



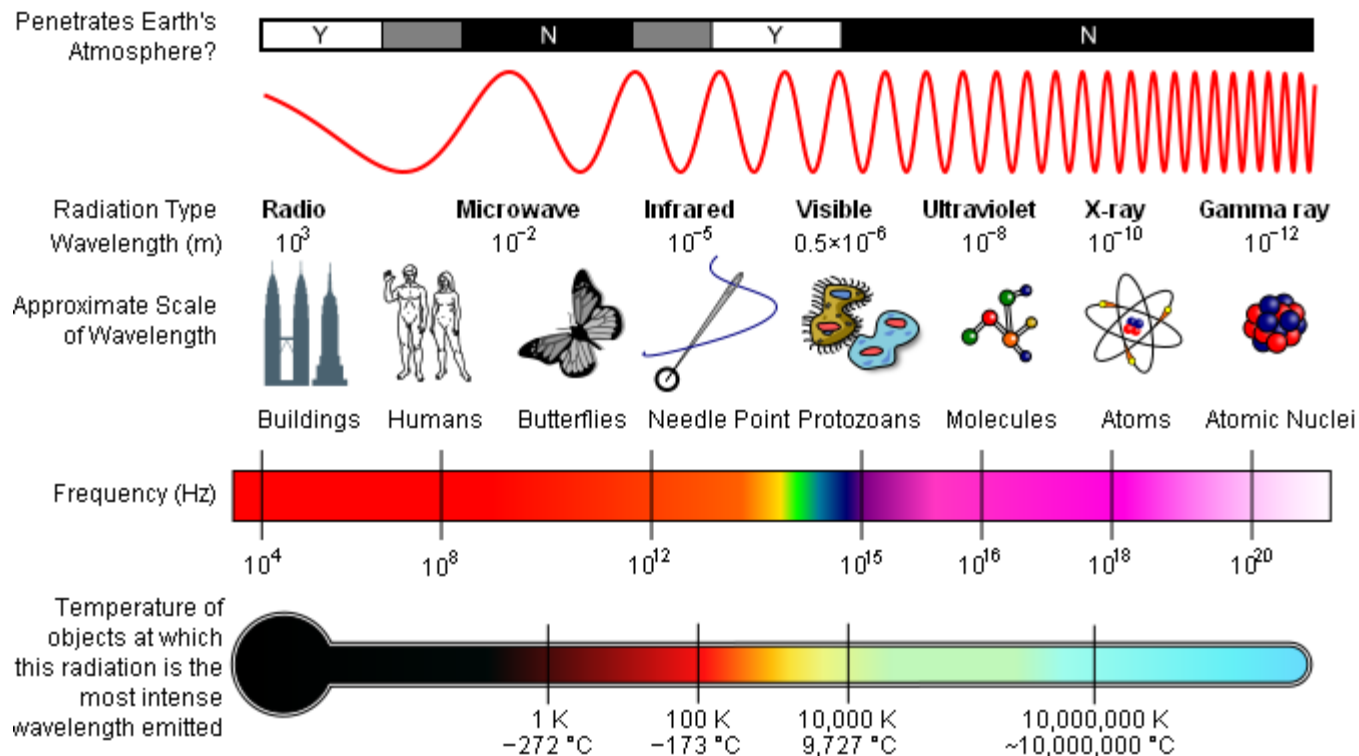
Kapittel 12

Strukturbestemmelse:
Infrarød spektroskopi (IR)

