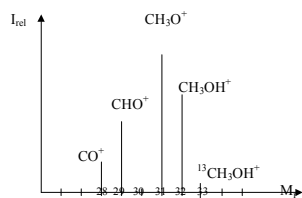


DOLOČANJE STRUKTURE MOLEKUL

▫ MASNA SPEKTROMETRIJA

Izmerimo m/z



CH_3OH , $M_r = 32$

▫ DIFRAKCIJA RENTGENSKIH ŽARKOV

▫ MOLEKULSKA SPEKTROSKOPIJA

Osnove iste kot pri atomski spektroskopiji

$$h\nu = E_2 - E_1$$

pri molekulah absorpcija fotona pomeni lahko:

- večjo hitrost rotacije
v mikrovalovnem delu spektra

$$\lambda \text{ od } 1 \text{ mm do } 30 \text{ cm}$$

ali

- pospešeno vibracijo
v infrardečem (IR) delu spektra

(elektronski prehodi so v ultravijoličnem (UV) in v vidnem delu spektra)

* MIKROVALOVNI SPEKTRI

- energija rotacije molekul je kvantizirana
- vrednost kvantov energije, ki jih molekule lahko absorbirajo, so odvisne od kotov med vezmi in dolžin vezi (od oblike molekul)
- molekule morajo biti v plinastem agregatnem stanju

* INFRARDEČI SPEKTRI

- tudi vibracija molekul kvantizirana
- za vzbujanje molekul IR sevanje (ν : 10^{12} do 10^{14} Hz)

(valovno število - $\tilde{\nu}$; število valov na dolžinsko enoto;
npr. 100 cm^{-1} sevanje s 100 valovnimi dolžinami v 1 cm)

IR območje: $4000 - 100 \text{ cm}^{-1}$

FREKVENCA ODVISNA OD MASE ATOMA:

C—H vibracija pri 3000 cm^{-1} ($9 \cdot 10^{13}\text{ Hz}$)
C—Cl vibracija pri 700 cm^{-1} ($2.1 \cdot 10^{13}\text{ Hz}$)

FREKVENCA ODVISNA OD JAKOSTI VEZI:

C—C $\sim 1000\text{ cm}^{-1}$
C=C $\sim 1650\text{ cm}^{-1}$
C≡C $\sim 2200\text{ cm}^{-1}$

FREKVENCA ODVISNA OD VRSTE NIHANJA:

C—H $\leftrightarrow \sim 3000\text{ cm}^{-1}$
C—H ? $\sim 1400\text{ cm}^{-1}$

"PRSTNI ODTIS" MOLEKUL

ULTRAVIJOLIČNI IN VIDNI SPEKTRI

npr.: modra svetloba $\sim 260\text{ kJ/mol}$

UV svetloba še večje energije

absorpcija te energije povzroči prehode elektronov v molekuli

npr.: klorofil absorbira rdečo in modro svetlobo, zato je odbita svetloba, ki jo zaznamo, zelena

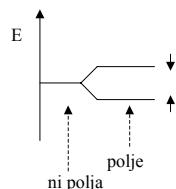
Velja, da je barva snovi v beli svetlobi komplementarna barvi absorbirane svetlobe

Komplementarne barve v barvnem krogu

(Cu^{2+} moder, ker absorbira oranžno,
 $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ oranžen, ker absorbira modro barvo)

JEDRSKA MAGNETNA REZONANCA

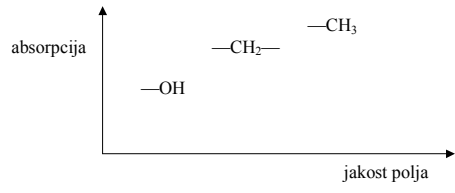
jedro mora imeti spin, npr. ^1H , ^{13}C
 ^{16}O , ^{12}C nimata spina



Ko je energija fotonov, ki jih seva oddajnik v spektrometru, enaka energetske razliki spinskih stanj, pride do resonance med jedrom in fotonom in s tem do absorpcije fotona \Rightarrow rekorder

zazna padec energije

Primer:
ETANOL, $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—OH}$



- kemijski premik - protoni pridejo v resonanco pri različni jakosti magnetnega polja
- površine vrhov v razmerju 1 : 2 : 3 (glede na število H atomov)

FINA STRUKTURA SPEKTRA

