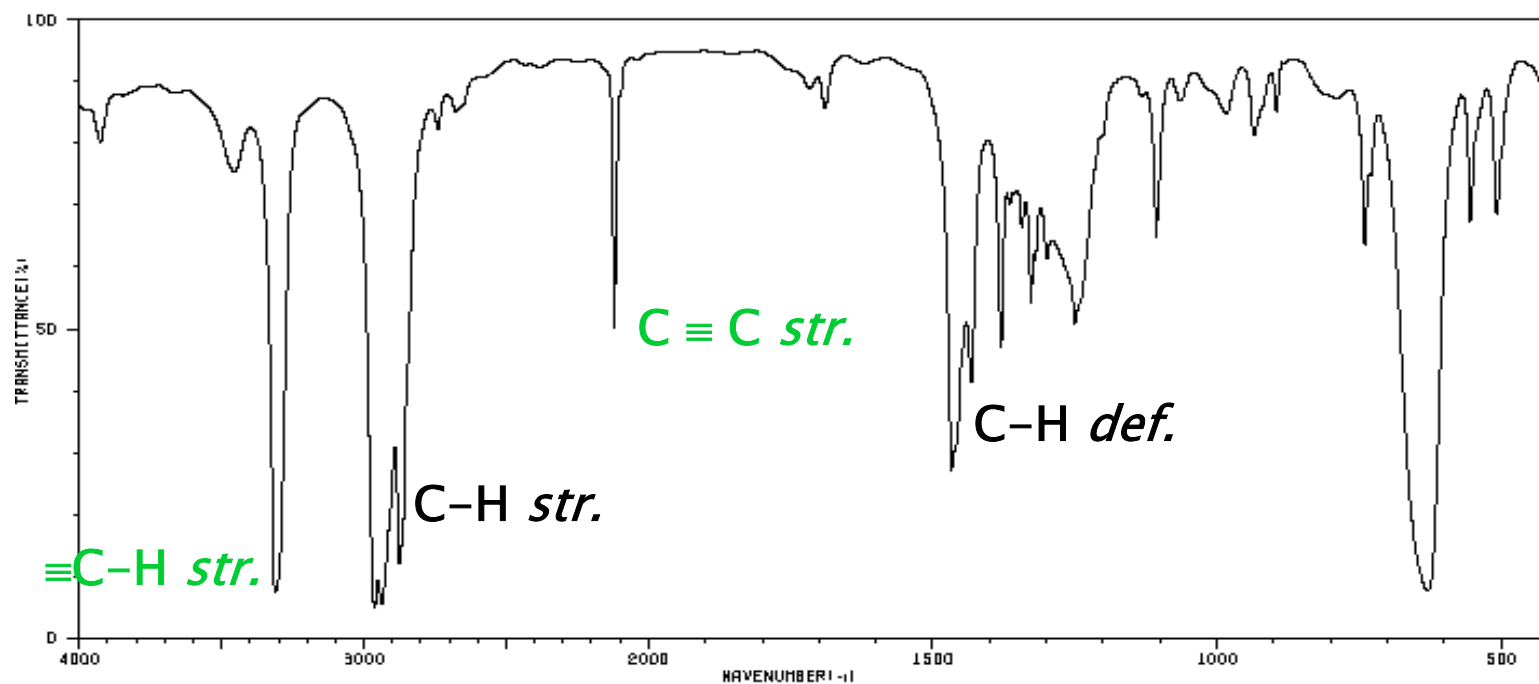
IN PLANE

OUT OF PLANE



Vilka faktorer påverkar?

- IR-spektrum för 1-hexyn





Vilka faktorer påverkar?

Stretching

- Bindningsstyrka, *högre $\bar{\nu}$ för starkare bindning*

$\text{C}\equiv\text{C}$
2150 cm^{-1}

$\text{C}=\text{C}$
1650 cm^{-1}

$\text{C}-\text{C}$
1200 cm^{-1}

- Atomernas massa, *högre $\bar{\nu}$ vid lägre massa*

$\text{C}-\text{H}$
3000 cm^{-1}

$\text{C}-\text{O}$
1100 cm^{-1}

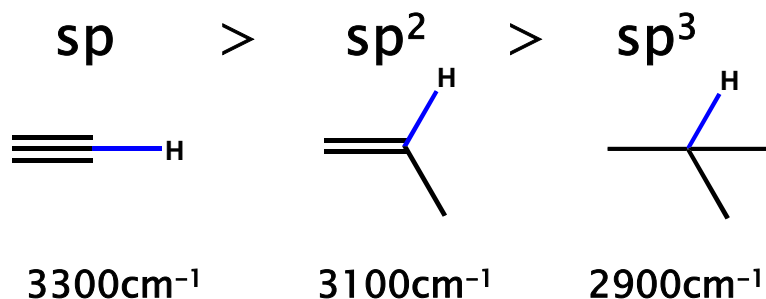
$\text{C}-\text{I}$
500 cm^{-1}



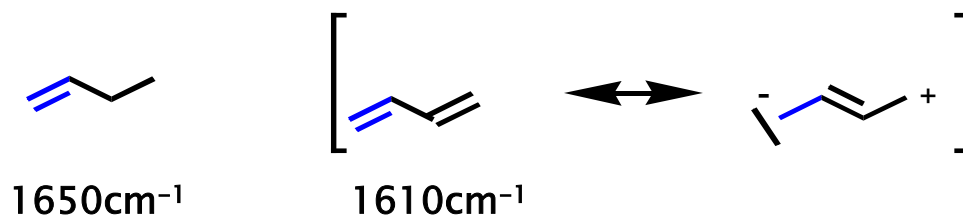
Vilka faktorer påverkar?

Stretching

- Hybridisering, *påverkar bindningens längd/styrka*



- Resonans, *påverkar bindningens längd/styrka*





När används IR?

