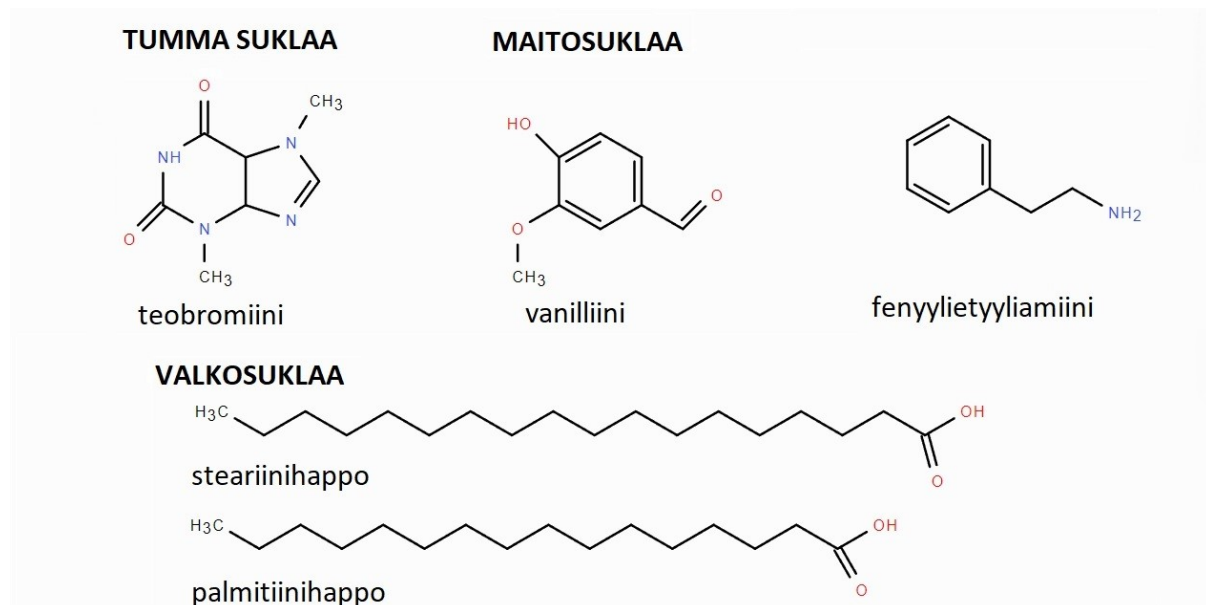


1 Mikä suklaassa maistuu?

Suklaa tehdään sekoittamalla kaakaojauhetta, kaakaovoita ja sokeria sopivassa suhteessa. Kaupassa myydään tummaa, maito- ja valkosuklaata. Tumma suklaa sisältää vähintään 35 % kaakaojauhetta, jossa on runsaasti makua antavaa **teobromiinia** ja aivoissa mielihyvää lisäävää **fenyylietyyliamiinia**. Maitosuklaassa kaakaojauhetta on vähemmän, jolloin siinä maistuu usein suklaamassaan lisätty **vanilliini**. Valkosuklaa sisältää ainoastaan kaakaovoita, sokeria ja maitoa jolloin sen maku tulee lähinnä **steariinihaposta** ja **palmitiinihaposta**.

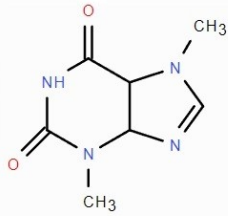
Millaisia toiminnallisia ryhmiä löydätte näiden molekyylien rakenteesta? Mikä on yhdisteiden molekyylikaava?



2 Vesiliukoisuus

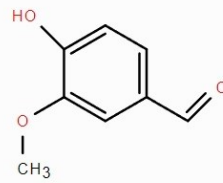
Ovatko yhdisteet vesi- vai rasvaliukoisia?

