
Opgave 1

Bereken de frequentie (Hz) en het golfgetal (cm^{-1}) van straling met een golflengte van 5000 nm.

$$f = c / \lambda \quad \text{met } \lambda = 5,000 \times 10^{-6} \text{ m} \quad \blacktriangleright \quad f = 2,998 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} / 5,000 \times 10^{-6} \text{ m} = \mathbf{5,996 \times 10^{13} \text{ Hz}}$$

$$\sigma = 1 / \lambda \quad \text{met } \lambda = 5,000 \times 10^{-4} \text{ cm} \quad \blacktriangleright \quad \sigma = 1 / 5,000 \times 10^{-4} \text{ cm} = \mathbf{2000 \text{ cm}^{-1}}$$

Opgave 2

Bereken de frequentie (Hz) en de golflengte (nm) van straling met een golfgetal van 2500 cm^{-1} .

$$f = c / \lambda \quad \sigma = 1 / \lambda \quad f = c \cdot \sigma \quad \lambda = 1 / \sigma$$

$$\sigma = 2,500 \times 10^3 \text{ cm}^{-1} \quad \blacktriangleright \quad \sigma = 2,500 \times 10^5 \text{ m}^{-1} \quad (100 \times \text{zoveel golven op 1 m als op 1 cm ..})$$

$$f = c \cdot \sigma \quad \blacktriangleright \quad f = 2,998 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} \times 2,500 \times 10^5 \text{ m}^{-1} = \mathbf{7,495 \times 10^{13} \text{ Hz}}$$

$$\lambda = 1 / \sigma \quad \blacktriangleright \quad \lambda = 1 / 2,500 \times 10^5 \text{ m}^{-1} \quad \blacktriangleright \quad 4,000 \times 10^{-6} \text{ m} \quad \blacktriangleright \quad \mathbf{4000 \text{ nm}}$$

Opgave 3

Bereken het golfgetal (cm^{-1}) en de golflengte (nm) van straling met een frequentie van $5,0 \times 10^{13} \text{ Hz}$.

$$\sigma = 1 / \lambda \quad f = c \cdot \sigma \quad \lambda = 1 / \sigma$$

$$\sigma = f / c \quad \blacktriangleright \quad 5,0 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} / 2,998 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} = 1,668 \times 10^5 \text{ m}^{-1} \quad \blacktriangleright \quad \mathbf{1668 \text{ cm}^{-1}}$$

$$\lambda = 1 / \sigma \quad \blacktriangleright \quad \lambda = 1 / 1,668 \times 10^5 \text{ m}^{-1} \quad \blacktriangleright \quad 5,996 \times 10^{-6} \text{ m} \quad \blacktriangleright \quad \mathbf{5996 \text{ nm}}$$

Opgave 4

Welke van de volgende bindingen absorberen IR-straling door rekvibraties?

- a C-C in ethaan
- b C-H in ethaan
- c C-Cl in chloormethaan
- d C=C in etheen
- e N≡N in stikstofgas

Alleen moleculen met een (trillende) dipool. Dat zijn C-H in ethaan (b) en C-Cl in

chloormethaan (c).

Opgave 5

Vergelijk het spectrum in afbeelding 12.8 met dat van ethanol (12.7) voor golfgetallen $> 1000\text{ cm}^{-1}$.

a Welke sterke absorptie ontbreekt nu?

De brede piek van -OH bij circa 3500 cm^{-1}

b Welke sterke absorptie is er bij gekomen?

De scherpe piek bij 1700 cm^{-1} van C=O

c Welke van de volgende verbindingen is vermoedelijk de component van spectrum 12.8?

methanol, ethaanzuur, diethylether, butanon, butanol.

butanon

Opgave 6

Bij het spectrum in afbeelding 12.9.

a Welke functionele groepen kun je herkennen?

ca 3300 cm^{-1} -OH

ca 1700 cm^{-1} C=O

ca 2800 cm^{-1} C-H

ca 1250 cm^{-1} C-O

b Welke van onderstaande stoffen moet het zijn?

1-propanol, ethanal, ethaanzuur, ethylacetaat.

ethaanzuur

Opgave 7

Uit welke bijdragen bestaat de totale geabsorbeerde energie bij een moleculaire spectrale absorptie?

Energie van: elektronen, vibraties en rotaties.

Opgave 8

Welke oplosmiddelen zijn bruikbaar bij IR-spectrometrie?

Alle vloeistoffen geven storende absorpties. Trichloormethaan en tetrachloormethaan het minst.