- IR ger information om vilka *funktionella grupper* molekylen innehåller eller inte innehåller.
- IR säger inget om hur grupperna är ordnade inbördes, i molekylen. För att utreda detta får man ta andra spektroskopiska metoder till hjälp (t.ex. NMR).



När används IR?

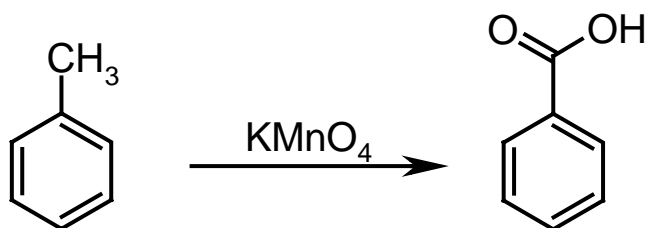
- Identifiering av substanser.
- För att följa en reaktion där en funktionell grupp försvinner och/eller en ny tillkommer.
- För strukturbestämning, tillsammans med andra spektroskopiska metoder.



När används IR?

Att följa en reaktion

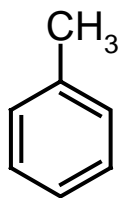
- Oxidation av toluen till bensoesyra





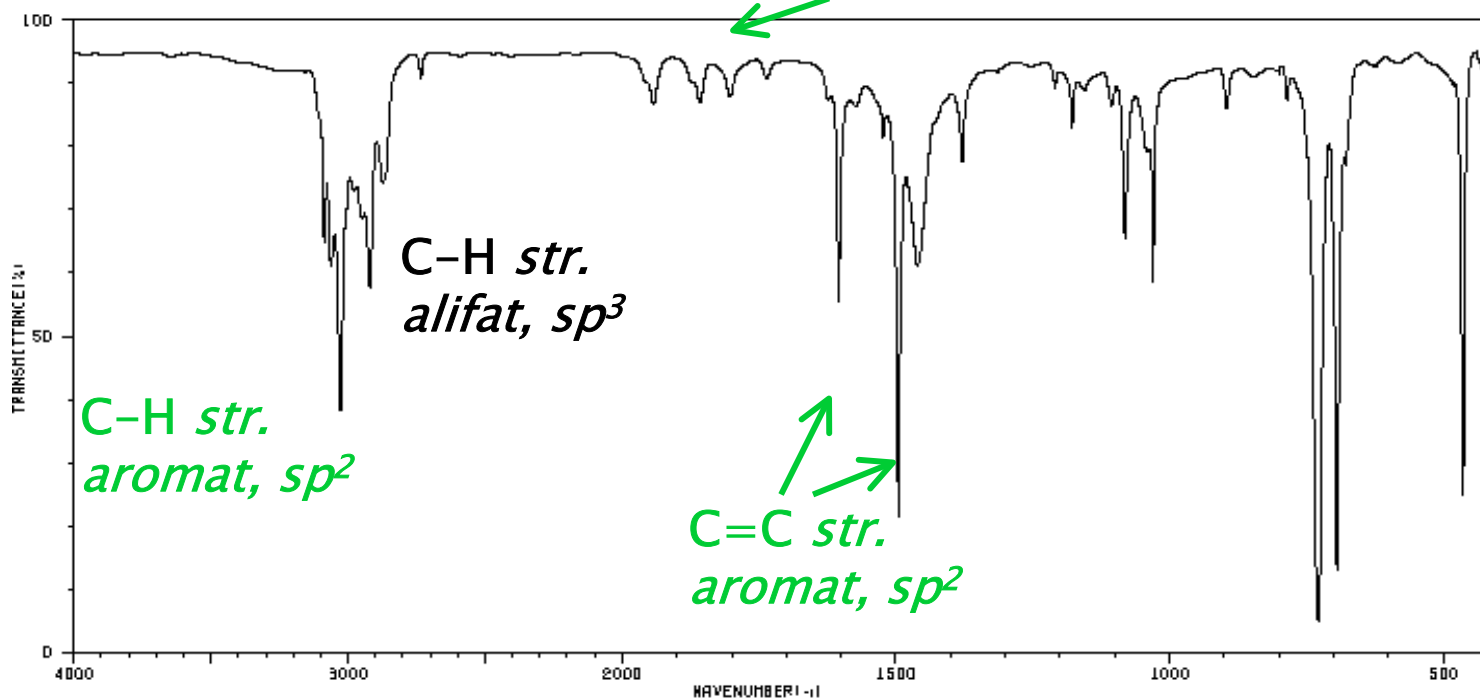
När används IR?

Att följa en reaktion



Toluen

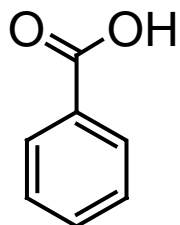
Aromatiska
övertoner
"bensenfingrar"



