



ITÄ-SUOMEN YLIOPISTO  
*Luonnontieteiden ja  
metsätieteiden tiedekunta*

# ANALYYTTINEN SPEKTROSKOPIA LUKION KEMIAN OPPIMÄÄRÄSSÄ

Pertti Keinänen

Pro gradu -tutkielma

Kemian laitos

Opettaja

408/2012

# **ANALYYTTINEN SPEKTROSKOPIA LUKION KEMIAN OPPIMÄÄRÄSSÄ**

## **ANALYTICAL SPECTROSCOPY IN UPPER SECONDARY SCHOOL CHEMISTRY SYLLABUS**

### **PERTTI KEINÄNEN**

**OHJAAJAT: LEILA ALVILA, JANNE JÄNIS, JAANA PAKARINEN, KARI SORMUNEN**  
**25.4.2012**

---

## **TIIVISTELMÄ**

Spektroskooppiset menetelmät ovat olleet rakenneanalyysin keskeisimpiä menetelmiä jo vuosikymmenien ajan. Kymmenistä spektroskooppisista menetelmistä keskeisimpiin kuuluvat ultravioletti- ja näkyvän valon spektrometria (UV/VIS), infrapunaspektrometria (IR), massaspektrometria (MS) ja ydinmagneettinen resonanssispektrometria (NMR). Opetushallituksen muotoilemissa lukiokoulutuksen opetussuunnitelman perusteissa Kemian mikromaailma-kurssin yhdeksi tavoitteeksi asetetaan rakenneanalyysissä käytettävien menetelmien tunteminen. Kyseisen kurssin lukion oppikirjoissa esitelläänkin spektroskopiaa.

Tutkielmassani olen käsitellyt menetelmiä UV/VIS, IR, MS ja NMR. Näiden menetelmien periaatteita ja näihin menetelmiin liittyviä kemian teorioita ja ilmiöitä olen pyrkinyt esittelemään hieman syvällisemmin kuin lukiolaisen on tarpeen ymmärtää. Lisäksi olen tarkastellut sitä, millaiset tiedot opiskelijalla tulisi olla ennen spektroskopiaan perehtymistä.

Aineiston kokoamiseksi kävin läpi kaikki käytössä olevat lukion oppikirjat. Oppikirjasarjoja on viisi ja lisäksi perehdyin yhteen ylioppilaskirjoituksiin valmistavaan oppikirjaan. Tutkimukseni aineistoon valikoitui yksitoista lukion oppikirjaa, joista viisi on tehty Kemian mikromaailma-kurssia varten. Tutkin spektroskooppisen käsittelyn laatua kirjoissa muun muassa menetelmällisen kattavuuden, asiayhteyden, selkeäkielisyyden ja havainnollistamisen suhteen.

Oppikirjasarjoissa spektroskooppinen tieto esitellään valtaosaltaan Kemian mikromaailma kurssin eli lukion toisen kurssin kirjoissa. Kuitenkin näissä kirjoissa esiintyy runsasta laadullista ja määrällistä vaihtelua spektroskooppisen tiedon esittelyssä. Muissa oppikirjoissa spektroskopia jää marginaaliin tai kokonaan käsittelemättä. Spektroskopia on kaikissa oppikirjoissa jäänyt muusta opiskeltavasta aineistosta jokseenkin irralliseksi osa-alueeksi.

Sekä lukiokoulutuksen opetussuunnitelman perusteiden mukaan että alan tutkimuksellisen merkittävyyden perusteella spektroskopia tulisi suoda nykyistä suurempi näkyvyys lukio-oppikirjoissa. Samasta syystä ylioppilaskokeissa spektroskooppisen osaamisen arviointia tulisi lisätä.

# SISÄLLYSLUETTELO

Tiivistelmä .....	1
Sisällysluettelo .....	2
Lyhenteet.....	3
1 Johdanto .....	4
2 Kemia spektroskopian taustalla.....	6
2.1 Johdatus spektrokopiaan.....	6
2.2 Ultraviolettisektrometria ja näkyvän valon spektrometria.....	8
2.3 Infrapunasektrometria .....	9
2.4 Massasektrometria.....	11
2.5 Ydinmagneettinen resonanssispektrometria.....	12
2.6 Opiskelijalta vaadittava pohjatieto ennen spektrokopiaan perehtymistä.....	15
3 Havaintoja lukion oppikirjoista.....	16
3.1 Spektrokopia lukiokoulutuksen opetussuunnitelman perusteissa .....	16
3.2 Spektrokopiaa käsittelevät oppikirjat .....	17
3.3 Spektrokopia lukion 2. kurssin kirjoissa .....	18
3.4 Spektrokopia muissa kuin 2. kurssin kirjoissa .....	21
4 Oppikirjojen kritiikki ja osaamisen arviointi .....	22
4.1 Yleishuomioita oppikirja-analyysistä.....	22
4.2 Opiskelijan ensikohtaaminen spektroskopian kanssa 2. lukiokurssin oppikirjoissa.	23
4.3 Tavoitteiden, oppikirjojen ja arvioinnin yhteislinjaisuus.....	25
5 Yhteenveto, rajoitukset ja suositukset.....	27
Liitteet .....	29
Lähteet.....	32
Aineistoluettelo .....	34

## LYHENTEET

AAS	Atomiabsorptiospektrometria (Atomic Absorption Spectrometry)
IR	Infrapunspektrometria (Infra Red spectrometry)
MS	Massaspektrometria (Mass Spectrometry)
NMR	Ydinmagneettinen resonanssispektrometria (Nuclear Magnetic Resonance spectrometry)
UV	Ultraviolettispektrometria (Ultra Violet spectrometry)
VIS	Näkyvän valon spektrometria (VIsible Spectrometry)

# 1 JOHDANTO

Spektroskopia määritellään aineen ja sähkömagneettisen säteilyn välisen vuorovaikutuksen tutkimiseksi. Menetelmiä on monenlaisia, mutta yleensä näytettä säteilytetään ja näytteen läpäisseen säteilyn määrää mitataan sen aallonpituuden funktiona. Toisin kuin useimmissa kemiallisissa testeissä, spektroskooppisissa tutkimuksissa näytteelle ei aiheudu vahinkoa.<sup>1</sup> Spektroskooppisilla menetelmillä saadaan tehokkaasti hyvin olennaista tietoa tuntemattoman yhdisteen rakenteesta.<sup>2,3</sup> Opiskeltaessa spektroskopiaa modernien tekniikoiden ja niiden tuottamien spektrien käsittely jo aiheeseen johdateltaessa lisää opiskelijoiden motivaatiota ja ymmärrystä.<sup>4</sup>

Tavoitteenani oli selvittää, opetetaanko suomalaisissa lukioissa analyttistä spektroskopiaa osana kemian opetusta, ja jos opetetaan, millaista opetus on. Toinen kysymys on luonnollisesti se, onko analyttisen spektroskopian opettamiselle lukioissa perusteita, ja jos on, millaista opetuksen tulisi olla. Niin Suomessa kuin muissakin maissa spektroskopiaa opetetaan uutena asiana yliopistoissa.<sup>5</sup> Suomalaisia lukioiden oppikirjoja tarkastellessa käy kuitenkin ilmi, etteivät kaikki opiskelijat tule yliopistoihin ilman pohjatietoa. Yliopistoissa spektroskopiaa voidaan opettaa jo ensimmäisen vuoden opiskelijoille jakamalla kurssi luento- ja laboratoriotyöskentelyyn.<sup>6</sup> Suomalaisissa lukioissa ei ole spektrometrejä, joten on etsittävä vaihtoehtoisia tapoja opettaa spektroskopiaa.

Itä-Suomen yliopiston kemian laitoksen opetuksen kannalta on tärkeää tietää, miten lukioissa analyttistä spektroskopiaa käsitellään vai käsitelläänkö sitä ollenkaan. Minulle henkilökohtaisesti tutkimukseni merkitsee mahdollisuutta perehtyä spektroskopiaan opetuksellisesta näkökulmasta ja kenties näin saada ammatillisia valmiuksia tulevassa työssäni kemian opettajana. Myös spektroskopia kemian osa-alueena kiinnostaa minua poikkeuksellisen paljon, koska se tekee näkymättömästä näkyvää, on tarpeeksi monimutkaista älyllisesti ja samalla loogista ja hyvin täsmällistä. Tiiviisti ilmaistuna tutkimuksen merkitys on minulle ammatillinen ja kemian laitokselle kehityksellinen.

Opetushallituksen vuonna 2003 muotoilemat lukiokoulutuksen opetussuunnitelman perusteet<sup>7</sup> linjaavat, millaista lukio-opetuksen tulisi olla. Lukiokoulutuksen opetussuunnitelman perusteissa määritellään melko ylimalkaisesti opetuksen tavoitteet ja keskeisimmät sisällöt kurssikohtaisesti. Kuitenkin myös sinänsä spesifinen aihe, analyttinen spektroskopia, on löydettävissä laajempien otsakkeiden alta. Suunnitelmien mukaan vuonna 2016 tulevat käyttöön uudet lukiokoulutuksen opetussuunnitelman perusteet.<sup>8</sup>

Selvittääkseni analyttisen spektroskopian opetusta lukioissa valtakunnallisella tasolla tarvitsin tietysti valtakunnallisen tason aineistoa. Ajattelin saavani helpoimmin tietoa lukio-opetuksesta tutkimalla lukio-opetuksessa käytettäviä oppikirjoja. Tietenkään oppikirjasarjoja tutkimalla ei saada eksaktia vastausta tutkimusongelmaani, mutta

välillisesti tämä menettelytapa kuitenkin tuottaa merkittävää tietoa, sillä oppikirjat ovat opiskelun pohja lukioluokassa ja itsenäisessä opiskelussa.

Kävin läpi kaikki saatavilla olevat lukion kemian oppikirjasarjat. Löysin lisäksi yhden ylioppilaskirjoituksiin valmistautumista varten tehdyn teoksen ja otin myös sen mukaan tarkasteluun, vaikka sitä ei todennäköisesti opetuksessa käytetäkään. Tarkastelemani oppikirjasarjat ovat Kemisti (WSOY), Kide (Otava), Mooli (Otava), Neon (Edita) ja Reaktio (Tammi). Ylioppilaskirjoituksiin valmentavan kirjan nimi on Abi kemia (Otava). Tutkin kirjoja sisällysluetteloita ja hakemistoja lukemalla sekä selaamalla kirjoja. Otin jatkotarkasteluun kaikki ne kirjat, joissa oli vähäinenkin maininta spektroskopiasta yleensä tai jostakin spektroskooppisesta menetelmästä. Näistä kirjoista tutkin muun muassa spektroskooppisen tarkastelun sijaintia kirjassa, asiayhteyttä, menetelmällistä kattavuutta ja havainnollisuutta.

Analyttisen spektroskopian menetelmiä on kymmeniä. Tässä tutkimuksessa perehdytään kuitenkin vain pieneen joukkoon yleisimpiä menetelmiä, sillä kehyksenä tässä tutkimuksessa on lukiotason tietämys. Käsittelyyn otetut menetelmät on rajattu yhtäältä sen mukaan, mitä lukion oppikirjoissa spektroskooppisiksi menetelmiksi on mainittu, ja toisaalta sen mukaan, mitä spektroskooppisia menetelmiä Itä-Suomen yliopiston Joensuun kemian laitoksella aktiivisesti käytetään. Tämän rajauksen pohjalta likeisimpään tarkasteluun päätyvät infrapunaspektrometria (IR), ydinmagneettinen resonanssispektrometria (NMR) ja massaspektrometria (MS). Lisäksi joissakin oppikirjoissa mainitaan muutamia menetelmiä, joissa käytetään näkyvää valoa tai ultraviolettisäteilyä (UV/VIS), joten lienee paikallaan tehdä pikakatsaus myös niihin.

Tutkielmani rakentuu viidestä osasta. Johdannossa olen kuvannut tutkimuksen taustajatuksia tutkimusongelmasta ja -aineistosta aineistoanalyysiin ja tutkimuksen merkitykseen. Seuraavassa luvussa Kemia spektroskopian taustalla käsittelen spektroskopiaa kemian osa-alueena, spektroskooppisia menetelmiä ja sitä, millaisia ilmiöitä opiskelijan olisi ymmärrettävä, jotta hän voi ymmärtää spektroskopiaa. Kolmas luku sisältää oppikirja-analyysin havainnot. Neljännessä luvussa lähestyn oppikirja-analyysin tuloksia tulkinnallisesti ja luon myös katsauksen spektroskooppisen tiedon hallinnan arvioimiseen kemian ylioppilaskokeiden kautta. Viimeisessä luvussa kokoan yhteen tutkimuksessani esiin piirtyneet suuntaviivat spektroskopian opetuksen sisällöstä ja esitän suosituksia oppikirjojen kehittämistä näiden suuntaviivojen perusteella. Lisäksi esittelen tutkimukseni rajoitukset.

