

## *SARRERA (1)*

Kimika organikoan sotzen zaigun lanik zailenetakoa zera da konposatu organikoen egitura zehaztea.

Zenbait molekulenkin nahikoa izango da datu adierazgarri batzuekin. Propietate fisiko edo kimikoaz baliatuz (fusio puntua, irakite puntua, oxidatzaileen aurrean duen erantzuna, errebelatzaileen aurrean duen joera...etab) eta bibliografiako datuekin konparatu ezkerro, zenbait konposatuen egitura antzeman dezakegu. Formula ere atera dezakegu oinarritzko analisi baten bitartez. Guzti hau baliagarria izan daiteke aurrez gure konposatua ezaguna ba da..

Egin behar guzti hauek nahasi egiten zaizkigu konposatua berria bada ala egitura oso konplexua ba du. Hau eguneroko lana da kimika organikako laborategi baten eta kasu hauetan analisi modu zehatzak eta oso konposatu gutxiz baliatzen direnak behar ditugu.

## ***SARRERA (2)***

Hemen aipatuko ditugun tekniken artean **absortzio espektroskopian** oinarritzen direnak ikusiko ditugu (**IG** eta **UM**). Teknika hauetan uhin luzeeraren arabera konposatu batek absorbatzen duen energia neurtzen dugu. **Emisio espektroskopian** oinarritzen den teknika bat ere ikusiko dugu (**EMN**). Teknika honetan analisatu beharreko molekulak energi batez kitzikatu egiten ditugu eta ondoren itzultitako energia neurtzen dugu. Asken teknika (**ME**) **apurtze edo fragmentazio espektrometria** bat da. Energia emanaz molekula zatitzea lortzen degu eta ondoren zati bakoitza aztertu, kasu honetan pisuaren arabera.

## ***SARRERA (3)***

Egitura organikoak zehazteko erabili behar ditugun lau teknika garrantzitsu hauek gehiago zehaztu behar ditugu:

**Infragorri espektroskopia (IG)**, lotura baten luzeera eta molekulen arteko angeluak aldatzen ditugu. Talde funtzionalak adierazten dizkigu teknika honek.

**Masa espektrometria (ME)** elektroien azeleratuen bidez eragiten diogu molekulari eta apurtu ondoren zati bakoitzaren masari buruzko informazioa lortu dezakegu.

**Erresonantzia magnetiko nuklearraren espektroskopia (EMN)** karbono edo hidrogeno jakin baten inguru elektronikoak sortzen dituen aldaketak zehaztu lezazke.

**Ultramore espektroskopia/Ikuskorra (UM/Ikus)** elektroien arteko transizioetan oinarritzen da eta molekulak dituen lotura anitzei buruzko informazioa ematen digu.

## *ESPEKTROSKOPÍA: SARRERA*

*espektroskopiaren* bitartez materia eta *erradiazio elektromagnetikoaren* arteko hartu emanak ikusiko ditugu

*Erradiazio elektromagnetikoa* energia eramateko modu bat besterik ez da, eta eremu magnetiko eta elektriko perpendikular baten bitartez egiten da energi edaketa hori, hau da **uhin** baten bitartez. Inguru baten sortutako perturbazio bidez **uhinak** energia garraiatzen du.

### *Uhinaren datu adierazgarriak*

**Uhin luzeera ( $\lambda$ ):** Bi maximo edo bi minimoen arteko distantzia, metrotan neurtzen da (m)

**Uhin baten maiztasuna ( $\nu$ ):** Puntu batetik igarotzen diren maximo edo minimo kopurua denborarekiko. Unitatea 1/seg.(s<sup>-1</sup>) eta *hertzio (Hz) deitzen zaio*.

$$E = h\nu$$

$$c = \lambda\nu$$

E= Erradiazio energia

h= Plancken konstantea= 6,62x10<sup>-37</sup> kJ/s

c= argiaren abiadura

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

Bi ekuazio hauek berdindu eta zenbait ondorio atera ditzakegu:

- *Uhin luzeera eta maiztasuna alderantziz proportzionalak dira*
- *Energia eta maiztasuna zuzenki proportzionalak dira.*

Eguzkiak jaurtitzen duen erradiazioari *izpi kosmikoak* deritze. Energi altuena, maiztasun haundiena eta uhin luzeera motzena dituzte.