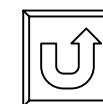
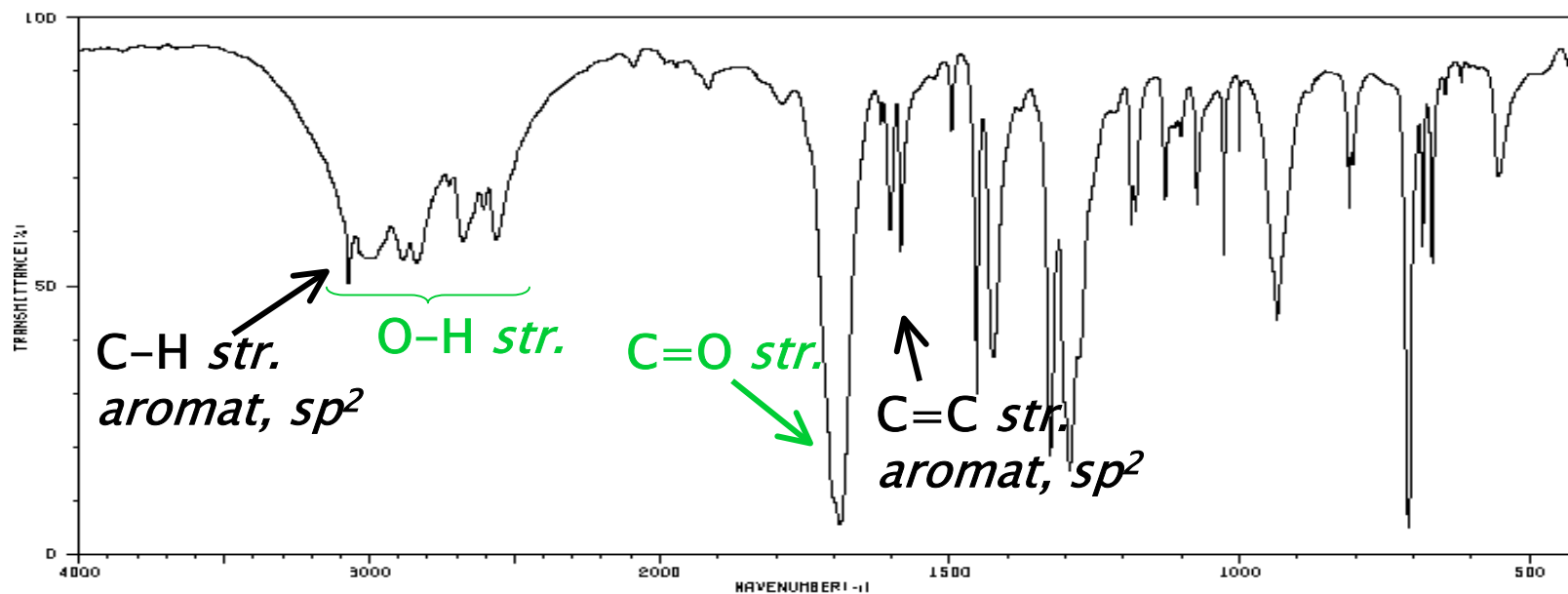


När används IR?

Att följa en reaktion



Bensoesyra





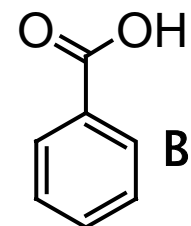
Provberedning

- Gas
- Olja
- Kristaller
- Lösning

Provberedningen
har betydelse för
spektrats utseende.

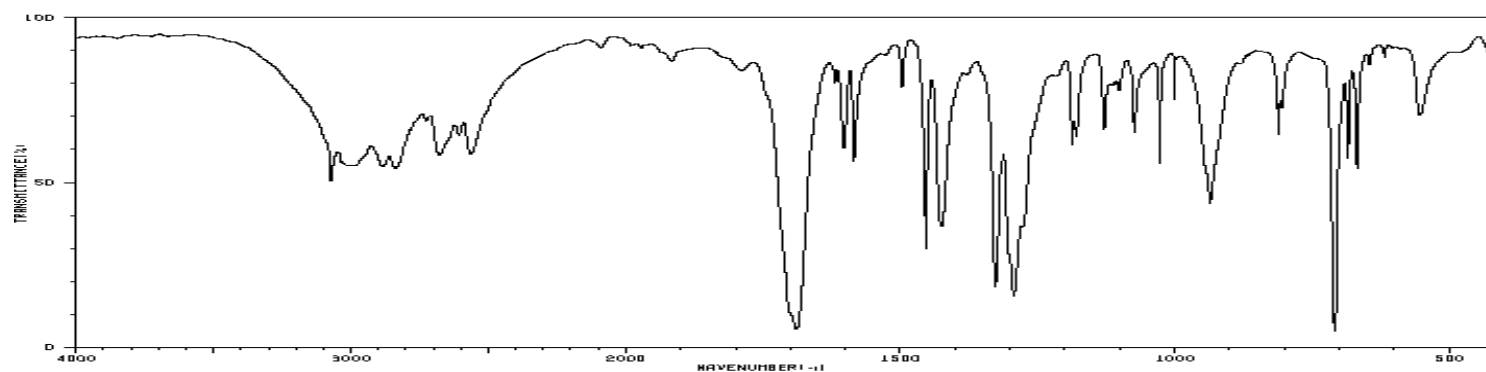


Provberedning

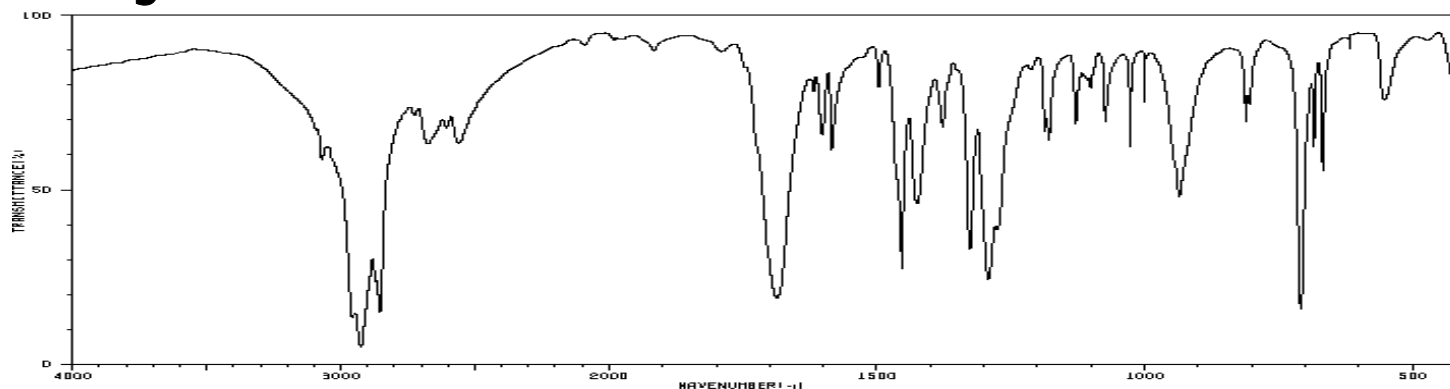


Bensoesyra

- KBr-tablett



- Nujol mull





Tolkning ~ Stretching

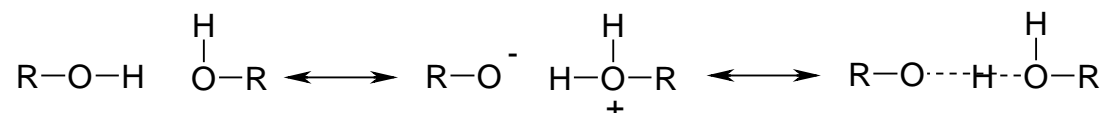
- $> 2\ 500\ \text{cm}^{-1}$, *bindning till -H*

