

Toets Spectroscopie - 28 oktober 2013

Antwoorden en correctienormen

Opgave 1

a) g_N waarden uit Appendix 5, Ball:

^{13}C 1.405 ^{19}F 5.2567 ^{31}P 2.2634 ^{77}Se 1.068 ^{183}W 0.2338

→ Grootste magnetisch moment ^{19}F met $g_N = 5.2567$
kleinste magnetisch moment ^{183}W met $g_N = 0.2338$

corr. → selectie op basis g_N waarden (2)

→ selectie op basis g_N , ^{19}F grootste, ^{183}W kleinste zonden (4)
noemen van g_N -waarden

→ verkeerd weergeven/oproepen één g_N waarde, vonden goed (4)

b) $h\nu = \gamma \cdot \hbar \cdot B \Rightarrow B = \frac{2\pi\nu}{\gamma}$

$$\gamma = \frac{g_N \mu_N}{\hbar} = \frac{5.2567 \times 5.05 \times 10^{-27}}{1.05 \times 10^{-34}} = 2.53 \times 10^8 \text{ Hz/T}$$

$$\nu = 700 \text{ MHz} \Rightarrow B = \frac{2\pi \times 700 \times 10^6}{2.53 \times 10^8} = \underline{17.4 \text{ T}}$$

corr. → formule goed (2)

γ goed berekend (2)

eenheid T vergeten in antwoord (1)

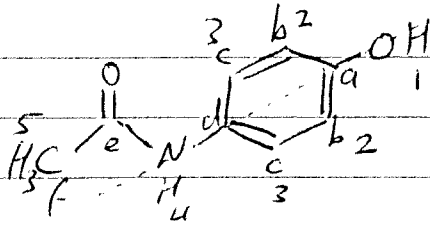
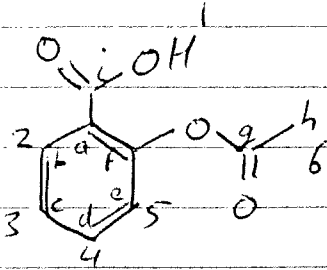
394 T (voor W) (4)

OPGAVE 2

a) Aspirine

Paracetamol

spiegelvlak



C-atomen: $a^4/m1 = 9$

C-atomen $a^4/mf = 6$

H-atomen: $1^4/m6 = 6$

H-atomen $1^4/m5 = 5$

AANTAL signalen is gelijk aan aantal niet-equivalente atomen

→ Aspirine: 9 niet-equivalente C-atomen, 6 niet-equ. H-atomen

→ Paracetamol: 6 " " C-atomen, 5 " " H-atomen

corr. → spiegelvlak paracetamol goed aangegeven ②

→ AANTAL signalen juist: ① per juist antwoord } TOTAAL max ⑤

b) De signalen tussen 7.1 en 8.1 ppm zijn afkomstig van H-atomen in de benzeenring. Het spectrum laat zien dat het Aspirine betreft. Voor Aspirine zijn er vier niet-equivalente H-atomen aan de benzeenring, voor Paracetamol twee van de twee niet-equ. H-atomen in Aspirine hebben twee een buur H-atom (→ 2x doublet) en twee hebben twee niet-equ. H-buren (→ 2x triplet). Dit klopt precies met het spectrum. Voor paracetamol worden twee doubletten verwacht → klopt niet met spectrum → Aspirine

corr. → H-atomen aan benzeenring ②

→ AANTAL signalen (4 Aspirine, 2 paracetamol) goed ③ ②

→ koppeling patronen: 2x doublet, 2x triplet Aspirine ②

→ juiste conclusie ② 2x doublet paracetamol ②

vervolg opgave 2)

c) 500 MHz Apparaat $\Rightarrow 1 \text{ ppm} = 500 \text{ Hz}$

Opmeten AFSTAND $1 \text{ ppm} (7.1-8.1) = 11.28 \text{ cm}$

Afstand tussen pieken in doublet en triplet correspondeert met J . Opmeren $\Rightarrow$ Afstand $\approx 0.16 \text{ cm}$

$$\Rightarrow J = \frac{0.16}{11.28} \times 500 = \underline{7.1 \text{ Hz}}$$

CORR $\rightarrow$ methode goed + juiste argumentatie (3)
 $\rightarrow J$ tussen 6 en 8.5 Hz (2) 5-6, 8.5-9.5 (1) } TOTAAL (5)
 $\rightarrow 1 \text{ ppm} = 500 \text{ Hz}$ (1) = 11-12 cm (1)

Opgave 3

a) AANTAL VIBRATIES $= 3 \cdot N - 6$

$N = 5$ (aantal atomen) $\Rightarrow$ AANTAL VIBS $= 3 \cdot 5 - 6 = \underline{9}$

CORR. $\rightarrow$ formule goed (3)

$\rightarrow 3N - 6$ (1)

$\rightarrow$ goed berekend (5 atomen, $N=5$) (2)

b) De square planar structuur heeft een inversie centrum (i), de tetraëden niet. Alleen voor de square planar structuur geldt het exclusion principe (vibratie nooit toegestaan in IR en RAMAN bij i). Voor XeF_4 zijn vibraties nooit IR en RAMAN TOEGESTAAN $\Rightarrow \text{XeF}_4$ heeft de square planar structuur (en SF_4 tetraëder).

