

Infrarød-spektroskopi

Sebastian Borgund Hansen
3r, Nørre Gymnasium

19. december 2016

Indhold

1	Kovalente bindinger og organiske molekyler	3
1.1	Elektroner	3
1.2	Orbitaler	4
1.3	MO-teori og hybridisering	6
1.4	Eksempler fra den organiske kemi	8
1.4.1	Kovalente bindinger	8
2	IR-Spektroskopi	10
2.1	Fysikken bag	10
2.1.1	Arbejde og Hookes lov	10
2.1.2	Udledning af Hookes lov	11
2.1.3	Harmoniske svingninger	13
2.1.4	Udledning af frekvens og positionsfunktion for harmonisk bevægelse . . .	13
2.2	Forsøg med Hooks lov	16
2.2.1	Forsøg 1	16
2.2.2	Forsøg 2	17
2.2.3	Forsøg 3	17
2.2.4	Forsøg 4	18
2.2.5	Delkonklusion	19
2.3	Den bagvedlæggende kemi	19
2.3.1	Fjederkonstanten for bindingen mellem diatomiske molekyler	22
2.4	IR-analyse af stofferne paracetamol, ibuprofen og R-limonen	24

Kapitel 1

Kovalente bindinger og organiske molekyler

Mange kemiske forbindelser indeholder ikke ioner, men består i stedet af atomer, som er bundet tæt sammen i det vi kalder molekyler. De bånd, der holder atomerne sammen, formes når de omkredsede elektroner deles af de to kerner og skaber stabilitet. Et sådan bånd kaldes et kovalent bånd. I modsætning til ion-bindinger dannes kovalente bindinger når ingen af de to atomkerner der indgår i bindingen har en stor nok elektronegativitet til at *rive* elektronen væk fra det andet atom. Et af de simpleste eksempler på kovalent binding er i molekylet H_2 . Kovalente bindinger er af stor betydning for den infrarøde-spektroskopi på grund af kovalente bindinger kan betragtes som fjedre som vi fra fysikkens verden kender meget til.

Vi vil se nærmere på dette i de følgende afsnit men først vil vi indledningsvist snakke om atomernes elektronkonfiguration.

1.1 Elektroner

Fra fysikkens verden ved vi følgende ting om elektroner.

1. En elektrons position kan ikke bestemmes nøjagtigt. Det vi til gengæld kan sige noget om, er den orbital som elektronen befinder sig i. Vi kan bestemme størrelsen og formen på den orbital hvor der er en relativt stor chance for at finde den enkelte elektron i.
2. De orbitaler som elektronerne bevæger sig i karakteriseres ved kvantenumre $n = 1, 2, 3, \dots$. Når n bliver større bliver afstanden til kernen større. Tilsvarende bliver energierne for orbitalerne også større med et større n . For n større end 1 kan der godt være forskellige orbitaler, som har samme værdi for n . En elektronskal indeholder orbitaler med samme værdi for n . Vi kan derfor vælge at benævne skallerne ved deres kvantenumre 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 eller respektivt med bogstaverne K, L, M, N, O, P, Q .
3. Orbitaler der har den samme værdi for n har nødvendigvis forskellige former. Se $2s$ og $2p$ orbitalerne, der behandles i afsnit [1.2](#)

4. Da elektroner er fermioner har de en spin-værdi på enten $\frac{1}{2}$ eller $-\frac{1}{2}$ som respektivt er værdierne for spin-op og spin-ned elektroner, der tit og ofte skrives som små pile der vender opad eller nedad.
5. Der kan maksimalt være 2 elektroner i hver orbital og de har hver deres spin.

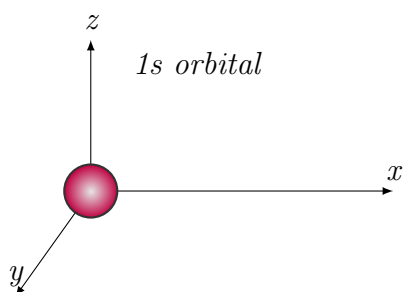
Det er desuden værd at notere sig, at der for atomer med mere end 2 elektroner gælder, at energien for elektronerne i orbitalerne at:

$$s \text{ elektroner} < p \text{ elektroner} < d \text{ elektroner} < f \text{ elektroner}$$

Da der kan være 2 elektroner i første skal, 8 i anden, 18 i tredje, 32 i den fjerde osv.. og atomer som udgangspunkt gerne vil have en så lav energi som muligt vil elektronerne starte med at fylde de orbitaler ud med lavest energiniveau først. Måden hvorpå elektronerne fylder orbitalerne ud er ved først at fylde en spin-op eller spin-ned elektron i orbitalen og dernæst det modsatte i orbitalen. Dette gør sig gældende for s-orbitalerne, men for de andre orbitaler, p, d og f orbitalerne, vil der først blive puttet en elektron i hver orbital før de fortsættes med at blive fyldt op. Dette leder os til orbitaler.

1.2 Orbitaler

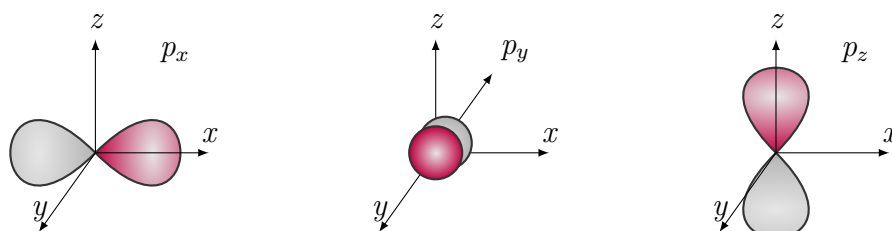
For at opnå en dybere forståelse af hvorfor atomer vælger at gå sammen om at danne kovalente bindinger ser vi os nødsaget til at betragte et enkelt atoms elektronkonfiguration. De subatomare entiteter som elektroner er opfører sig ikke lige så pænt som Bohr formulerede i hans atommodel, hvor elektronerne bevæger sig i cirkulære baner, eller skaller, rundt omkring atomets kerne. Ifølge nyere teori har elektronerne en chance for at eksistere i visse områder omkring atomet som forklaret i forrige afsnit. Det laveste energiniveau en elektron kan befinde sig i, når det bevæger sig rundt om atomkernen er kugleformet og har tildelt navnet 1s orbitalen. Figur 1.1 er en skitse af 1s orbitalen plottet i det kartesiske plan.



Figur 1.1: 1s orbital

I s-orbitalerne er der plads til netop 2 elektroner. At den første orbital hedder 1s henviser til at den tilhører 1. skal. I 2. skal tilhører elektronerne 2s orbitalen. S på grund af orbitalerne som elektronerne forventes at være i har den samme form som 1s orbitalen og 2 fordi orbitalen

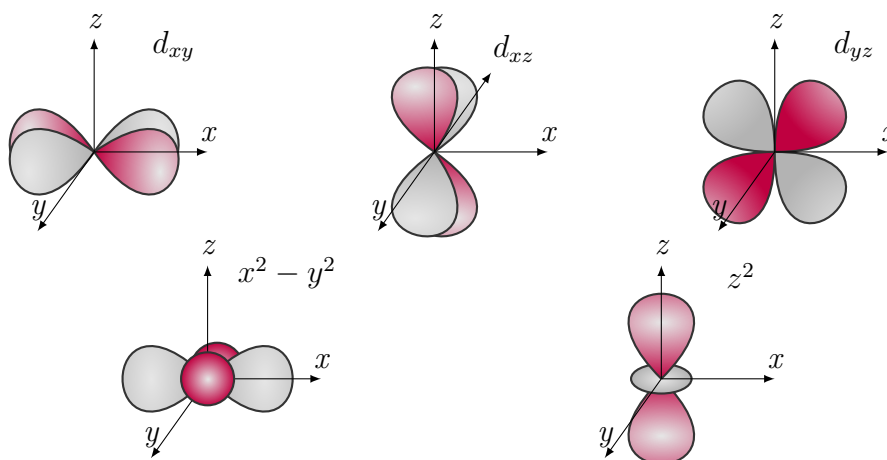
knytter sig til den 2. skal. Orbitalen ligner 1s orbitalen til forveksling, men vil have en større radius da elektronerne der befinder sig i denne orbital har mere energi. Da vi ved, at der skal være 8 elektroner i den 2. skal for, at oktetreglen er opfyldt og atomerne derfor er stabile mangler vi stadigvæk at placere 6 elektroner. Disse elektroner vil befinde sig i de såkaldte p-orbitaler. Der eksisterer 3 forskellige p-orbitaler, som ligner sløjfer og som hver især indeholder 2 elektroner. De tre p-orbitaler benævnes respektivt p_x , p_y og p_z , de er ortogonale på hinanden og ligger hhv. langs x-, y- og z-aksen. De er på 1.2 illustreret i et kartesisk koordinatsystem.



Figur 1.2: $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ orbital

I 3. skal kan der være 18 elektroner. De første 2 elektroner bliver først fyldt ind i en 3s orbital, der ligner både 1s og 2s orbitalen i og med, at den er kugleformet. Radius på 3s orbitalen er større end på 2s orbitalen grundet det højere energiniveau. 6 af de resterende 16 elektroner kan dernæst findes i 3p orbitalerne. Ligesom 2p-orbitalerne er der også tre 3p-orbitaler - $3p_x$, $3p_y$ og en $3p_z$ orbital. For det illustrative formål kan vi betragte 2p-orbitalerne. 3p-orbitalerne ligner dem, men elektronerne kan befinde sig i større sløjfer end elektronerne i 2p-orbitalerne.

