



# Kernspinresonantie (NMR)

Keuzeopdracht scheikunde voor 6 vwo

## Een verrijkende opdracht over koolstofchemie en analysetechnieken

**Voorkennis: Koolstofchemie**

**Benodigde tijd: 8 SLU**

© Junior College Utrecht 2013

Deze opdracht gaat over de analysetechniek NMR (Nuclear Magnetic Resonance) oftewel kernspinresonantie. Hiermee kun je moleculen in detail onderzoeken. Je kunt bijvoorbeeld met behulp van NMR isomeren van elkaar onderscheiden. NMR wordt veel toegepast in laboratoria om molecuulstructuren op te helderen. NMR speelt ook een grote rol bij het onderzoek naar eiwitmoleculen. Niet alleen in chemische en fysische laboratoria maar ook in de medische wereld maakt men gebruik van kernspinresonantie, denk aan de bekende MRI-scans waarmee artsen in je lichaam kunnen kijken.

Met deze opdracht ga je je eerst verdiepen in de theorie van NMR. Daarna ga je de uitkomsten van een NMR-analyse interpreteren.

### Oriëntatie

De theorie van NMR ga je je eigen maken op basis van een bijgevoegde powerpoint presentatie. Je zoekt aanvullende informatie op internet of je vraagt nadere uitleg aan je docent.

#### **Vraag 1. Kernspinresonantie (NMR)**

Bestudeer een powerpoint presentatie over NMR. Probeer uitleg te vinden bij begrippen die je niet meteen duidelijk zijn. Raadpleeg zonodig je docent of een van de volgende websites:

- [www.ch.ic.ac.uk/local/organic/nmr.html](http://www.ch.ic.ac.uk/local/organic/nmr.html)
- [www.cis.rit.edu/htbooks/nmr-main.htm](http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr-main.htm)
- <http://teaching.shu.ac.uk/hwb/chemistry/tutorials/molspec/nmr1.htm>



Figuur 1 NMR-apparaat

Mobieltjes en pacemakers worden blijvend ontregeld door zijn sterke magnetische veld!

## Verdieping en onderzoek

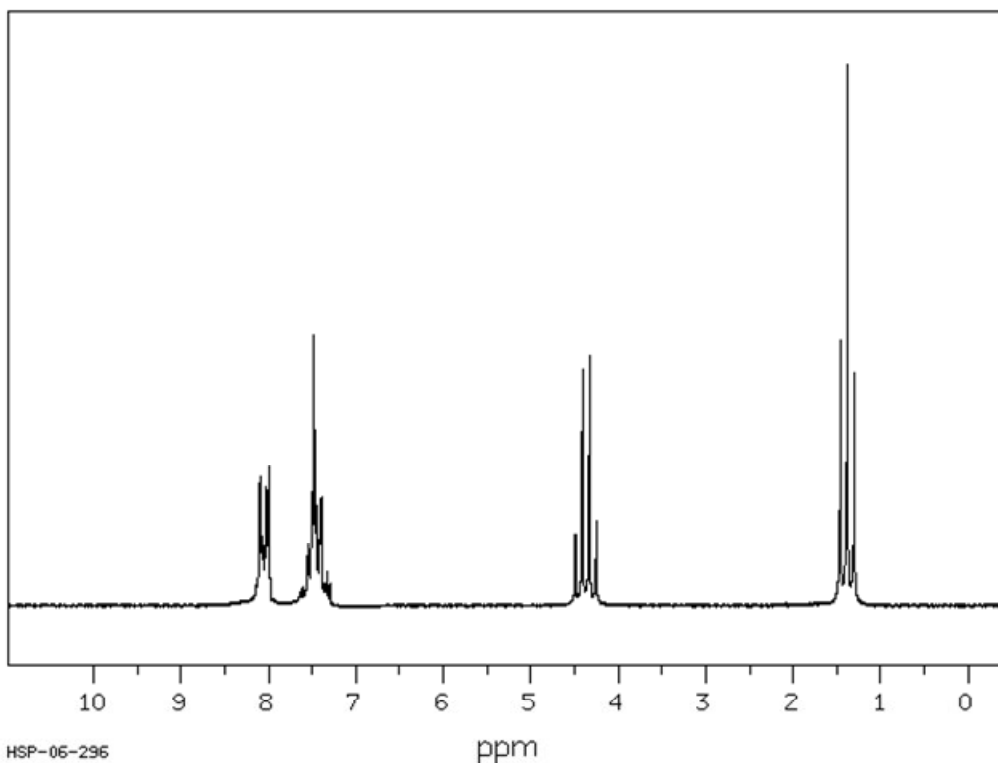
In de volgende opdrachten verwerk je de theorie van kernspinresonantie. Als je ze af hebt, kun je je docent om de uitwerkingen vragen en daarmee je resultaten controleren.