Opgave 9

- a Bereken de frequentie en het golfgetal van straling waarvan de golflengte 8800 nm bedraagt.

$$\sigma = 1 / \lambda \quad \blacktriangleright \quad 1 / 8,800 \times 10^{-6} = 1,136 \times 10^5 \text{ m}^{-1} \quad \blacktriangleright \quad \mathbf{1136 \text{ cm}^{-1}}$$

$$f = c \cdot \sigma \quad \blacktriangleright \quad 2,998 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} \times 1,136 \times 10^5 \text{ m}^{-1} = \mathbf{3,41 \times 10^{13} \text{ Hz}}$$

- b Bereken de frequentie en de golflengte (nm) van straling waarvan het golfgetal 750 cm⁻¹ bedraagt.

$$f = c \cdot \sigma \quad \blacktriangleright \quad 2,998 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} \times 7,50 \times 10^4 \text{ m}^{-1} = \mathbf{2,25 \times 10^{13} \text{ Hz}}$$

$$\lambda = 1 / \sigma \quad \blacktriangleright \quad \lambda = 1 / 7,50 \times 10^4 \text{ m}^{-1} \quad \blacktriangleright \quad \mathbf{1,33 \times 10^{-5} \text{ m}} \quad (1,33 \times 10^4 \text{ nm})$$

- c Bereken het golfgetal en de golflengte (nm) van straling waarvan de frequentie $2,50 \times 10^{13}$ Hz.

$$\sigma = f / c \quad \blacktriangleright \quad \sigma = 2,50 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} / 2,998 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} = 8,34 \times 10^4 \text{ m}^{-1} \quad \blacktriangleright \quad \mathbf{834 \text{ cm}^{-1}}$$

$$\lambda = 1 / \sigma \quad \blacktriangleright \quad \lambda = 1 / 8,34 \times 10^4 \text{ m}^{-1} = 1,20 \times 10^{-5} \text{ m} \quad \blacktriangleright \quad \mathbf{1,20 \times 10^4 \text{ nm}}$$

Opgave 10

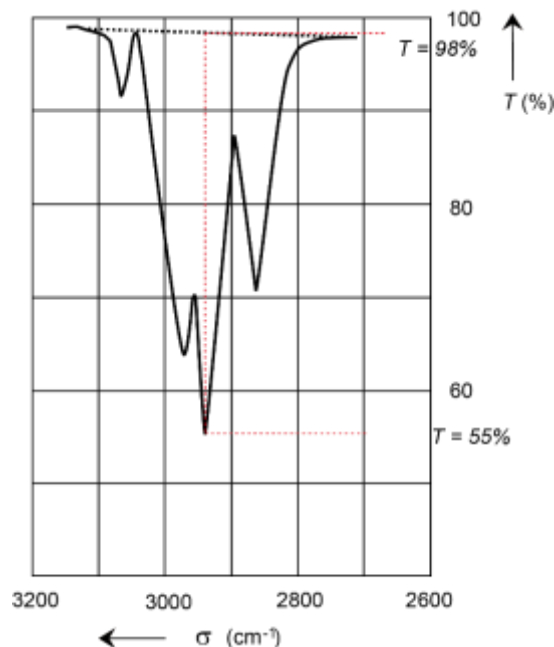
Bepaal de extinctie van de C-H band bij 2940 cm⁻¹ in afbeelding 12.18.

Uit de afbeelding:

$$T_{\text{piek}} = 55\%$$

$$T_0 = 98\%$$

$$E = -\log (55/98) = \mathbf{0,25}$$



Opgave 11

Ga in afbeelding 12.19 na bij welke golfgetallen de absorptiepieken liggen waaraan men kan zien dat soja-olie een ester is en lange alkylketens bevat met enkele dubbele bindingen.

Een ester heeft een dubbelgebonden O:

We zien een scherpe piek bij 1750 cm^{-1} C=O (tabel: $1650 - 1900\text{ cm}^{-1}$)

Ester binding: sterke C-O-C absorptie bij 1160 cm^{-1} (tabel: $1020 - 1275\text{ cm}^{-1}$)

Lange koolstofketens:

Sterke absorpties bij 2850 cm^{-1} C-H rek (tabel: $2700-3000\text{ cm}^{-1}$)

En bij 1470 cm^{-1} C-H buig (tabel: $1300-1475\text{ cm}^{-1}$)

-OH absorptie ontbreekt, dus geen zuur

Opgave 12

Verbinding van afbeelding 12.20 heeft een brutoformule van $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$.

Welke verbinding zal dit waarschijnlijk zijn?

We zien:

C=O dubbelgebonden O van een keton ester, zuur, sterke absorptie: 1700 cm^{-1}

Geen brede -OH absorptie ($3000 - 3700\text{ cm}^{-1}$) geen carbonzuurgroep

C-O-C etherbinding bij ($1100 - 1200\text{ cm}^{-1}$)

Ethylacetaat