Nu har vi kigget på de simpleste af orbitalerne, s- og p-orbitalerne. Der eksisterer også d og f orbitaler. f-orbitalerne vil der blive set bort fra i denne opgave, men d-orbitalerne er illustreret i figur 1.3.



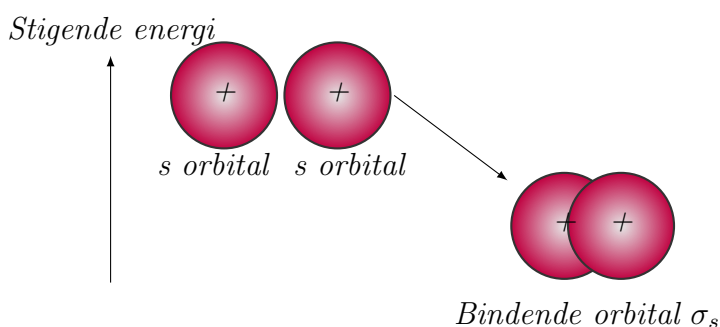
Figur 1.3: d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} , $x^2 - y^2$, z^2 orbitalerne

1.3 MO-teori og hybridisering

I molekylær orbital teori ses der på fordelingen af elektroner i molekyler på samme måde som vi ser på fordelingen af elektroner i atomer.¹⁾ Måden hvorpå vi bestemmer hvordan en elektron opfører sig på i et molekyle er ved hjælp af kvantemekanik og en bølgefunktion Ψ .²⁾ På denne måde kan energien af en elektron og formen på det område hvori en elektron bevæger sig i bestemmes. Som vi i afsnit 1.1 fandt ud af, havde elektroner nogle områder hvori de havde den størst mulige chance for at blive fundet i. Disse områder kaldte vi orbitaler. Som enkelte atomer har orbitaler, har molekyler ligeledes orbitaler hvori elektronerne har en stor chance for at blive fundet i. Forskellen på atomer og molekyler er, at elektroner i molekyler kan findes nær en hvilken som helst kerne i molekylet i stedet for den ene kerne, som orbitalen hører til for et atom.³⁾ Dette er netop hvorfor vi kalder disse orbitaler for molekylære elektronorbitaler eller bare molekylære orbitaler. Ligesom atomare orbitaler er molekylære orbitaler også fyldt når de indeholder præcist 2 orbitaler med modsat spin.

Da vi så de atomare orbitaler gav vi dem navnene, s,p,d og f. Molekylære orbitaler har også navne, men der vil i denne opgave ligge et fokus på π -orbitaler og σ -orbitaler. Lad os som eksempel betragte et eksempel på et homonukleært diatomisk molekyle som H_2 . De to hydrogenatomer der er bundet sammen har hver deres egen elektron, men når de er tilpas tæt nok på hinanden vil elektronerne i deres 1s orbitaler overlappe. Da elektro-

nerne er negativt ladede og de 2 hydrogenkerner er positivt ladede, vil elektronerne blive tiltrukket af begge kerner og have et lavere niveau af energi ved at befinde sig mellem de to atomer end de ville have isolerede.⁴⁾ Elektronerne vil altså søge at befinde sig mellem de to kerner og derved stabilisere molekylet. Denne slags orbitaler kaldes **bindende** orbitaler, da de som navnet antyder binder molekylet sammen. Da der stadigvæk kun er plads til 2 elektroner i en orbital, vil elektroner der ikke kan indgå i bindende orbitaler indgå i anti-bindende orbitaler. Disse orbitaler er med til at destabilisere molekyler og er en af grundene til at alle atomer kan gå i forbindelse med hinanden. De anti-bindende orbitaler findes ved at tage to orbitaler der overlapper hinanden og fjerne deres overlap. Nu er orbitalen ikke mellem atomerne mere og vil derfor ikke stabilisere molekylet længere. På figur 1.4 er det illustreret hvordan to atomare orbitaler går sammen om at danne en bindende σ_s orbital.



Figur 1.4: Sigma-binding

¹Sears, Zemansky, Young, 1987, s. 186

²Holtzclaw, Robinson, Nebergall, 1984, s. 149

³Holtzclaw, Robinson, Nebergall, 1984, s. 149

⁴Holtzclaw, Robinson, Nebergall, 1984, s. 151

Når to atomare orbitaler går sammen om at danne en ny orbital kalder vi det en hybridisering. En σ -binding er altså en hybridorbital.

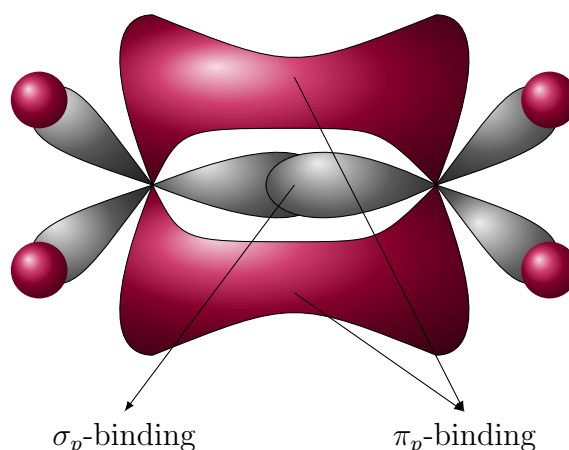
En σ -orbital er også det vi kender som en σ -binding eller en slags kovalent binding. Kovalente bindinger er defineret som molekulære bindinger, der involverer en deling af elektroner mellem to atomer.⁵

På samme måde som med σ -orbitalerne dannes π -orbitalerne ved, at to atomers befinder sig tæt på hinanden og elektronerne kan få en lavere energi ved at befinde sig i det sted hvor orbitalerne overlapper. Det græske bogstav π refererer til p-orbitalerne. Dette er fordi π -orbitaler oftest ses dannet ud fra netop p-orbitaler, men det skal sige, at de også kan dannes ud fra d orbitaler. På figur 1.5 ses hvordan 2 p-orbitaler går sammen om at danne en π -bindinger.

Nu har vi set på både σ -orbitaler /bindinger og π -orbitaler / bindinger - men hver for sig. Hvis de to orbitaler eksisterer sammentidigt i et molekyle har vi faktisk en dobbeltbinding. Dobbeltbindinger er netop en σ - og en π -binding. Illustret som en tegning ville det se ud på følgende måde, se Figur 1.5.

σ -bindingerne er de stærkestee af de kovalente bindinger. Dernæst kommer π -bindingerne. blabla MO teori...

Det er nemlig ikke alle atomer, der har mulighed for at danne kovalente bindinger imellem sig. Når 2 atomer går sammen om at danne en kovalent binding er det fordi, at de hver især er ustabile. At de er ustabile er ens betydende med, at de ikke har deres orbitaler af højeste energiniveau fyldt ud. Hver orbital vil gerne have en spin-op og en spin-ned elektron. Når nogle atomer så alligevel ikke vælger at gå sammen og danne en kovalent binding er det enten fordi, at de har for mange mange elektroner til, at de kun kan befinde sig mellem atomerne og danne en bindende σ -binding og derfor befinder sig i en orbital, der kræver et højere energiniveau og derfor er anti-bindende.



figur 6:

Figur 1.5: Orbitaler i ethen

1.4 Eksempler fra den organiske kemi

*Den organiske kemi er carbonforbindelsernes kemi*⁶. Lad os indledningsvist se på methan, der har molekylformlen CH_4 . Carbon skal kunne danne forbindelse til alle 4 hydrogenatomer, men hvis vi betragter carbons elektronkonfiguration vil vi lægge mærke til, at der kun er 2 ledige

⁵Holtzclaw, Robinson, Nebergall, 1984, s. 151

⁶Nieslen og Axelsen, 2011, s. 117 [?]

elektroner til at danne bindinger. Dette kan vi se ved at skrive de orbitaler op, som carbon fylder ud.

Carbon har 6 elektroner og vil derfor først fylde $1s$ -orbitalen ud, dernæst $2s$ -orbitalen og til sidst vil der være 1 elektron i 2 af $2p$ -orbitalerne. Det er de 2 elektroner, der er alene i 2 -orbitalerne der har mulighed for at danne en binding. Vi var dog interesserede i at danne 4 bindinger - netop til de 4 hydrogenatomer. Derfor exciteres ét af de elektroner, som befinder sig i $2s$ -orbitalen til en $2p$ -orbital sådan at der er 4 orbitaler med 1 elektron i hver. Denne excitering danner grundlag for en ny hybridorbital. Dette er sp^3 -orbitalen. Navnet henviser til forholdet mellem s - og p -orbitaler. Der er 4 af disse. Hvis betragter carbons elektronkonfiguration nu vil vi se, at der først bliver fyldt op i $1s$ -orbitalen og dernæst fyldes 1 elektron i hver af de fire sp^3 -orbitaler. Dette giver anledning til at carbon nu kan danne 4 bindinger. Hver af de 4 sp^3 -orbitaler går nu sammen med en $1s$ -orbital som hydrogenatomerne har og danner en σ -binding således at molekylet stabiliseres. For at molekylet får en så lav energi som muligt vil bindingerne placere sig så langt væk fra hinanden som muligt og dette resulterer i at vi får den tetraedstruktur methan er kendt for at have (FODNOTE).