TUMMA SUKLAA

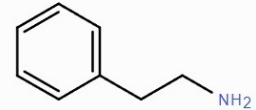


teobromiini

MAITOSUKLAA

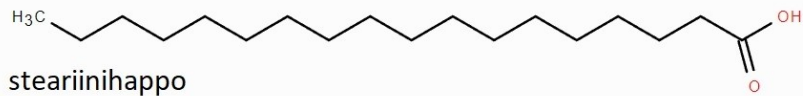


vanilliini

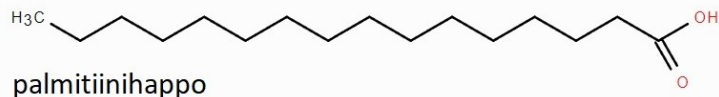


fenyylieetyyliamiini

VALKOSUKLAA



steariinihappo



palmitiinihappo

3 IR spektroskopia

Kemiallisia rakenteita selvitetään usein spektroskopisesti infrapuna-alueella (IR-spektri), koska toiminnalliset ryhmät imevät sidoksiinsa valoa tietyillä taajuuksilla. Usein absorbanssia voi tapahtua usealla eri taajuudella, jolloin IR-spektrin lukeminen vaatii harjoittelua.

Miten pystytte erottamaan molekyylit toisistaan niiden spektrin perusteella? Yrittäkää yhdistää kuvan piikit molekyylien rakenteisiin. Millainen olisi steariinihapon UV-spektri?

4 Massaspektrometria

Massaspektrometriassa laitteeseen eri olomuodoissa syötetty puhdas aine tai aineos pitää saada kaasuksi ja sähköisesti varatuksi (ioneiksi) ennen siirtoa massaspektrometrin sisäosiin tyhjiöön, missä ioneja voidaan erotella kokonaisina molekyylioneina tai jaloakaasuun törmäyttämällä palasiksi hajotettuina eli fragmentti-ioneina. Huomaa, että massaspektrometri ei havaitse varauksettomaksi jäänyttä ainetta lainkaan. Molekyylioni- tai fragmentti-ionit erotellaan magneettikentässä massan ja varauksen suhteen (m/z) mukaisesti, jolloin tulostuvissa kuvissa, eli massaspektreissä, vasemmalle jäävät kevyet, ja oikealle raskaat ionit. Piikkien korkeudet kertovat erimassaisten ionien määrasuhteista.

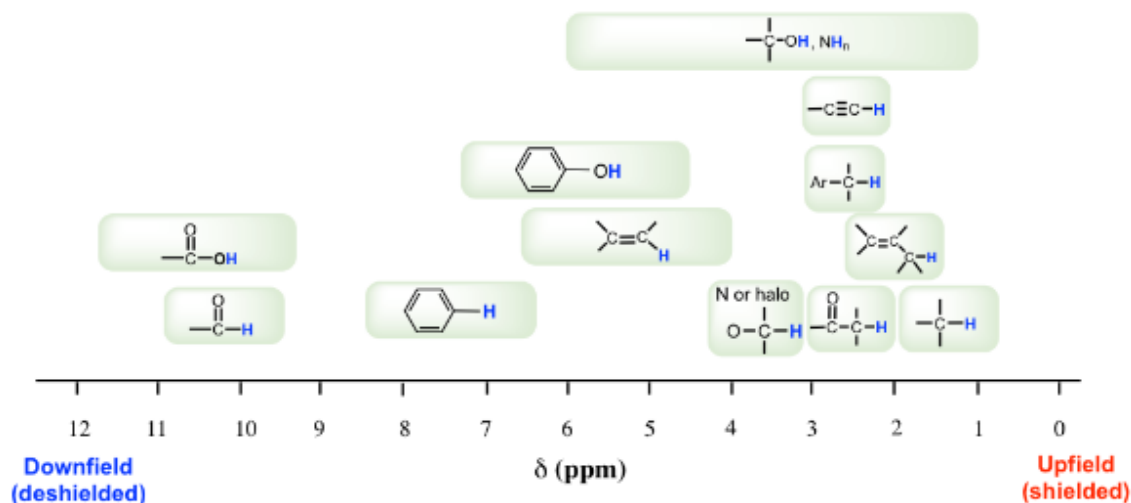
Menetelmän tarkkuus on niin suuri, että molekyylionien m/z -signaalit havaitaan useiden piikkien sarjoina. Tämä johtuu atomien isotoopeista (joissa neutroneita on eri määrä), jotka erottuvat toisistaan. Esimerkiksi hiiltä sisältävien molekyylionien m/z -signaalisarjojen isoimmassa vasemmanpuoleisessa piikissä molekyylionin kaikki hiilet ovat universumimme yleisintä kevyttä hiiliisotoppia (^{12}C), minkä jälkeen seuraavassa piikissä yksi molekyylionin monista hiilistä on harvinaisempaa raskaampaa isotoppia (^{13}C), ja kolmannessa piikissä kaksi hiilistä on raskaampia, mikä on tilastollisesti yhä epätodennäköisempää, ja siksi sarjojen piikkien korkeudet pienevät oikealle (ja myös spektrin molekyylionien tai niiden osien isotooppiikkisarjat voivat joutua osin päällekkäin).