$3\ 500\text{--}3\ 300\ \text{cm}^{-1}$ O-H alkohol, fenol ~ *oftast "bullig"*

$3\ 500\text{--}3\ 300\ \text{cm}^{-1}$ N-H aminer, primära $-\text{NH}_2$ ger två band
($> 3\ 000\ \text{cm}^{-1}$) sekundära $-\text{NH}-$ ger ett band
~medium till svaga band

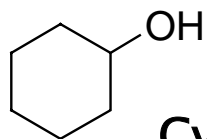
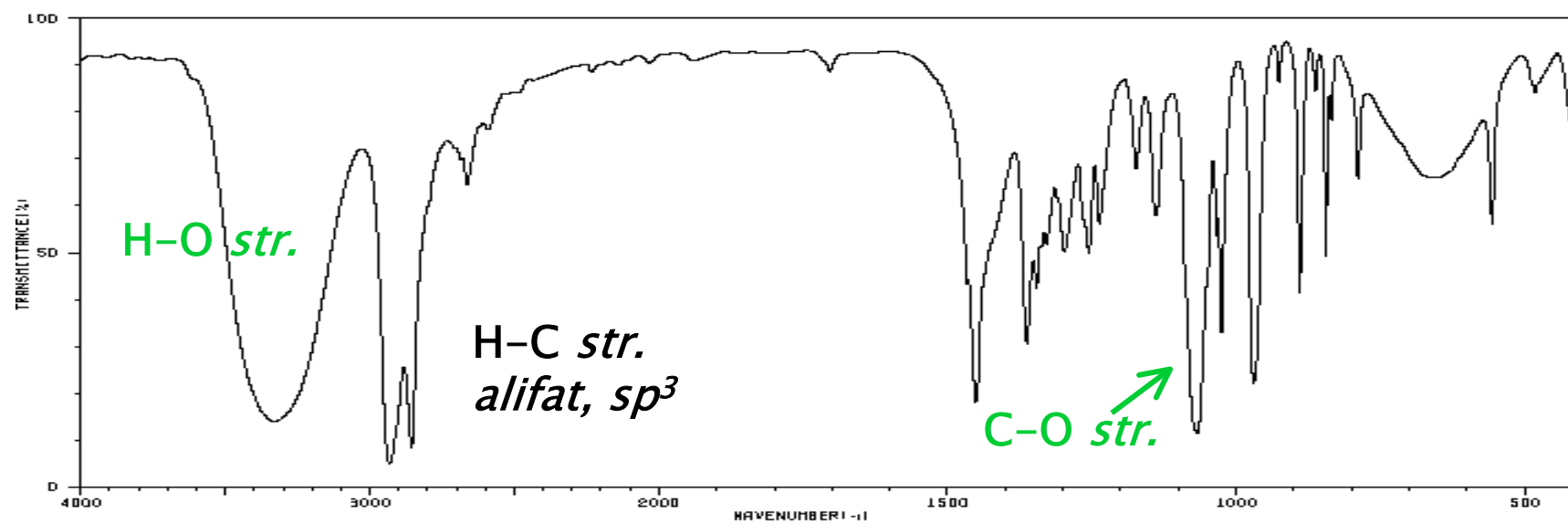
$3\ 400\text{--}2\ 400\ \text{cm}^{-1}$ $\text{O}=\text{C}-\underline{\text{O}}-\text{H}$ karboxylsyra ~ *brett "dike"* 

Generellt : Vätebundna O-H kommer vid lägre vågtal och är bredare.





Tolkning

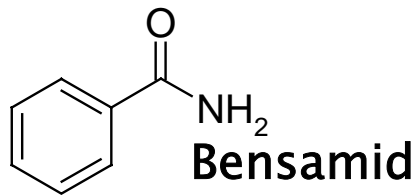
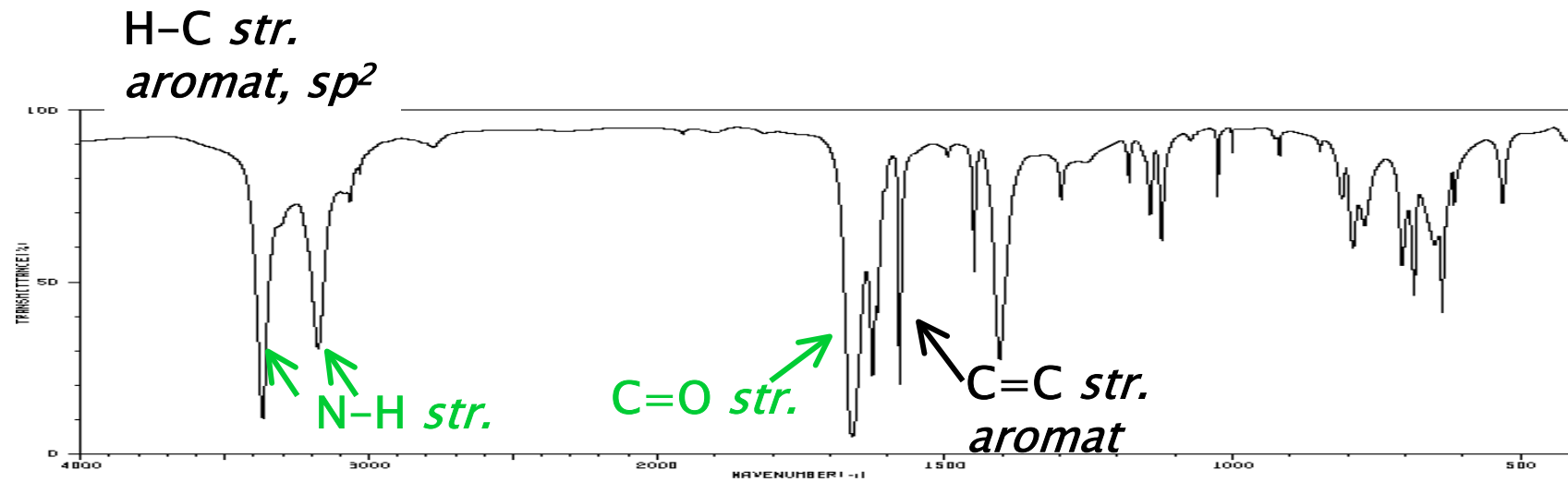