Et andet eksempel er ethen, hvis molekyl struktur er C_2H_2 . Her har vi 2 carbonatomer der er bundet sammen af en dobbeltbinding. I dette eksempel skal hver carbonatom danne 4 bindinger - ét til hvert af de hydrogenatomer, der er bundet til carbonatomet og 2 til en σ - og en π -binding mellem de 2 carbonatomer. Betragtes carbons elektronkonfiguration kan vi ligesom i det forrige eksempel se, at der kun er mulighed for at danne 2 bindinger. Derfor exciteres en elektron fra $2s$ -orbitalen til en $2p$ -orbital. Men da carbonatomet bliver nød til at beholde en $2p$ -orbital for at kunne danne en π -binding beholder den én af de 3 $2p$ -orbitaler der nu eksisterer. De 2 resterende $2p$ -orbitaler går sammen med $2s$ -orbitalen om at danne 3 sp^2 -orbitaler. Således går 2 af de 3 sp^2 -orbitaler til at danne σ -bindinger med de 2 hydrogenatomer og den sidste sp^2 -orbital går sammen med det andet carbonatoms sp^2 -orbital om at danne en σ -binding. Den $2p$ -orbital, som ikke hybridiseres danner nu en π -binding der hvor der overlappes med det andet carbonatoms $2p$ -orbital.

1.4.1 Kovalente bindinger

Så det vi fandt ud af i dette afsnit var, at når 2 atomer går sammen og deler deres elektroner for at opnå en lavere energitilstand dannes nogle bindinger som vi kalder kovalente bindinger. Kovalente bindinger dannes når atomer, der har lige stor tilbøjelighed til at afgive elektroner mødes. Et eksempel på et organisk molekyle, der dannes kovalente bindinger er ethen. Her ses det tydeligt hvordan de to p -orbitaler går sammen i midten af molekylet om at lave en σ_p - (se figur 6). Vi fandt også ud af, i eksemplet med methan og ethen, at elektroner kan exciteres fra deres orbitaler for at danne nye hybridiserede orbitaler, som gør molekylet mere stabilt. Denne process kaldte vi hybridisering. Vi fandt også ud af at delte elektroner primært befandt sig mellem de positivt ladede atomkerner og den elektrostatiske tiltrækning mellem de to positivt ladede kerner og de to negativt ladede elektroner holder molekylet sammen samt at det bånd der blev dannet som et resultat af førnævnte er meget stærkt.

Kapitel 2

IR-Spektroskopi

2.1 Fysikken bag

2.1.1 Arbejde og Hookes lov

I den daglige omtale er arbejde et fysisk aktivitet der kræver energi. I fysikken bruger vi derimod arbejde som et udtryk for en kraft der virker på en genstand over en given distance. Arbejdet, A , som en genstand er blevet tilført på en strækning, s , med en kraft, F , er givet ved formelen

$$A = F \cdot s.$$

Dette er dog under antagelse af at kraften der virker på objektet er konstant samt at flytningen af objektet er i samme retning som kraften virker. Vi støder dog ind i problemer med at bestemme energien ud fra denne formel, hvis vi ser på et system hvor kraften bliver større jo længere væk fra startstedet, s_0 , objektet bevæger sig. Formod nu, at vi ser på et objekt der bevæger sig langs en ret linje og hvor kraften bliver større jo længere vi flytter objektet. Da vil det samlede arbejde, $\sum A$ være lig summen af alle de kræfter der har virket på objektet, siden størrelsen **arbejde** er en skalar.

$$\sum A = A_1 + A_2 + \dots + A_{n-1} + A_n$$

For at bestemme denne størrelse deler vi den afstand, s , som objektet bevæger sig op i mindre dele Δx_1 , Δx_2 osv. Vi deler disse afstande op i tilstrækkeligt små længder sådan at kraften der virker over de enkelte afstande er omtrent konstant. På denne måde kan vi beregne et totale arbejde som:

$$A = F_1 \cdot \Delta x_1 + F_2 \cdot \Delta x_2 + \dots$$

Når vi får tilstrækkeligt mange længder og længderne samtidigt går mod at blive uendeligt små vil denne størrelse gå mod at blive integralet af F fra x_1 til x_2 :

$$A = \int_{x_1}^{x_2} F dx$$

Det er netop dette princip som Hookes lov benytter sig af. Hookes lov siger, at for en perfekt fjeder vil kraften direkte proportional til afstanden som fjederen er udtrukket.

$$F = kx$$

hvor k er stivheden af fjederen, F er kraften og x er den længde som fjederen er trukket ud. Med en perfekt fjeder skal der forstås at denne formel gælder uanset hvor langt man strækker fjederen ud eller presser den sammen. Dette er naturligvis en grov antagelse, men det er en god fysisk beskrivelse for at beregne størrelsen af en fjederkraft. Vi vil nu se på udledningen af denne sammenhæng.

Der vil her blive taget udgangspunkt i formlen

$$V = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (r - r_0)^2 \quad (2.1)$$

Hvor V beskriver den potentielle energi en fjeder har når den er strukket en distance r ud fra hvilelængden r_0 .

2.1.2 Udledning af Hookes lov

Betragt den potentielle energi af en fjeder givet ved

$$V = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (r - r_0)^2 \quad (2.2)$$

Sæt nu $r_0 = 0$ og lad den initiale længde $r_i = r$ og den endelige udstrækningslængde $r_e = r + \Delta r$. Hvis vi ser på ændringen i den potentielle energi for systemet får vi da:

$$\Delta V = V_e - V_i = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (r + \Delta r)^2 - \frac{1}{2} \cdot k \cdot r^2 \quad (2.3)$$

Vi skriver $(r + \Delta r)^2$ ud og får:

$$\Delta V = V_e - V_i = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (r^2 + 2r\Delta r + \Delta r^2) - \frac{1}{2} \cdot k \cdot r^2 \quad (2.4)$$

I ligningen betragter vi nu de to størrelser $\frac{1}{2} \cdot k \cdot r^2$ og $-\frac{1}{2} \cdot k \cdot r^2$. Disse to størrelser går ud med hinanden og efterlader os med

$$\Delta V = kr\Delta r + \frac{1}{2} \cdot k \cdot \Delta r^2 \quad (2.5)$$

Vi noterer os nu, at det første led på højresiden af lighedstegnet er lineært i Δr og at det andet led på højresiden af lighedstegnet er kvadreret i Δr . Δr er en infinitesimal i kalkulus, hvilket betyder at størrelsen Δr er meget mindre end 1. Når man så vælger at kvadrere noget der er strengt mindre end 1 og Δr er så lille som muligt, hvilket er naturligt i kalkulusregning, går størrelsen $\frac{1}{2} \cdot k \cdot \Delta r^2$ mod 0. Så vi ender med

$$\Delta V = kr\Delta r \quad (2.6)$$

Dette udtryk beskriver altså ændringen i den potentielle energi når vi udstrækker fjederen Δr , der er en meget lille størrelse.

Vi ser nu på ændringen for energi i et system, der er givet ved formlen

$$\Delta E = \Delta E_{kin} + \Delta E_{pot} \quad (2.7)$$

Ændringen i energi for et system er lig summen af ændringen i potentiel energi og kinetisk energi.

Dette skulle meget gerne være lig 0 og vi får da

$$\Delta E = \Delta E_{kin} + \Delta V = 0 \quad (2.8)$$

Hvilket, hvis størrelsen for den potentielle energi givet ved $\Delta V = kr\Delta r$ substitueres ind i stedet for V i ligning giver

$$\Delta E_{kin} + kr\Delta r = 0 \rightarrow \Delta E_{kin} = -kr\Delta r \quad (2.9)$$

Nu vil vi bruge det fysiske resultat

$$\Delta E_{kin} = A = \mathbf{F} \times \Delta \mathbf{r} = F \cdot \Delta r (\text{Arbejde} - \text{Energiteoremet}) \quad (2.10)$$

Notér at der i dette tilfælde regnes på en fjeder og der da kan ses bort fra at F og Δr begge normalt er vektorer og arbejdet da skal beregnes som krydsproduktet af de to vektorer da fjederen udstrækkes i samme retning som fjederen trækkes. Vi tillader os da at regne arbejdet som $F \cdot \Delta r = A$.

Nu bruger vi resultatet

$$\Delta E_{pot} = \mathbf{F} \times \Delta \mathbf{r} = F \cdot \Delta \mathbf{r} = -kr\Delta r \quad (2.11)$$

Ved division på begge sider af lighedstegnet af ligningen

$$F \cdot \Delta r = -kr\Delta r \quad (2.12)$$

Får vi det ønskede resultat:

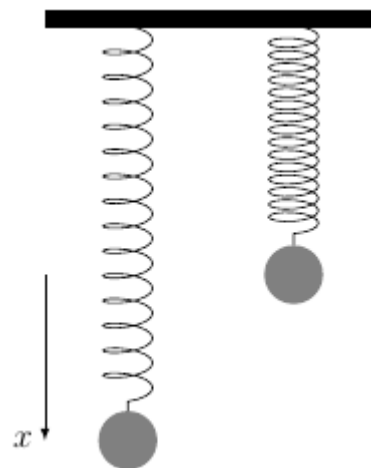
$$F = -k \cdot r \quad (2.13)$$

2.1.3 Harmoniske svingninger

En oscillerende bevægelse er en bevægelse hvor et objekt, som bliver flyttet fra sit hvilested og sluppet vil bevæge sig tilbage mod sit hvilested, hvor det vil bevæge sig forbi sit hvilested for igen at foretage gentagelser af netop dette for til slut at ende på sit hvilested igen. Dette kan eksempelvis ses hos penduler og masser bundet til fjedre.

