

Toets Spectroscopie

Maandag 26 oktober 2015, 9:00-12:00 uur
Educatorium, Zaal Alfa

Lees dit eerst!

Graag op alle papieren die je inlevert je naam en studentnummer vermelden. Je mag bij het oplossen van de vragen alle meegebrachte boeken, het dictaat Spectroscopie en BINAS gebruiken. Een rekenmachine en liniaal/geodriehoek zijn ook nodig bij enkele opgaven. Mocht je deze vergeten zijn, dan heeft de surveillant er enkele beschikbaar. Tentamenbundels, aantekeningen en uitwerkingen van opgaven mogen **niet** bij de toets gebruikt worden! Geef bij alle antwoorden **een duidelijke toelichting** waarin je aangeeft hoe je tot het antwoord gekomen bent. Na afloop mag je de opgaven meenemen. Veel succes!

Opgave 1

(15)

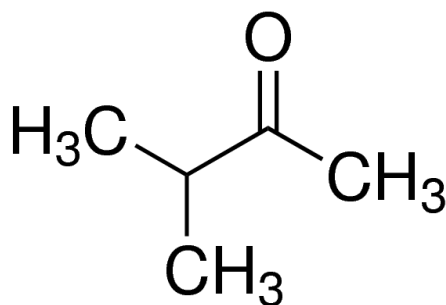
Het aardmagneetveld heeft een sterkte van ongeveer 45 μT .

- a) Wat is de resonantiefrequentie voor het omklappen van de kernspin van protonen in het aardmagneetveld? (5)
- b) Bereken de golflengte van elektromagnetische straling die wordt geabsorbeerd bij de overgang van opgave a). (5)
- c) Welke experimentele problemen voorziet je bij het opnemen van een proton NMR spectrum in het aardmagneetveld? (5)

Opgave 2

(15)

Je vindt op de labzaal een oud potje waarop 3-methyl-2-butanon staat geschreven. Je wilt met NMR bevestigen dat de inhoud inderdaad zuiver 3-methyl-2-butanon is. Je besluit niet CHEMDRAW te gebruiken maar zelf de ^1H en ^{13}C NMR spectra te voorspellen op basis van de kennis die je hebt opgedaan bij de colleges spectroscopie en de tabellen uit McMurry. De structuur van 3-methyl-2-butanon staat hieronder:

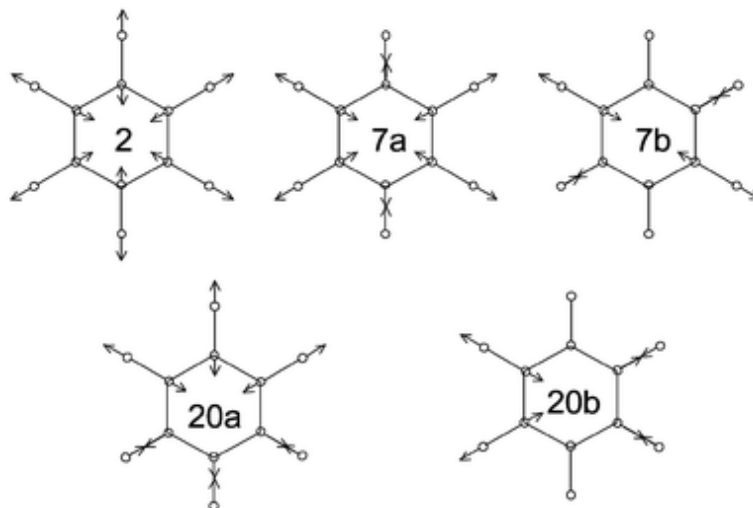


- a) Hoeveel signalen verwacht je in het ^1H NMR-spectrum te zien en hoeveel in het ^{13}C NMR-spectrum op basis van het aantal niet-equivalente H-atomen en C-atomen? (5)
- b) Schets het ^1H en het ^{13}C NMR spectrum. In het ^1H NMR spectrum is het belangrijk zowel de posities als de splitsingspatronen (door koppeling met ^1H burenen) van de pieken correct weer te geven. Geef onder de pieken ook de waarde van de integraal. In het ^{13}C NMR-spectrum zijn de posities van de pieken en de hoogte van de pieken belangrijk. (10)

Opgave 3

(30)

In de onderstaande figuur zijn voor vijf vibraties van het benzeenmolecuul met pijltjes de bewegingsrichtingen van de C- en H-atomen getekend.