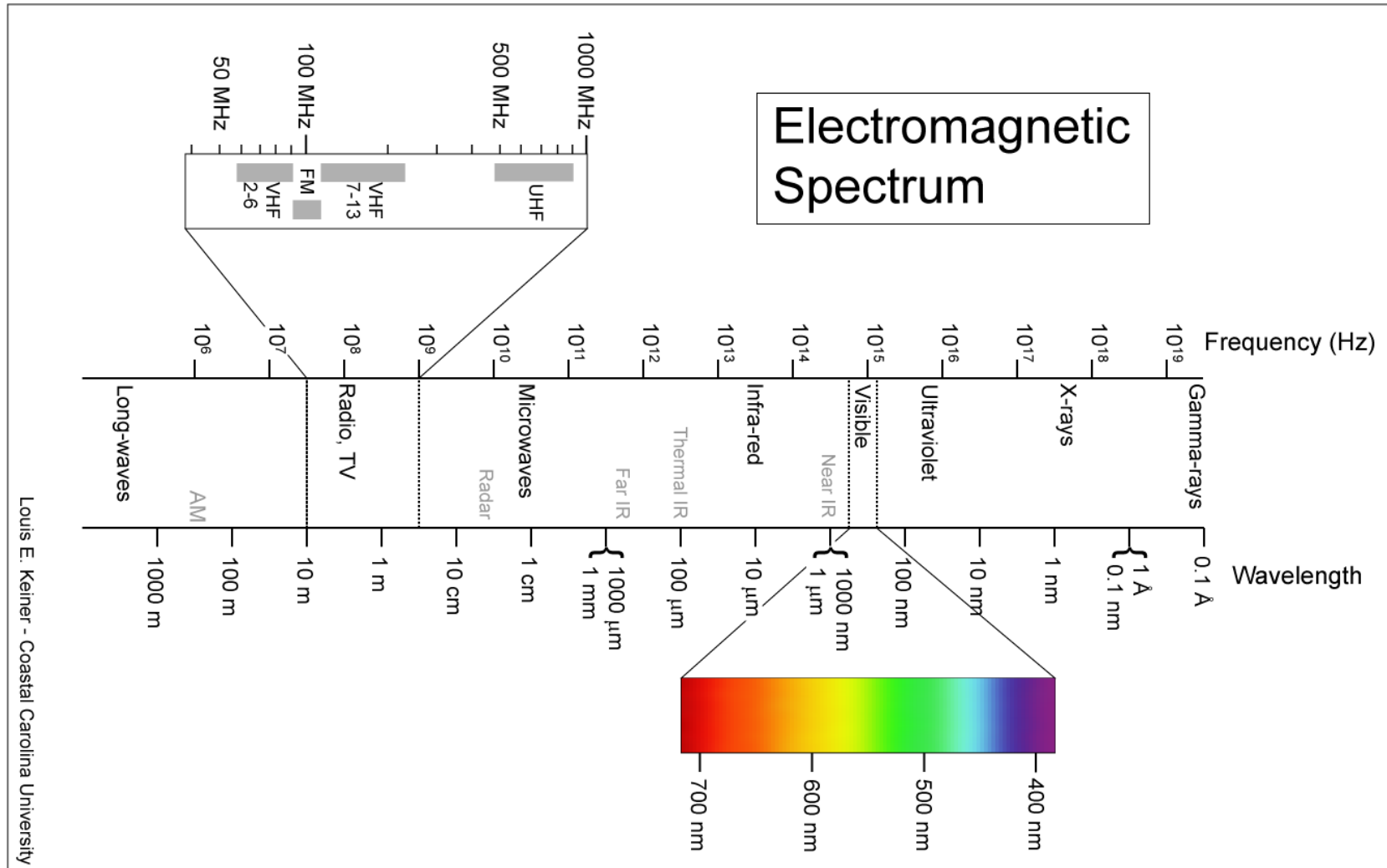
Strukturbestemmelse og spektroskopi

- Spørsmål:
“Hvordan vet vi hva vi har?”
- Dagens viktigste verktøy er et mangfold av avanserte, spektroskopiske metoder
 - Massespektrometri (MS)
Molekylmassen kan bestemmes
 - Infrarød spektroskopi (IR)
Vibrasjoner om bindinger gir informasjon om funksjonelle grupper
 - UV-synlig lys spektroskopi (UV-vis)
Informasjon om dobbeltbindinger og π -systemer
 - Kjernemagnetisk resonans (NMR)
Informasjon om funksjonelle grupper, konnektivitet og mye annet
“Ser” forskjellige atomkjerneslag (^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P ...)