Pohtikaa, mitkä molekyylionien osat aiheuttavat alla olevien kaltaiset massaspektrometriatulokset. Minkälainen olisi steariinihapon massaspektrometri-tulos?

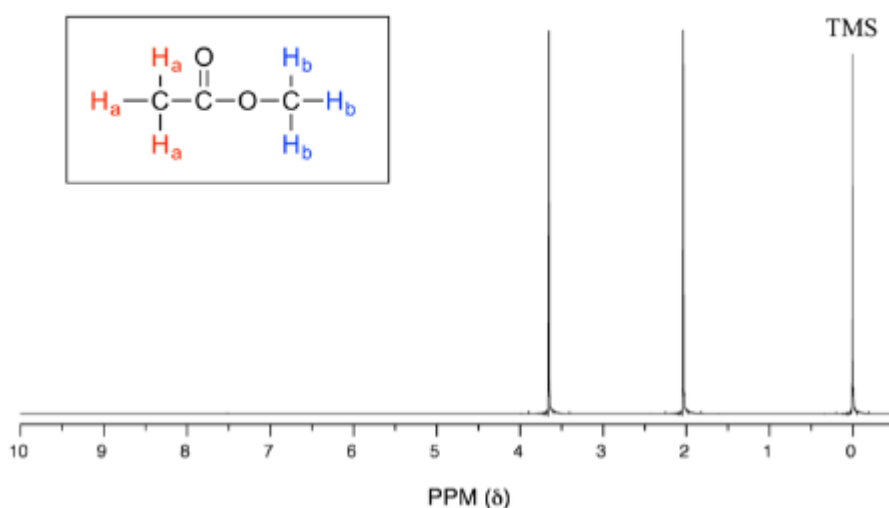
5 Ytimen magneettinen resonanssi

Spektroskooppinen tarkastelu antaa hyvän yleiskuvan molekyylin rakenteesta. Kuitenkin monet IR piikit osuvat samoille aallonpituuksille, joten rakenteen selvitys vaatii myös muita menetelmiä.

Eräs usein käytetty menetelmä mittaa vety- (^1H) tai hiiliatomien (^{13}C) värähtelyjä magneettikentässä. Menetelmää kutsutaan ytimen magneettiseksi resonanssiksi NMR ja sillä voidaan määrittää, millaisessa ympäristössä esim. vetyatomi on: esim. orgaaniseen happoon (COOH) liittynyt vety värähtelee erilaisessa magneettikentässä kuin hiileen liittynyt vety ($-\text{CH}_3$).