- a) Hoeveel vibraties zijn er maximaal mogelijk in een benzeenmolecuul? (5)
- b) Leg voor elk van de bovenstaande vibraties (2, 7a, 7b, 20a, 20b) uit of je de vibratie verwacht waar te nemen in (i) een infrarood spectrum en (ii) een Raman spectrum? Licht je antwoord toe! (10)
- c) Het zijn alle rekvibraties met een energie rond 3000 cm^{-1} . Gebruik deze informatie om de krachtconstante van de C-H binding te berekenen. (5)
- d) Bij welke energie (in cm^{-1}) verwacht je de C-D rekvibratie waar te nemen in gedeutereerd benzeen? (5)
- e) Er wordt een Ramanspectrum opgenomen van benzeen met een Ar-laser die 514 nm (groen) licht uitzendt. Bereken de golflengte waarbij je de Ramanpiek voor de C-H rekvibratie van $\sim 3000\text{ cm}^{-1}$ verwacht waar te nemen in een Ramanspectrum voor benzeen (5)

Bonusvraag:

(5)

B1) Welke binding heeft een grotere krachtconstante: een C-O binding of een C-H binding. Licht je antwoord toe.

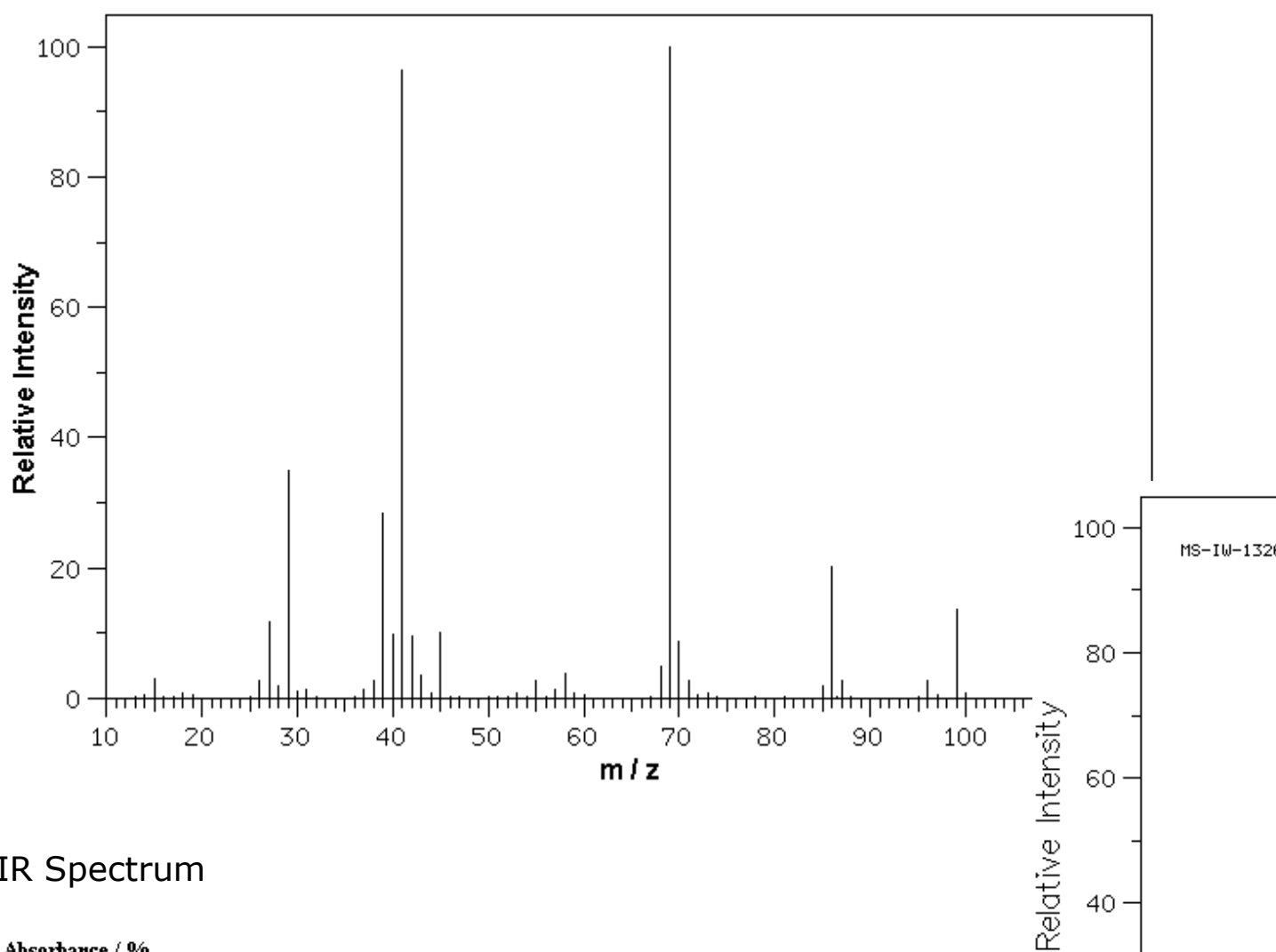
Opgave 4

(40)