Cyklohexanol





Tolkning







Tolkning ~ Stretching

- $> 2\,500\text{ cm}^{-1}$, *bindning till -H*

$3\,000\text{--}2\,800\text{ cm}^{-1}$ $C(sp^3) - H$
($< 3\,000\text{ cm}^{-1}$)

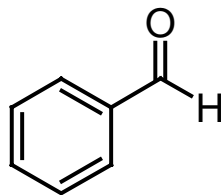
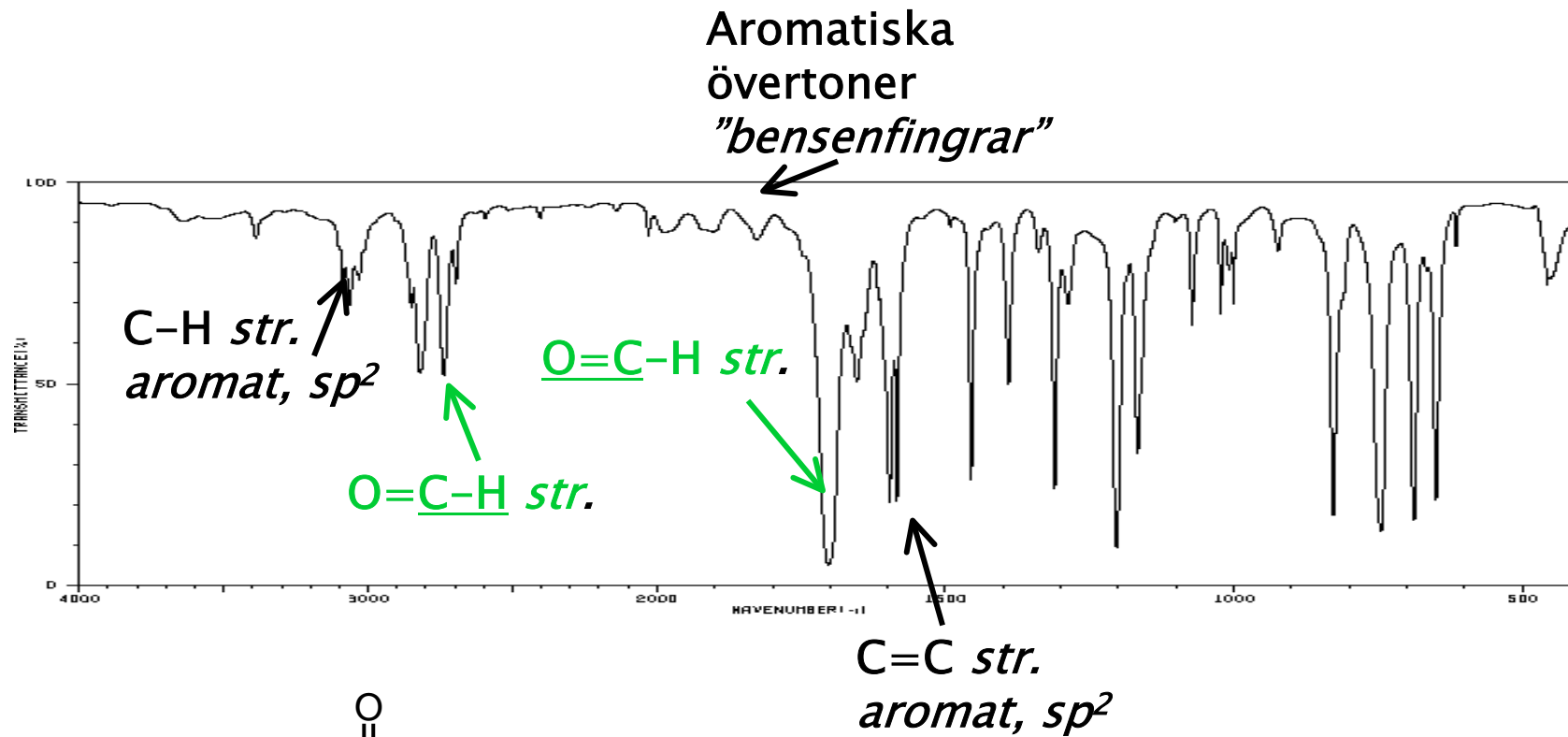
$3\,100\text{--}3\,000\text{ cm}^{-1}$ $C(sp^2) - H$ 

$3\,300\text{ cm}^{-1}$ $C(sp) - H$ *skarpt band ~ terminal acetylen*

$2\,850\text{ cm}^{-1}$ och $O=\underline{C} - H$ *två svaga band ~ aldehyd*
 $2\,750\text{ cm}^{-1}$ 