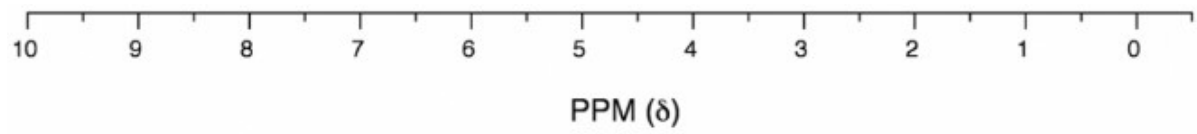


Värähtelyn herkkyys magneettikentälle riippuu vedyn tapauksessa paitsi siitä, millaiseen atomiin se on kiinnittynyt, myös mihin atomeihin tämä atomi on kiinnittynyt. Mikäli usea vety on samanlaisessa paikassa, niiden värähtelyt havaitaan samalla taajuudella.



Esim. metyyliasetaatin metyyliiryhmän (sinisellä) aiheuttavat värähtelyn 3,7 ppm ja asetaattiryhmän (punaisella) 2 ppm:n taajuudella.

Päätelkää, millaisia ^1H -NMR spektrin piikkejä edellä kuvatuissa aineissa voisi esiintyä.



5 Tuntematon suklaanäyte

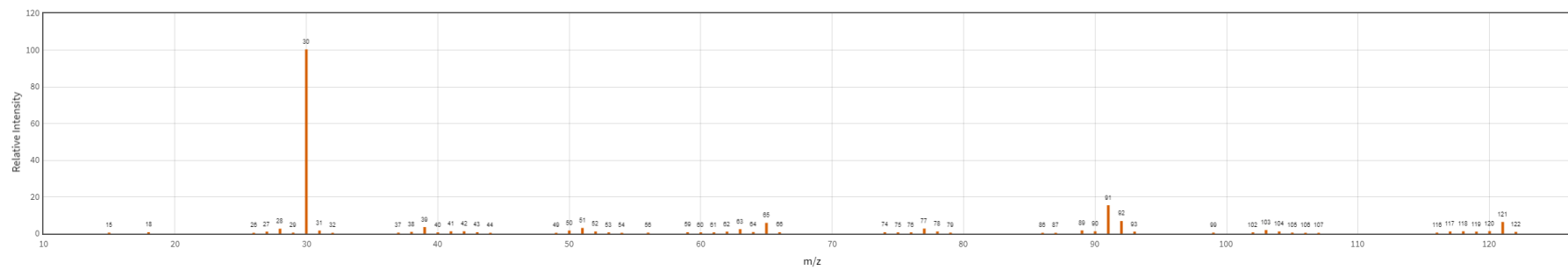
Kaakaon kallistuttua riski väärennöksille on lisääntynyt. Sinulle yritetään myydä suuri erä kallista belgialaista suklaata. Varmistuaksesi sen laadusta haluat testata sen edellä kuvatuilla menetelmillä.

- IR-spektrissä aineen sidokset imevät valoa 1800 ja 2900 cm^{-1} aallonpituudella
- massaspektrometriassa piikkejä esiintyy 40 – 1000 m/z alueella
- NMR:ssä piikit 10,5 ja 1,5 ppm alueella.

Onko kyse laadukkaasta tummasta kaakaosta, kuten sinulle on luvattu?