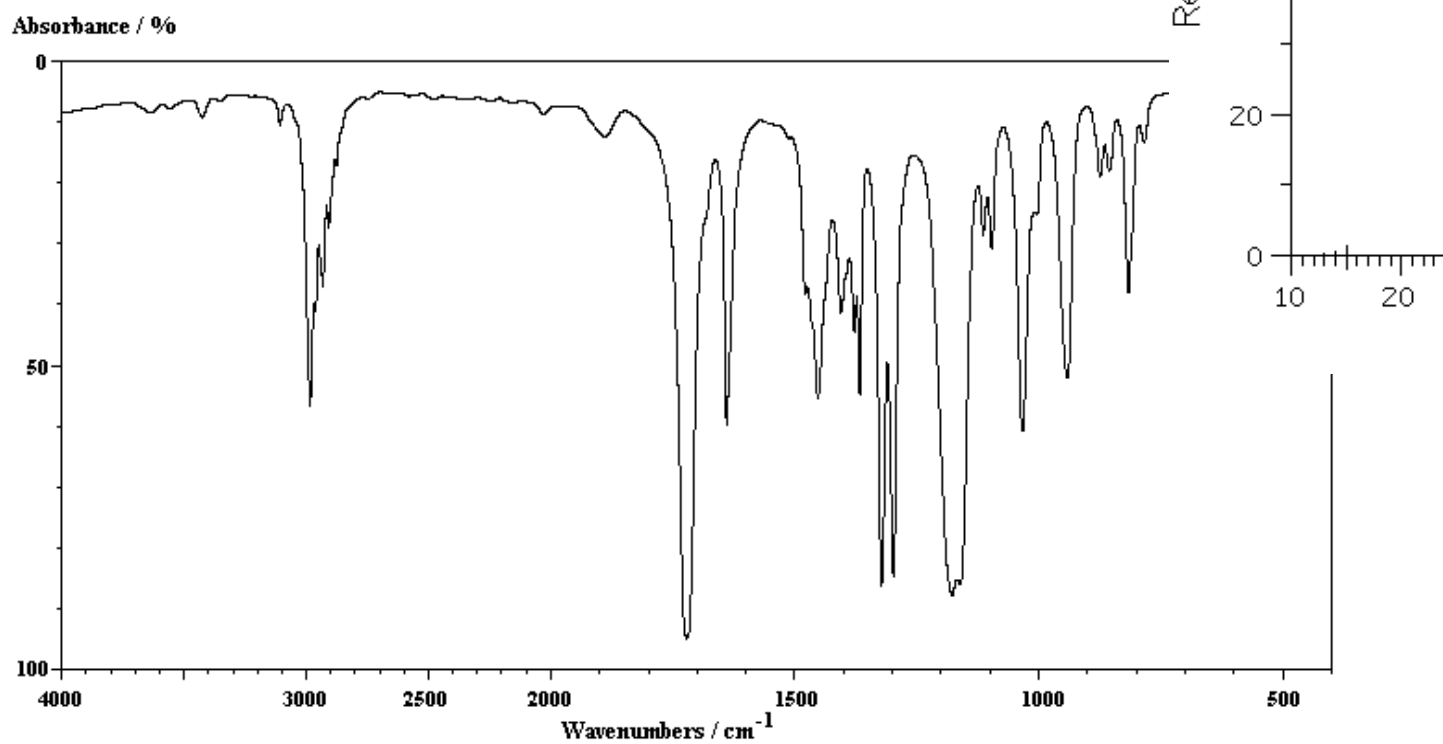
Deze opgave betreft een structuuropheldering van een onbekend molecuul X aan de hand van 4 spectra (Massa, IR, ^1H -NMR en ^{13}C -NMR). De spectra staan op de hierna volgende pagina's. Aan de hand van vragen worden de spectra geïnterpreteerd om uiteindelijk tot de juiste structuur te komen. Ook als deelvragen niet juist beantwoord worden en daardoor uiteindelijk een verkeerde structuur voor X bepaald wordt, kunnen er veel punten behaald worden door aspecten bij de deelvragen correct te interpreteren.