## 2 KEMIA SPEKTROSKOPIAN TAUSTALLA

Spektroskooppiset menetelmät ovat tärkeä osa modernia kemian ja fysiikan tutkimusta. Erityisen käytettyjä ja tehokkaita ne ovat molekyyliarakenteiden määrittämisessä. Lisäksi joillakin menetelmillä voidaan mitata molekyylin tai atomin pitoisuus näytteessä.<sup>9a</sup>

### 2.1 JOHDATUS SPEKTROSKOPIAAN

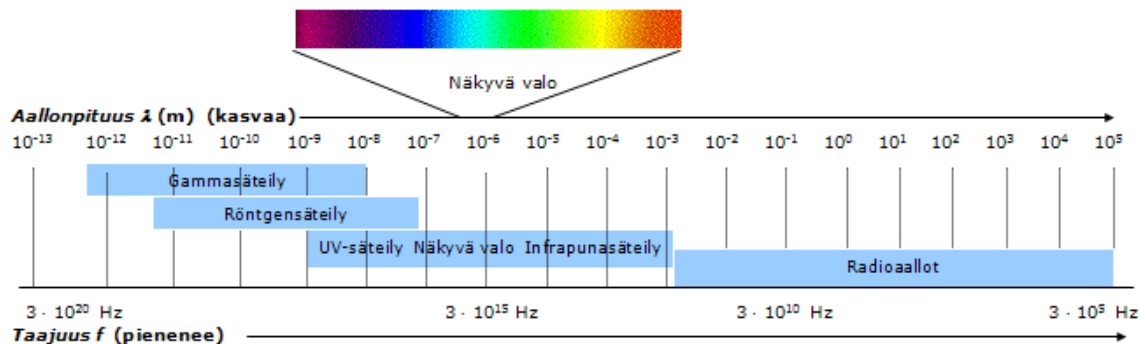
Spektroskopiassa on kysymys aineen ja sähkömagneettisen säteilyn vuorovaikutuksesta. Tutkittavaa ainetta voidaan säteilyttää, jolloin osa säteilystä imeytyy eli absorboituu aineeseen, tai aine voidaan saada lähettämään eli emittoimaan säteilyä. Aineen läpi kulkenut tai aineesta tuleva säteily kertoo aineen rakenteesta ja/tai määrästä.<sup>9a</sup> Vaikka massaspektrometriassa ei tapahdukaan sähkömagneettisen säteilyn absorptiota eikä emissiota, luetaan se kuitenkin kuuluvaksi spektroskooppisiin menetelmiin.<sup>10a</sup>

Taulukoon 1 on koottu eri säteilylajit, säteilyn alkuperä, aallonpituus ja spektrometrian laji, jossa kyseistä säteilyä käytetään. Spektroskopian lajit on järjestetty menetelmissä käytettyjen aallonpituuksien mukaan. Massaspektrometria luonnollisesti puuttuu taulukosta, sillä siinä ei käytetä sähkömagneettista säteilyä lainkaan.

**Taulukko 1.** Sähkömagneettinen säteily ja spektrometrian laji<sup>11</sup>

Säteilylaji	Säteilyn alkuperä	Aallonpituus, $\lambda$	Spektrometrian laji
Gammasäteily	Atomin ydinprosessit	< 0,1 nm	Gammasädespektrometria
Röntgensäteily	Sisäkuorella olevien elektronien siirtymiset	0,01 – 2,0 nm	Röntgenfluoresenssi-spektrometria
UV-säteily	Ulkokuorella olevien elektronien siirtymiset	2,0 – 200 nm	Vakuumiultravioletti-spektrometria
UV-VIS -säteily	Atomin sisä- ja ulkokuorella olevien elektronien siirtymiset	200 – 800 nm	UV-VIS -spektrometria
IR-säteily	Molekyylien värähdykset ja pyörimiset	0,8 – 300 $\mu$ m	IR- ja ramanspektrometria
Mikroaallot	Molekyylien pyörimiset	1 mm – 30 cm	Mikroaaltospektrometria
Radioaallot	Atomiytimen pyöriminen magneettikentässä	0,6 – 10 m	Ydinmagneettinen resonanssispektrometria, NMR

Kuva 1 helpottaa hahmottamaan eri säteilylajit sähkömagneettisen säteilyn skaalassa. Samalla paljastuu eri säteilylajien suhde toisiinsa; kysymys on pohjimmiltaan yhdestä ainoasta ilmiöstä, jonka ominaisuudet muuttuvat. Lisäksi kuva muistuttaa näkyvän valon olevan hyvin pieni osa sähkömagneettisen säteilyn skaalaa.



**Kuva 1.** Sähkömagneettisen säteilyn aallonpituus ja taajuus<sup>11</sup>

Sähkömagneettisella säteilyllä on aallonpituus ( $\lambda$ ) ja taajuus ( $\nu$ ). Aallonpituuden ja taajuuden suhde toisiinsa on seuraavanlainen:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} ,$$

jossa  $c$  on valon nopeus. Sähkömagneettisen säteilyn energia ( $E$ ) on siten

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} ,$$

jossa  $h$  on Planckin vakio. Joten, jos tiedetään säteilyn taajuus tai aallonpituus, myös säteilyn energia tiedetään. Spektroskopiassa käytetään yleisesti termiä aaltoluku ( $\bar{\nu}$ ), joka tarkoittaa aallonpituuden käänteisarvoa ( $\frac{1}{\lambda}$ ). Sen yksikkö on  $\text{cm}^{-1}$ .<sup>1</sup>

Spektroskopian ilmiöitä voidaan selittää kvanttiteorialla, jolloin sähkömagneettisen säteilyn ajatellaan koostuvan valon nopeudella kulkevista fotoneista tai kvanteista, keskenään samankokoisista pakkauksista puhdasta energiaa. Vaikka tietyssä säteilyn lajissa fotonien energiat ovat keskenään yhtä suuret, säteilystä toiseen siirryttäessä fotonien energia muuttuu. Mitä lyhyempi on säteilyn aallonpituus (samalla siis korkeampi frekvenssi eli taajuus), sitä suurempi on yksittäisen fotonin energia.<sup>5h</sup> Fotonin energiasta taas riippuu, millaisia muutoksia se saa näytemolekyylissä aikaan. Fotonin ja molekyylin törmäyksen johdosta jokin näytteen elektroneista voi siirtyä väliaikaisesti ylemmälle energiatasolle tai molekyylin rakenteessa voi tapahtua värähdyksiä ja kiertymisiä.<sup>9b</sup>

Mitä enemmän säteily kuljettaa energiaa tietyssä aikayksikössä, sitä suurempi on sen intensiteetti. Koska osa kvantittuneesta energiasta imeytyy näytemolekyyliin, näytteen läpi tulevan säteilyn intensiteetti on pienempi kuin näytteeseen ohjatun säteilyn intensiteetti. Absorptiospektroskopia perustuu tämän intensiteetin muutoksen mittaamiseen.<sup>13e</sup>



Spektroskooppiset menetelmät ovat syntyneet osana tieteen kehitystä tietyssä paikassa tiettyyn aikaan. Tässä nostan esiin eri menetelmien historiaa. Samalla kronologinen järjestys määrää myös menetelmien käsittelyjärjestyksen kirjoitelmassani. Spektroskopian kehityksen voidaan sanoa alkaneen vuonna 1758, sillä silloin Andreas Sigismund Marggraf havaitsi, että natriumin ja kaliumin suolat tuottavat erivärisen liekin. Vuonna 1860 Robert Bunsen ja Gustav Robert Kirchhoff valmistivat ensimmäisen ”spektroskoopin” (termillä tarkoitetaan atomin emissioon perustuvaa menetelmää). Spektroskoopissa oli Bunsenin kehittämä vähävaloinen kaasuliekki. Liekin avulla näyte saatiin emittoimaan säteilyä, joka ohjattiin prismaan. Muodostuneet spektriviivat havaittiin suolassa olevalle metallille luonteenomaisiksi. Pian kumouksellinen menetelmä johti monien uusien alkuaineiden jäljille; cesium löydettiin vuonna 1860, rubidium ja tallium vuonna 1861 ja indium vuonna 1863.<sup>12a</sup>

William Herschel keksi infrapunavalon jo vuonna 1800, mutta W. de W. Abney ja E. R. Festling ryhtyivät ensimmäisinä systemaattiseen aineiden infrapunasäteilyn absorptiokyvyn tutkimiseen vuonna 1881. Seuraavien kolmenkymmenen vuoden aikana kerätyn aineiston perusteella laadittiin korrelaatiotaulukoita, joiden avulla tuntemattoman molekyylin rakenteellisia ominaisuuksia voitiin määrittää.<sup>12b</sup> Massaspektrometri on kehitetty Francis William Astonin 1919 kehittämän massaspektograafin pohjalta.<sup>12c</sup> Aluksi näitä laitteita käytettiin vain isotooppien massojen ja niiden suhteellisen runsauden määrittämiseen. Tutkittavalle aineelle luonteenomaista fragmentaatiokuvaota hyödynnettiin ensimmäisen kerran 1940-luvulla öljyteollisuudessa. Toisen maailmansodan päätyttyä Felix Bloch ja Edward Mills Purcell löysivät toisistaan riippumatta ydinmagneettisen resonanssin. Rex Richards havaitsi etanolin NMR-spektristä kolme erilaista piikkiä eli kemiallista siirtymää.<sup>12d</sup>

## 2.2 ULTRAVIOLETTISPEKTROMETRIA JA NÄKYVÄN VALON SPEKTROMETRIA

UV-spektrometriaa voidaan käyttää kaksoissidossysteemien ja vapaiden elektronien havaitsemiseen yhdisteistä. Mikäli laitteen resoluutio on korkea, voidaan yhdiste jopa tunnistaa spektristä. Tällä menetelmällä ei siis voida havaita  $\sigma$ -sidoksellisia molekyyliä tai molekyylin osia. Käytetyn säteilyn aallonpituus vaihtelee 200 ja 800 nm välillä. Menetelmä perustuu säteilyn absorptioon mittaamiseen. Absorboituva säteily virittää jonkun ulkoelektroneista korkeammalle energiatasolle. Absorptiosta ei kuitenkaan saada selviä erillisiä signaaleja spektrille säteilyn aallonpituutta muuttamalla, sillä näytemolekyylien luontaisen värähtelyn vuoksi elektronin virittämiseen tarvittava energia (siten myös tarvittava säteilyn aallonpituus) vaihtelee suuresti.<sup>9c</sup>

Atomiabsorptiospektrometria (AAS) soveltuu erityisesti metallipitoisuuksien määrittämiseen liuoksista. Käytetty säteily on UV-säteilyä. Kun näyteliuos viedään liekkiin, se höyrystyy. Höyrystyneet metalliatomit absorboivat säteilyä niille ominaisella aaltoluvulla. Absorptio saa aikaan metalliatomien uloimpien elektronien virittymistä. Detektori mittaa absorptiota ja absorptio on suoraan verrannollinen

atomien tiheyteen liekissä. Koska eri atomit absorboivat eri taajuisia säteilyä, näytettä ei välttämättä tarvitse esikäsitellä.<sup>9d</sup>

Kolorimetrialla voidaan tutkia värillisten yhdisteiden tai jossakin reaktiossa värillisiä yhdisteitä tuottavien yhdisteiden pitoisuuksia liuoksissa. Säteilynä käytetään näkyvän valon tiettyä aallonpituusaluetta. Menetelmässä mitataan valon absorptiota näyteliuokseen ja verrataan tulosta pitoisuuksiltaan tunnettujen standardiliuosten absorptioon.<sup>10b</sup>

Polarimetrialla voidaan määrittää optisesti aktiivisen yhdisteen konsentraatio liuoksessa. Sähkömagneettisen säteilyn aallonpituus on näkyvän valon alueella (n. 500 nm). Valo on kuitenkin tasopolarisoitua valoa. Optisesti aktiiviset yhdisteet kääntävät polarisaation tasoa myötä- tai vastapäivään. Optisen aktiivisuuden syy on niin sanottu kiraalinen atomi, joka on usein hiiliatomi. Kiraalinen atomi tarkoittaa atomia, johon on liittynyt neljä keskenään erilaista ryhmää. Menetelmällä ei tuoteta minkäänlaista spektriä vaan polarisaation tason kiertymää mittaamalla saadaan tietoa näytemolekyylistä ja sen konsentraatiosta.<sup>9e</sup>

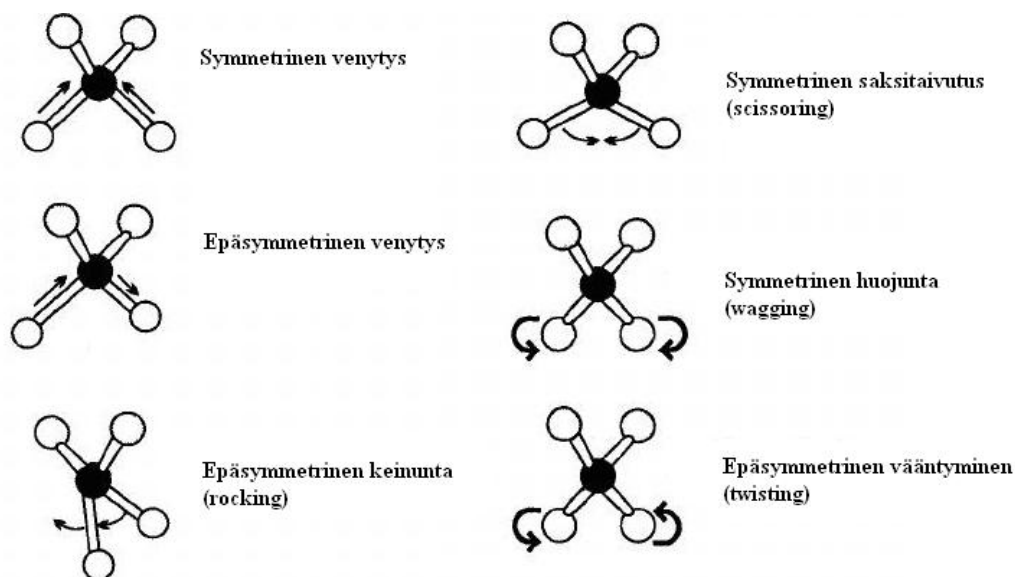
## 2.3 INFRAPUNASPEKTROMETRIA

IR soveltuu erityisen hyvin orgaanisten molekyylien rakenteiden selvittämiseen. Se on nopea menetelmä, joka ei tuhoa näytettä. Termi infrapunasäteily viittaa sähkömagneettisen säteilyn siihen alueeseen, joka jää näkyvän valon ja mikroaaltojen väliin. Tavallisimmin IR-spektrometrit toimivat kuitenkin tätä pienemmällä aallonpituusalueella 4000–400 cm<sup>-1</sup>.