Zebait elementu erradiaktiboek  $\gamma$  *izpiak* jaurtitzen dituzte. Energi haundikoak dira eta izaki biziengan kalte haundiak egin ditzakete.

*X izpiak*, aurrekoak baino energi gutxiago dute eta kalte txikiagoak eragiten dituzte. Izaki bizien barnea aztertzeke erabiltzen dira.

*UM argia* eguzkitan jarri eta erretzen geranean argi honegatik gertatzen zaigu. Azaleko minbizia sortu lezake, azal zelulen DNAn aldaketak sortu bai lezazke.

*Argi ikuskorra* ikus dezakegun erradiazio elektromagnetikoa.

*Infragorria* bero bezela nabaritzen degu.

*Mikrouhinen* bidez berotzen ditugu elikagaiak.

*Irrati uhinak* berriz dira energi bajeuna dutenak. Irrati/telebistan, urrutiko kontroletan etab. erabiltzen ditugu, gure kasuan Eresonantzia Magnetiko Nuklearrean.

## *Luzeera neurtzeko unitateak*

$$1 \text{ cm} = 1 \times 10^{-2} \text{ m}$$

$$1 \text{ }\mu\text{m} = 1 \times 10^{-6} \text{ m}$$

$$1 \text{ nm} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}$$

$$1 \text{ \AA} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$1 \text{ pm} = 1 \times 10^{-12} \text{ m}$$

<i>Teknika</i>	<i>Tartea</i>	$\lambda$	$\Delta E$ (Kcal)	<i>Eragina</i>
ME(MS)		< 10 nm	> 800	Ionizazioa
UM/Ikus.	UM Ikuskorra	200-400 nm 400-800 nm	280-82 82-36	Elektroien orbital aldaketak (O.M.)
IG	IG	0,8-300 $\mu\text{m}$	36-1	Lotura dardarketa
EMN (NMR)	Erradio frekuentzia	3 m	$10^{-6}$	Spin transizioak



## ***UHIN-PARTIKULA BIKOIZTASUNA***

Erradiazio elektromagnetikoak uhin eta partikula propietateak ditu. Partikulei **fotoi** deitzen diogu, eta fotoi bakoitzak duen energi kopuruari **kuanto**.

Oinarriaren arabera fotoiak energi maila ezberdinak izan ditzakete.; X izpiak energi oso haundiko fotoiak dira. Irrati uhinak askoz energi gutxiago dute.

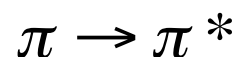
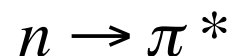
Eremu elektromagnetiko guzti hori honelako eskema baten irudikatu leike:

Erradizio elektromagnetikoaren eraginez molekula batek fotoi bat artu lezake eta honen energia bereganatu. Molekulak ez dute edozein maiztasun duen energia absorbatzen, hau da energia kuantizatua dago. Solik maiztasun jakin batzuek dituzten fotoiak eragiten diote molekulari. Maiztasun hori molekularen egitura eta barne izaerari lotuta dago eta bereganatzen duen edo dituen fotoien maiztasuna neurtzeko **espektrometroak** erabiltzen dira. Lortzen diren datuek egiturarekin zuzenean lotu leizke eta analisi organikoaren mundua zeharo aldatu dute.

Espektrometro batek, lagin batek bereganatzen duen erradiazio elektromagnetikoaren neurketa egin al izateko egitura du. Espektrometro batek erradiazio iturri bat du, eta horrez gainera lagina jartzeko leku aproposa eta detektagailu bat. Erradiazioak lagina zeharkatzen du eta detektagailuak neurtutako maiztasun eta absortzio arteko erregistroa irudikatzen da. Irudi horri espektru deitzen zaio. Espektru honen azterketak egiturari buruzko datu franko eman lezazke.