Eksemplet der vil blive betragtet i dette kapitel er oscillerende bevægelse, der er hensigtsmæssig i forhold til at forstå IR-spektroskopier. Vi vil se på en masse der er bundet til en fjeder. se figur 2.1.

Med udgangspunkt i figur 2.1 vil vi se på en masse der i den ene ende er fastgjort til noget stationært og i den anden ende er fastgjort til en kugle med en masse. Når kuglen ikke påvirkes af andre ydre kræfter en tyngdekraften vil kuglen opnå en hviletilstand hvor fjederkraften er lige så stor som tyngdekraften. Vi sætter denne hviletilstand til $x_0 = 0$. Når vi så begynder at påvirke system med en ydre kraft ved f.eks. at hive i kuglen vil fjederen svare tilbage ved at trække endnu hårdere i kuglen. Hvis vi op som den positive retning vil vi på figur 2.1 have flyttet kuglen en afstand $-x$ væk fra sin hvileposition vil fjederkraften givet ved Hookes lov, der blev beskrevet i 2.1.2 være givet ved $F_x = -k \cdot x$. Hvor F er fjederkraften, k er fjederkonstanten for den givne fjeder og x er afstanden flyttet fra hvilepositionen x_0



Figur 2.1: Fjeder med lod

2.1.4 Udlledning af frekvens og positionsfunktion for harmonisk bevægelse

Antag nu at Hookes lov gælder og at bevægelsen udelukkende foregår i y-aksens retning. Newton II giver da

$$F_x = -k \cdot x = m \cdot a_x = m \cdot x'' \rightarrow a_x = -\frac{k}{m} \cdot x$$

Hvis massen, m , af objektet der er fæstnet til fjederen er konstant er størrelsen $\frac{k}{m}$ bare en konstant og da er $a_x \propto x$ til et hvert tidspunkt. Ud fra dette kan vi se at accelerationen er

størst når x har opnået sin højeste positive værdi, kald denne størrelse x_{max} . Ydermere vil accelerationen være lig 0 når objektet passerer sit hvilepunkt, da x er lig 0 i det punkt.

Der bruges nu princippet om energibevarelse med den potentielle energi af systemet givet ved $V = \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2$, ligesom i afsnit 2.1.2 om Hookes lov, og den kinetiske energi af systemet givet ved $E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2$.

$$E_{system} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 + \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2 = \text{konstant}$$

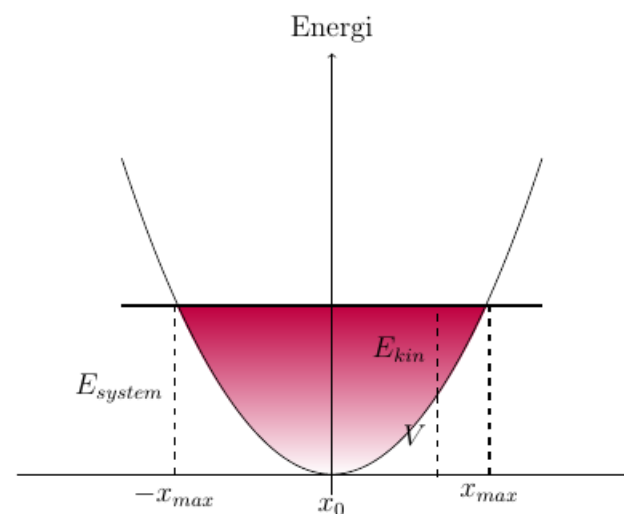
Den totale energi E_{system} er ydermere også relateret til amplituden af x_{max} sådan at når objektet når sin maksimale flytning $\pm x_{max}$ vil objektet stoppe og vende om. I dette punkt hastigheden $v = 0$ og objektet har altså ikke nogen kinetisk energi. I dette punkt er $E_{system} = \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2$. Derfor må det gælde at

$$E_{system} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 + \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2 = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (x_{max})^2$$

eller

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 + \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2 &= \frac{1}{2} \cdot k \cdot (x_{max})^2 \rightarrow m \cdot v^2 = k \cdot (x_{max})^2 - k \cdot x^2 = k \cdot ((x_{max})^2 - x^2) \\ \rightarrow v^2 &= \frac{k}{m} \cdot ((x_{max})^2 - x^2) \rightarrow v = \pm \sqrt{\frac{k}{m}} \cdot \sqrt{(x_{max})^2 - x^2} \end{aligned}$$

Med forbehold for fortegnet kan vi bruge denne relation til at bestemme hastigheden af objektet til en hver position x . Vigtigheden af det fundne udtryk $v = \pm \sqrt{\frac{k}{m}} \cdot \sqrt{(x_{max})^2 - x^2}$ gør sig tydeligt på Figur (MANGLER) hvor energien er plottet op ad 2. akse og udstrækningen fra hvilepositionen x_0 ad 1. akse. Kurven repræsenterer den potentielle energi givet ved forskriften $V = \frac{1}{2} \cdot kx^2$ og dette er en parabel. I højden E er der en tyk sort streg, som repræsenterer den energibevarelse der er for systemet, da den skærer parabelen i netop $-x_{max}$ og x_{max} som er yderpositionerne for bevægelsen. Til en vilkårlig udstrækning af fjederen kan vi også bestemme den kinetiske energi som længden af den linje, der går fra den horisontale linje ned til parabelen ved netop den x -værdi. Der hvor den kinetiske energi er størst og altså farten er størst er ved hvilepositionen x_0 . Det gælder altså at



Figur 2.2: Energi for fjedersystemet

$$\frac{1}{2} \cdot m \cdot (v_{max})^2 = E_{system} \text{ eller } v_{max} = \sqrt[2]{\frac{2 \cdot E_{system}}{m}}$$

Men da det netop gjorde sig gældende at den maksimale potentielle og kinetiske energi begge er lig systemets energi E_{system} , og derfor også til hinanden, kan vi relatere v_{max} til x_{max} .

$$E_{system} = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (x_{max})^2 = \frac{1}{2} \cdot m \cdot (v_{max})^2 \rightarrow v_{max} = \sqrt[2]{\frac{k}{m}} \cdot x_{max} \quad (2.14)$$

I ligning (MANGLER) fandt vi udtrykket $v = \pm \sqrt[2]{\frac{k}{m}} \cdot \sqrt{(x_{max})^2 - x^2}$. Dette beskrev hastigheden til en udstrækning x . Vi ser os ikke tilfredse med en hastighedsfunktion. Vi vil også have stedsfunktionen. Denne findes ved at skrive den fundne ligning op som

$$\frac{dx}{dt} = v = \pm \sqrt[2]{\frac{k}{m}} \cdot \sqrt{(x_{max})^2 - x^2} \quad (2.15)$$

Men da kan ligningen integreres og løses for x , hvilket giver

$$x = x_{max} \cdot \sin(\sqrt[2]{\frac{k}{m}} \cdot t + C) \quad (2.16)$$

Hvor C er en konstant. Notér at sinus er en periodisk funktion og at positionen af x altså også er en periodisk funktion af tiden, som vi forventede. Perioden for bevægelsen, T , er den tid det tager for systemet at lave en oscilation. Da sinusfunktionen gentager sig selv, hver eneste gang vi øger udtrykket inden i parantesen $\sin(\sqrt[2]{\frac{k}{m}} \cdot t + C)$ må det altså gælde, hvis vi starten til $t = 0$ at en oscilation må tage

$$\sqrt[2]{\frac{k}{m}} \cdot T = 2\pi \rightarrow T = 2\pi \sqrt[2]{\frac{m}{k}} \quad (2.17)$$

Hvilket hvis $f = \frac{1}{T}$ giver

$$f = \frac{1}{T} = \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt[2]{\frac{k}{m}} \quad (2.18)$$

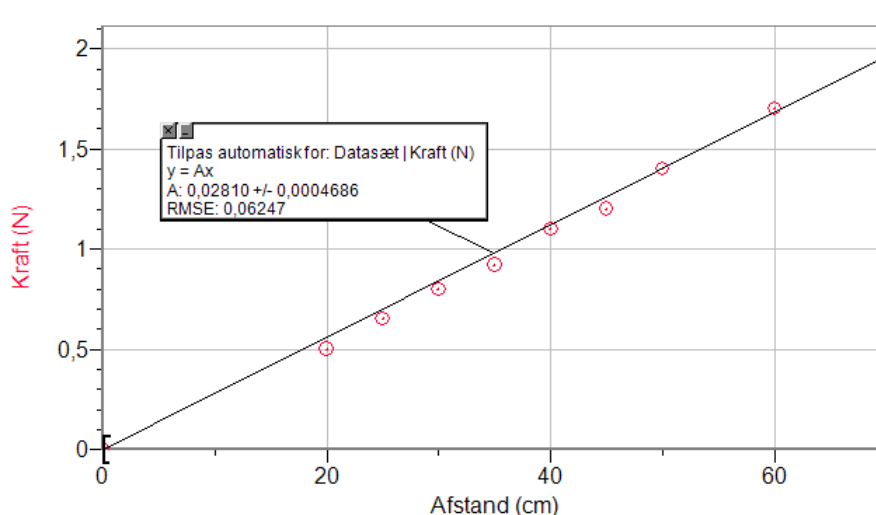
Hvilket er et vigtigt resultat, som vi vil bruge til at bestemme bølgetal for funktionelle grupper i IR-spektroskopien.

