

Toets Spectroscopie 29 oktober 2012

Antwoorden + correctie normen

OpGave 1

$$a) h\nu = \gamma \cdot \hbar \cdot B \rightarrow B = \frac{h\nu}{\gamma \cdot \hbar} = \frac{2\pi\nu}{\gamma} = \frac{2\pi \times 900 \times 10^6}{2.68 \times 10^8} \\ \rightarrow \underline{B = 21.1 \text{ T}}$$

- formule goed (3)
- kleine rekenfout (-1)

$$b) \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}}{900 \times 10^6 \text{ s}^{-1}} = 0.33 \Rightarrow \underline{\lambda = 33 \text{ cm}}$$

- formule goed (3)
- geen eenheid (-1)

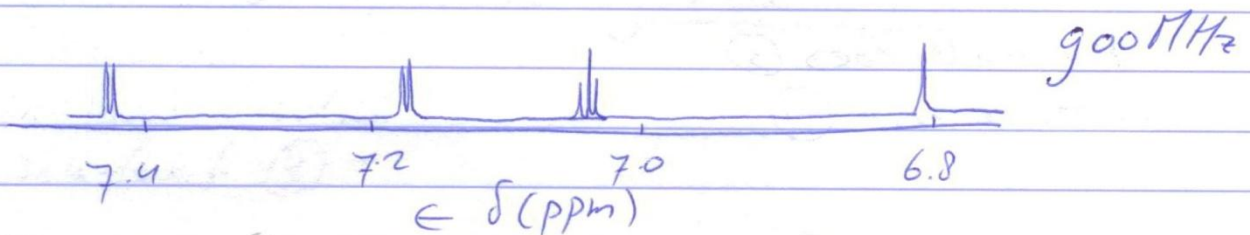
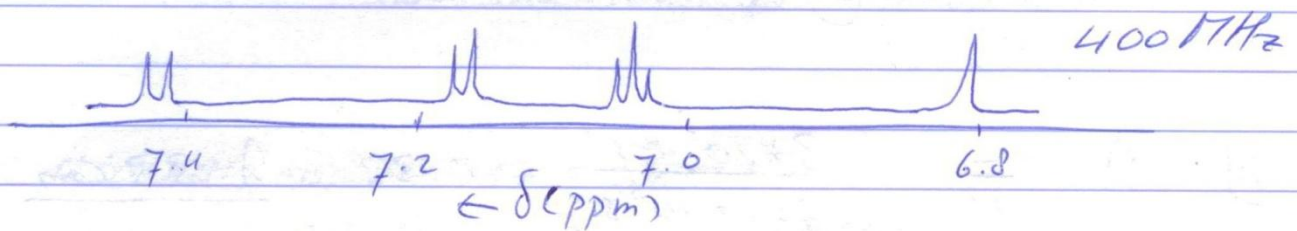
OpGave 1c) - Meet afstand tussen 6.8 en 7.2 ppm
 $\rightarrow 5.92 \text{ cm} = 0.4 \text{ ppm}$, $1 \text{ ppm} = 14.8 \text{ cm} = 400 \text{ Hz}$
($1 \text{ ppm} = 1 \times 10^{-6} \times 400 \text{ MHz} = 400 \text{ Hz}$) $\Rightarrow 400 \text{ Hz} = 14.8 \text{ cm}$
 $1 \text{ cm} = 400 / 14.8 = 27 \text{ Hz}$

- Meet afstand tussen twee piekjes
in doublet of triplet $\Rightarrow J = 0.23 \text{ cm}$
 $\Rightarrow J = 0.23 \times 27 = 6.2 \text{ Hz}$ $\underline{J = 6.2 \text{ Hz}}$

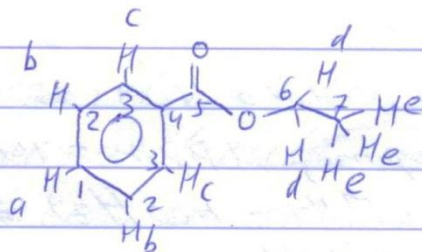
- methode goed, J onnauwkeurig gemeten ($> 7.5 \text{ Hz}$; $< 5 \text{ Hz}$) (3)
- eenheid fout (-1)

Opgave 1 Bonus

De koppelingsconstante J verandert niet (in Hz) in een groot magnetisch veld (wordt bepaald door koppeling tussen naburige H-atomen).^① Piekposities (in ppm) veranderen ook niet (wordt bepaald door afscherming).^② Het aantal Hz/ppm verandert wel: van 400 Hz/ppm naar 900 Hz/ppm. Dit betekent dat in het spectrum op de ppm schaal de piekjes in de dubletten en tripletten een factor $9/4$ dichter bij elkaar komen te liggen.^③