## *UM/Ikus. ESPEKTROSKOPIA*

UM( $\lambda = 100\text{-}350\text{ nm}$ ) eta Ikuskor( $\lambda = 350\text{-}800\text{ nm}$ ) erradiazioak elektroien transizioak hauek egiteko aina energia ba dute:



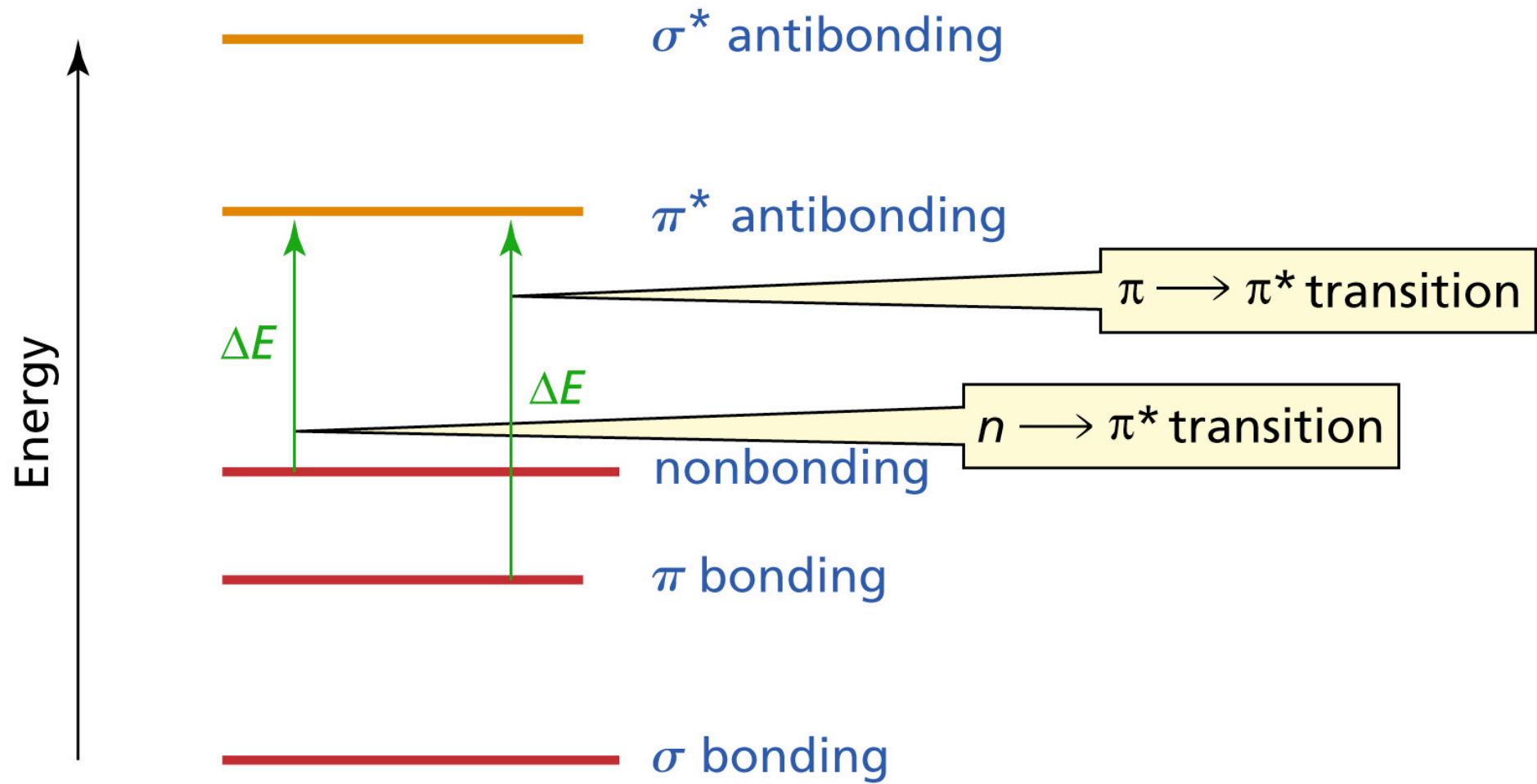
Lehendabizikoan elektroien pare ez lotzaile bat (“*lone pair*”)  $\pi^*$  antilotzaile MO batera jauzitzen da. Transizio hau detektatzen da.  $\pi$   $\pi^*$  dira arrunetnak eta  *$\pi$  elektroien dituzten molekula organikoak izango dira UM/Ikus. espektroskopia bidez ikus ditzakegun bakarrak.*