Tolkning



Bensaldehyd



Tolkning ~ Stretching

- 2 500–2 000 cm^{-1}

2 270 cm^{-1} $-\text{N}=\text{C}=\text{O}$ isocyanat ~ *medium till starka band*

2 250 cm^{-1} $-\text{C}\equiv\text{N}$ nitril ~ *medium till starkt band*

2 150 cm^{-1} $-\text{C}\equiv\text{C}$ alkyn ~ *medium till svaga band*

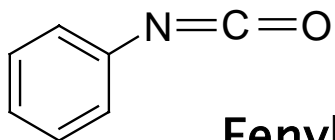
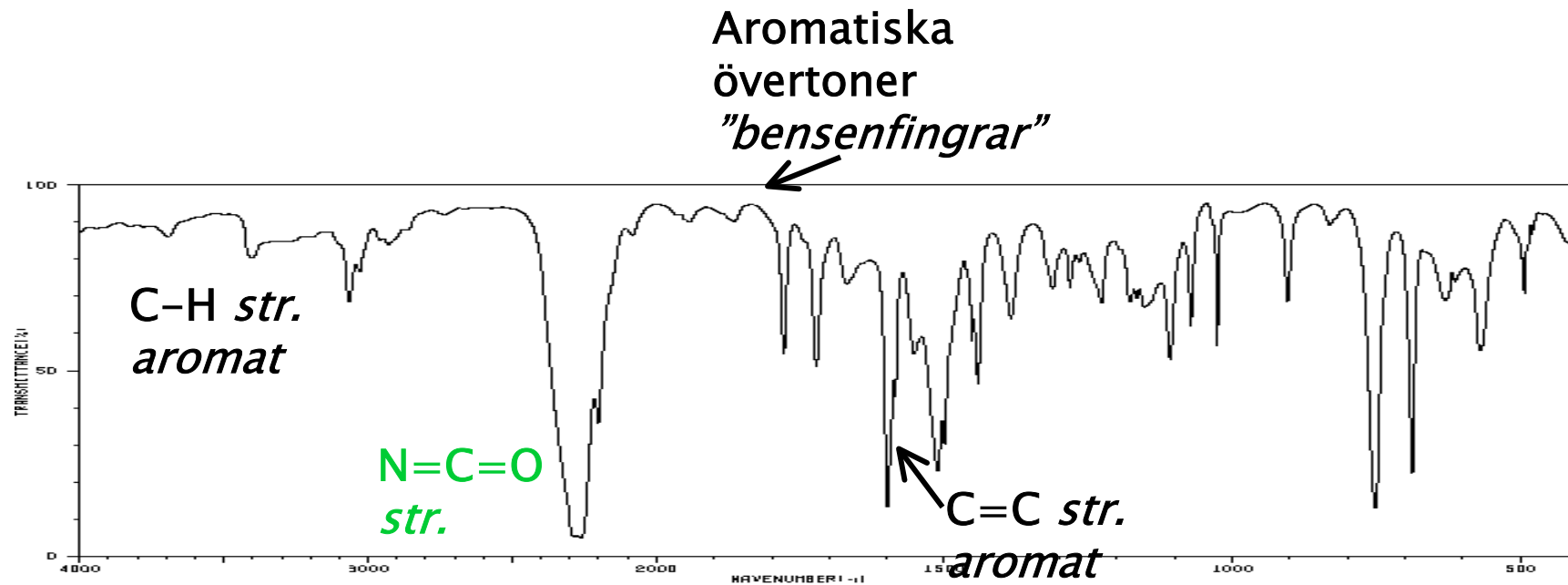


- 2 000–1 800 cm^{-1}

2 000–1 800 cm^{-1} *Aromatiska övertoner och kombinationsband
~ svaga band*



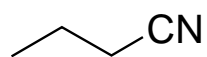
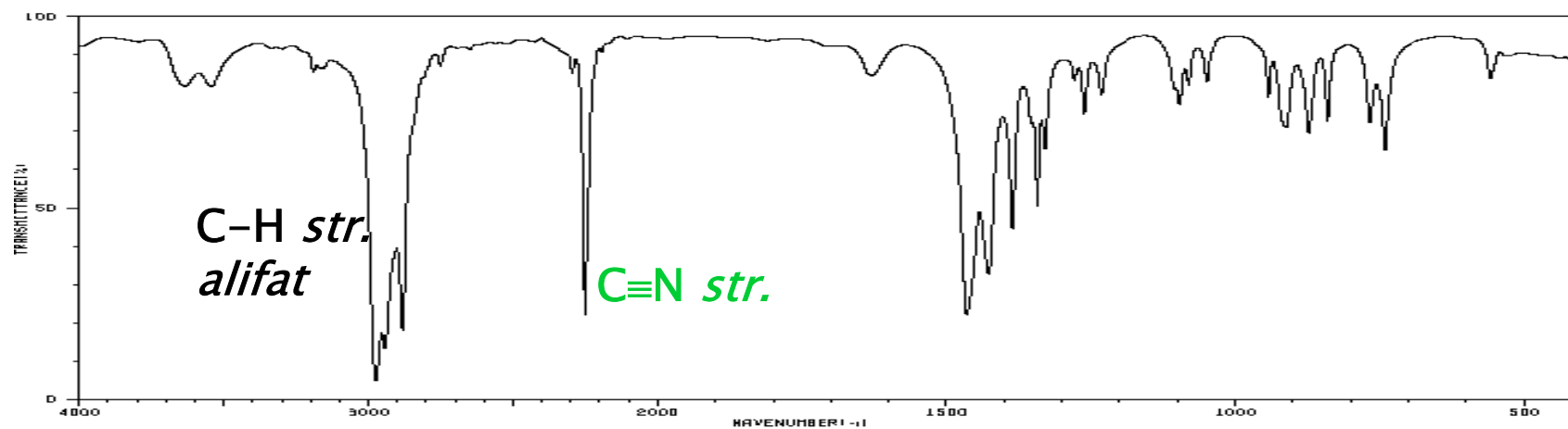
Tolkning