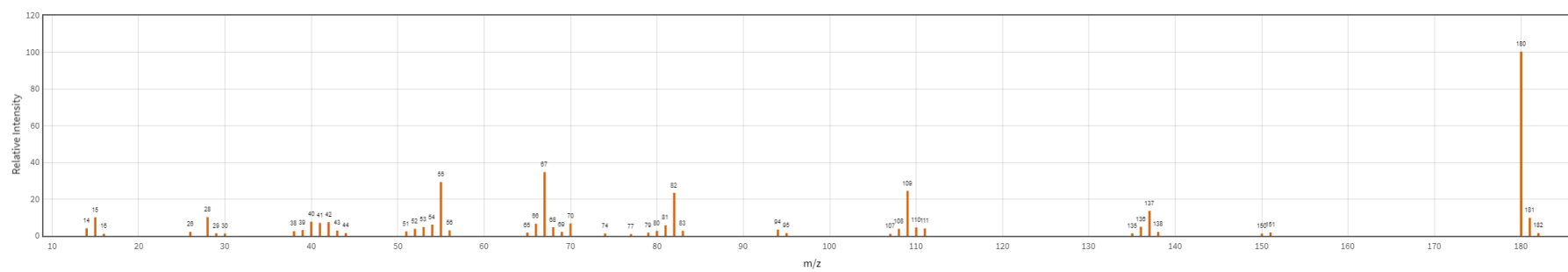
Benzeethanamine

Mass Spectrum



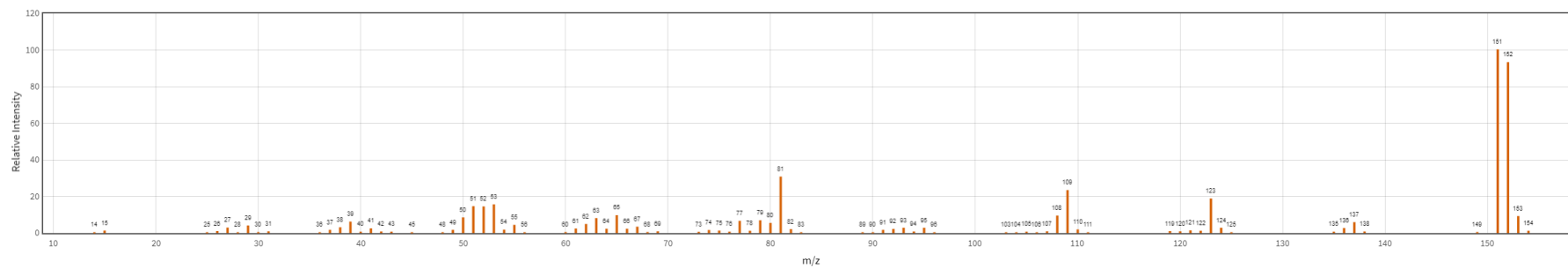
Theobromine

Mass Spectrum



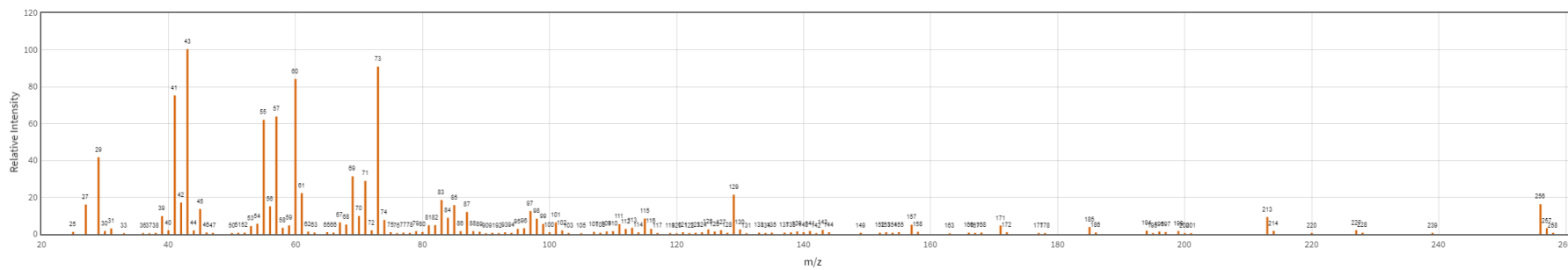
Vanillin

Mass Spectrum