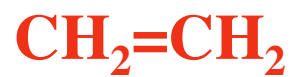
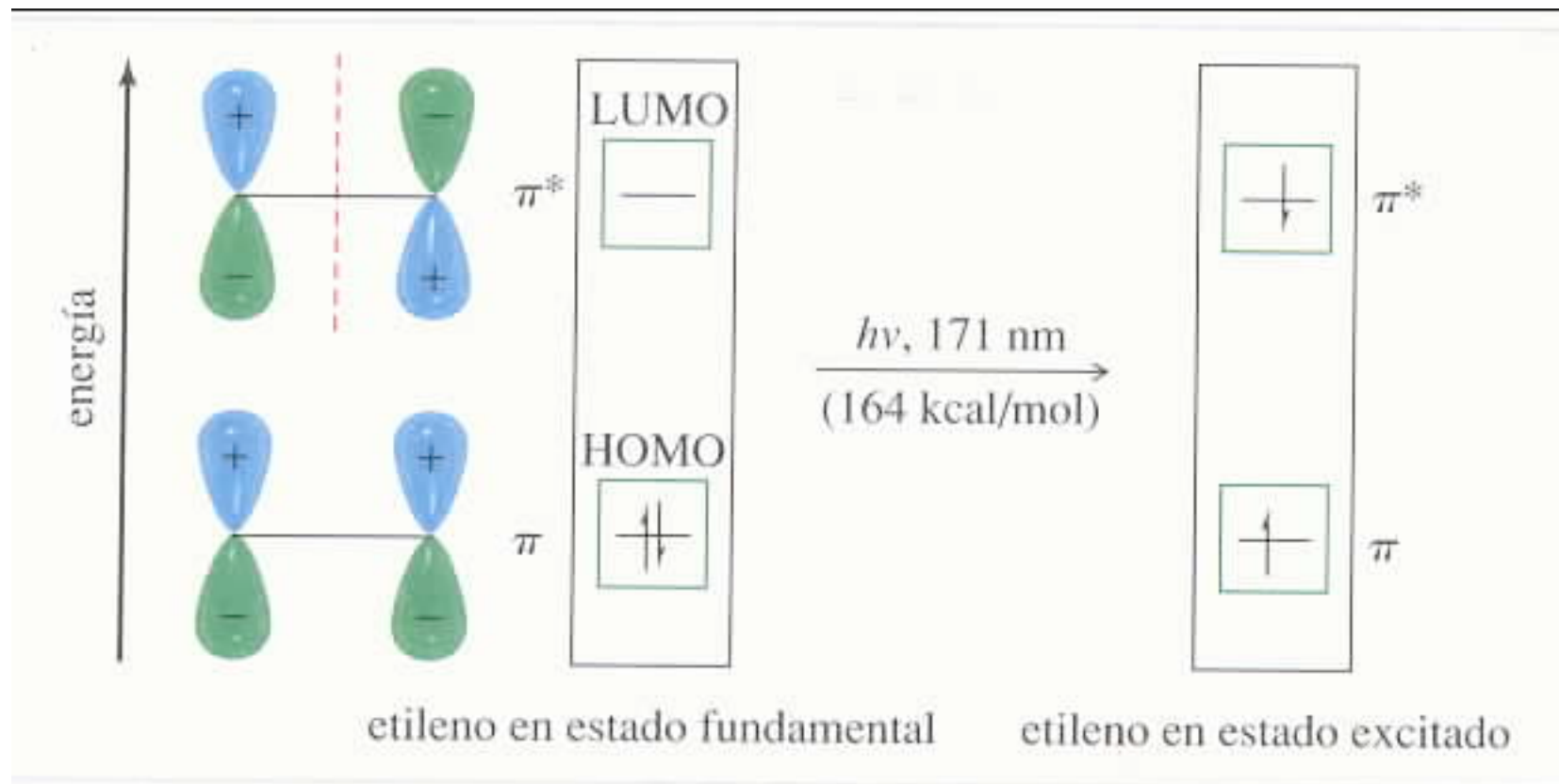
## Energi maila eta elektroi transizioak

Molekula baten elektroi konfigurazio arrunta **oinarrizko egoera** bezala ezagutzen da. Egoera horretan elektroi guztiak energi maila apaleneko orbitaletan kokatuta daude.