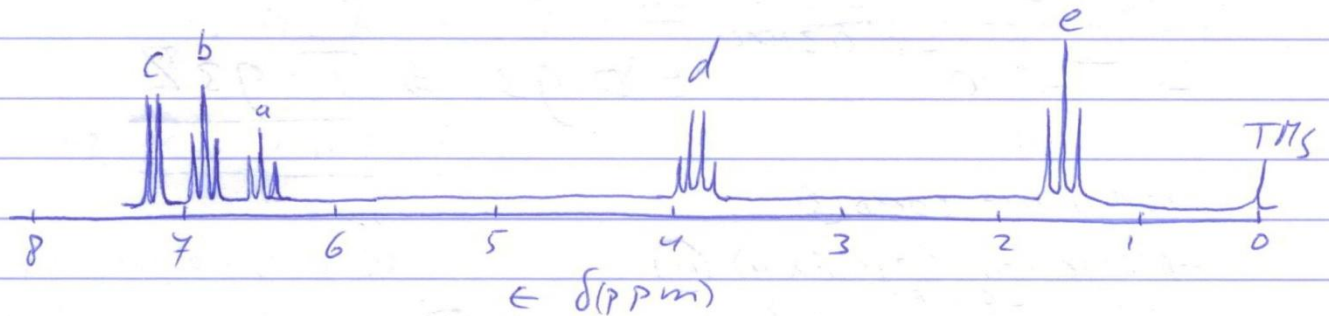
Opgave 2



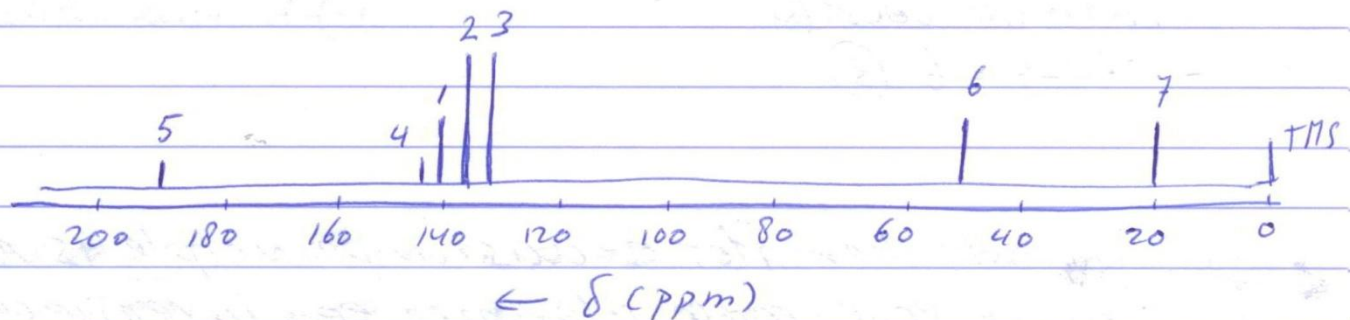
- a) Aantal niet-equivalente H-atomen $\rightarrow 5$ (a t/m e)
Aantal niet-equivalente C-atomen $\rightarrow 7$ (1 t/m 7)

Opdrave 2 b)

- ^1H spectrum a) triplet rond 7 ppm ; b) triplet rond 7 ppm
c) doublet rond 7 ppm d) quartet rond 4 ppm e) triplet ~1.5 ppm



- ^{13}C spectrum 1) piek ~140 ppm, hoogte 1 2) piek ~140 ppm, $h=2$
3) piek ~140 ppm, $h=2$ 4) piek ~140 ppm $h \approx 0.25$ (geen H-atom!)
5) piek ~190 ppm, $h \approx 0.25$ (geen H-atom) 6) piek ~50 ppm, $h=1$
7) piek ~20 ppm, $h=1$



- ^1H spec $\rightarrow \frac{1}{2}$ punt per goede positie, $\frac{1}{2}$ per goed splitsingspatroon
- ^{13}C spec $\rightarrow \frac{1}{2}$ punt per goede positie, $\frac{1}{2}$ punt per goede hoogte (max 5)

OpGAVE 3

$$a) \left. \begin{aligned} T &= \frac{I}{I_0} = 10^{-\epsilon \cdot c \cdot l} \\ \epsilon &= 393 \text{ M}^{-1} \text{cm}^{-1}, c = 8 \times 10^{-5} \text{ M}, l = 1 \text{ cm} \end{aligned} \right\} T = 10^{-393.8 \times 10^{-5}}$$

$$\Rightarrow T = 10^{-0.03144} = 0.93 \Rightarrow \underline{T = 93\%}$$

- formule goed (3)

- kleine fout (bijv. $\epsilon \times 4$) (4)

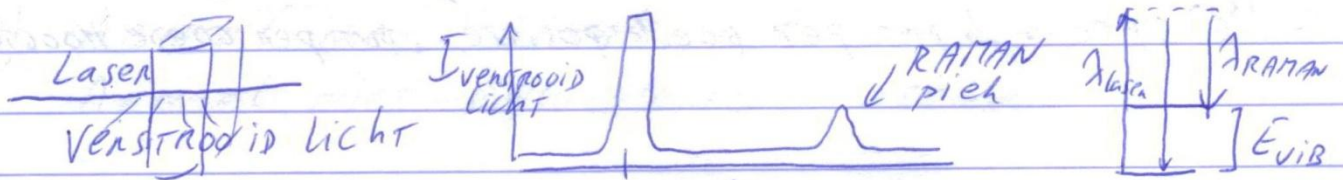
- $T = 10^{+\epsilon \cdot c \cdot l}$ - vanden goed ingevuld (2)

$$b) \text{AANTAL VIBRATIES} = 3N - 6$$
$$3 \times 5 - 6 = 9 \Rightarrow \underline{9 \text{ VIBRATIES}}$$