2.2 Forsøg med Hooks lov

I anledning af vigtigheden af Hookes' lov har jeg opstillet nogle forsøg. Forsøgene har dels til formål at eftervise validiteten af Hookes lov samt at anskueliggøre ideen om at kovalente bindinger kan betragtes som fjedre. Der er i alt 4 forsøg, det første skal vise at kraften som en fjeder trækker med når den bliver trukket i er direkte proportionelt med afstanden som fjederen bliver trukket ud og at proportionalitetsfaktoren er fjederkonstanten K . Det andet forsøg skal vise at stedfunktionen for et objekt der laver en oscillerende bevægelse kan skrives på formen $x(t) = A \cdot \sin(Bt + C) + D$, hvor A , B , C er konstanter. A bestemmes som amplituden på udslagene og B bestemmes som $B = \sqrt{\frac{k}{m}}$. Det tredje forsøg skal vise, at hvis vi har et system af to fjedre, som er helt ens og vi hænger en masse i de to fjedre vil fjederkonstanten for systemet blive lig summen af de to fjedres fjederkonstanter. Det fjerde forsøg skal vise, at hvis vi har et system med flere forskellige fjedre og betragter dem som **én** samlet fjeder vil fjederkonstanten for systemet af fjedre være lig summen af de fjederkonstanter for fjedrene, som er med i systemet. Det fjerde forsøg er en generaliserende version af forsøg 3, da der indgår forskellige fjedrer.

2.2.1 Forsøg 1

En luftpudebænk blev sat op og 2 kroge blev monteret. Én for enden af luftpudebænken og én på en vogn. Der blev fastgjort en fjeder mellem de to kroge. Derefter blev der trukket i vognen og målt sammenhørende værdier mellem afstanden som vognen blev trukket ud og kraften målt på et newtonmeter, som blev brugt til at hive i vognen med. Efter indtastning af data i programmet LoggerPro blev følgende graf tegnet ved at prøve at passe en proportionel regression ned over den målte data.

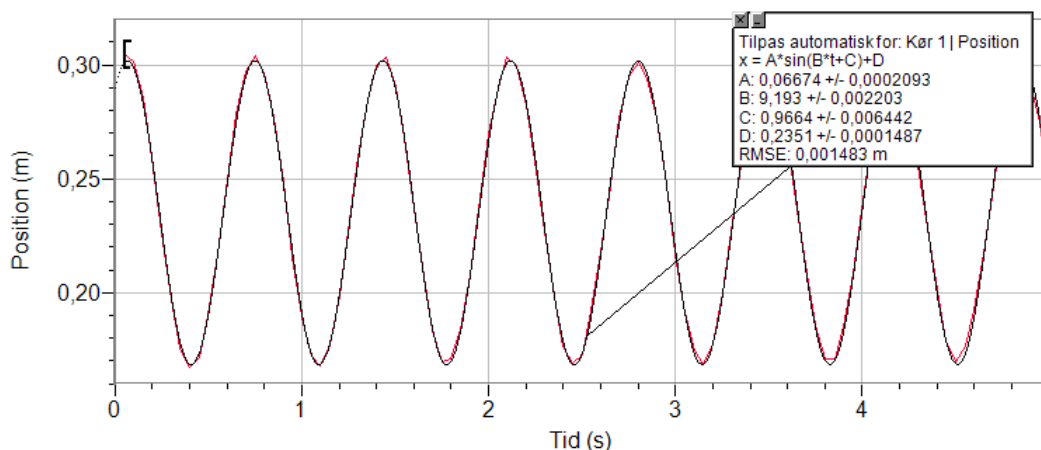


Vi kan konkludere ud fra *Root – mean – square*-værdien, der er på 0.06247, at en proportionel regression passer godt på den målte data. Altså må Hookes lov $F = k \cdot x$ gælde. Ydermere kan vi sige at fjederkonstanten for den pågældende fjeder har en værdi på $k = 0.0281 \frac{N}{cm} = 2.81 \frac{N}{m}$ da dette er hældningskoefficienten på vores lineære regression og altså k i $F = k \cdot x$

Den data, der ligger til grunde for forsøget kan ses i bilag (MANGLER)

2.2.2 Forsøg 2

I dette forsøg blev en fjeder, *ikke* den samme som i forsøg 1, monteret til et stativ og et lod blev hængt i fjederen. Med en Go!Motion ultralydssensor blev afstanden til loddet målt til sammenhørende tidspunkter. Ultralydssensoren var sat til en computer og sendte automatisk data ind i programmet LoggerPro der behandlede dataen og plottede den. Der blev foretaget en regression på datapunkterne på formen $x = A \cdot (B \cdot t + C) + D$. Dette kan ses på følgende billede:

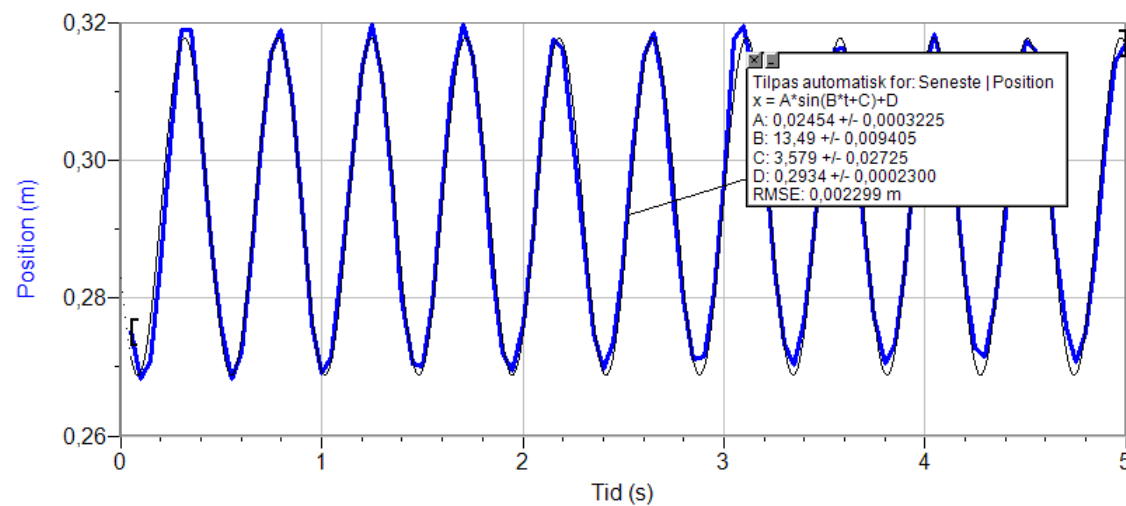


Som det fremgår af *root – mean – square*-værdien af den regression der er lavet over dataen passer den definerede funktion. Det var dette vi gerne ville vise. Herved har vi vist at en oscillerende bevægelse kan skrives på formen: $x = A \cdot (B \cdot t + C) + D$, hvor $B = \sqrt[2]{\frac{k}{m}}$. Vi definerer nogle gange $\omega = \sqrt[2]{\frac{k}{m}}$ så forskriften kommer til at blive $x(t) = A \cdot (\omega t + C) + D$.

Dataen der er brugt til at lave regressionen kan ses på bilag MANGLER

2.2.3 Forsøg 3

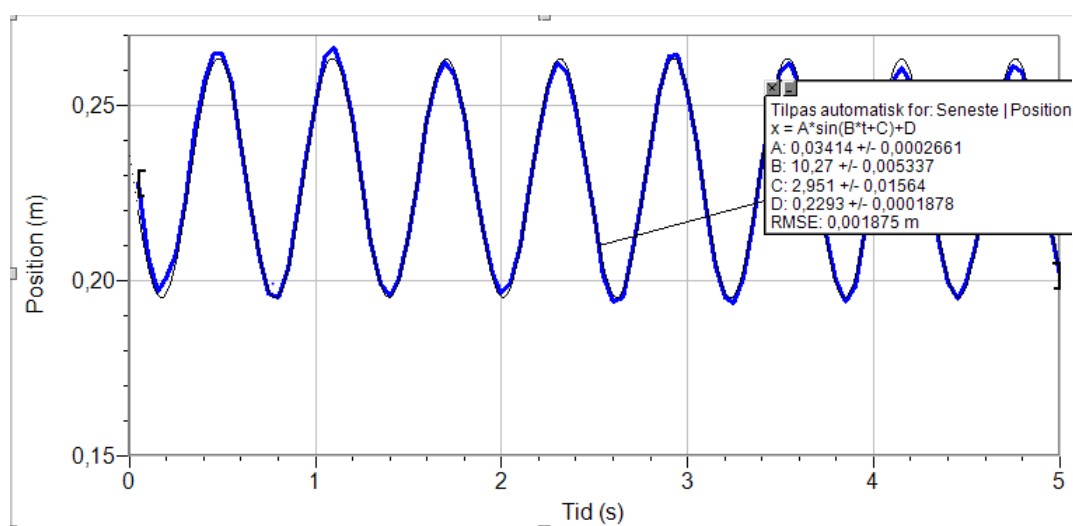
I dette forsøg blev 2 fjedre, identiske til den som blev brugt i forsøg 1, hængt op på et stativ og et lod blev sat til dem og loddet blev sat i bevægelse. En Go!Motion ultralydssensor målte afstanden til loddet til en tid og plottede det i programmet LoggerPro. Plottet så sådan ud:



Her kan vi se, at værdien for B eller $B = \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = 13.49$. Men da vi kender massen af loddet som blev brugt som $m = 32.45g$, (denne værdi blev målt inden forsøget), kan vi beregne fjederkonstanten af dette system som: $k = \omega^2 \cdot m = \frac{13.49}{s} \cdot 32.45g = 5.879 \frac{N}{m}$. Men da vi fandt ud af at fjederkonstanten for forsøg 1 var $k = 2.81 \frac{N}{m}$ skulle den forventede fjederkonstant for dette forsøg være $2 \cdot 2.81 \frac{N}{m} = 5.62 \frac{N}{m}$. Det målte viste sig at være $5.879 \frac{N}{m}$, hvilket er meget tæt på den forventede værdi. Vi konkluderer da at et system bestående af 2 af de samme fjedre får en fjederkonstant der er lig summen af de 2 fjedre der er med i systemet.

2.2.4 Forsøg 4

I dette forsøg skulle der undersøges fjederkonstanten for en dobbeltbinding, som består af en π -binding og en enkelt σ -binding. I forsøget blev der derfor brugt 3 fjedre, hvor 2 af fjedrene var ens. (2 de ens fjedre skulle symbolisere π -bindingen der kan eksistere på begge sider af sigmabindingen). Fjedrene blev hængt op på et stativ og en lodbåd med en vægt i blev sat sammen med fjedrene. De enkelte fjederkonstanter for fjedrene var hhv. $k_1 = 2.74 \frac{N}{m}$ og $17.03 \frac{N}{m}$. Der var 2 fjedre med fjederkonstanten k_1 og vi forventede da at fjederkonstanten for systemet blev $k_{system} = 2 \cdot k_1 + k_2$. Lodbåden med vægten i blev sat i bevægelse og en Go!Motion ultralydssensor sendte data til computeren, der i programmet LoggerPro behandlede dataen og plottede følgende efter at have givet LoggerPro en regression for harmonisk oscillerende bevægelse:



root – mean – square-værdien er lav og regressionen passer derfor på dataen. Dette betyder at vi kan beregne fjederkonstanten, k , ud fra B værdien af den givne forskrift.

Da $B = \sqrt{\frac{k}{m}}$ og massen af det lod som blev brugt var 220g kan fjederkonstanten, k , løses i ovenstående ligning:

$$k = B^2 \cdot m = (10.27)^2 \cdot 220g = 23.2 \frac{N}{m}$$

Vores gæt på fjederkonstanten for dette system var: $2 \cdot k_1 + k_2 = 2 \cdot 2.74 + 17.03 = 22.51$.

Disse to værdier er tæt nok på hinanden til at kunne sige, at der er en sammenhæng. Det må altså gælde at fjederkonstanten for et system med tre fjedre er lig summen af fjederkonstanterne for fjedrene der indgår i systemet.

2.2.5 Delkonklusion

Den målte data og den efterfølgende behandling af samme, har eftervist Hookes lov om fjedre. Derudover har det også vist sig at et objekt med en masse, der hænger i fjeder og som sættes i bevægelse foretager en harmonisk oscillerende bevægelse, hvor fjederkonstanten kan bestemmes ud fra forskriften. Ydermere er der vist, at et system bestående af forskellige fjedre vil have en samlet fjederkonstant for systemet, som er lig summen af de individuelle fjederkonstanter.

2.3 Den bagvedlæggende kemi

Stort set alle kemiske forbindelser, der indeholder kovalente bindinger absorberer nogle specielle frekvenser af elektromagnetisk stråling i den infrarøde del af det elektromagnetiske spektrum. Det infrarøde lys har en længere bølgelængde end det lys menneskets øjne kan opfange $400nm - 800nm$ men kortere end det vi bruger i vores mikroovne, der er længere end 1mm. Det interval vi beskæftiger os med når vi ser på IR-spektroskopi ligger i intervallet $2,5\mu m - 25\mu m$. Det er de bølgelængder af det infrarøde lys, som giver den vibrationelle effekt på atomerne og molekylerne

som vi søger. Når vi i afsnit (MANGLER) skal se på de 3 forskellige IR-spektra, vil der hen af x-aksen være plottet reciprokke centimeter i stedet. Dette skyldes, at kemikere af konvention laver bølgelængder om til **bølgetal**, $\bar{\nu}$, ved at tage den reciprokke værdi af bølgelængden i cm.

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$

Den primære grund til at vi vælger at bruge bølgetal i stedet for en bølgelængde er, at bølgetallene er direkte proportionelle til energien af de fotoner, som lyset består af. På den måde vil et højere bølgetal repræsenterer en højere energi. Bølgetal kan laves om til en frekvens ved at gange det med lysets hastighed, c , for så at puttes ind i formlen for fotonenergi $E_{\text{fot}} = h \cdot \nu$

Dette ses da at fotonenergien bliver større ved et større bølgetal

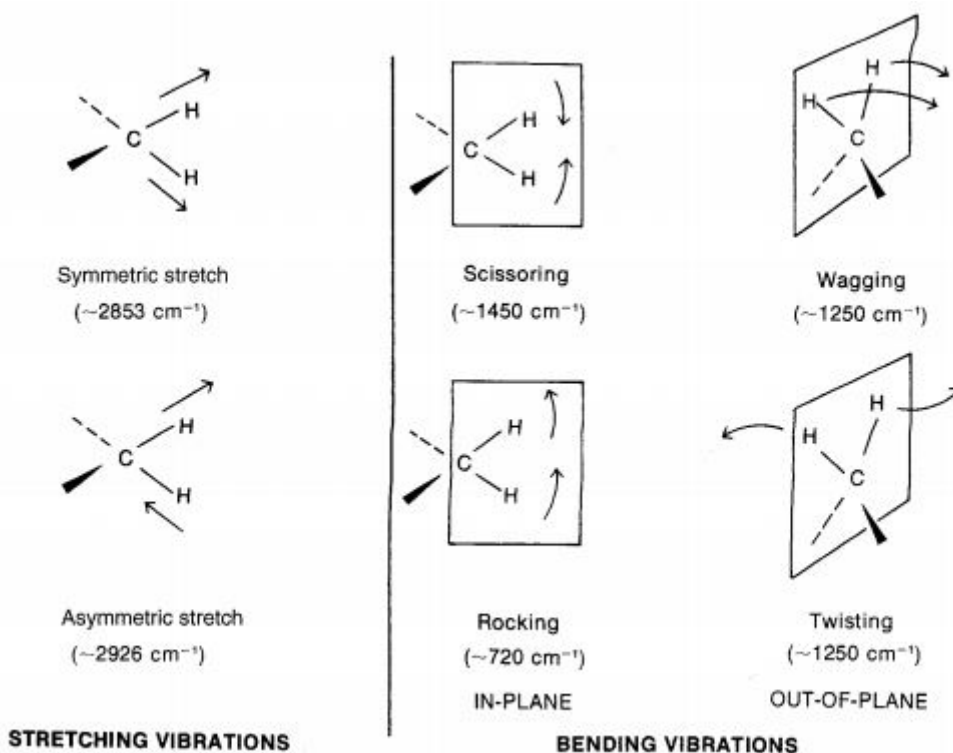
$$\nu = \bar{\nu} \cdot c \rightarrow \bar{\nu} \cdot c \cdot h = E_{\text{fot}}$$

Som med alle former for stråling vil molekyler der rammes blive exciteret til et højere energiniveau ved absorption af den infrarøde stråling. Det resultat der gør IR-spektroskopi interessant er, at molekyler absorberer energi af forskellige frekvenser. De frekvenser som molekylerne absorberer svarer lige præcist til de egenfrekvenser som molekylerne får når atomerne, der er bundet sammen af kovalente bindinger, enten bøjer eller svinger som vist på figur (MANGLER FIGUR DER ILLUSTRERER SVING OG BØJ). Dette er med forbehold for, at der er visse molekyler, der ikke giver sig til kende på IR-spektra grundet årsager som vi skal behandle i et senere afsnit.