Det elektromagnetiske spektrum



Det elektromagnetiske spektrum



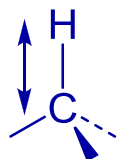
Infrarød (IR) spektroskopi

Vibrasjonsspektroskopi

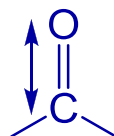
- Vibrasjonene er *kvantiserte*, d.v.s. skjer ved spesifikke frekvenser
- Bølgelengder λ i området ca. 2.5×10^{-6} til 2.5×10^{-5} m brukes av organikere
- Oppgis oftest som antall bølger pr. centimeter,

$$\text{Bølgetall} = \tilde{\nu} \text{ (cm}^{-1}\text{)} = \frac{1}{\lambda \text{ (cm)}}$$

- Bølgetall 4000 til 400 cm^{-1} tilsvarer 48-4.8 kJ/mol
- Forskjellige bindingstyper vibrerer ved forskjellige frekvenser

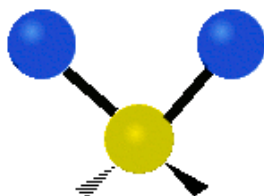


ca. 3000 cm^{-1}

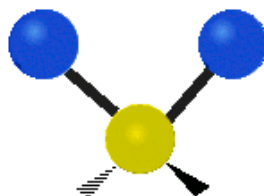


ca. 1700 cm^{-1}

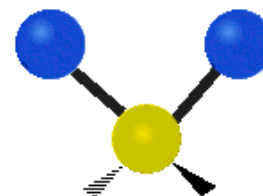
Molekylgymnastikk



Symmetrisk
strekk

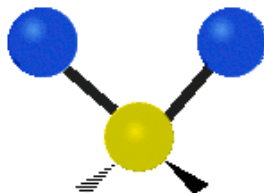


Antisymmetrisk
strekk

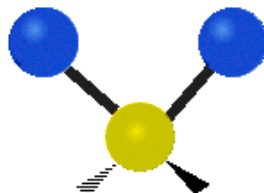


Saksing

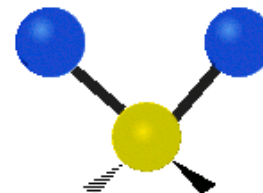
Rocking



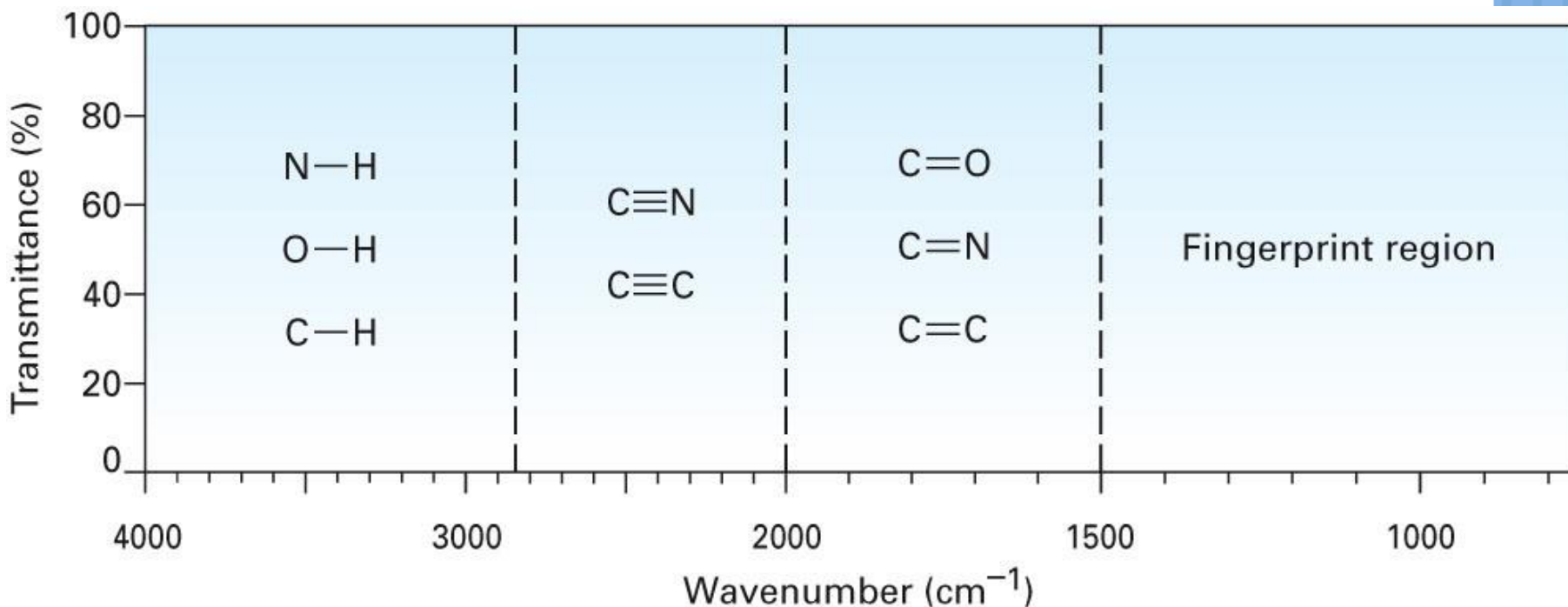
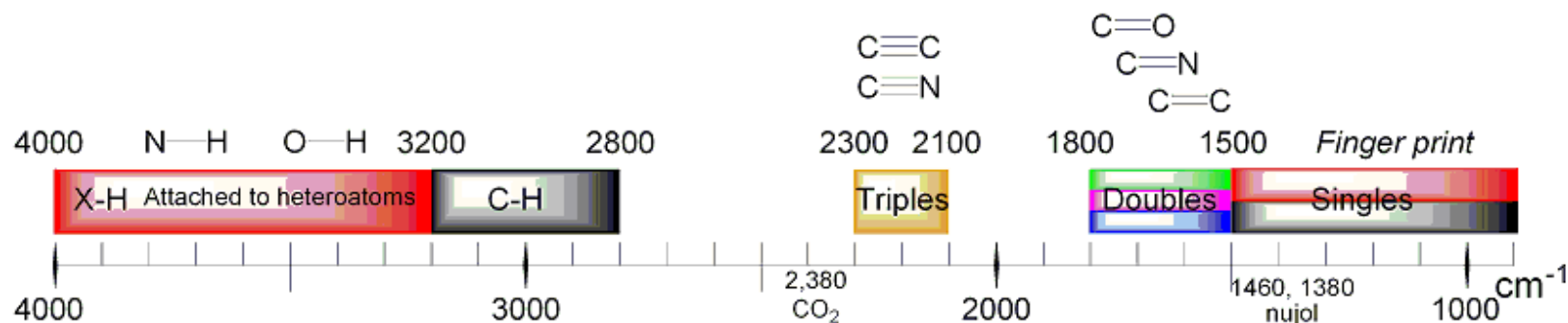
Logring