Fenylisocyanat



Tolkning



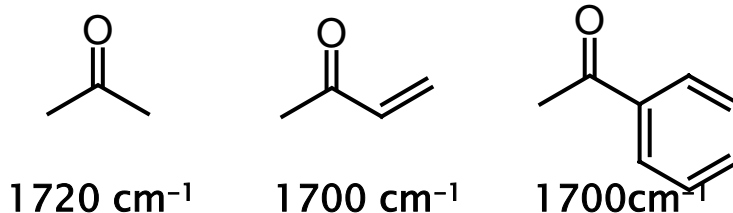
Butyronitril



Tolkning ~ Stretching

- 1 800–1 650 cm^{-1}

1 800–1 660 cm^{-1} C=O karbonyler ~ starka band



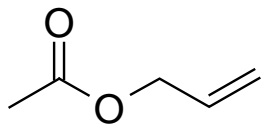
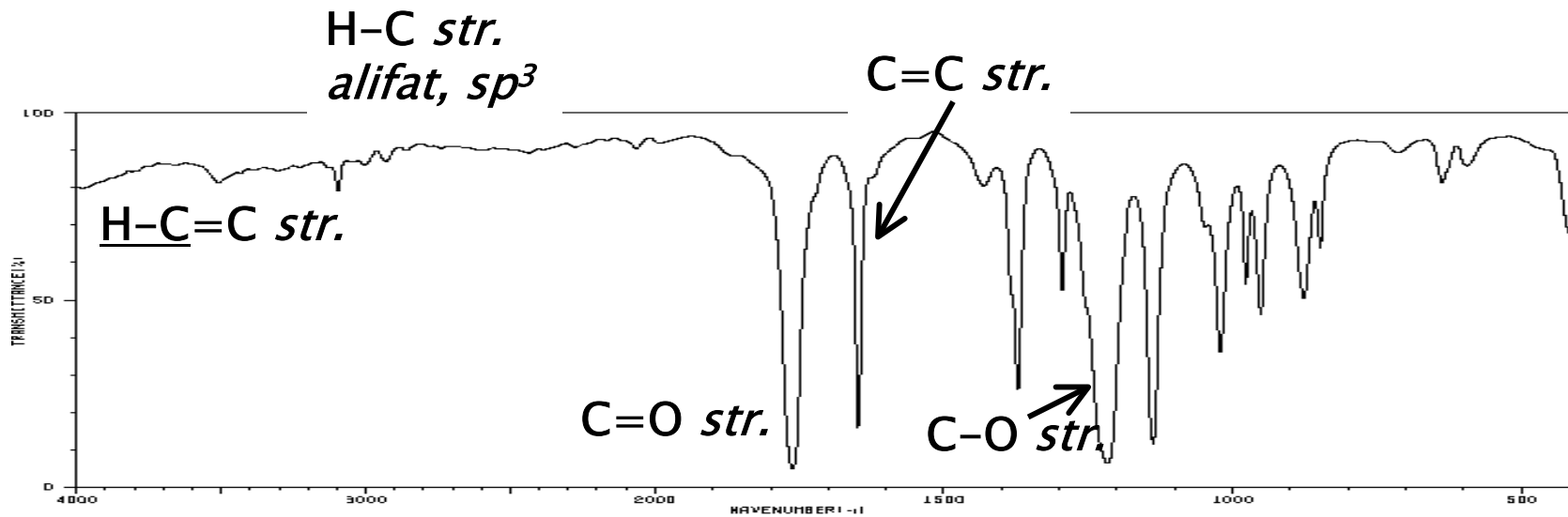
- 1 650–1 500 cm^{-1}

1 680–1 600 cm^{-1} C=C alken och/eller aromat, aromater har ofta 2–3 band 1 650–1 450 cm^{-1} ~ medium till svaga band

1 550–1 350 cm^{-1} -NO₂ nitro ~starka band



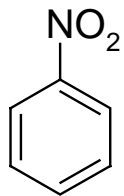
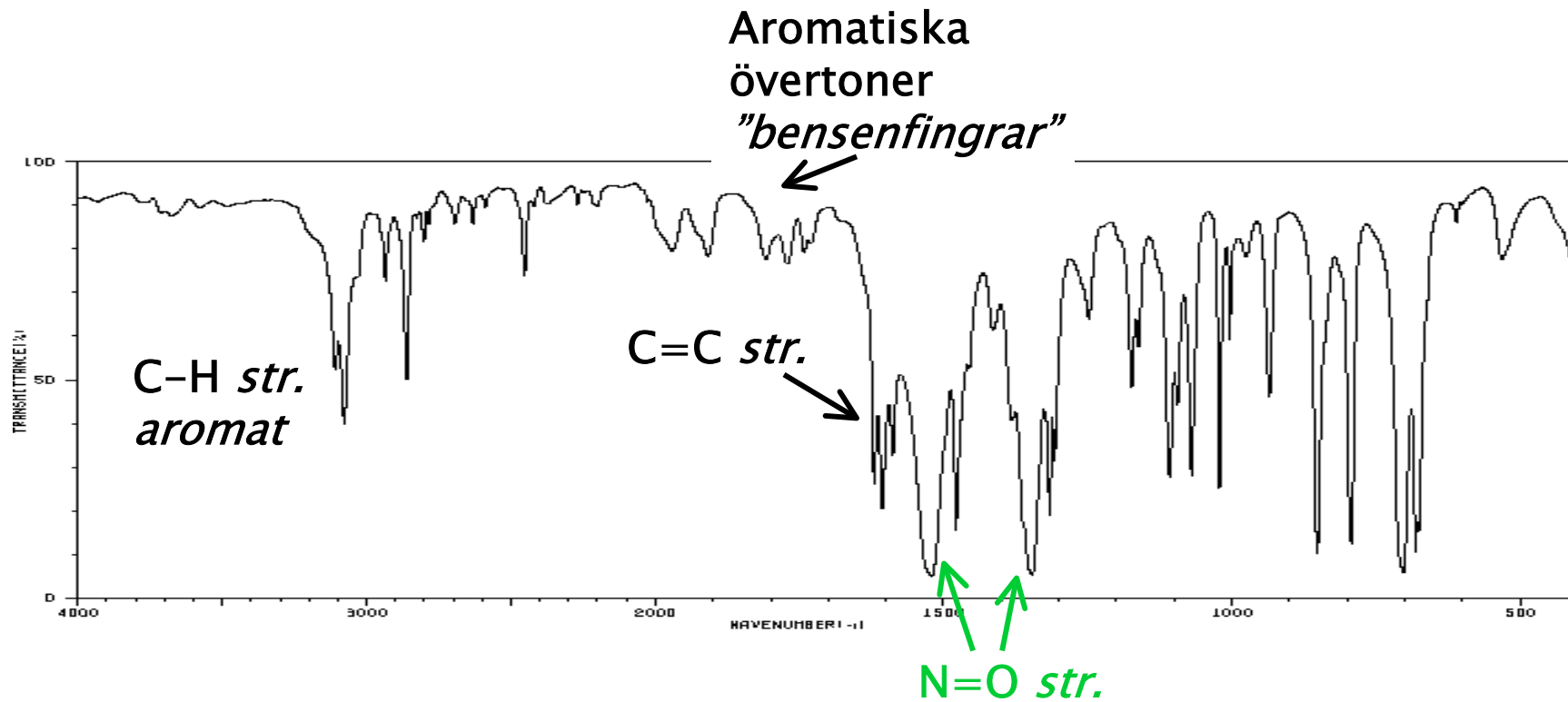
Tolkning