CORR. $\rightarrow$ square planar heeft inversie centrum (1) tetraëden niet (1)

$\rightarrow$ exclusion principe bij inversie symm. (2)

$\rightarrow$ correcte toepassing exclusion principe (2)
(XeF_4 heeft square planar structuur)

TOTAAL
MAX (5)

VERVOLG OP GAVE 3

- c) VIBRATIE (1) → GEEN VERANDERING VAN DIPOL MOMENT
 ⇒ PARITEITS VERBODEN IN IR
 VIBRATIE (2) → GEEN VERANDERING VAN DIPOL MOMENT
 ⇒ PARITEITS VERBODEN IN IR
 VIBRATIE (3) → WEL VERANDERING VAN DIPOL MOMENT
 ⇒ PARITEITS TOEGESTAAN IN IR
 Centrum VAN symmetrie ⇒ exclusion principle ⇒
 (1) en (2) kunnen TOEGESTAAN zijn in RAMAN
 (3) is VERBODEN in RAMAN

(MAX 5)

- CORR → ① per GOED en juist BEARGUMENTEERD ANTWOORD
 → ① en ② TOEGESTAAN IN IR (i.p.v. kan TOEBEST.) (-1)
 → exclusion principle ①

d) Energie Laser foton $514 \text{ nm} \Rightarrow \frac{1}{514 \times 10^{-7} \text{ cm}} = 19455 \text{ cm}^{-1}$
 RAMAN piek bij 730 cm^{-1} lagere energie ⇒
 $E_{\text{RAMAN piek}} = (19455 - 730) \text{ cm}^{-1} = 18725 \text{ cm}^{-1}$
 $\Rightarrow \lambda = \frac{1}{18725 \text{ cm}^{-1}} \times 10^7 \frac{\text{nm}}{\text{cm}} = \underline{534 \text{ nm}}$

- corr. → verschil Laser ↔ RAMAN piek = 730 cm^{-1} ②
 → energie Laser foton in cm^{-1} goed ①
 →

- e) Energie VIBRATIES Bepaald door $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$, k is
 KRACHTCONSTANTE, μ is GEREDEUCEERDE MASSA
 $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \Rightarrow$ TOENEMENDE massa geeft GROTERE
 μ en daardoor een lagere ω en VIBRATIE energie
 GAANDE VAN S → SeTe (S is lichtst, Te zwaarst)
 CORR. → $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ ②
 $\rightarrow \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$ ② → Bindingssterkte S > SeTe + argum. ② juiste
 $\rightarrow$ juiste Redenatie - Grotere massa lagere E_{vib} ②
 $\rightarrow m_S < m_{Se} < m_{Te}$ ②

OPGAVE 4

$$a) n_c = \frac{[M+1] \cdot 98.9}{[M] \cdot 1.1} = \frac{4.2 \cdot 98.9}{100 \cdot 1.1} = 3.8$$

⇒ 4 koolstof atomen

corr. → formule goed ③

→ simpele berekening $\frac{4.2}{1.1} = 3.8 \rightarrow 4 \text{ C-atomen}$ ⑤

→

b) Pieken bij $2800-3000 \text{ cm}^{-1}$ en $\sim 1450 \text{ cm}^{-1}$ duiden op CH_3 en CH_2 groepen.

Piek bij $2250 \text{ cm}^{-1} \rightarrow \text{C}\equiv\text{N}$ NITRIL ($2210-2260 \text{ cm}^{-1}$).

De piek bij 2250 cm^{-1} is zeer karakteristiek. In hetzelfde gebied liggen nauwelijks andere vibraties. Tussen 2100 en 2260 cm^{-1} ligt ook de $\text{C}\equiv\text{C}$ vibratie van een Alkyn, maar daarbij hoort ook een 'strong' piek bij $\sim 3300 \text{ cm}^{-1}$ en die is er niet.

→ Groepen CH_3 , CH_2 en $\text{C}\equiv\text{N}$.