Molekyylit värähtelevät luonnostaan tietyllä taajuudella. Jotta näytteeseen tuotu säteily voisi absorboitua, täytyy säteilyn värähdellä samalla taajuudella kuin näytemolekyylillä luonnostaan värähtelee. Muun taajuinen säteily kulkeutuu näytteen läpi. Absorboitu säteilyenergia voimistaa näytemolekyylin värähtelyä. Tietyn värähtelytaajuuden lisäksi molekyylissä on oltava sähköinen dipoli, jotta säteily voisi absorboitua. Absorboituessaan säteily muuttaa dipolin polaarisuutta hetkellisesti, joten dipolin muodostavien atomien sijainti toisiinsa nähden muuttuu hetkellisesti. Tätä muutosta ja paluuta normaalitilaan kutsutaan värähdykseksi.<sup>9f</sup>

IR-säteilyn molekyylissä aikaansaamat värähdykset voidaan jakaa karkeasti kahteen pääluokkaan: venytyksiin ja taivutuksiin. Venytyksiä on kahdenlaisia. Symmetrisissä venytyksissä kaikki tietyn atomin sidokset muihin atomeihin venyvät tai kutistuvat samanaikaisesti. Epäsymmetrisissä venytyksissä taas tietyn atomin sidokset muihin atomeihin venyvät ja kutistuvat eritahtisesti. Taivutukset puolestaan voivat tapahtua neljällä tavalla. Kaksi samaan atomiin liittynyttä atomia voivat taipua toisiaan kohti ja erilleen saksimaisesti (scissoring). Molekyylin osa voi heilua – kuten keinutuoli lattialla - molekyylin tasossa (rocking) tai molekyylin tasosta poiketen (wagging). Molekyylin osa voi kiertyä sen sidoksen suhteen, joka yhdistää sen loppuosaan molekyyliä

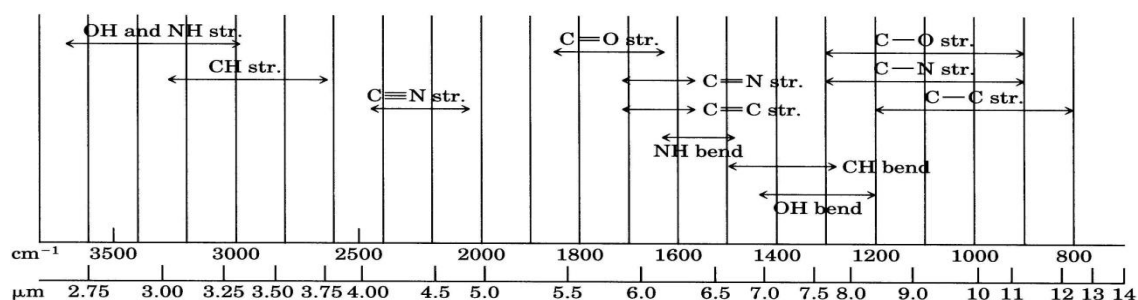
(twisting). Kaikki nämä värähdykset voivat sitoa säteilyä ja täten jättää jälkensä IR-spektriin.<sup>10c</sup> Olen havainnollistanut säteilyn aikaansaamia mahdollisia venytyksiä ja taivutuksia Kuvassa 2.



**Kuva 2.** IR-säteilyn aikaansaamat venytykset ja taivutukset<sup>1a</sup>

IR-spektristä nähdään, millä aaltoluvulla IR-säteet ovat absorboituneet näytteeseen. Absorptiosignaalin sijainti spektrissä riippuu absorboivan sidoksen tai ryhmän luonteesta. Spektri voidaan tulkinnallisista syistä tavallisesti jakaa kahteen osaan. Molekyylin sisäisten yksittäisten sidosten absorptiosignaalit piirtyvät yleensä aaltolukualueelle  $4000\text{--}1250\text{ cm}^{-1}$ , kun taas tätä matalammalla aaltolukualueella näkyvät signaalit liittyvät koko molekyylin monimutkaisiin värähdys- ja pyörimisenergioiden muutoksiin. Jälkimmäisenä mainittua aluetta kutsutaan sormenjälkialueeksi, sillä sen avulla hyvin samankaltaisetkin molekyylit voidaan erottaa toisistaan.<sup>9e</sup>

IR-spektrien tulkitsemiseksi on kehitetty korrelaatiotaulukoita. Taulukot on muodostettu tutkimalla tuhansista infrapunaspektreistä eri funktionaalisten ryhmien absorptiion tyypilliset aaltoluvut. Vertaamalla tuntemattoman yhdisteen absorptiosignaleja tulkintataulukoon, voidaan päätellä millaisia sidoksia yhdisteessä on. Kuva 3 on yksinkertainen kaaviomainen esitys tulkintataulukosta.<sup>13b</sup>



**Kuva 3.** Korrelaatiokaavio IR-spektrin tulkintaan (kuvassa str. tarkoittaa venytystä ja bend taivutusta)<sup>13a</sup>

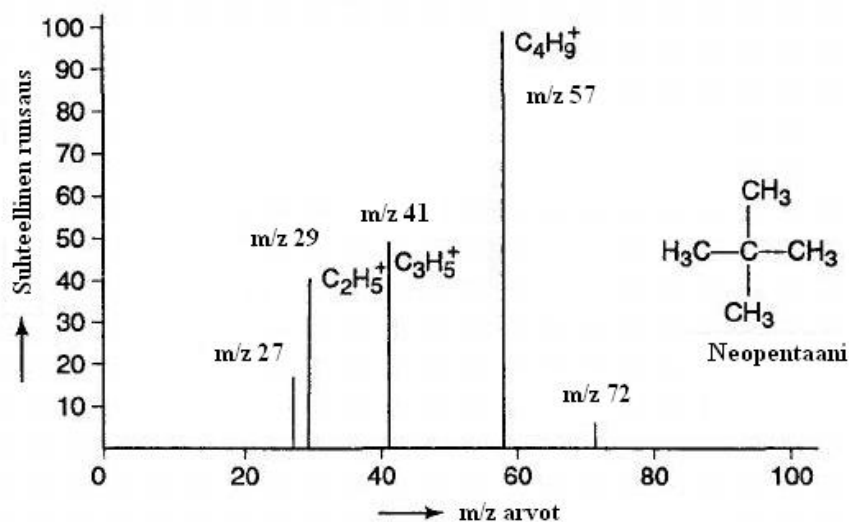
Sormenjälkialueen signaaleja ei useinkaan voida eksaktisti löytää tulkintakaavioista, mutta ne ovat tärkeitä silloin, kun yhdiste pyritään tunnistamaan vertaamalla syntynyttä spektriä tunnettujen yhdisteiden spektreihin. Syntyneet absorptiosignaalit voidaan jakaa kolmeen osaan niiden intensiteetin mukaan: vahvoihin, keskivahvoihin ja heikkoihin signaaleihin. Myös signaalin intensiteetti on tärkeä tuntomerkki signaalin yhdistämisessä sitä vastaavaan sidokseen tai ryhmään. Toisaalta, mikäli molekyyllissä on identtisiä sidoksia tai ryhmiä, niistä aiheutuu yksittäistä sidosta tai ryhmää voimakkaampi absorptiosignaali.<sup>13b</sup>

## 2.4 MASSASPEKTROMETRIA

MS on tarkoin tunnettu menetelmä yhdisteen molekyylipainon ja alkuainekoostumuksen määrittämisessä. Se on yksi harvoista menetelmistä, joilla saadaan myös kvantitatiivista tietoa. Menetelmässä kaasumuotoon saatettua näytettä pommitetaan sähkökentässä kiihdytetyllä elektronisuihkulla, jonka seurauksena näytemolekyylistä irtoaa elektroni. Tällöin muodostuu positiivinen ioni. (Ionisaatio voidaan toteuttaa myös lukuisilla muilla tavoilla, mutta tässä käsittelen vain elektronipommitukseen perustuvaa menetelmää. Lisäksi MS:ssa voidaan hyödyntää myös negatiivisia ioneja.)<sup>10a</sup>

Syntynyt ioni on epästabiili, joten se hajoaa tietyn kokoisiksi ja varauksellisiksi fragmenteiksi. Lisäksi, mitä suurempi on törmäävän elektronin energia, sitä todennäköisemmin syntyy voimakkaammin positiivisia ioneja. Ionit ohjataan sähkökentän avulla magneettikenttään. Magneettikentässä ionien lentorataan vaikuttaa niiden massa ja varaus. Juuri massa/varaus-suhte on eri ionit toisistaan erotteleva tekijä.<sup>9g</sup> Kaikki syntyneet ionit eivät välttämättä osu samanaikaisesti detektoriin. Ionien lentorataan voidaan vaikuttaa niitä kiihdyttävää voimaa ja/tai lentoreittiä ympäröivän magneettikentän suuruutta muuntelemalla. Näin erikokoiset ionit saadaan vuorollaan ohjattua detektorille.

Se, miten ionisoitunut molekyyli pilkkoutuu, riippuu sen rakenteesta ja funktionaalisista ryhmistä. Myös syntyneet fragmentit pilkkoutuvat edelleen. Fragmenteista toiset ovat pysyvämpiä kuin toiset. Detektorille saapuneet fragmentit näkyvät spektrissä vasemmalta oikealle kasvavassa massa/varaus-suhteessa. Äärimmäisenä oikealla näkyvä piikki siis kertoo tutkittavan molekyylin massan (Kuvassa 4 m/z-arvolla 72 esiintyvä piikki). Joskus kuitenkin tutkittavat molekyylit hajoavat niin nopeasti, ettei niin sanottua molekyylipiikkiä voida lainkaan havaita. Esimerkiksi useista alkoholeista irtoaa vesimolekyyli erittäin helposti. Piikkien korkeus kertoo fragmenttien suhteellisen runsauden eli samalla suhteellisen pysyvyyden.<sup>13c</sup>



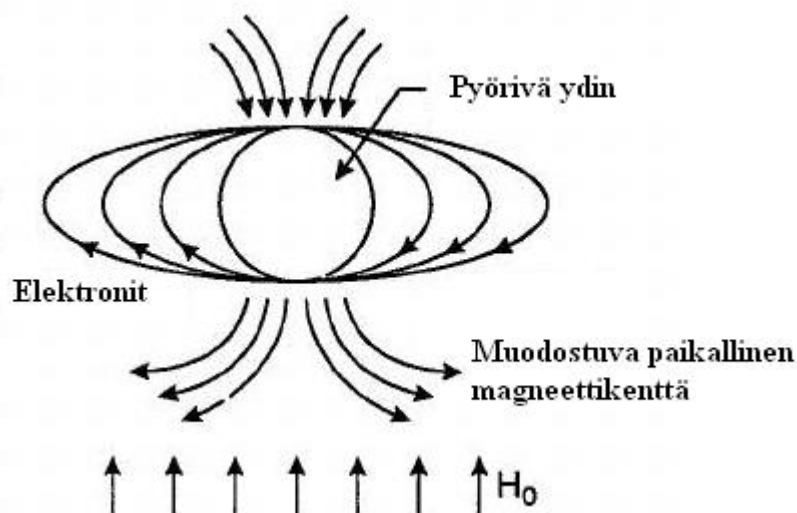
**Kuva 4.** Neopentaanin eli 2,2-dimetyylipropaanin massaspektri<sup>10a</sup>

## 2.5 YDINMAGNEETTINEN RESONANSSISPEKTROMETRIA

NMR:llä saadaan selville tiettyjen atomydinten läsnäolo ja ympäristö molekyylissä ja tämän tiedon avulla voidaan selvittää tutkittavan yhdisteen rakenne.<sup>10d</sup> Menetelmässä magneettiset atomytimet (esimerkiksi vedyn tai hiilen isotoopit  $^1H$  ja  $^{13}C$ ) asetetaan ulkoiseen magneettikenttään, jolloin niiden pyörimissuunnat ovat joko magneettikentän suuntaiset tai vastakkaissuuntaiset. Magneettikentän suuntaisesti pyörivien ytimien energiataso on hieman matalampi kuin vastakkaissuuntaisesti pyörivien ytimien energiataso.