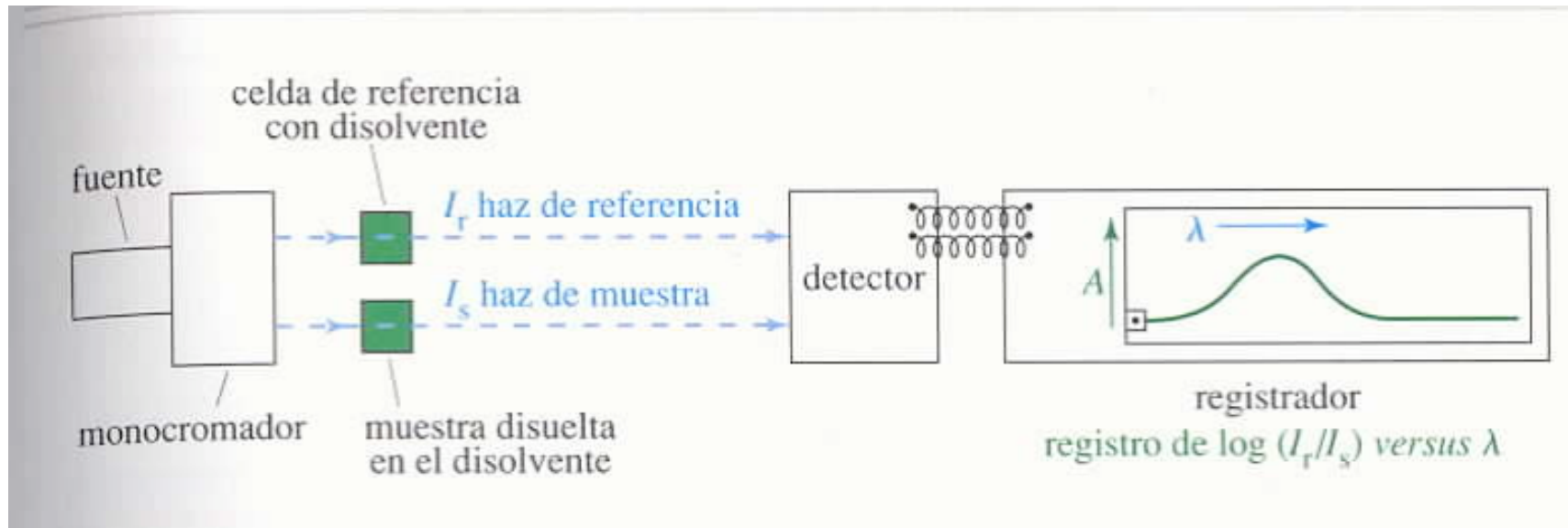
Molekula batek uhin luzeera jakineko ( $\lambda$ ) erradiazioa jasotzen duenean, elektroi bat igarotzen du energia haundiago duen orbital batera, molekula orduan egoera kitzikatu baten aurkitzen da.

Orduan **ELEKTROI TRANSIZIOA**, elektroi bat energi maila haundiagoa duen orbitalera igarotzea izango litzake.





## UM espektrometro baten itxura



**Monokromatzaileak** uhin luzeera bat aukeratu eta bitan banatzen du.

**Detekttagailuak** bi uhinen arteko erlazioa neurtu eta grafika osatzen du.

.



Lagin baten absorbantzia neurtzeko *Lambert-Beer-en legea* erabiltzen da:

$$A = \varepsilon cl$$

Non:

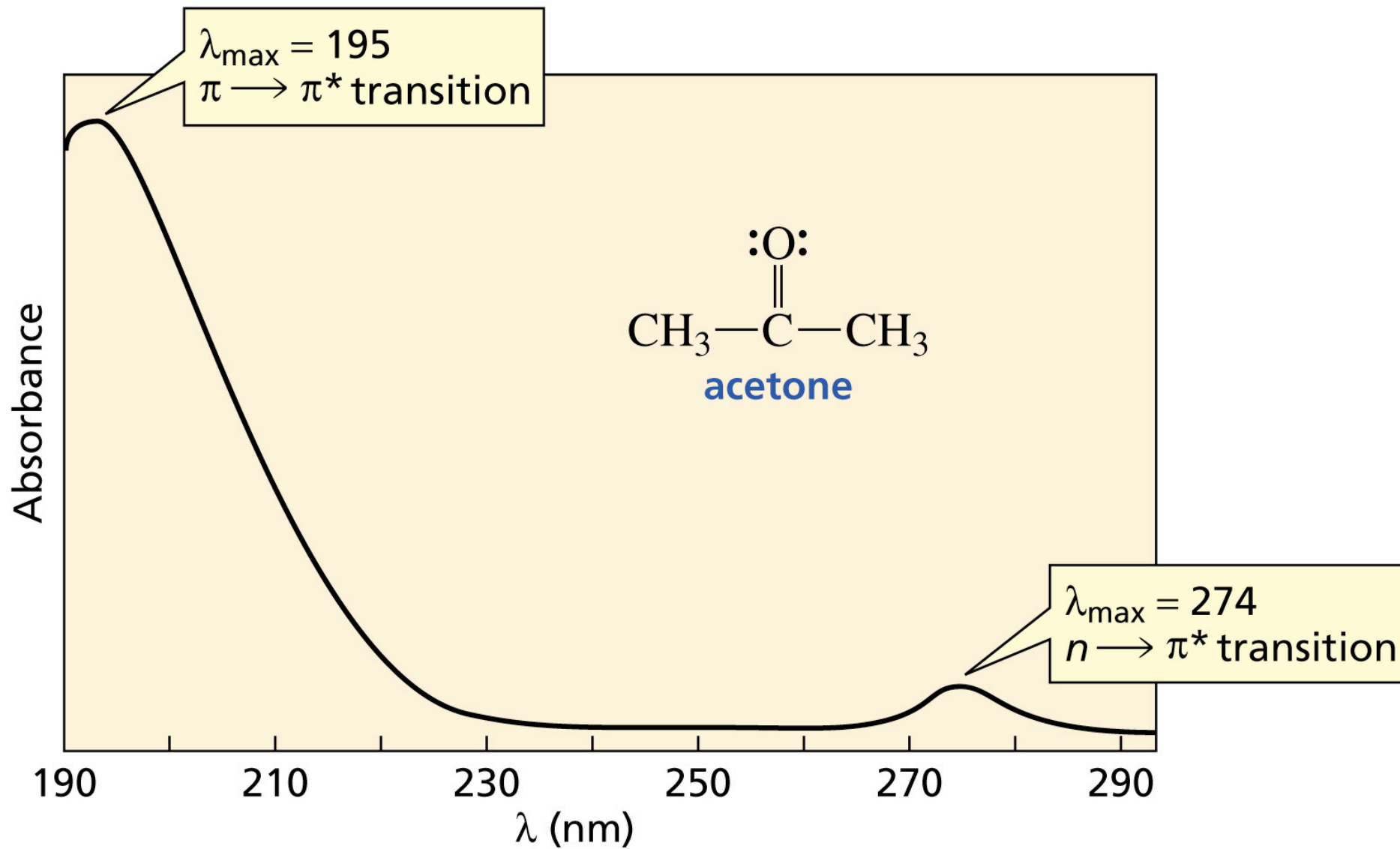
$c$  = kontzentrazioa mol/l.

$l$  = argiak edo erradiazioak, muestra duen ontzian, egiten duen bidea, cm-tan

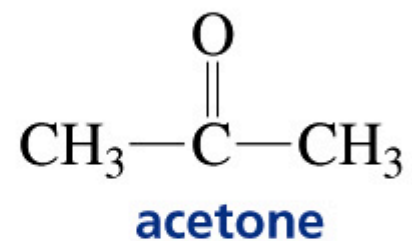
$\varepsilon$  = **absortzio molarra** (edo **coeficiente de absortzio molarreko koefizientea**), ia laginak ze neurritan absorbatzen duen erradiazioa.

.

$\lambda_{\max}$  da laginaren absorzio maximoa ematen duen uhin luzeera

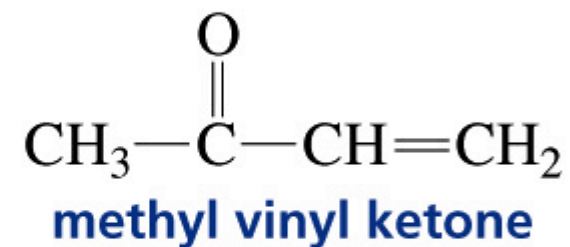


## Konjoazioen eragina $\lambda_{\max}$ -n



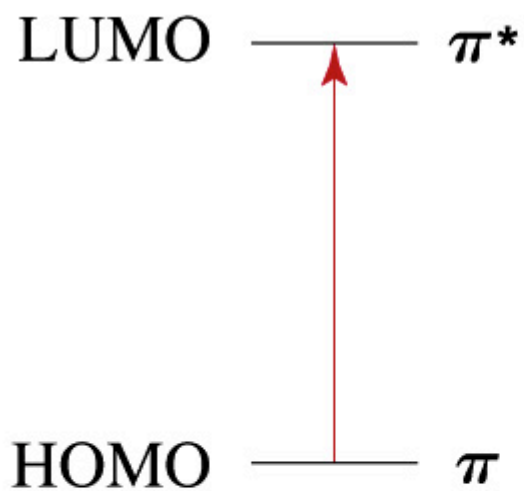
$$n \longrightarrow \pi^* \quad \lambda_{\max} = 270 \text{ nm}$$