Siden alle slags bånd har en forskellig egenfrekvens, i og med at de befinder sig i lidt forskellige *miljøer*, vil to molekyler give forskellige udslag på et infrarødt spektrum. Selvom nogle absorptionsmønstre kan være de samme, hvis begge molekyler eksempelvis indeholder en fælles funktionel gruppe, vil de to molekyler stadigvæk give nogle udslag som adskiller sig fra hinanden. IR-spektra for kemiske forbindelser kan på den måde betragtes den kemiske pendant til menneskets fingeraftryk. Dette betyder at bindinger mellem atomer vil give udslag i små intervaller, der så er kendetegnende for netop disse atomer. Eksempelvis vil et udslag i området 2150cm^{-1} formegentligt være 2 carbonatomer, der er dobbeltbundet til hinanden, hvor vi vil finde 2 carbonatomer der er enkeltbundet til hinanden i området omkring 1650cm^{-1} . Vi kan slå disse værdier op i en databog

Atomerne i molekylerne der er bundet sammen af kovalente bånd kan svinge på forskellige måder. De simpleste vibrationelle bevægelser i molekyler, som er *infrarøde aktive* er bindinger som strækker sig eller bøjer. Se figur (MANGLER)

Der er andre, mere komplicerede måder, som bindingerne mellem atomerne i molekylerne kan opføre sig på. De kan også *sakse* (scissoring), *rokke* (rocking), *twiste* (twisting) og *rykke* (wagging).



Det gælder desuden, at for et hvilket som helst molekyle, der er større eller har netop 3 atomer, hvor 2 af dem er ens at der er en asymmetrisk og en symmetrisk node.

Lad os nu se på hvordan vi kan beregne bølgetal for bestemte atom- og funktionelle grupper. Hvis vi nu ser på et af de simpleste eksempler for vibrationelle noder, et diatomisk molekyle med en strækkende vibration, kan vi betragte den kovalente binding mellem de to atomer som en fjeder. Et diatomisk molekyle kan betragtes som en fjeder hvor båndlængden bliver ved med at ændre sig. Dette betyder nødvendigvis at den kovalente binding, eller fjederen, må have en frekvens som den vibrerer med. Det gælder at energien for en harmonisk oscillator er direkte proportionelt med frekvensen for den harmoniske oscillator givet ved formelen

$$E_{osc} \propto h\nu_{osc} \quad (2.19)$$

For et diatomisk molekyle er det, der bestemmer frekvensen i den harmonisk oscillerende bevægelse størrelserne, K (fjederkonstanten) og masserne af de to atomer der indgår i bindingen m_1 og m_2 .

Men da er frekvensen for en harmonisk oscillator er givet ved formelen

$$\bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{K}{\mu}}$$

Denne formel er udledt fra Hookes lov for vibrerende fjedre. (FODNOTE TIL s8 spectroscopy). her er K , fjederkonstanten, $\bar{\nu}$ er bølgetallet og μ er den reducerede masse givet ved formelen

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Da det ikke altid er lige praktisk at bruge massen af atomer til at finde bølgetallet, kan man i stedet omskrive lidt på formelen således at der kan regnes på molarmassen af de to atomer i

stedet for deres masse.

I stedet for $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ kan vi skrive $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)(6.02 \cdot 10^{23})}$.

Vi kan altså udtrykke masserne som molarmasser ved at dividere μ udtrykt ved masse, med Avogadros tal N_A .

Avogadros tal flyttes ud foran kvadratrodstegnet ved at tage kvadratroden af det og putte det i tælleren på den første brøk således at der står:

$$\bar{\nu}(cm^{-1}) = \frac{\sqrt[2]{6.02 \cdot 10^{23}}}{2\pi c} \cdot \sqrt[2]{\frac{K}{\mu}} = \frac{7.76 \cdot 10^{11}}{2\pi c} \cdot \sqrt[2]{\frac{K}{\mu}}$$

Her er μ ikke massen længere, men *molarmassen*.

Udtrykket kan reduceres yderligere ved at udregne værdien af den første brøk, så vi får formlen

$$\bar{\nu} = 4.12 \sqrt[2]{\frac{K}{\mu}}$$

Hvor μ er den reducerede molarmasse og K er fjeder- eller kraftkonstant for systemet i *dynes* per. centimeter. Dynes er mål for kraft. $10^5 \text{ dynes} = 1N$.

Som en approksimation bruger vi respektivt $K = 5, 10, 15 \cdot 10^5 \frac{\text{dynes}}{\text{cm}}$ for enkelt, dobbelt og trippeltbindinger.

For at validere denne formel vil vi se på 2 eksempler hvor bølgetallet er bestemt gennem et eksperiment og ved brug af formlen. Vi betragter først dobbeltbindingen mellem carbonatomerne i ethen.

Det bølgetal, der er bestemt ved forsøg er $\bar{\nu} = 1650 cm^{-1}$ (FODNOTE). Hvis vi bruger formlen til at regne bølgetallet ud får vi: $4.12 \cdot \sqrt[2]{\frac{10 \cdot 10^5}{(\frac{12 \cdot 12}{12 + 12})}} = 1682 cm^{-1}$.

Et andet eksempel er bindingen mellem et carbonatom og et hydrogenatom. Her er der tale om en enkeltbinding og vi bruger da $K = 5 \cdot 10^5 \frac{\text{dynes}}{\text{cm}}$ og en $\mu = \frac{12 \cdot 1}{12 + 1} = 0.9231$. Putter vi det ind i formlen får vi et bølgetal på: $4.12 \cdot \sqrt[2]{\frac{5 \cdot 10^5}{0.9231}} \approx 3032 cm^{-1}$. Bølgetallet for en stræk mellem C og H er ved forsøg bestemt til at være 3000.

Formlen giver os altså et godt bud på hvor vi kan forvente at se bølgetal for stræk mellem to atomer.

Vi vil lige diskutere betydningen af K samt hvad der har indflydelse på størrelsen.

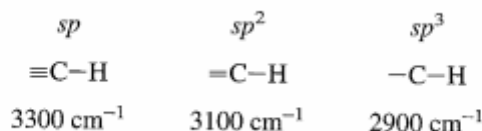
2.3.1 Fjederkonstanten for bindingen mellem diatomiske molekyler

I normale fjedre vil fjederkonstanten, som navnet antyder, være konstant lige gyldigt hver vi hænger i den. Dette gør sig egentligt også gældende for de kovalente bindinger mellem molekyler, hvis de vel at mærke er underlagt præcist de samme betingelser. Så kovalente bånd er ikke én fjeder, men adskillige vis af forskellige fjedre og dette er utroligt vigtigt at have i mente, når vi skal se på forskellige værdier af K .

Et større K medfører et større bølgetal, da tælleren bliver større og værdien for $\sqrt[2]{\frac{K}{\mu}}$ da bliver større. Det er derfor nødvendigt at betragte hvad der har betydning for værdien af K .

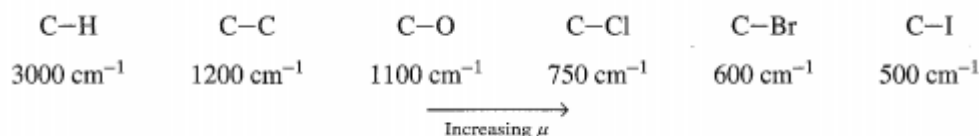
Betydninger for værdien af K

1. Det gælder som en grov regel at værdien af fjederkonstanten, K , er tre gange så høj for trippeltbindinger som for enkeltbindinger og at K er dobbelt så høj for dobbeltbindinger som for enkeltbindinger. Vi sætter disse værdier af K til at være henholdsvis 5, 10 og 15 for enkelt-, dobbelt- og trippeltbindinger. Vi vil senere diskutere i hvor stor grad denne grove fingerregel for beregninger af bølgetal holder.
2. Hybdridering har også en effekt på værdien af K . Som regel er bond stærkere i rækkefølgen $sp > sp^2 > sp^3$. Dette kan vi se hvis vi betragter enkeltbundne, dobbeltbundne og trippeltbundne carbonatomer, der også binder sig til et hydrogenatom:



For det andet vil store atomer der er bundet til atomer der er relativt mindre til dem selv vibrerer ved højere frekvenser da værdien af μ vil være mindre og gøre $\sqrt[2]{\frac{K}{\mu}}$ større.

Vi kan tjekke om dette passer ved at slå op i en databog og se på bølgetal for forskellige atomer bundet sammen:



Vi kan se jo større et atom som carbon er bundet til jo større bliver μ og derfor også bølgetallet $\bar{\nu}$.

Bevægelser mellem atomer, der er bøjende vil også optræde ved en lavere energi, og altså også ved et lavere $\bar{\nu}$, end de strækkende bevægelser. Eksempelvis vil C-H stræk give udslag ved et bølgetal på ca. 3000 cm^{-1} mens C-H bøj vil give et udsalg omkring 1340 cm^{-1} .

Hookes lov som model for interaktion mellem atomer

I forrige afsnit fandt vi frem til formelen:

$$\bar{\nu} = 4.12 \sqrt[2]{\frac{K}{\mu}}$$

Som er en utrolig brugbar formel til at regne bølgetal ud for svingninger mellem to atomer. Vi skal dog notere os, at formelen kun kan bruges til at regne bølgetallet ud for stræk mellem to atomer, da formelen er udledt ud fra Hookes lov, som beskriver en fjeder som bliver enten trukket i eller presset sammen. Formlen beskriver altså ikke de andre former for *noder* som buk, saks og tvist. Når vi har gjort os det klart, kan vi fortsat bruge formelen.

Derudover bruger vi i den selv samme formel følgende værdier for k : $5 \cdot 10^5 \text{ dynes}$ for enkeltbindinger, $10 \cdot 10^5 \text{ dynes}$ for dobbeltbindinger og $15 \cdot 10^5 \text{ dynes}$ for trippeltbindinger. Vi viste, at disse værdier passede godt for de to eksempler med methan og ethen, men hvis vi husker

hvad vi fandt ud af i 2.2.5 ville fjederkonstanten for et system være lig summen af alle de fjederkonstanter, som var med i systemet.