NMR:ssä käytetyn radiotaajuuden (aallonpituus 1-1000 m) säteilyn energia on hyvin pieni, joten se ei riitä aiheuttamaan sidosvärähdyksiä, pyörähdyksiä tai virittäytymistä kohdemolekyyleissä tai -atomeissa. Sen sijaan absorboituessaan säteilyn energia riittää muuttamaan ytimen pyörimissuunnan vastakkaiseksi. Muutoksia voi tapahtua molempiin suuntiin, jolloin matalaenergisemmältä tasolta korkeaenergisemmälle tasolle siirtyvä atomydin absorboi säteilyn energiaa ja korkeaenergisemmältä tasolta matalaenergisemmälle tasolle siirtyvä atomydin emittoi yhtäläisen määrän energiaa. Detektori havaitsee energian absorptiot. Detektorilta signaali vahvistetaan piikiksi spektriin. Ulkoisen magneettikentän voimakkuus vaikuttaa siihen, miten suuri on vastakkaisesti pyörivien ydinten energiatasojen välinen ero.<sup>9h</sup>

Atomiydintä suojaa ulkoiselta magneettikentältä sitä ympäröivä elektroniverho. Elektroniverho indusoi paikallisen magneettikentän, joka vastustaa ulkoista magneettikenttää (Kuva 5). Mitä enemmän atomiytimen ympärillä on elektroneja, sitä suurempi täytyy ulkoisen magneettikentän olla, jotta ydin voitaisiin saattaa resonanssitilaan eli tilaan, jossa tapahtuu siirtymiä sen erienergisiltä tiloilta toisille. Toisaalta vahvemmassa ulkoisesta magneettikentästä johtuen resonanssitilan saavuttamiseksi tarvitaan myös suurenergisempää säteilyä.<sup>10d</sup>



**Kuva 5.** Elektronien aiheuttama magneettikenttä<sup>10d</sup>

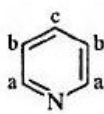
Atomien erilaisista elektroniympäristöistä johtuen ydinten virittymisestä aiheutuneet piikit näkyvät spektrissä eri kohdissa. Toisaalta samanlaisessa elektronisessa ympäristössä olevan atomiytimen absorptio näkyy spektrissä samassa kohdassa riippumatta siitä, missä molekyylissä se esiintyy. Siksi signaalin paikasta voidaan päätellä, minkälaisessa ympäristössä atomiydin on.

<sup>1</sup>H-NMR:ssä samanlaisessa elektronisessa ympäristössä olevien atomiydinten absorboimasta säteilystä muodostunut signaali voi olla jakaantunut kahden tai useamman piikin ryppääksi. Tämä johtuu siitä, että absorboivan protonin vieressä oleva sekundäärinen protoni voi magneettisella momentillaan joko vahvistaa tai heikentää absorboivaan protoniin kohdistuvaa magneettikenttää. Ilmiötä nimitetään kytkeytymiseksi. Koska molempia vaikutuksia on jokaisella hetkellä eri näytämolekyyleissä, havaitaan kahdentunut absorptiosignaali.<sup>9h</sup> Useissa tapauksissa signaalin jakautumisesta osiin voidaan laskea sekundääristen protonien määrä; sekundäärisiä protoneja on yksi vähemmän kuin signaalin osasignaaleja.

<sup>1</sup>H-NMR-spektrissä alhaisilla ppm-luvuilla näkyy niiden vetyjen absorptio, joiden ympärillä on paljon elektroneja eli jotka saadaan resonanssitilaan vahvistamalla ulkoista magneettikenttää. Korkeammille ppm-luvuille spektriin piirtyy niiden vetyjen absorptio, joiden ympärillä on vain vähän elektroneja.  $\pi$ -sidoksissa on paljon elektroneja, mutta esimerkiksi bentseenirenkaan  $\pi$ -elektronit eivät suojaa renkaaseen kiinnittyneitä

protoneita. Sen sijaan  $\pi$ -elektronit muodostavat paikallisen magneettikentän, joka on samansuuntainen ulkoisen magneettikentän kanssa. Tästä johtuen protonit ovat melko suojattomia ja näkyvät spektrissä keskivaiheilla.<sup>13d</sup> Taulukkoon 2 on koottu joitakin  $^1\text{H}$ -NMR:ssä havaittavia absorptiosignaaleja.

**Taulukko 2.** Erilaisissa elektronisissa ympäristöissä olevien vetyjen tunnusomaisia absorptiosignaaleja<sup>10d</sup>

Vedyt erilaisissa ympäristöissä		Kemiallinen siirtymä (ppm)
Alkoholi	$\text{H}-\text{C}-\text{OH}$	3.4-4.0
Aldehydi	$\text{R}-\text{CHO}$	9.0-10.0
Happo	$\text{H}-\text{C}-\text{COOH}$	2.0-2.5
Asetyleeni	$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	2.0-3.5
Aromaattinen	$\text{Ar}-\text{H}$	6.0-9.0
Karboksyylihappo	$\text{R}-\text{COOH}$	10.5-12.0
Fluoridi	$\text{H}-\text{C}-\text{F}$	4.0-4.5
Vinyyli	$\text{C}=\text{C}-\text{H}$	4.6-5.8
Hydroksi	$\text{R}-\text{OH}$	1.0-5.5
Enoli	$\text{C}=\text{C}-\text{OH}$	15.0-17.0
Fenoli	$\text{Ar}-\text{OH}$	4.0-12.0
Alkyyliamiini	$\text{R}-\text{NH}_2$	1.2-1.8
Aryyliamiini	$\text{Ar}-\text{NH}_2$	3.4-4.2
Tioli	$-\text{S}-\text{H}$	1.3-1.8
Alkeeni	$=\text{C}=\text{CH}$	1.5-3.1
Pyridiini		7.0-7.6
TMS	$\text{Me}_4\text{Si}$	0.0

$^{13}\text{C}$ -NMR-spektrometria tuottaa tietoa hiiliatomeista molekyylissä. Koska isotooppi  $^{13}\text{C}$  on harvinainen (vertailun vuoksi: isotooppia  $^1\text{H}$  on 99,985 % kaikista vetyatomeista kun taas isotooppia  $^{13}\text{C}$  on vain 1,1 % kaikista hiiliatomeista) ja koska sen siirtymätilojen välinen energia on hyvin pieni, tarvitaan absorption havaitsemiseen erittäin herkkä spektrometri. Toisaalta absorboivien atomien vähäisyys näytteessä on myös etu; absorptiosignaalien jakautumista ei havaita, sillä on hyvin epätodennäköistä, että kaksi  $^{13}\text{C}$ -isotooppia sattuisi vierekkäin samaan molekyyliin. Absorptiosignaalit asettuvat jopa kaksikymmentä kertaa laajemmalle skaalalle kuin  $^1\text{H}$ -NMR:ssä. Nämä seikat tekevät spektristä yksinkertaisemmän lukea. Absorptiosignaalien asettuminen suhteessa toisiinsa on karkeasti samankaltaista kuin  $^1\text{H}$ -NMR:ssä.<sup>13d</sup>

## 2.6 OPISKELIJALTA VAADITTAVA POHJATIETO ENNEN SPEKTROSKOPIAAN PEREHTYMISTÄ

Mitä opiskelijan tulee tietää, jotta hän voi ymmärtää spektroskopiaa? Erilaisten spektroskooppisten menetelmien taustalla on hyvin erilaisia luonnontieteellisiä ilmiöitä; erilaiset säteilyn lajit, säteilyenergian kvantittuminen, sähkö- ja magneettikentät, elektronien jakautuminen orbitaaleille, energioiltaan erilaiset tilat, jne. Se, mitä kaikkea ja kuinka syvällisesti opiskelijan tulee tietää ja ymmärtää ennen spektroskopiaan perehtymistä, riippuu siitä, mille tasolle spektroskopian ymmärtäminen aiotaan viedä.

Aiheeseen syventymistä lukiossa rajoittavat tietysti kurssin laajuus ja muu sisältö sekä opiskelijoiden aiempi osaaminen. Lisäksi opettajan valmiudet on otettava huomioon. Itä-Suomen yliopistossa Joensuussa jopa sivuaineenaan kemiaa opiskelevat perehtyvät spektroskopiaan aineopintojen kursseilla *Orgaanisen kemian työmenetelmät* ja *Orgaanisen kemian aineopintojen työt*. Molempien kurssien sisältöön kuuluu IR ja NMR, mutta MS rajautuu ulkopuolelle. Kuitenkin MS, IR ja NMR kuuluvat kurssin *Orgaaninen kemia I* sisältöön. Koska opettajaopiskelijat opiskelevat spektroskopiaa, heillä on myös valmiudet opettaa sitä lukioissa.<sup>14</sup>

Opiskelijan pitäisi tuntea erilaisten orgaanisten yhdisteiden rakenteita ja funktionaalisten ryhmien ominaisuuksia, ennen kuin spektroskopiaa on hyödyllistä opiskella.<sup>13e</sup> Koska massaspektrometriassa fragmenttien pysyvyys korreloi signaalien voimakkuuden kanssa, ei haittaisi, vaikka opiskelijalla olisi myös tietoa elektronien delokalisaatiosta.



## 3 HAVAINTOJA LUKION OPPIKIRJOISTA

Vaikka kaikki lukio-oppikirjat pyritäänkin tekemään Opetushallituksen muotoilemien lukiokoulutuksen opetussuunnitelman perusteiden pohjalta, valmiit kirjat ovat hyvin erilaisia keskenään. Tämä selittyy osittain kurssikohtaisten tavoitteiden ja keskeisten sisältöjen tulkinnallisesta väljyydestä.

### 3.1 SPEKTROSKOPIA LUKIOKOULUTUKSEN OPETUSSUUNNITELMAN PERUSTEISSA

Opetushallituksen muotoileminen opetussuunnitelman perusteiden mukaan luontevin ja jopa välttämätön sijainti spektroskopialle on toisessa kurssissa nimeltä Kemian mikromaailma. Olen esittänyt kyseisen kurssin tavoitteet ja keskeiset sisällöt luettelomuodossa. Alleviivasin luettelosta spektroskopian kannalta keskeisen tavoitteen. Yhdisteiden rakenteiden määrittämisessä spektroskooppiset menetelmät ovat avainasemassa.<sup>2</sup> Kurssin keskeisistä sisällöistä kemiallinen sidos ja yhdisteen avaruusrakenne liittyvät myös kiinteästi spektrokopiaan.

#### TAVOITTEET

Kurssin tavoitteena on, että opiskelija

- tuntee aineen rakenteen ja ominaisuuksien välisiä yhteyksiä
- osaa käyttää aineen ominaisuuksien päättelyssä erilaisia kemian malleja, taulukoita ja järjestelmiä
- ymmärtää orgaanisten yhdisteiden rakenteita ja tuntee rakenteen määrittämisessä käytettäviä menetelmiä
- osaa tutkia kokeellisesti ja erilaisia malleja käyttäen aineiden rakenteeseen, ominaisuuksiin ja reaktioihin liittyviä ilmiöitä.

#### KESKEISET SISÄLLÖT

- alkuaineiden ominaisuudet ja jaksollinen järjestelmä
- elektroniverhon rakenne ja atomiorbitaalit
- hapetuslukujen määräytyminen ja yhdisteen kaava
- kemiallinen sidos, sidosenergia ja aineen ominaisuudet
- atomiorbitaalien hybridisoituminen ja orgaanisten yhdisteiden sidos- ja avaruusrakenne
- isomeria

### 3.2 SPEKTROSKOPIAA KÄSITTELEVÄT OPPIKIRJAT

Taulukkoon 3 olen koonnut lukion oppikirjojen seulonnan tuloksena lähempään tarkasteluun päätyneet kirjat. Taulukon yhdestätoista oppikirjasta viisi on Kemian mikromaailma-kurssin (2. lukiokurssi), kolme kertauskurssin ja kolme muiden kurssien oppikirjoja. Useimmin ja laajimmin spektroskopiaa käsitellään toisen lukiokurssin oppikirjoissa.

**Taulukko 3.** Lukion kemian oppikirjoista ne, joissa käsitellään spektroskopiaa

Oppikirjat	Painovuosi	Kustantaja	Kirjan tekijät
Kemisti 2	2009	WSOY	Lampiselkä, Sorjonen, Karkela, Vakkilainen, Kanerva, Mäkelä, Aroluoma
Kemisti 3	2008		
Kemisti 6 kertauskirja	2007		
Kide 2	2005	Otava	Kalkku, Kalmi, Korvenranta
Kide 3	2005		
Mooli 2	2005	Otava	Lehtiniemi, Turpeenoja
Mooli 4	2009		
Neon 2	2009	Edita	Hannola-Teitto, Jokela, Leskelä, Pohjakallio, Näsäkkälä, Rassi
Neon kertauskirja	2008		
Reaktio 2	2011	Tammi	Kaila, Meriläinen, Ojala, Pihko
Reaktio kertauskirja	2007		

Analysoin 2. kurssin oppikirjoja luvussa 3.3 ominaisuus kerrallaan. Nämä kirjat ovat keskenään hyvin vertailukelpoisia, sillä niiden sisältöä määrittää samat opetussuunnitelman perusteet. Muiden kuin 2. kurssien kirjat käsitelen erillään omana kokonaisuutenaan luvussa 3.4, sillä niiden spektroskooppinen sisältö poikkeaa selkeästi 2. kurssin kirjojen sisällöstä. Olen käsitellyt nämä muut oppikirjat kirja kerrallaan, koska ne eivät ole vertailukelpoisia. Ne sisältävät hyvin vähän tietoa spektroskopiasta ja niiden sisällöt ovat keskenään hyvin vaihtelevia.

### 3.3 SPEKTROSKOPIA LUKION 2. KURSSIN KIRJOISSA

Oppikirjasarjojen katsaukset spektroskopiaan ovat hyvin vaihtelevat. Vaihtelua esiintyy ennen muuta laajuuden ja asiayhteyden suhteen. Eroja on myös spektrien tulkinnan avaamisessa. Kirjojen käsittelemät menetelmät olen koonnut Taulukkoon 4. Taulukosta selviää kirjojen **kattavuus esiteltävien menetelmien suhteen** yhdellä silmäyksellä. Toisaalta taulukko ei kerro mitään käsittelyn syvällisyydestä. Esimerkiksi **Kemisti 2:n** merkinnät UV- ja VIS-sarakkeissa aiheutuvat molemmat yksittäisistä menetelmää valottavista harjoitustehtävistä. NMR:n, MS:n ja IR:n ollessa orgaanisen kemian rakenneanalytiikan keskeisimpiä menetelmiä näyttää **Reaktio 2:n** tekijöiden päätös jättää IR pois käsiteltävien menetelmien joukosta suoranaishetvällä virheeltä.