- formule goed (3)

$$- 3 \times 4 - 6 = 6 \quad (3)$$

c) Ja, DAT kan. Het exclusion principe is Alleen geldig voor moleculen met een inversiecentrum CH_4 heeft geen centrum van symmetrie en dus kunnen vibraties zowel IR als RAMAN actief zijn



$$E_{\text{VIB}} (\text{cm}^{-1}) = \frac{1}{\lambda_{\text{Laser}}} - \frac{1}{\lambda_{\text{RAMAN}}}$$

- exclusion principe + correcte uitlsg (3)

- exclusion principe + foute uitlsg (1)

- techniek - zichtbaan licht in verstrooid licht meten (1)

- techniek Raman - correct (2)

vervolg opgave 3)

$$3e) \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \omega = 2\pi \times c \times \tilde{\nu}$$

$3 \times 10^{10} \text{ cm/s} \quad \text{cm}^{-1}$

$$\rightarrow \omega = 2\pi \times 3 \times 10^{10} \times 3157 = 5.95 \times 10^{14} \text{ rad/s}$$

$$\omega^2 = \frac{k}{\mu}$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{1} + \frac{1}{12} = 1\frac{1}{12} \Rightarrow \mu = 0.923 \times 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg} = 1.54 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$k = \omega^2 \cdot \mu = (5.95 \times 10^{14})^2 \times 1.54 \times 10^{-27} = \underline{545.7 \frac{\text{N}}{\text{m}}}$$

- Basisformule goed ② eenheid (Nm⁻¹) fout ①
- μ goed ①
- ω goed ①

Opgave 4

a) Het Br isotoop ^{79}Br en ^{81}Br komen in een verhouding van 1:1 voor. In een massaspectrum duidt de aanwezigheid van 2 even grote pieken met een verschil van 2 op de aanwezigheid van Br

- ① ①

$$b) \quad n_c = \frac{[M+1] \cdot 98.9}{[M] \cdot 1.1} = \frac{0.14 \times 98.9}{4.15 \times 1.1} = 3 \Rightarrow \underline{3 \text{ C-atomen}}$$

- principeformule goed, meet fout ③

c) 3 signalen $\Rightarrow$ 3 C-atomen - klopt met b)

d) Brede piek Bij $3067 \text{ cm}^{-1} \Rightarrow \text{OH}$ in zuurgroep
 Sterke piek Bij $1717 \text{ cm}^{-1} \Rightarrow \text{C=O}$ reh
 (evt. piek $\sim 1100 \text{ cm}^{-1} \Rightarrow \text{C-O}$ reh)

$\Rightarrow 2 \text{ O-atomen in } \text{C=O} \text{ groep}$

NMR- ^{13}C 178.6 ppm C=O -OH

NMR- ^1H 10.8 ppm $\text{C}^{\text{-OH}}_{\text{=O}}$

① per goed signaal + ① voor $\text{C}^{\text{-OH}}_{\text{=O}}$

e) Twee tripletten $\rightarrow$ duidt op twee CH_2 groepen naast elkaar $\Rightarrow$



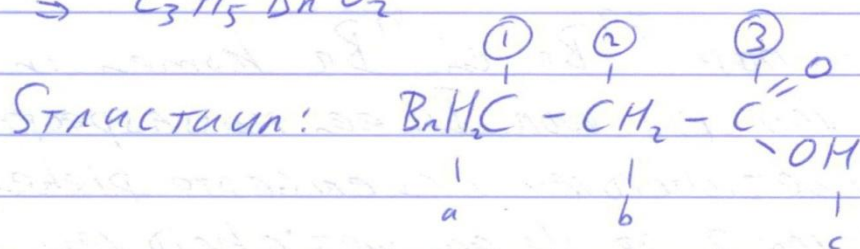
koppelingspatroon door koppeling met twee

H-Atomen:  $\rightarrow$ triplet

1:2:1

- AX_2, AX_2 , four element ②

f) $\text{C}_3 \text{ Br O}_2 \Rightarrow M = 36 + 32 + 79 = 147 \Rightarrow 5 \text{ H voor } 152$
 $\Rightarrow \text{C}_3\text{H}_5\text{BrO}_2$



g) $^1\text{H-NMR}$ $10.8 \text{ ppm} \rightarrow \text{H}_c$, singlet (geen H-buren), integraal 1
 $3.6 \text{ ppm} \rightarrow \text{H}_b$, triplet - koppeling met 2 H-buren, integraal 2
 $3.0 \text{ ppm} \rightarrow \text{H}_a$, triplet - 2 H-buren, integraal 2

^{13}C ③ - 178.6 ppm - lage piek, geen H-atomen

②/① - 38.6 en 24.3 ppm - hoger, H-atomen gekoppeld