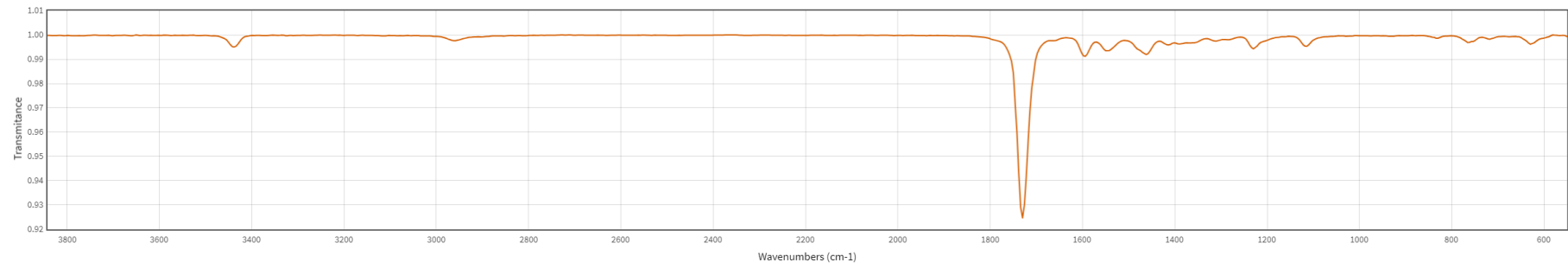


n-hexadecanoic acid

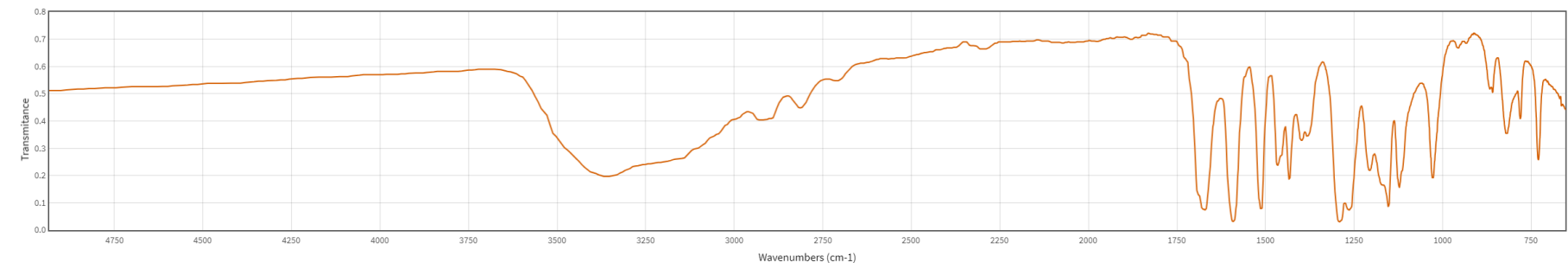
Mass Spectrum



Theobromine
Infrared Spectrum

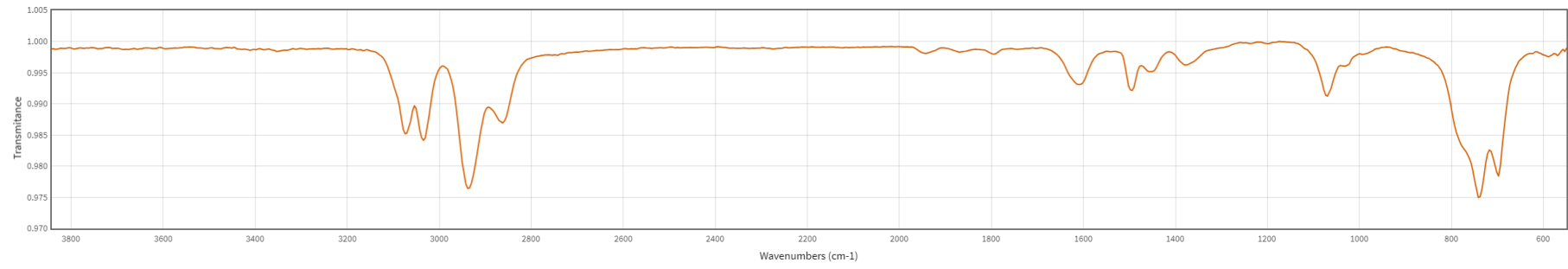


Vanillin
Infrared Spectrum