→ Naast C en H ook het element stikstof (N)

corr. → $\text{C}\equiv\text{N}$ op basis 2250 cm^{-1} piek ③

→ CH_3 , CH_2 op basis $2800-3000 \text{ cm}^{-1}$ ①

→ Naast C en H ook N ①

→ $\text{C}\equiv\text{C}$ op basis 2250 cm^{-1} piek ②

$$c) 4 \times \text{C} + 1 \times \text{N} = 4 \times 12 + 14 = 62 \quad] \quad 69 - 62 = 7 \text{ H-atomen}$$

Massa Moleculair ion = 69

corr. 7 H-atomen klopt met integraal in verhouding

$$24.9 : 24.8 : 37.2 \approx 2 : 2 : 3 \Rightarrow 7 \text{ H-atomen}$$

corr. → 7 H-atomen op basis $69 - 62 = 7$ ③

→ 7 H-atomen op basis integraal $2:2:3 \Rightarrow 7$ ③

corr. c) vervolg - Goede antwoorden op basis van verkeerde aannames/conclusies bij a) en b) op zelfde wijze belonen bij correct vervolg

d) C_4H_7N → mol massa 69, 4 C-atomen a)
→ N-aanwzig naast C en H b)
→ 7 H-atomen op basis 2:2:3 int c)

corr. → ② per juiste argument bij a), b) en c) max ⑤
③ voor C_4H_7N zonder argumentatie

e) Signalen bij 1.1 en 1.7 ppm zijn afkomstig van CH_3 en CH_2 groep naast CH_2 groep
Signaal bij 2.4 ppm van CH_2 -groep dichtbij elektronenziegende groep - moet in dit geval N zijn.

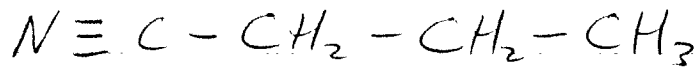
corr. → ② per juiste toekenning 1.1 ppm CH_3 naast CH_2 , 1.7 ppm CH_2 naast CH_2/CH_3 , 2.4 ppm CH_2 naast elektronenziegende groep

f) - Pieken tussen 10 en 20 ppm → CH_3 , CH_2
- Pieken bij 120 ppm $C \equiv N$ (verwacht 110-130 ppm)
- Pieken bij 120 ppm is van $C \equiv N$ en is veel zwakker omdat er geen H-atomen aan het C-atoom zitten

corr. → pieken 10-20 ppm → CH_3 , CH_2 groepen ②
→ pieken bij 120 ppm $C \equiv N$, klopt met tabel ②
→ zwakke pieken omdat er geen H-atomen ③ aan C-atoom zitten

Vervolg opgave 4

g)

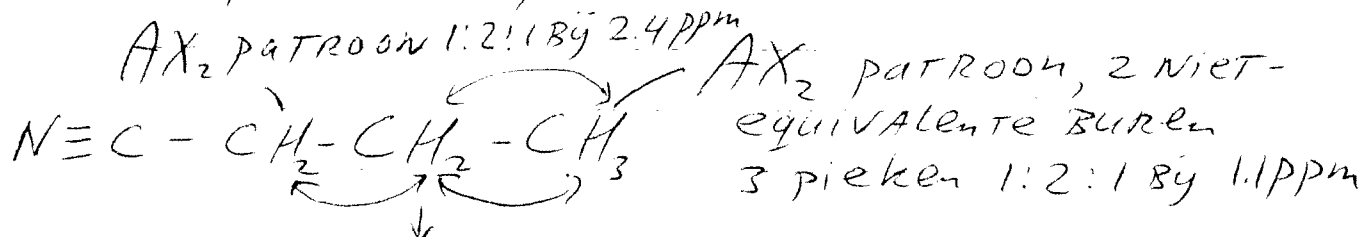


- klopt met IR - Alleen CH_2 , CH_3 en $\text{C} \equiv \text{N}$
- klopt met ^1H NMR - 3 soorten H-atomen in verhouding 2:2:3
- klopt met ^{13}C NMR - 4 soorten C-atomen WAARVAN 3 met kleine δ (10-20 ppm) en 1 met $\delta \approx 120$ ppm
- massa - molmassa is 69, ook fragmenten te herkennen ($\text{C} \equiv \text{N}$ bij 26, $\text{CH}_2 - \text{CH}_3$ bij 29)

CORR. → Goede STRUCTUUR ③

- RECHTVAARDIGING OP BASIS SPECTRA ① per juiste
- foute STRUCTUREN OP BASIS fouten a & m f maar met goede argumenten en twijfels ① - ④ pnt, afhankelijk van juistheid

Bonus! Splitsingspatroon



CH_2 groep heeft 5 niet-equivalente buuren (3 van CH_3 buur en 2 van CH_2 buur) → 6 pieken met intensiteitsverhouding 1:5:10:10:5:1 (klopt met sextet bij 1.7 ppm)

- CORR. → juiste toekenning 2x triplet + 1x sextet + uitleg ③
- juiste intensiteitsverhoudingen ②