- a) In het massaspectrum is de piek van het moleculaire ion te zien bij een m/z waarde van 114 met een intensiteit van 12 mm. Bij een m/z van 115 is een zwakke piek zichtbaar met een relatieve intensiteit van 0.8 mm. Bepaal het aantal C-atomen in het onbekende molecuul. (5)
- b) Beredeneer op basis van het massaspectrum of er in het molecuul Cl of Br aanwezig kan zijn. (5)
- c) Het IR spectrum geeft informatie over functionele groepen. Doe op basis van het IR spectrum een uitspraak over de aanwezigheid van de volgende groepen in het molecuul: -O-H, -N-H, C=O, C-O en C=C. Motiveer je antwoord! (5)
- d) Het ^1H -NMR spectrum laat drie singlets, een triplet en een quartet zien. Welke groep kan aanleiding geven tot het triplet en quartet? Geef ook een toekenning voor de drie singlets. (5)
- e) In het ^{13}C -NMR spectrum zijn zes pieken te zien met verschillende intensiteit. Ken de pieken toe en verklaar de intensiteiten. (5)
- f) Geef de brutoformule van het molecuul op basis van de informatie uit de bovenstaande vragen en de integralen in het ^1H NMR spectrum (5)
- g) Geef de structuur van het onbekende molecuul X. Geef aan hoe deze past bij de informatie die je uit de verschillende spectra verkregen hebt. Geef ook aan waar je (eventueel) twijfel hebt (goed gemotiveerde twijfel wordt beloond, misplaatste zelfverzekerdheid niet!). (5)
- h) De sterkste pieken in het massaspectrum liggen bij $m/z=29$, $m/z=41$ en $m/z=69$. Ken op basis van de structuur bij g) deze fragmenten toe. (5)

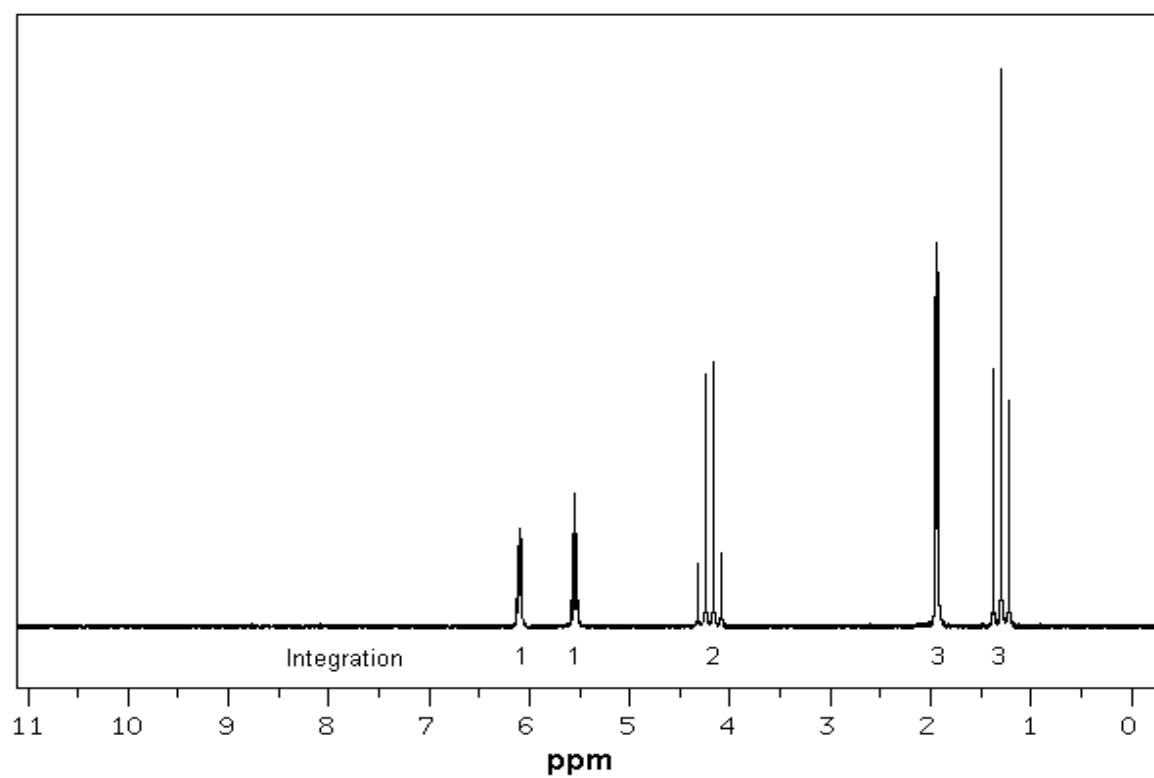
Massa Spectrum



IR Spectrum



^1H NMR Spectrum



^{13}C NMR Spectrum