Vridning



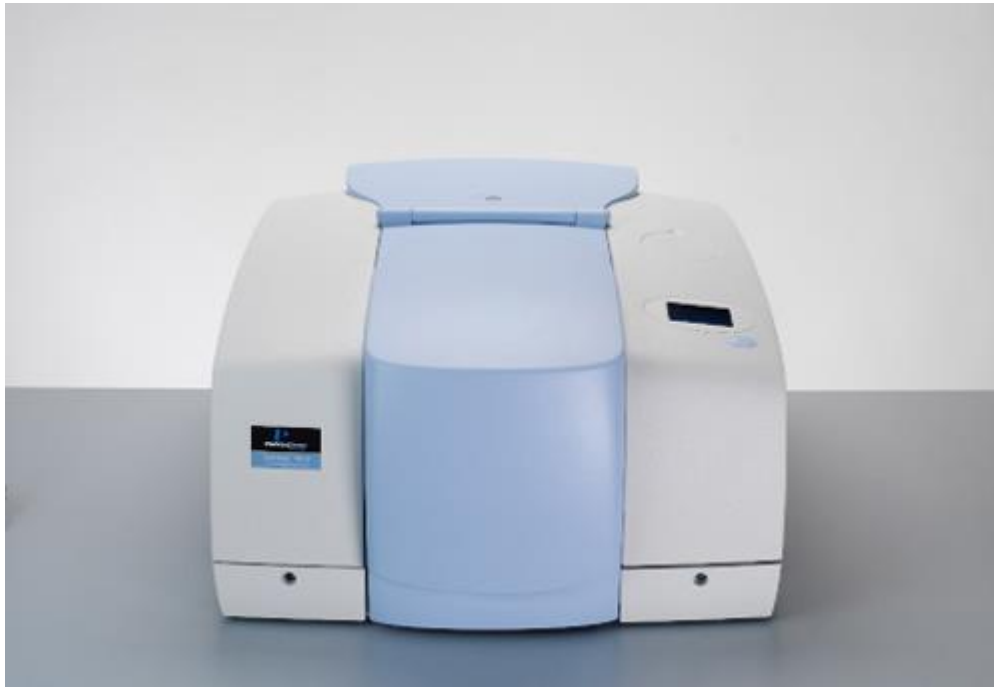
Noen viktige IR-områder



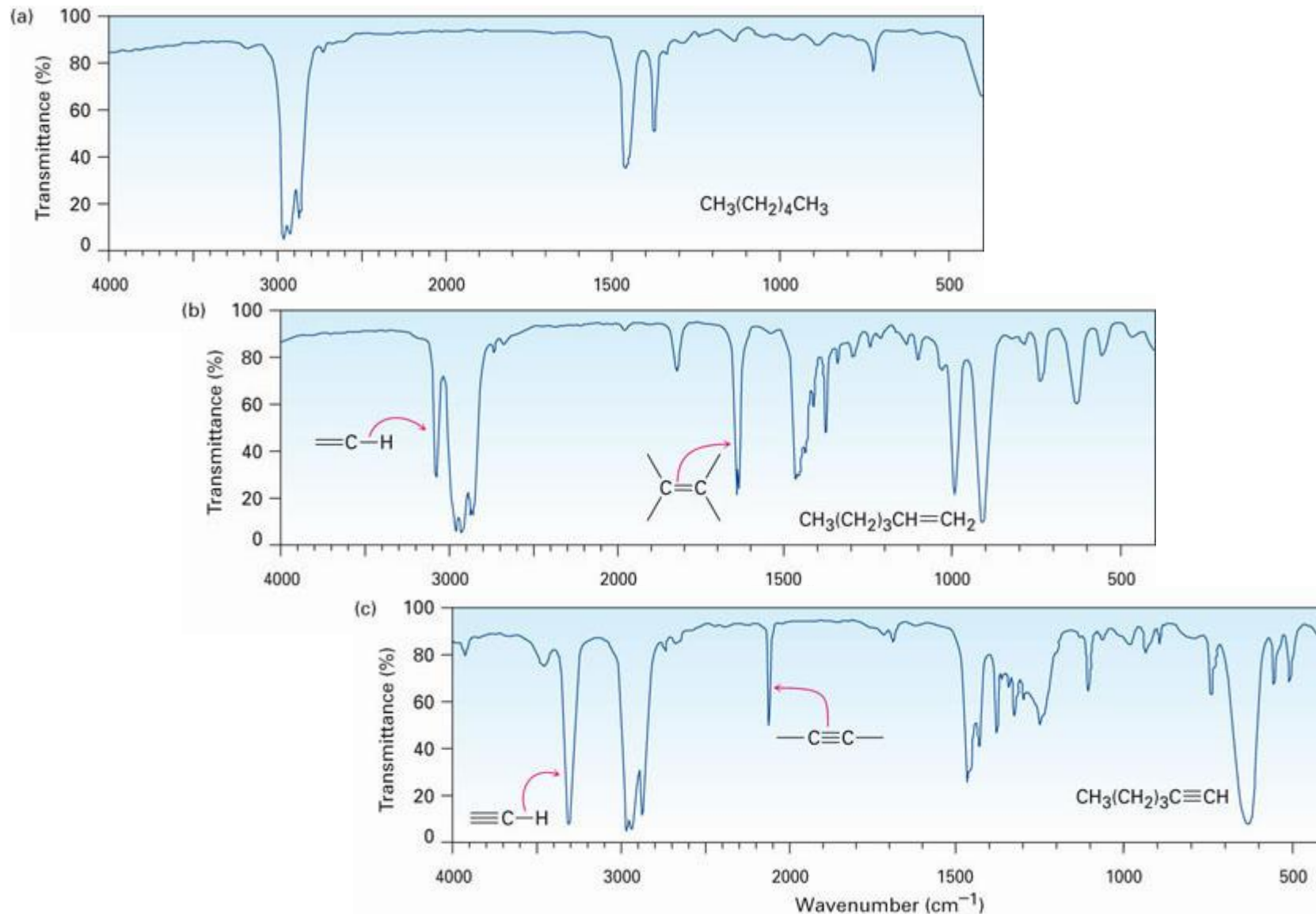
Et moderne IR-spektrometer