**Taulukko 4.** Oppikirjojen käsittelemät spektroskooppiset menetelmät

	<sup>1</sup> H NMR	<sup>13</sup> C NMR	MS	IR	UV	VIS
Kemisti 2	x	x	x	x	x	x
Kide 2	x		x	x		x
Mooli 2	x		x	x		x
Neon 2	x	x	x	x	x	x
Reaktio 2	x		x			x

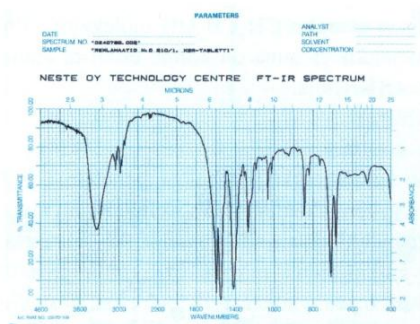
**Kirjoissa spektroskopia on liitetty erilaisiin asiayhteyksiin;** joissakin teoksissa spektroskopiaa käsitellään osana kemian teoriaa, toisissa osana laboratoriotöitä ja yhdessä lähes sattumanvaraisissa yhteyksissä. **Kemisti 2:ssa** spektroskopia kuuluu opiskeltavaan teoreettiseen aineistoon (Kuva 6). Sen kontekstina on kvanttimekaaninen atomimalli.

<b>4</b>	<b>KVANTTIMEKAANINEN ATOMIMALLI</b>	
	Elektroneilla on hiukkas- ja aaltoluonnetta.....	72
	Elektronien energia on kvantittunut.....	74
	Elektronit sijoittuvat orbitaaleille.....	75
	Alatasojen täytyminen näkyy jaksollisessa järjestelmässä .....	79
	Spektroskopia perustuu energian kvantittumiseen.....	80
	Tehtäviä.....	84 <sup>†</sup>

**Kuva 6.** Ote Kemisti 2:n sisällysluettelosta

**Neon 2**:ssa spektroskopiaa käsitellään aineen analyysin yhteydessä muiden analyysimenetelmien joukossa. **Kide 2**:ssa spektroskopiaa käsitellään varsinaisen kemian teorian ulkopuolella, luvussa Työt ja tutkimus. Aihetta sivutaan myös siirtymäalkuaineita käsitellessä; tekstin vieressä on kaaviokuva spektrofotometrasta ja tekstissä kerrotaan, värin syntymisestä elektronin virittymisen seurauksena. **Mooli 2**:ssa spektroskooppisia menetelmiä on käsitelty kromatografisten menetelmien rinnalla luvussa Kemiaa kokeellisesti. Kyseisessä luvussa on sekä lukiokurssille sopivia kokeellisia töitä että kirjallisesti tarkasteltuja aiheita. **Reaktio 2**:ssa spektroskopia on ripoteltu lähes sattumanvaraisesti eripuolille kirjaa pohjaväritään sinisille sivuille. MS (Liite 1) on esitelty yhdisteen kaavan ja NMR rasvahappojen yhteydessä.

Joissakin kirjoissa on kuvattu melko tarkkaan eri spektroskooppisten tekniikoiden periaatteita, mutta periaatteiden sidosteisuus kemian teorioihin on melko niukkaa. **Kemisti 2**:n tulokulma aiheeseen on kvanttimekaaninen atomimalli ja siten aihe on saatu sidottua melko hyvin juuri aiemmin käsiteltyyn kemian teoriaan. Erityisesti ajatus kvantittuneesta energiasta on otettu hyvin mukaan. Myös eri menetelmien periaatteita on selitetty melko syvästi. **Kide 2**:ssa IR:n ja NMR:n periaatteita selitetään kiitettävästi; tekstissä mainitaan erilaisia IR-säteilyn aiheuttamia värähdyksiä (Kuva 7) ja eritellään eriarvoisia vetyjä NMR:n kohdalla. Spektroskopiaa ei kuitenkaan ole yritetty yhdistää teorian kautta muuhun kurssisisältöön. **Reaktio 2**:ssa ja **Mooli 2**:ssa on selitetty melko yksityiskohtaisesti käsiteltyjen menetelmien periaatetta, mutta käsittelyn yhteys kemian toisen kurssin kemian teorioihin on heikko. **Neon 2** on melko pinnallinen spektroskopiaa esittelevän osionsa suhteen, samoin yhteys muuhun opiskeltavaan sisältöön on vähäinen.



95A Autonmoottorin suodattimelta löytyneen natriumbentsoaattisaostuman IR-spektri. Henkilöautossa ovat suodattimien ja suuttimien tukkeutumisesta aiheuttaneet usein ongelmia. Syyksi on yleensä epäilty bensiinin lisäaineita. Korjaamoilla moottoreita huollettaessa on mainituista osista löytynyt saostuma, joka on infrapunaspektrometrisesti analysoitu ja todettu natriumbentsoatiksi. Natriumbentsoatti on jäädytinnesteen (glykolin) korroosiota ehkäisevä lisäaine. Jos sitä lisätään bensiinin joukkoon, natriumbentsoatti saostuu. Autoilijoiden tarkoituksena on ilmeisesti ollut lisätä bensiiniin jäänestoainetta, mutta he ovatkin huolimattomuuttaan lisänneet jäädytinnestettä. IR-spektri paljastaa luotettavasti, missä vika piilee.

### IR-spektroskopia

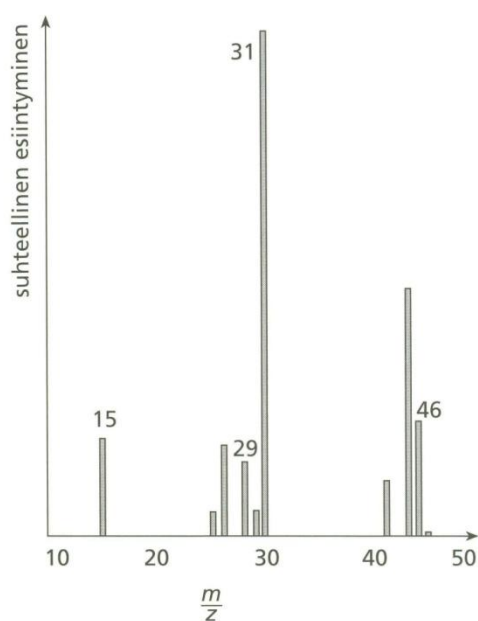
Molekyylissä tapahtuvat sidosvärähtelyenergiat vastaavat sähkömagneettisen säteilyn infrapuna-aallonpituusalueella. Esimerkiksi vesimolekyylissä ovat kolmenlaiset sidosvärähtelyt mahdollisia: epäsymmetrinen venytys, symmetrinen venytys ja taivutus. Kukin näistä absorboi energiaa infrapuna-alueella, mikä nähdään absorptiomaksimina veden infrapunaspektrissä.

Kullakin orgaanisella yhdisteellä on sille ominainen IR-spektri, joka on kuin yhdisteen sormenjälki. IR-spektroskopiaa käytetäänkin usein aineiden tunnistamiseen. Vertaamalla tutkittavan aineen spektriä tunnetun aineen spektriin nähdään heti, onko kyseessä sama yhdiste.

**Kuva 7.** Kide 2:n IR-katsaus

**Spektrien tulkinnan** opettaminen on tärkeä osa spektroskopiaa niin ymmärtämisen kuin motivaationkin kannalta. **Neon 2** sisältää spektrien tulkinnan avaimet IR:n, MS:n,  $^1\text{H-NMR}$ :n ja  $^{13}\text{C-NMR}$ :n osalta. Lisäksi spektrien tulkintaa voi harjoitella useiden ja mielekkäiden tehtävien parissa. Näistä tehtävistä yksi on esitetty Kuvassa 8 ja toinen esimerkki Liitteessä 2. Spektrien tulkinnan avaimet annetaan visuaalisessa asussa (Liite 3).

- 166.** Tarkastele etanolin  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$  massaspektriä. Molekyylipeikki on 46, joka vastaa ionisoitunutta molekyyliä  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}^+$ . Korkein piikki on kohdassa 31.



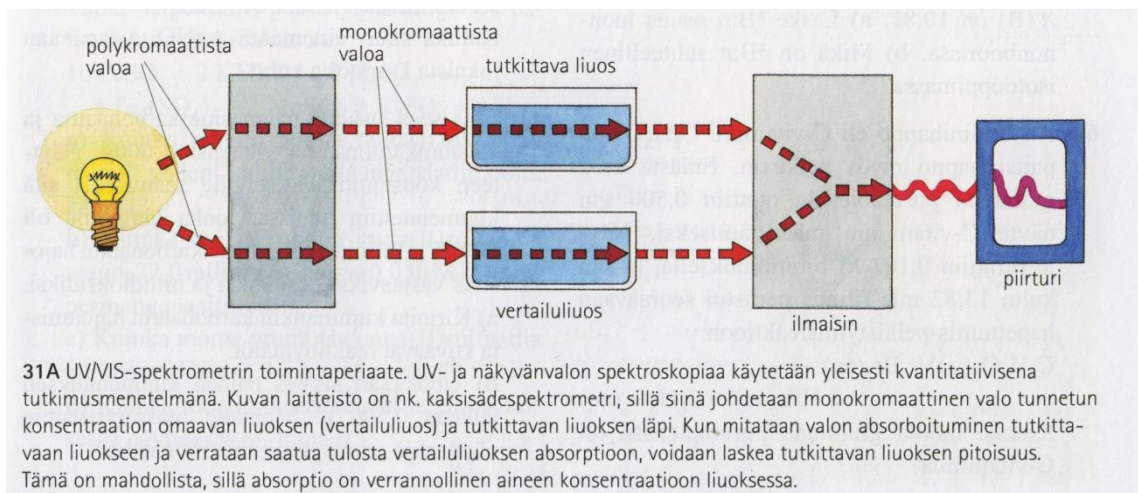
- Mikä ioni aiheuttaa piikin, joka vastaa massaa 31?
- Mikä ioni aiheuttaa piikin, joka vastaa massaa 29?
- Mikä ioni aiheuttaa piikin, joka vastaa massaa 15?

**Kuva 8.** Harjoitustehtävä Neon 2:sta

**Kemisti 2:**ssa on osoitettu joitakin tunnusomaisia absorptiosignaaleja asetonin IR-spektristä, kirjoitettu dodekaanin MS-spektriin fragmenttien rakenteet piikkien kohdille ja yhdistetty pentaanin atomit  $^1\text{H-NMR}$ -spektrin siirtymiin. **Mooli 2:**ssa on havainnollistavat spektrikuviot esimerkkinä jokaisen menetelmän kohdalla ja signaalit on yhdistetty rakenteen osiin. Kuitenkin kysymys on spektrien tulkinnan havainnollistamisesta, ei tulkinnan opettamisesta. **Reaktio 2:**ssa ei opasteta massaspektrin tulkintaa, ja NMR-spektrin tulkinta jää lapsen kenkiin. **Kide 2** ei käsittele spektrien tulkintaa lainkaan.

### 3.4 SPEKTROSKOPIA MUISSA KUIN 2. KURSSIN KIRJOISSA

**Kemisti 3** esittelee spektrofotometrisiä menetelmiä kvantitatiivisen analyysin yhteydessä. Kolorimetrian, refraktometrian, polarimetrian ja AAS:n periaatteet mainitaan hyvin pinnallisesti. Tulosten tulkintaa käsitellään vain yhdessä kolorimetrisessä harjoittelutehtävässä. **Kide 3** mainitsee kursorisesti MS:n suhteellisen atomimassan yhteydessä. Periaatteesta tai tulkinnasta ei mainita mitään. Lisäksi seoslaskujen ohessa on kaaviokuva UV/VIS:n toimintaperiaatteesta (Kuva 9). Kuvatekstissä on selostettu toimintaperiaatetta ja kerrottu laitteiston käyttökelpoisuudesta liuoksien pitoisuuksien määrittämisessä. Tämä lienee aasinsilta seoslaskuihin, joiden yhteyteen kuva on sijoitettu.



**Kuva 9.** Ote Kide 3:sta

**Mooli 4:n** ainoa spektroskooppinen osuus on luvun 4 Metallit materiaaleina kokeellisessa osassa. Työn nimi on veden rautapitoisuuden määrittäminen kolorimetrisesti. Työn ohjeessa kuvataan kolorimetrian periaate ja laitteisto osana spektrofotometriä. Työssä näyteliuosten absorbanssilukemia verrataan ensin valmistettujen standardiliuosten absorbanssien avulla piirrettyyn standardikuvaajaan. Työohjeessa viitataan taustamateriaalina saman teoksen sivuihin 74–78. Kuitenkin kyseinen tehtävä jää ainoaksi spektroskooppiseksi materiaaliksi tässä kirjassa, sillä mainittu työn taustamateriaali kertoo siirtymäalkuaineiden erityisominaisuuksista, mm. elektronien virittymisestä osasta näkyvän valon energiaa muun osan valosta mennessä aineen läpi ja siten määräten aineen värin.

**Kemisti 6** eli Kemisti-sarjan kertauskirja esittelee analyysimenetelmiä osana kokeellista kemiaa. Spektroskopia mainitaan sekä kvantitatiivisissa että kvalitatiivisissa menetelmissä ja esimerkkinä luetellaan UV/VIS, AAS, MS, NMR ja IR. Periaatteiden kuvaus jää hyvin pinnalliseksi. Ohessa on myös IR-spektrin ja MS-spektrin tulkintaa havainnollistava esimerkki. **Neon Kertaus**-kirjan sanastossa on selitetty sanan *spektroskopia* merkitystä kolmella virkkeellä. **Reaktio Kertaus** mainitsee kvantitatiivisten tekniikoiden luettelossa optisten ominaisuuksien mittaamisen, ja luettelee esimerkkeinä VIS-, UV- ja IR-absorptiospektrien mittaamisen.