$$\pi \longrightarrow \pi^* \quad \lambda_{\max} = 187 \text{ nm}$$

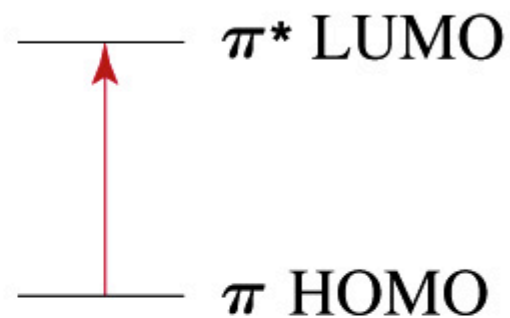
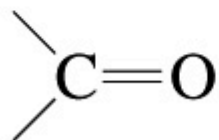


$$\lambda_{\max} = 324 \text{ nm}$$

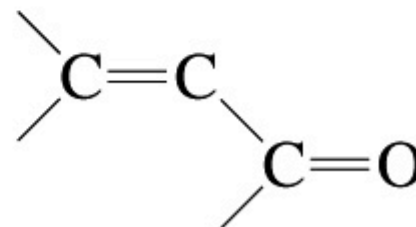
$$\lambda_{\max} = 219 \text{ nm}$$

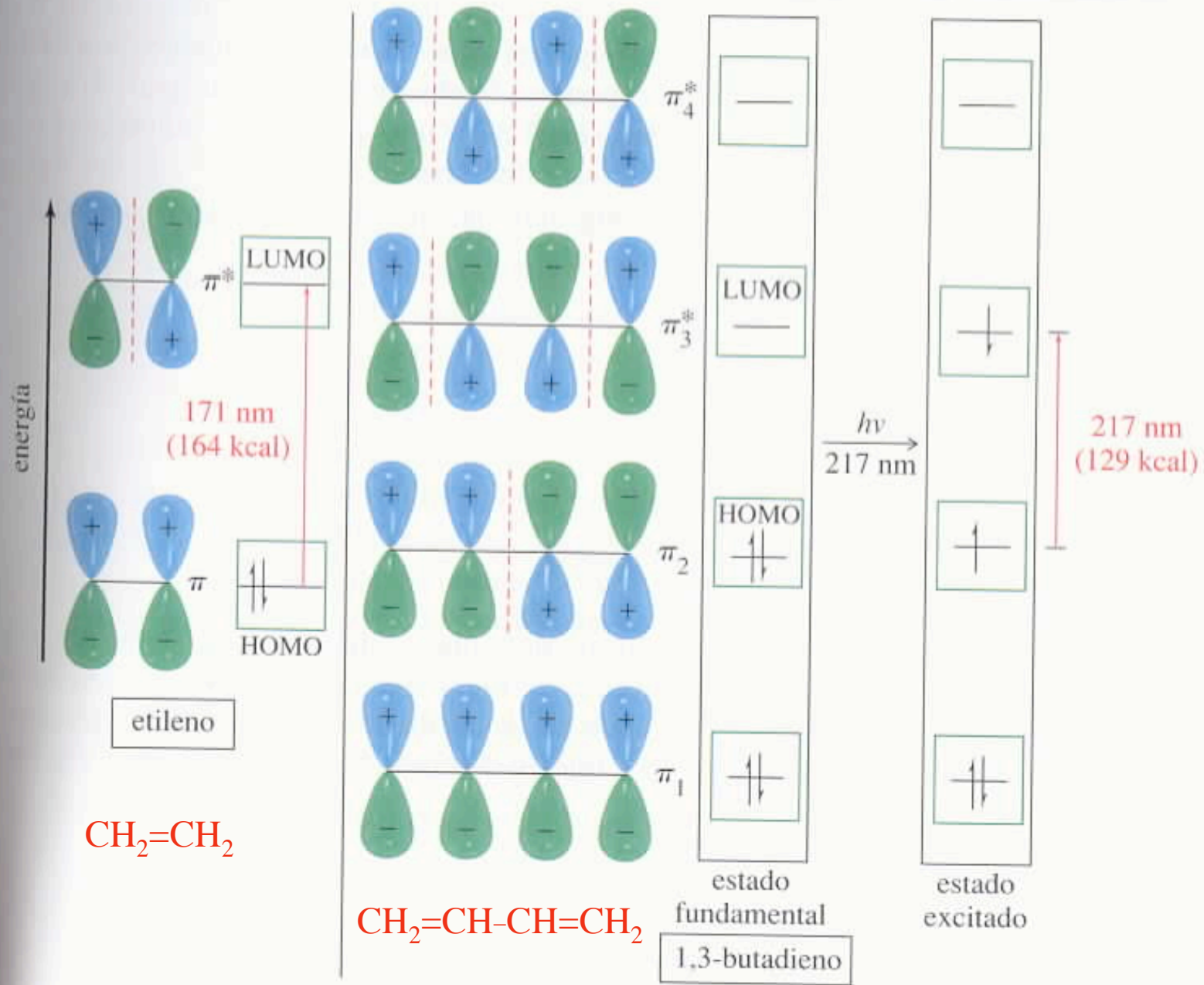


nonconjugated  $\pi$  electrons

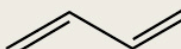






conjugated  $\pi$  electrons

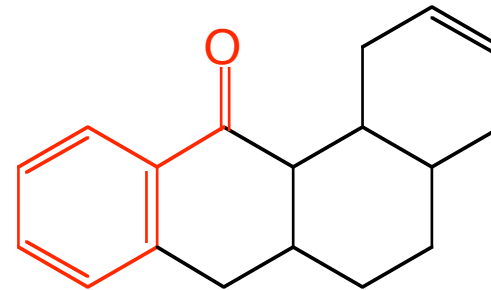
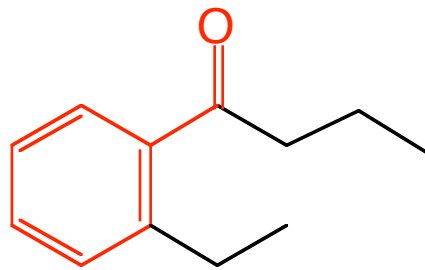
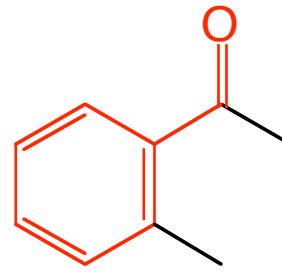
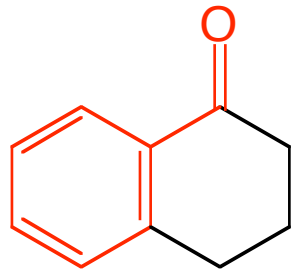




Lotura konjoatuen kopurua igotzen dan arabera  $\lambda_{\max}$  igo egiten da

Compound	$\lambda_{\max}$ (nm)	$\epsilon$
$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$	165	15,000
	217	21,000
	256	50,000
	290	85,000
	334	125,000
	364	138,000

UM/iku. espektroskopian argia absorbatzen duen zatiari **kromoforo** deitzen diogu..

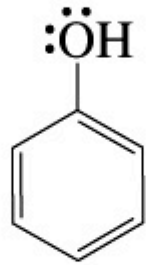


Lau konposatu hauek kromoforo berdina dute eta beren  $\lambda_{\text{max}}$ . Ia berdina da.

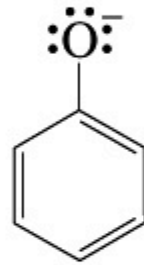
Kromoforo baten  $\lambda_{\max}$ -ren balorea aldatzen duen ordezkatzaileari auxokromoa deitzen zaio.



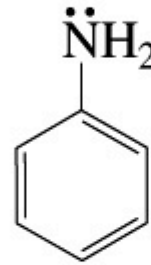
benzene  
255 nm



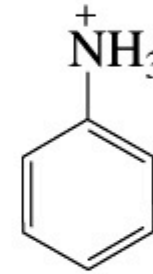
phenol  
270 nm



phenolate ion  
287 nm



aniline  
280 nm



anilinium ion  
254 nm