Antag at fjeder-/kraftkonstanterne for henholdsvis enkelt-, dobbelt- og tripeltbindinger er $5 \cdot 10^5$, $10 \cdot 10^5$ og $15 \cdot 10^5$ dynes. Der vil nu føres et argument for at disse værdier af k kun er en grov antagelse.

Hvis vi ser på et system med en dobbeltbinding skal fjeder-/kraftkonstanten være 10. Da en dobbeltbinding også indeholder en σ -binding kan vi tillade os jævnførende resultatet i 2.2.5 at trække fjederkonstanten for en σ -binding fra, som er 5. Dette efterlader os med en fjederkonstant på 5 som vi skal tildele til de resterende fjedre i systemet. Da vi kun har en π -binding tilbage må vi enten have at π -bindingen er lige så stærk som σ -bindingen, hvilket er falskt(MANGLER FODNOTE) eller hvis vi regner π -bindingen som 2 svage fjedre over for hinanden på hver sin side af σ -bindingen, at σ -bindinger er præcist dobbelt så stærke som π -bindinger - hvilket også er falskt(MANGLER FODNOTE).

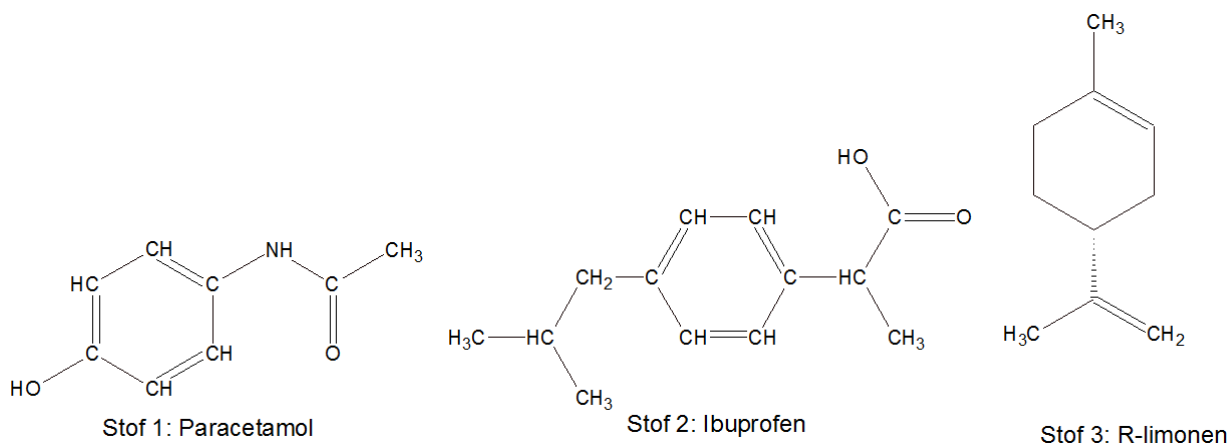
Derfor er antagelsen om at enkelt-, dobbelt- og trippeltbindinger respektivt kan gives værdierne $5 \cdot 10^5$, $10 \cdot 10^5$ og $15 \cdot 10^5$ dynes for k en grov antagelse, som dog viser sig at passe nogenlunde.

2.4 IR-analyse af stofferne paracetamol, ibuprofen og R-limonen

Vi vil i dette afsnit se nærmere på hvordan man i praksis bestemmer hvilket stof et bestemt IR-spektrogram hører til. Der vil ses på de tre stoffer: paracetamol, som er et udbredt smertestillende middel, ibuprofen, der også er smertestillende og til sidst stoffet R-limonen, som er en farveløs væske der ved stuetemperatur dufter kraftigt af appelsin (FODNOTE WIKI). Vi har tre forskellige stoffer vi skal tildele til tre forskellige IR-spektre. Man kan indledningsvist se på molekylernes opbygning og gøre det klart for sig selv, hvilke steder man forventer at se absorption.

Der kigges da på de funktionelle grupper som de tre stoffer indeholder. (Alle de karakteristiske bølgetal for absorptionsbåndene er taget fra BASISKEMI A)¹

¹Nieslen og Axelsen , 2011, s. 248-249 [?]



Stof 1 Stof 1 er paracetamol. De karakteristiske bølgetal for funktionelle grupper vi har tænkt at at kigge efter, når vi skal slå op i vores tabel for bølgetal er følgende:

- OH-Ar Fenol, da vi har en alkoholgruppe, som sidder på en aromatisk ring. ($\bar{\nu}$ = 3550-3200)
- N-H: sekundær amid, da vi har en carbonylgruppe, som er bundet til et nitrogenatom, der kun er bundet til 1 hydrogenatom. ($\bar{\nu}$ = 3400-3500 og 1650)
- CH: sp^2 -stræk fra den aromatiske ring ($\bar{\nu}$ =3010-3100)
- C=O: Amidgruppen giver udslag i området ($\bar{\nu}$ = 1600-1700)
- C-H sp^3 -stræk i området ($\bar{\nu}$ = 2810-2960)

Stof 2 Stof 2 er Ibuprofen. Vi er igen interesserede i de karakteristiske bølgetal for de funktionelle grupper som stoffet indeholder. Vi skriver dem op i tabellen nedenfor.

- C-H: sp^3 -stræk i området ($\bar{\nu}$ = 2810-2960)
- CH: sp^2 -stræk i intervallet ($\bar{\nu}$ = 3010-3100) for den aromatiske ring.
- C=O: Carboxylsyregruppen i ibuprofen giver udslag i området om ($\bar{\nu}$ = 1695)
- O-H: Hydroxylgruppen i ibuprofen giver udslag i området ($\bar{\nu}$ = 3000-2500) og er et meget bredt bånd.

Stof 3 De karakteristiske bølgetal for de funktionelle grupper i R-limonen skrives op

1. H-C=: Bindingen mellem hydrogenatomet og carbonatomet, der sidder i en dobbeltbinding med et andet carbonatom giver udslag i området ($\bar{\nu}$ = 3010-3100)
2. C-H sp^3 : giver udslag i området ($\bar{\nu}$ = 2810-2960)
3. C=C sp^2 : Giver udslag i området ($\bar{\nu}$ = 1600-1700)

De tre stoffer skal nu knyttes til hver deres IR-spektrogram (SE BILAG MANGLER). For at overskueliggøre denne process, tager vi udgangspunkt i forskellene på de funktionelle grupper som de tre stoffer indeholder. R-limonen indeholder for eksempel ikke nogen hydroxylgruppe

og vil ikke have det kendetegnende brede *tungebånd* i området omkring ($\bar{\nu} \approx 3000$). Hvis vi kigger på bilagene med IR-spektrogrammerne kan vi se, at dette udelukker både bilag 1 og 2. Vi kan altså næsten øjeblikkeligt slutte, at stoffet R-limonen hører til IR-spektrogrammet på bilag 3. Vi vælger dog at undersøge det lidt nærmere for en sikkerheds skyld.

Hvis bilag 3 skulle være IR-spektrogrammet af R-limonen skulle vi se absorptionsbånd for de funktionelle grupper der er i R-limonen. Dette var et udslag i området ($\bar{\nu} = 1600-1700$) - Dette kan vi bekræfte også er der på bilag 3, et udslag i området ($\bar{\nu} = 2810-2960$) - dette er også tilstedeværende på vores spektrogram, og et udslag ved ($\bar{\nu} = 3010-3100$) som formegentligt er blevet forskudt lidt mod højre og flyder ud *sp²*-båndet.

Med alt taget i betragtning virker bilag 3 til at være et godt bud på at være et IR-spektrogram af R-limonen.

Nu betragtes de to resterende stoffer og deres IR-spektre. Én af de funktionelle grupper der adskiller de to stoffer er paracetamols sekundære amid, som gav udslag i området omkring ($\bar{\nu} \approx 1650$). Kigger vi på de to spektre på hhv. bilag 1 og bilag 2 vil vi se, at der kun optræder et absorptionsbånd omkring ($\bar{\nu} \approx 1650$) ved bilag 1. Det absorptionsbånd som kommer tættest på er absorptionsbåndet der ligger omkring de $\bar{\nu} \approx 1700$, men dette absorptionsbånd kan tildeles til C=O strækket for carbonylgruppen i ibuprofen.

Vi kan bekræfte formodningen om at bilag 1 hører til stof 1 og bilag 2 hører til stof 2 yderligere ved at se på hydroxylgruppen OH. Da hydroxylgruppen i stof 1 sidder på en aromatisk ring vil den give udslag ved et højere bølgetal end, hvis den havde siddet som en del af en carboxylsyre, som er tilfældet i stof 2. Dette kan vi også se, hvis vi betragter de to spektre. På spektret på bilag 1 har vi et *tungebånd* med centrum i omkring ($\bar{\nu} = 3200$) og på spektret på bilag 2 har vi et *tungebånd* med centrum omkring ($\bar{\nu} = 2750$).

Dette gør det muligt for at tildele de tre spektre til de tre stoffer. Stof 1 (Paracetamol) hører til IR-spektret på bilag 1, stof 2 (Ibuprofen) hører til IR-spektret på bilag 2 og stof 3 (R-limonen) hører til IR-spektret på bilag 3.