## 4 OPPIKIRJOJEN KRITIIKKI JA OSAAMISEN ARVIOINTI

Oppikirjasarjat kuvastavat eri ihmisten näkemyksiä siitä, mikä on hyvä oppikirja. Samalla tekijöiden oma osaaminen voi vaikuttaa siihen, miten erilaisia aiheita käsitellään. Analysoimissani oppikirjoissa spektroskopiaa on käsitelty eri tavoin, mutta niistä löytyy myös jotakin yhteistä. Koska 2. lukiokurssin kirjoissa on selvästi eniten spektroskopiaa, painottuu myös kritiikkini kyseisiin kirjoihin. Olen tutkinut myös sitä, yltävätkö oppikirjat ja ylioppilaskokeissa suoritettu osaamisen arviointi oppimiselle annettujen tavoitteiden tasolle.

### 4.1 YLEISHUOMIOITA OPPIKIRJA-ANALYYSISTA

Lukion kemian oppikirjoista suurimmassa osassa ei ollut pienintäkään mainintaa spektroskopiasta. Käytyäni läpi lukion oppikirjat aineistokseni valikoitui vain yksitoista oppikirjaa. Lisäksi näistäkin kuudessa – mukaan lukien kertauskurssien oppikirjat – spektroskooppinen sisältö on erittäin suppea. Karkeasti voidaan sanoa, että spektroskopiaan *perehdytään* vain Kemian mikromaailma–kurssin kirjoissa. Myös kyseisen kurssin kirjoista jotkut esittävät spektroskopian tavalla, josta syntyy helposti vaikutelma spektroskopiasta epämiellyttävänä mutta pakollisena osana kurssisisältöä.

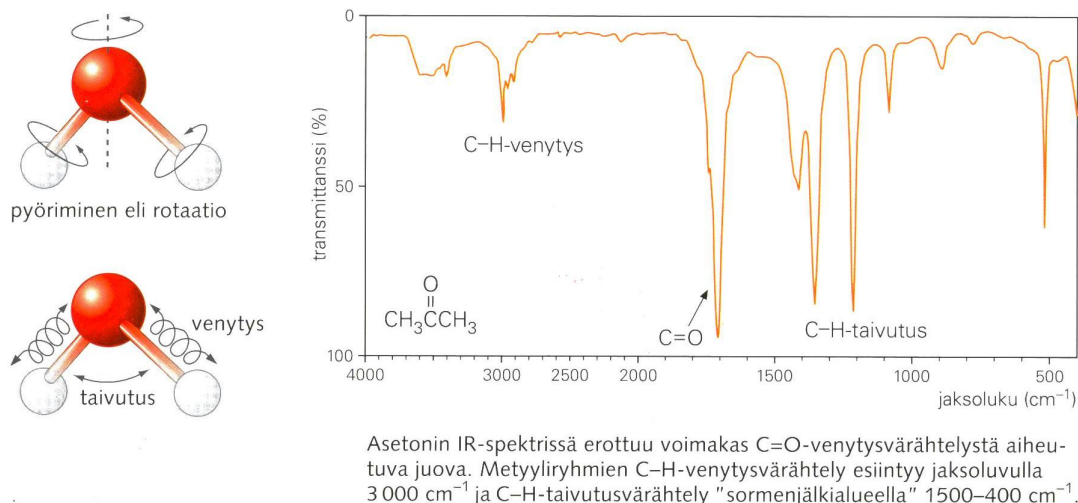
Oppikirjoissa ei kerrota mitään spektroskooppisten menetelmien kehittymisestä osana tieteen historiaa. Kuitenkaan tieteen historiaa ja filosofiaa ei pitäisi ohittaa, sillä niiden mukanaan tuoma näkökulma voi tehdä opetuksesta parempaa, johdonmukaisempaa, innostavampaa ja kriittisempää.<sup>15</sup> Jos opiskelijat asetetaan vuorollaan jonkin edesmenneen tiedemiehen kenkiin ja laitteiston eteen ja annetaan heidän itse havainnoida, päätellä ja muodostaa teorioita, olemme lähellä todellista konstruktivistista oppimiskokemusta.

Lukion opetussuunnitelman perusteissa mainitaan kemian opetuksesta muun muassa, että mallintaminen on kemian opetukselle luonteenomaista.<sup>7</sup> Aineen rakenteen määrittämisessä voitaisiinkin käyttää tietokoneavusteista molekyylihallinnusta.<sup>16</sup> Molekyylihallinnuksen on todettu voivan helpottaa oppimista.<sup>17</sup> Myös spektroskooppisia menetelmiä ja molekyylihallinnusta voidaan yhdistää opetuksessa.<sup>18,19</sup> Yhdessäkään oppikirjassa ei oltu mainittavasti hyödynnetty tätä mahdollisuutta. Spektroskopian opiskelua ei ole yritetty yhdistää myöskään verkkomateriaaleihin. Paljon hyödyllistä tietoa sisältäviä verkkomateriaaleja on ilmaiseksi tarjolla ainakin englanninkielellä.<sup>20,21</sup>

## 4.2 OPIKELIJAN ENSIKOHTAAMINEN SPEKTROSKOPIAN KANSSA 2. LUKIOKURSSIN OPIKIRJOISSA

Pääasiallisesti spektroskopiaa käsitellään Kemian mikromaailma–kurssin kirjoissa eli 2. lukiokurssissa. Olen pyrkinyt tulkitsemaan kaikkia viittä 2. lukiokurssin oppikirjaa opiskelijan näkökulmasta. Olen pohtinut sitä, millaista opiskelijan ymmärtäminen voisi olla muun muassa kunkin oppikirjan havainnollisuuden ja selkokielisyyden kautta. Lisäksi olen etsinyt spektroskooppisesta sisällöstä yhteyksiä aiemmin samassa kirjassa esiteltyihin asioihin.

**Kemisti 2** tarjoaa varsin hyvät edellytykset asian ymmärtämiselle. Aihetta on käsitelty melko yksinkertaisesti, mutta kuitenkin energian kvantittumisen ja muun kurssisisällön sitominen aiheeseen parantavat teorian syvällistä ymmärtämistä. Lisäksi eri ilmiöitä havainnollistetaan kuvallisesti kiitettävästi. Kuvassa 10 esitetty IR-spektrin ja molekyylivärähdysten yhteys ansaitsee tulla mainituksi. Kirjassa on myös luettelo erilaisista säteilylajeista ja niiden vaikutuksista näytemolekyyleihin.

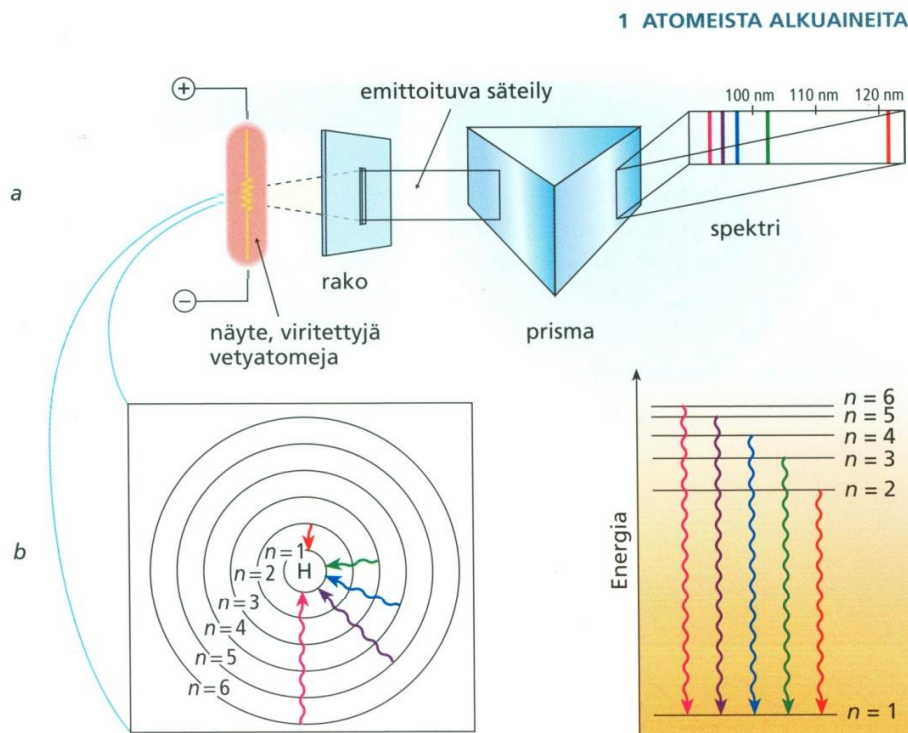


**Kuva 10.** IR-spektrometriaa käsittelevän osion kuvitusta Kemisti 2:sta

**Reaktio 2:**ssa kaikki vieraat sanat on selitetty ja käytetty ymmärtämistä lisääviä kielikuvia. Esimerkkinä tällaisesta kielikuvasta esitän lauseen NMR:aa käsittelevän luvun johdannosta: *"Voimakkaassa magneettikentässä nämä ytimet asettuvat kentän suuntaisesti kuten kompassineula Maan magneettikentässä."* Toisaalta joidenkin seikkojen on mainittu vaikuttavan spektriin selittämättä tarkemmin, mistä nämä vaikutukset johtuvat. Mainittujen seikkojen joukossa on elektronien varjostus, viereisten atomien hybridisaatiotyyppi ja elektronegatiiviset atomit. Tässä voin vain kuvitella millaisia mielle yhtymiä opiskelijalle mahdollisesti syntyy esimerkiksi elektronien varjostavasta ominaisuudesta. Koska teorian ymmärtämistä ei vaadita, on pinnallinen asian hallinta helpommin saavutettavissa, mutta samalla voidaan aina kysyä, missä määrin se on asian ymmärtämistä.



**Neon 2** esittää asiansa ymmärrettävästi ja selkeästi. Myös spektroskooppisen laitteiston peruskomponentit, pääperiaatteet ja erilaiset säteilylajit on esitelty havainnollisesti. Keskittyessään ennen muuta siihen, mitä spektroskopiolla voidaan saada selville ja kuinka spektreistä saadaan tietoa, ei oppikirjassa olekaan mitään, mitä olisi kovin vaikea *ymmärtää*. Toisaalta heti kirjan alussa käsitellään Bohrin atomimallia ja kvanttimekaanista atomimallia tavalla, joka taustoittaa spektroskopiaa todella hyvin. Näitä erillisiä osioita ei ole millään tavalla kytketty yhteen. Atomimalleja käsittelevässä tekstissä kerrotaan sähkömagneettisen säteilyn absorptiosta ja emissiosta ja esitellään elektronien mahdollisia energiatasoja. Näkökulmasta riippuen kysymys voi olla spektroskopiasta (Kuva 11).



**Kuva 1.10** Osa vetyatomien emissiospektristä. Esitetyt viivat ovat UV-alueella, joten viivoille valitut värit eivät vastaa emittoituneen säteilyn todellista väriä.

a) Spektrin mittaus.

b)  $n$ :t kuvaavat energiatasoja, joilla elektronit voivat olla. Kukin spektrin viiva vastaa elektronin siirtymistä tietyltä energiatasolta toiselle.

siirtymä	spektriviivan aallonpituus
$n = 2 \rightarrow n = 1$	121,6 nm
$n = 3 \rightarrow n = 1$	102,6 nm
$n = 4 \rightarrow n = 1$	97,2 nm
$n = 5 \rightarrow n = 1$	95,0 nm
$n = 6 \rightarrow n = 1$	93,8 nm

**Kuva 11.** Atomimallia käsittelevän osion kuvitusta Neon 2:ssa

**Kide 2** ei ole kovin lukijaystävällinen. Siinä ei käsitellä erilaisia sähkömagneettisen säteilyn lajeja ollenkaan, kuvallinen havainnollistaminen on vähäistä, teksti on informatiivisesti hyvin tiivistä ja sanasto vaikeahkoa. Erityisesti käsittelyn tiivyydestä ja sijainnista laboratoriotöiden yhteydessä syntyy vaikutelma ahkerimpien opiskelijoiden lisälukemistosta. **Mooli 2**:ssa spektroskooppiset ja kromatografiset menetelmät esitellään päätä huimaavaan tahtiin ja erityisesti johdantoteksti vilisee opiskelijalle uusia sanoja. Menetelmien kuvauksissa on pieniä puutteita; esimerkiksi massaspektrometrin ei kerrota erottelevan varattuja ioneja *massan ja varauksen suhteessa*, vaan pelkästään massan suhteen. Lisäksi opiskelua vaikeuttaa se, ettei yhdellä aukeamalla esiteltyjä viittä eri spektroskooppista tai kromatografista menetelmää ole rajattu selkeästi erillisiksi kokonaisuuksiksi.