Vinylacetat



Tolkning



Nitrobensen



Tolkning ~ Stretching

- 1 500–650 cm^{-1} , ”fingerprint” svårtolkat

1 300–1 000 cm^{-1} C–O ~ starka band 

1 400–1000 cm^{-1} C–F ~ starka band

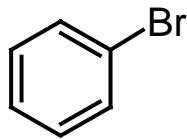
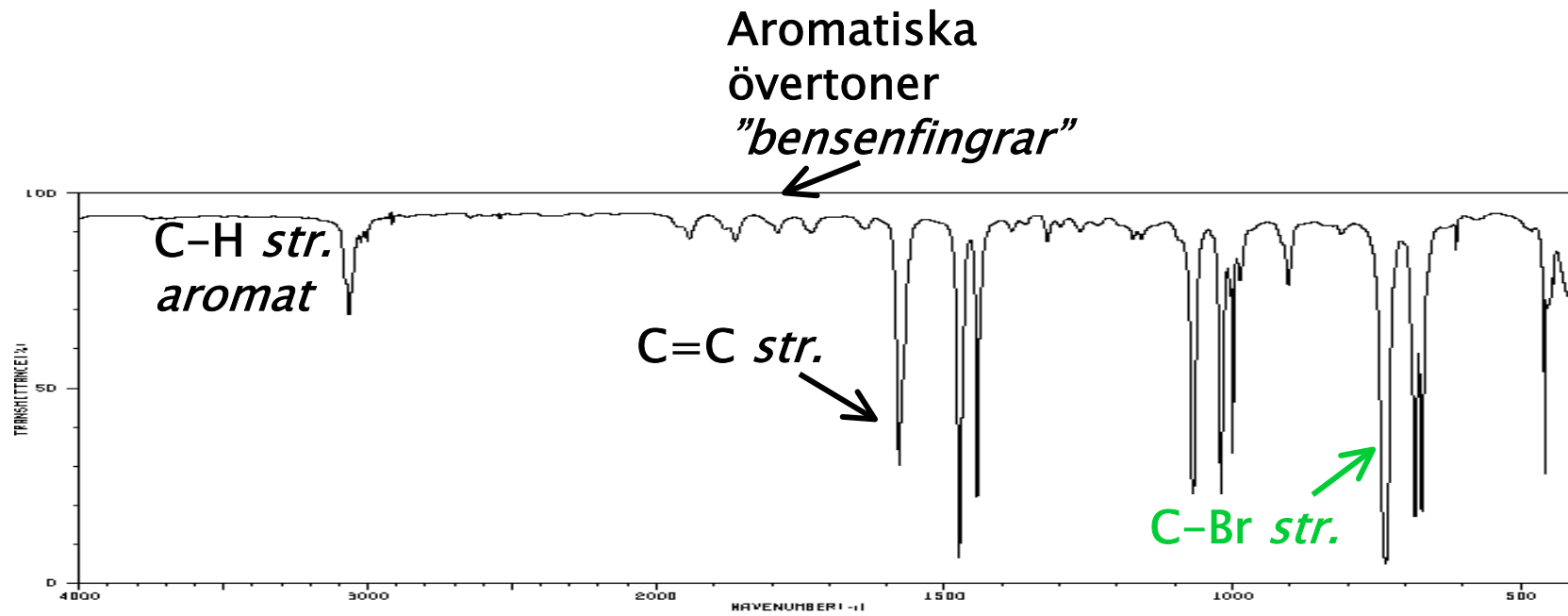
800–600 cm^{-1} C–Cl ~ starka band

750–500 cm^{-1} C–Br ~ starka band

I ”fingerprint”-regionen återfinns även absorptionsbanden för bending!



Tolkning



Brombensen



Tolkning

- Bortse från "fingerprint" ($1400-900\text{cm}^{-1}$)
- Identifiera karakteristiska band.
- Frånvaron av ett band säger ibland mer än dess närvaro!
- Om det finns flera funktionella grupper så ser du dessa separat, så länge de inte interfererar.
- Tabeller tar inte hänsyn till eventuella molekylära särdrag!