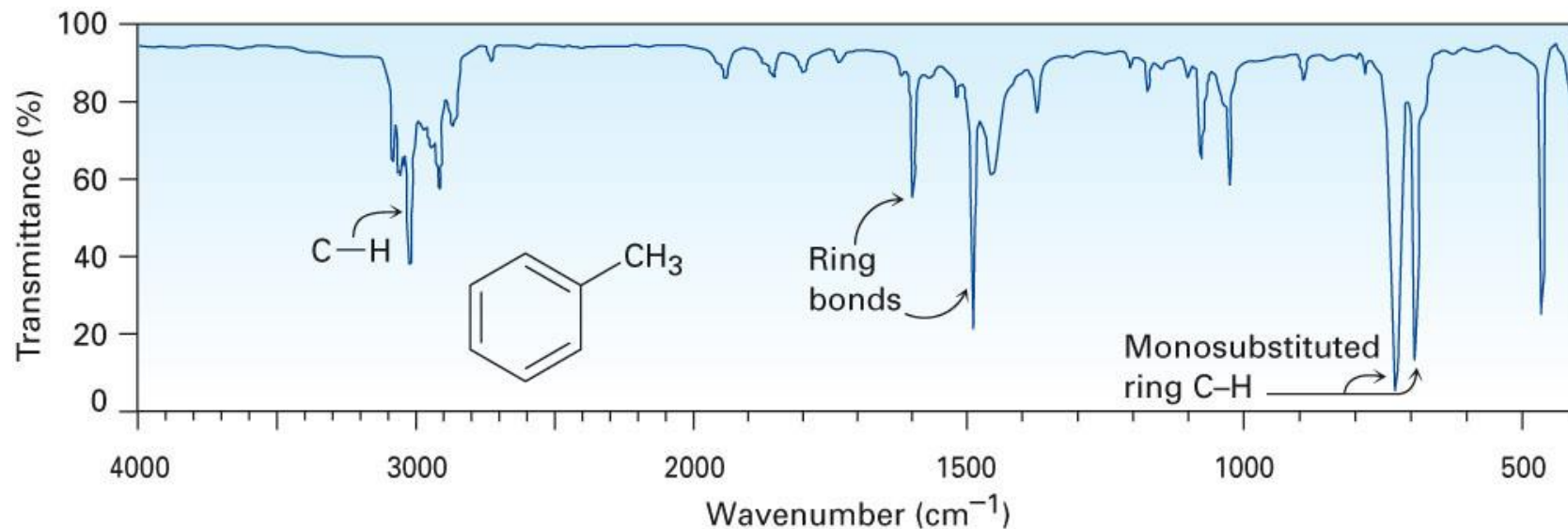
UNIVERSITETET
I OSLO



Noen eksempler - hydrokarboner



En aromatisk forbindelse



Hvilke grupper kan vi “se” her?



UNIVERSITETET
I OSLO