### 4.3 TAVOITTEIDEN, OPPIKIRJOJEN JA ARVIOINNIN YHTEISLINJAISUUS

Lukiokoulutukselle opetussuunnitelman perusteissa asetettujen tavoitteiden tulisi antaa suuntaa oppikirjojen sisällöille ja ylioppilaskirjoitusten kysymysten asetteluille. Kuten jo aiemmin tästä tutkielmasta on käynyt ilmi, Kemian mikromaailma-kurssin tavoitteiden mukaisesti kaikista Kemian mikromaailma-kurssia varten tehdyistä kirjoista löytyy spektroskopiaa. Koska opetussuunnitelman perusteissa ei linjata, millä tasolla tai yksityiskohtaisuudella spektroskopiaa tulisi opettaa, on tämä kysymys avoin tulkinnoille. Kuitenkin spektroskopia tulisi sijoittaa muun opiskeltavan sisällön kanssa tasa-arvoiseen asemaan. Sitä ei siis saisi asettaa laboratoriotöiden joukkoon, johon se ei lukiossa kuulu. Tasa-arvoisuutta voi heikentää myös muusta sisällöstä poikkeavat viestinnälliset yksityiskohdat kuten lisälukemistoon viittaava lokerointi tai pohjavärytys. Samoin tulisi kiinnittää huomiota sinänsä monimutkaisten menetelmien esittelyn selkeyteen ja havainnollistamiseen. Menetelmistä pitäisi käsitellä ainakin IR, MS ja NMR.

Kertauskirjojen suppeat maininnat spektroskopiasta kielivät siitä, että spektroskooppisten menetelmien hallintaa ei vaadita ylioppilaskirjoituksissa. Tähän viittaa myös se, ettei nimenomaan kirjoituksiin valmistavan *Abi kemia*-kirjan sivuilla mainita lainkaan spektroskopiaa. Kuitenkin sekä keväällä 2009 että keväällä 2012 Ylioppilastutkintolautakunnan kemian kokeissa on ollut jokeritehtävä, johon vastatakseen opiskelijan on pitänyt tuntea spektroskooppisia tutkimusmenetelmiä ja niiden käyttöä kemiallisessa analyysissä.<sup>22,23</sup> Olen esittänyt kyseiset jokeritehtävät Taulukossa 5. Opiskelija voi saada täydet pisteet yo-kokeesta, vaikka hän ei vastaisikaan jokeritehtävään. Opettajaa, joka toivoo kaikkien opiskelijoiden menestyvän hyvin, ei välttämättä huoleta jokeritehtävien kysymykset, vaan hän saattaa keskittyä mieluummin ”vähemmän vaativiin, tavallisiin” tehtäviin. Aiemmin, vuodesta 2002 vuoteen 2008, rakenneanalyysissä käytettävien spektroskooppisten menetelmien hallintaa ei ole vaadittu.<sup>22</sup>

**Taulukko 5.** Spektroskooppista tietämystä vaativat ylioppilaskokeen jokeritehtävät<sup>22,23</sup>

Kemian kokeen tehtävä +11, kevät 2009

Monet analyysimenetelmät perustuvat sähkömagneettisen säteilyn ja aineen väliseen vuorovaikutukseen. Tarkastele joitakin tällaisia spektroskooppisia tutkimusmenetelmiä ja niiden käyttöä kemiallisessa analyysissä.

Kemian kokeen tehtävä +11, kevät 2012

Erään hiiltä, vetyä ja yhden happiatomin sisältävän yhdisteen moolimassa on 55-60 g/mol. Yhdisteen rakenteessa on vähintään yksi  $sp^2$ -hybridoitunut hiili.

- a) Esitä kaikkien määritelmään sopivien yhdisteiden rakennekaavat. (2 p.)
- b) Mikä on tuntematon yhdiste, kun tiedetään, että sillä on näistä yhdisteistä korkein kiehumispiste? Perustelee. (2 p.)
- c) Tuntematon yhdiste voi dimerisoitua tietyissä olosuhteissa. Esitä dimeerien rakenne. (1 p.)
- d) Mitä erilaisia spektroskooppisia menetelmiä voit käyttää varmistaaksesi tuntemattoman yhdisteen rakenteen? Kuvaa lyhyesti yhden valitsemasi spektroskooppisen menetelmän toimintaperiaatetta ja spektristä saatavaa informaatiota tuntemattoman yhdisteen rakenteesta. (4 p.)

Taulukkoon 5 kirjoittamani jokeritehtävät ovat luonteeltaan laajoja ja edellyttävät kokonaisuuden hallintaa. Jotta ylioppilaskirjoitukset olisivat paremmin linjassa opetussuunnitelman perusteissa toiselle kurssille asetettujen tavoitteiden kanssa, tulisi spektroskooppisten menetelmien tuntemisen arvioimista lisätä. Spektroskopian hallintaa pitäisi toisinaan arvioida myös jokeritehtävien ulkopuolella.

## 5 YHTEENVETO, RAJOITUKSET JA SUOSITUKSET

Lukiokoulutuksen opetussuunnitelman perusteiden mukaan spektroskopia on olennainen osa Kemian mikromailma-kurssia. Kurssin keskeisistä sisällöistä lähimmäksi spektroskopiaa tulee atomiorbitaalien hybridisoituminen ja orgaanisten yhdisteiden sidos- ja avaruusrakenne. Atomimallit, elektronien järjestäytyminen orbitaaleille ja kvantittunut energia ovat spektroskopiaa sivuavia aiheita. Spektroskopiaa on kuitenkin kyseisen kurssin kirjoissa yleensä ottaen melko vähän suhteessa oppimiselle asetettuihin tavoitteisiin. Samoin spektroskopian hallinnan arvionti yökokeissa on hyvin vähäistä. Opiskelijan mahdollisuudet oppia tuntemaan yhdisteiden rakenteen määrityksessä käytettäviä menetelmiä paransivat selvästi, mikäli spektroskopian painoarvoa lisättäisiin sekä lukion oppikirjoissa että kemian ylioppilaskokeissa.

Mielestäni **Neon 2**:n tapa käsitellä spektroskopiaa selkeäkielisesti, runsaasti kuvallisesti havainnollistaen ja spektrien tulkintaan painottaen, on lukio-opiskelijoita ajatellen lähellä ideaalia. Kuitenkin siihenkin kaipaisin tiiviimpää sitomista aiemmin opiskeltuun, erityisesti atomimalleihin ja orbitaaliteoriaan. Myös aiemmin esitetty (luvussa 4.2) **Kemisti 2**:n ratkaisu sijoittaa spektroskopia kvanttimekaanisen atomimallin yhteyteen on hyvin toimiva ratkaisu. Mikäli spektroskopia sijoitetaan laboratoriotöiden yhteyteen (**Kide 2** ja **Mooli 2**) tai viestitään esimerkiksi poikkeavan värisellä pohjavärillä sen olevan niin sanottua lisälukemistoa (**Reaktio 2**), kasvaa riski spektroskopian ohittamiseen suureksi. Menetelmistä tulisi esitellä ainakin IR, MS ja NMR, sillä ne ovat hyvin yleisiä rakenteen määrityksen menetelmiä. Spektroskooppisten menetelmien erillaisuuden ja monimutkaisuuden vuoksi tulisi kiinnittää erityistä huomiota selkeään ja yksinkertaiseen kielenkäyttöön ja kuvittamiseen.

Koska spektroskopia on hyvin monitahoinen kemian osa-alue, ei ole järkevää olettaa lukio-opiskelijoiden ymmärtävän kaikkia sen piiriin kuuluvia kemiallisia ilmiöitä. Sen sijaan avainilmiöiden ymmärtäminen ja spektrien tulkinnan alkeiden opiskelu voisivat perehdyttää opiskelijat spektroskopiaan innostavasti. Isomerian yhteydessä olisi loogista käsitellä UV-spektrometriaa ja kiraalisten yhdisteiden kohdalla polarimetriaa. Toisaalta spektroskopian menetelmien ripotteleminen eri asiayhteyksiin voi olla hämmentävää, jolloin vaihtoehtoisesti menetelmät voisi koota aineen analyysin yhteyteen. Kumpaan tahansa ratkaisuun päätyinkin, olisi hyvä viitata menetelmästä sitä selittävään teoriaan ja teoriasta sitä soveltavaan menetelmään.

Ymmärtämistä voisi lisätä myös esittämällä oppikirjoissa menetelmien kehityksen vaiheita ja historian tiedemiesten todellisia kysymyksiä ja havaintoja. Opiskelija voi parhaassa tapauksessa samaistua tiedemieheen, joka on juuri ymmärtämässä jotakin mullistavaa. Molekyylimallinnuksen ja verkkoympäristöjen käyttö opetuksessa olisi erittäin suotavaa myös spektroskopian oppimisen helpottamiseksi. Nykyaikaisesta oppikirjasta tulisi mielestäni löytyä yhteyksiä ilmaisiin tietokoneavusteisiin ohjelmiin ja oppimisen verkkoympäristöihin.

Lukion oppikirjoja tutkimalla saatu tieto lukio-opetuksesta on epäsuoraa ja vaillinaista. Näin voidaan kuitenkin muodostaa suuntaa antava näkemys koko maan lukio-opetuksesta. Tutkimukseni vanhentuu sitä mukaa kun tutkimani oppikirjat jäävät pois käytöstä ja toisaalta opetussuunnitelman perusteet muuttuvat. Vaikka olen pyrkinyt analysoimaan ja vertailemaan oppikirjoja mahdollisimman objektiivisesti, ovat tulokseni väistämättä jossain määrin subjektiivisia. Myös tekemäni suositukset ovat yhteydessä omaan mielenkiintooni spektroskopiasta. Jos joku toinen henkilö tekisi vastaavanlaisen tutkimuksen, hän saattaisi painottaa eri asioita ja esimerkiksi pitää nykyistä spektroskopian osuutta oppikirjoissa ja yo-kokeissa riittävänä.

Spektroskooppiset menetelmät ovat jo laitteistoltaan ja tulkinnallisuudeltaan niin erilaisia kuin lukiolaisten aiemmin opiskelemat menetelmät, että niiden parissa tulisi työskennellä useita lukio-oppitunteja, jotta niistä innostuminen ja niiden ymmärtäminen tulisivat mahdollisiksi. Spektroskooppiset menetelmät ovat kemian rakenneanalytiikan parhaita työkaluja. Nykyaikaista tutkimusta olisi vaikea kuvitella ilman niitä. Spektroskopiaan perehtyminen lukiossa tasoittaisi opiskelijoiden tietä yliopistoon, sillä spektroskopia tulee kemian opiskelijoita vastaan jo ensimmäisinä opiskeluvuosina.



# LIITTEET

## Liite 1. Reaktio 2-kirjan katsaus massaspektrometriaan

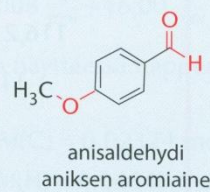


### Massaspektrometria

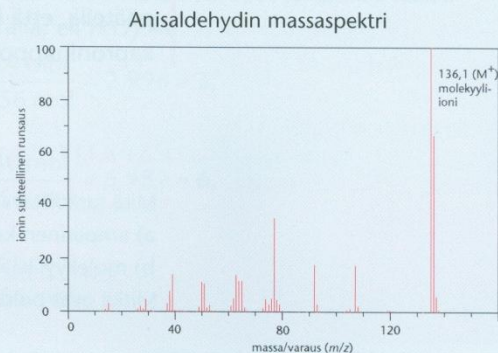
Massaspektrometri on nykyaikaisen laboratorion monipuolisin peruslaite, ja sillä voidaan mitata hyvin pieniäkin pitoisuuksia. Sen avulla saadaan kvalitatiivista (= mitä alkuaineita) ja kvantitatiivista (= kuinka paljon) tietoa jopa monimutkaisten seosten tai kiinteiden pintojen sisältämistä alkuaineista ja yhdisteistä. Menetelmä antaa tietoa myös alkuaineiden isotooppisuhteista ja yhdisteiden rakenteesta.

Massaspektrometrillä voidaan määrittää alkuaineiden ja yhdisteiden moolimassat, joten se on keviden hiukkasten "vaaka". Nykyaikaiseen huippu-urheiluun liittyvät dopinganalyysit suoritetaan massaspektrometrien avulla. Laitteen avulla voidaan myös esimerkiksi tarkkailla leikkauspotilaan anestesian tasoa seuraamalla hänen uloshengitysilmansa koostumusta. Myös monissa satelliiteissa ja avaruusluotaimissa on massaspektrometrit, joiden avulla hankitaan tietoa ilmakehän ja avaruuden kohteiden kemiallisesta koostumuksesta.

Massaspektrometrissä tutkittava näyte on aluksi saatava ionimuotoon. Ionisaatio voidaan nykyisin tehdä useampaa eri tekniikkaa käyttäen. Perinteisissä menetelmissä näyte höyrystetään alhaisessa paineessa ja sitä pommitetaan suureen nopeuteen kiihdytetyillä elektroneilla. Silloin näytteen molekyyleistä irtoaa



elektroneja ja muodostuu ioneja. Nykyaikaisemmissa, hieman hellävaraisemmissa menetelmissä ionit muodostetaan esimerkiksi sumuttamalla näyteliuos voimakkaasti varautuneiden suuttimien läpi kammioon, jossa varautuneet sumupisarot haihtuvat ja pisaroiden varaukset jäävät ioneille. Näin syntyneet positiiviset ionit kiihdytetään sähkökentässä ja johdetaan magneettikenttään. Tämä muuttaa näyteionien lentoratoja, jolloin eri massa-varaus-suhteen omaavat ionit saadaan erotettua toisistaan. Ilmaismelle tuotettu massaspektri tallennetaan tietokoneen muistiin.