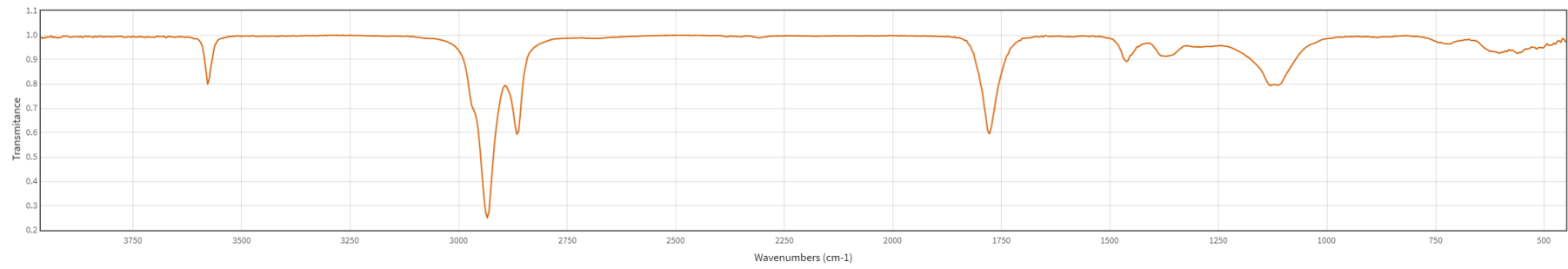
Phenethylamine

Infrared Spectrum



Hexadecanoic acid

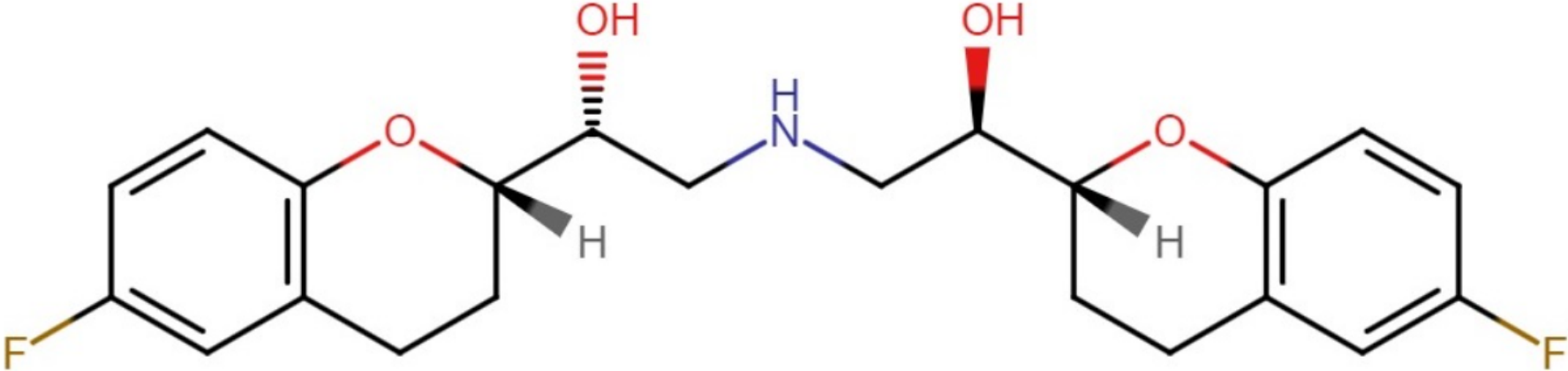
Infrared Spectrum



6 MINDMAP

Veden kemialliset erityispiirteet

Toiminnalliset ryhmät



HCl