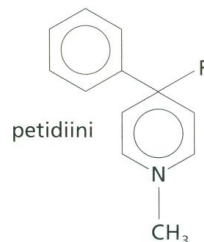


## Liite 2. Ote Neon 2:n harjoitustehtävistä

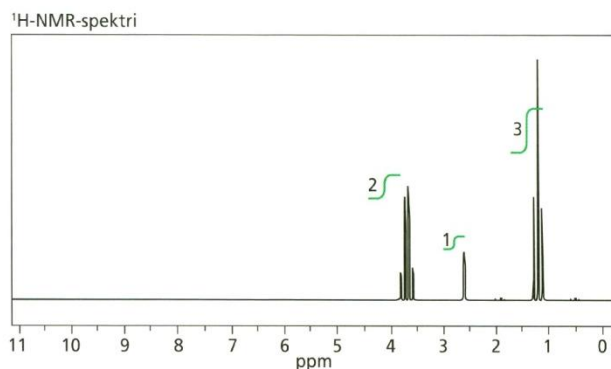
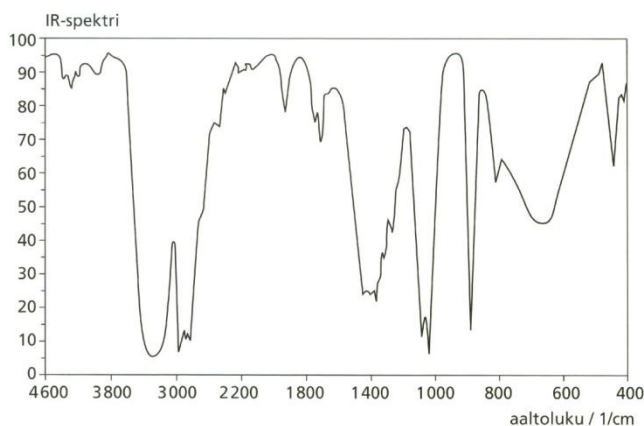


**167.** Alkaloideiksi kutsutaan kasveissa olevia rakenteeltaan monimutkaisia emäksisiä tyyppiyhdisteitä, joilla on voimakkaita fysiologisia vaikutuksia. Alkaloideja voidaan valmistaa joko kasveista eristämällä tai synteettisesti. Alkaloidipitoiset kasvinosat tai niiden vesiuutteet tehdään emäksisiksi, minkä jälkeen ne voidaan edelleen uuttaa esimerkiksi eetteriin. Monien alkaloidien tunnistamiseen voidaan käyttää värireaktioita, joita saadaan aikaan muun muassa hapoilla. 1900-luvulla kehitetyistä ensimmäisistä synteettisistä alkaloideista tunnetaan morfiinin johdannainen petidiini, joka on narkoottinen aine. Se vaikuttaa hermosoluihin aivoissa ja selkärangassa.

Oheisessa petidiinin rakennekaavassa sen sivuketjua on merkitty R:llä.



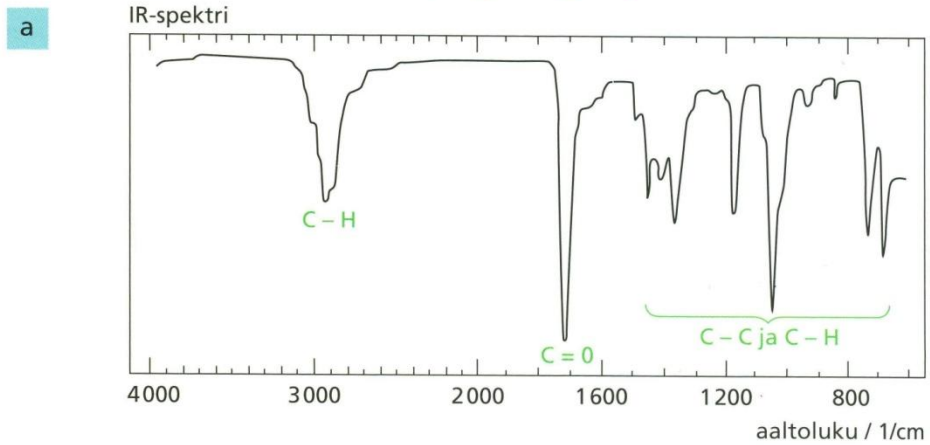
- Yhdisteen massaspektrin molekyylipiikiksi mitattiin 247. Mikä on yhdisteen moolimassa?
- Massaspektrissä näkyvät myös piikit 15 ja 77. Mitkä atomiryhmät voivat tuottaa nämä piikit?
- Kun petidiini hydrolysoitiin, saatiin kaksi eri yhdistettä. Toinen näistä, yhdiste Q, oli osa sivuketjua. Yhdisteen Q tunnistamiseksi tehtiin spektroskooppisia tutkimuksia. Yhdisteen IR- ja  $^1\text{H-NMR}$ -spektrit näyttivät seuraavilta:



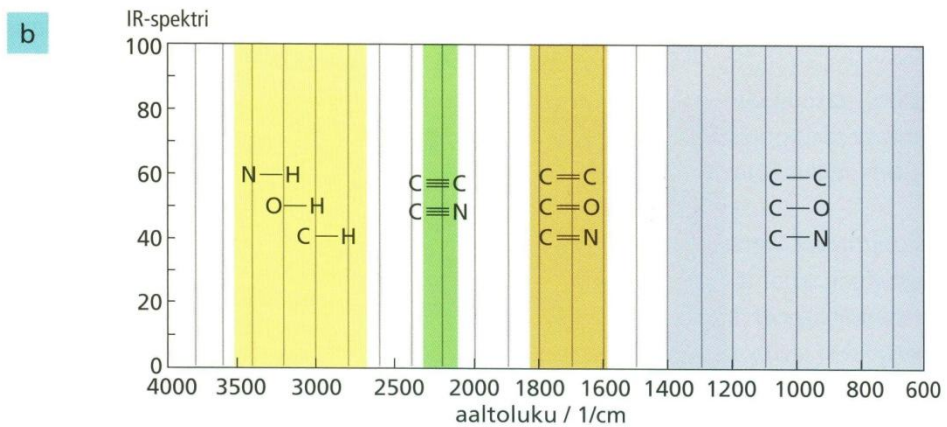
Tunnista yhdisteen Q funktionaaliset ryhmät IR-spektristä ja vetyatomien lukumäärät ja paikat sen  $^1\text{H-NMR}$ -spektristä. Käytä apuna kirjan kuvia 4.15 b) ja e).

- Kokoa kaikki tutkimustulokset ja päätele niiden perusteella sivuketjun R rakenne.

### Liite 3. Ote Neon 2:n spektrien tulkintaa käsittelevästä osiosta



- a) Kuvassa näkyy kaksi selvää absorptiopiikkiä, hieman alle  $3000 \text{ cm}^{-1}$ :ssa ja  $1705 \text{ cm}^{-1}$ :ssa. Lisäksi välillä  $1500\text{--}700 \text{ cm}^{-1}$  on piikkejä. IR-spektriä tulkitaan b-kuvan avulla.



- b) Kuvan avulla voidaan päätellä, että kuvan a absorptiopiikki hieman alle  $3000 \text{ cm}^{-1}$ :ssa syntyy alifaattisista C-H-sidoksista ja  $1705 \text{ cm}^{-1}$ :ssa C=O-sidoksista.



## LÄHTEET

- 1 Singh, J. Y.: Organic Chemistry, Volume II, Global Media, Meerut, **2010**, s. 1-39.
- 2 Gallego, M. G.; Romano, S.; Sierra, M. A.; Nieto, E.: A More Realistic Teaching Style in Spectroscopic Instruction. *J. Chem. Educ.* **2001**, *78*, 765.
- 3 Liotta, L. J.; James-Pederson, M.: Identification of an Unknown Compound by Combined Use of IR, <sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR, and Mass Spectrometry: A Real-Life Experience in Structure Determination. *J. Chem. Educ.* **2008**, *85*, 832.
- 4 Steehler, J. K.: Should Advances Instruments Be Used in Introductory Courses? *J. Chem. Educ.* **1998**, *75*, 274.
- 5 Lucas, T.; Rowley, N. M.: Enquiry-based learning: experiences of first year chemistry students learning spectroscopy. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2011**, *12*, 478.
- 6 Baer, C.; Cornely, K.: Spectroscopy of Simple Molecules. *J. Chem. Educ.* **1999**, *76*, 89.
- 7 Lukiokoulutuksen opetussuunnitelman perusteet 2003, Opetushallitus.
- 8 Opetus- ja kulttuuriministeriön ja Opetushallituksen tulossopimus vuosille 2012-2015, 16.1.2012 ([http://www.oph.fi/download/138783\\_Tulossopimus\\_2012\\_2015.pdf](http://www.oph.fi/download/138783_Tulossopimus_2012_2015.pdf))
- 9 Chatwal, G. R.; Anand, S. K.: Spectroscopy: Atomic and Molecular, Global Media, Mumbai, **2009**, a) s. 1.1, b) s. 1.1-1.4, c) s. 2.149-2.177, d) s. 2.340-2.341, e) s. 2.458-2.464, f) s. 2.29-2.60, g) s. 2.272-2.278, h) s. 2.185-2.199.
- 10 Kaur, H.: Spectroscopy, Global Media, Meerut, **2009**, a) s. 443-450, b) s. 237-246, c) s. 137-138, d) s. 322-335.
- 11 [http://www03.edu.fi/oppimateriaalit/laboratorio/analyysimenetelmat\\_5-1\\_yleista\\_spektroskopiasta.html](http://www03.edu.fi/oppimateriaalit/laboratorio/analyysimenetelmat_5-1_yleista_spektroskopiasta.html), Opetushallitus, 12.3.2012.
- 12 Hudson, J.: Suurin tiede, kemian historia, Art House, Helsinki, **2002**, a) s. 191-192, b) s. 331-333, c) s. 257, d) s. 337
- 13 Fessenden, R.J.; Fessenden J. S.: Organic Chemistry, 6. painos, Brooks/Cole, Berkeley, **1998**, a) takakansi, b) s. 344, c) s. 340, d) s. 359-386, e) Preface v.
- 14 <https://wiola.uef.fi/weboodi/>, Itä-Suomen yliopiston Weboodi, Opinto-opas, 23.3.2012.
- 15 Matthews, M. R.: Science Teaching: The Role of History and Philosophy of Science, Routledge, London, **1994**, s. 200.
- 16 Aksela, M; Karjalainen, V.: KEMIAN OPETUS TÄNÄÄN: Nykytila ja haasteet Suomessa, Kemian opetuksen keskus, Kemian laitos, Helsingin yliopisto, **2008**, s. 26.
- 17 Hyde, R. T.; Shaw, P. N.; Jackson, D. E.; Woods, K.: Integration of Molecular Modelling Algorithms with Tutorial Instruction: Design of an Interactive Three-Dimensional Computer-Assisted Learning Environment for Exploring Molecular Structure. *J. Chem. Educ.* **1995**, *72*, 699.
- 18 Parnis, M. J.; Thompson, M. G. K.: Modeling Stretching Modes of Common Organic Molecules with Quantum Mechanical Harmonic Oscillator. *J. Chem. Educ.* **2004**, *81*, 1196.

- 19 Andersen, E. L.; Li, D.; Owen, N. L.: Solving Molecular Structures Using NMR and Molecular Mechanics. *J. Chem. Educ.* **1992**, *69*, 846.
- 20 Nick, Sabine; Andresen, J; Lübker, B; Thumm, L.: CHEMnet – Structure, Design, and Evaluation of an Online Chemistry Course. *J. Science Educ. Techn.* **2003**, *12*, 333.
- 21 Lahti, P. M.; Motyka, E. J.; Lancashire, R. J.: Interactive Visualization of Infrared Spectral Data: A synergy of Computation, Visualization, and Experiment for Learning Spectroscopy. *J. Chem. Educ.* **2000**, *77*, 649.
- 22 Saarinen, H.; Montonen, M.: Kemian ylioppilastehtävät ratkaisuiheen 2002-2011, 18. painos, MFKA-Kustannus Oy, **2011**, s. 42, 196.
- 23 Ylioppilastutkintolautakunta: Kemian koe 14.3.2012, s. 4.

## AINEISTOLUETTELO

**Kemisti 2**, Lampiselkä, J.; Sorjonen, T.; Karkela, L.; Vakkilainen, K-M.; Kanerva, K.; Mäkelä, R.; Aroluoma, I., 1.-2. painos, WSOY, **2009**.

**Kemisti 3**, Lampiselkä, J.; Sorjonen, T.; Karkela, L.; Vakkilainen, K-M.; Kanerva, K.; Mäkelä, R.; Aroluoma, I., 1.-2. painos, WSOY, **2008**.

**Kemisti 6** (kertauskirja), Lampiselkä, J.; Sorjonen, T.; Karkela, L.; Vakkilainen, K-M.; Kanerva, K.; Mäkelä, R.; Aroluoma, I., 1. painos, WSOY, **2007**.

**Kide 2**, Kalkku, I.; Kalmi, H.; Korvenranta, J., 1. painos, Otava, **2005**.

**Kide 3**, Kalkku, I.; Kalmi, H.; Korvenranta, J., 1. painos, Otava, **2005**.

**Mooli 2**, Lehtiniemi, K.; Turpeenoja, L., 2.-8. painos, Otava, **2005**.

**Mooli 4**, Lehtiniemi, K.; Turpeenoja, L., 1.-4. painos, Otava, **2009**.

**Neon 2**, Hannola-Teitto, M.; Jokela, R.; Leskelä, M.; Näsäkkälä, E.; Pohjakallio, M.; Rassi, M., 2. painos, Edita, **2009**.

**Neon kertauskirja**, Hannola-Teitto, M.; Jokela, R.; Leskelä, M.; Näsäkkälä, E.; Pohjakallio, M.; Rassi, M., 1. painos, Edita, **2008**.

**Reaktio 2**, Kaila, L.; Meriläinen, P.; Pihko, P.; Ojala, P., 1. painos, Tammi, **2011**.

**Reaktio kertauskirja**, Kaila, L.; Meriläinen, P.; Pihko, P.; Ojala, P., 1. painos, Tammi, **2007**.