### **Vraag 2. Met spectrum van ethylbenzoaat**

---

Hieronder vind je het spectrum van ethylbenzoaat, gemeten met NMR.

- a. Teken de structuur van ethylbenzoaat (de ester van ethanol en benzeencarbonzuur)
  - b. Waar in het spectrum zitten de signalen van de benzeenring?
  - c.
    - c.1 Hoeveel verschillende 'soorten' H-atomen zitten er in dit molecuul?
    - c.2 Wat is het verschil? Welke specifieke kenmerken hebben deze 'soorten'?
    - c.3 Welke signalen horen bij welke H-atomen?
    - c.4 Controleer de toekenning van de signalen bij b.3 door de verhouding van de signaaloppervlakken te bepalen.
  - d.
    - d.1 Hoeveel directe H-buuratomen hebben de verschillende H-atomen?
    - d.2 Hoe zie je dat in de opsplitsing van de signalen?
    - d.3 Ken nu alle signalen toe aan de verschillende H-atomen.
  - e. Het triplet bij 7.52 ppm ziet er niet zo mooi uit. Hoe zou dat kunnen komen? (Tip: Een benzeenring is erg stabiel door zijn elektronenwolken die over de gehele ring zijn verdeeld)
-



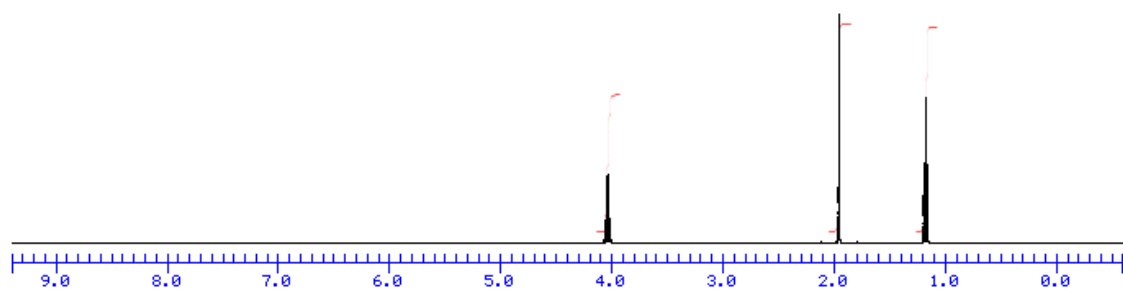
Ethylbenzoate  
 signaalopp:      2      3                              2                              3

**Vraag 3. Nader onderzoek**

Je analyseert met NMR de stof  $C_4H_8O_2$ . Je wilt weten hoe het molecuul precies in elkaar zit. Volg de volgende werkwijze voor het toekennen van signalen in het spectrum aan bestanddelen van het molecuul:

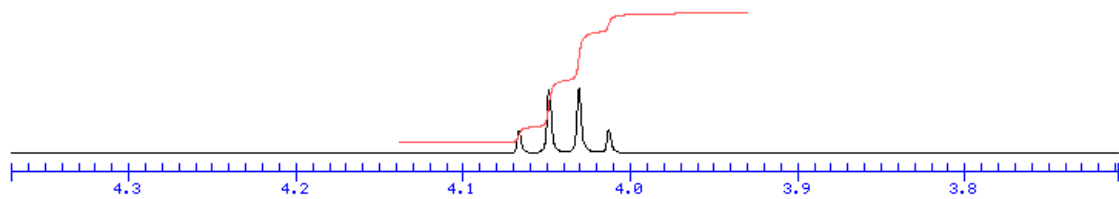
- Bepaal het aantal signalen in het spectrum
- Bepaal de verhouding tussen de oppervlakken onder de signalen
- Bedenk welke H-atomen de meeste last zullen hebben van de elektronenzuigende werking van de zuurstofatomen (dus hoe zullen de signalen verschuiven?)
- Kijk hoeveel burens ieder opgesplitst signaal heeft
- Wijs nu de signalen toe aan de H-atomen en leid daarmee de structuur van de ontbrekende stof af.

C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub> totaalspectrum

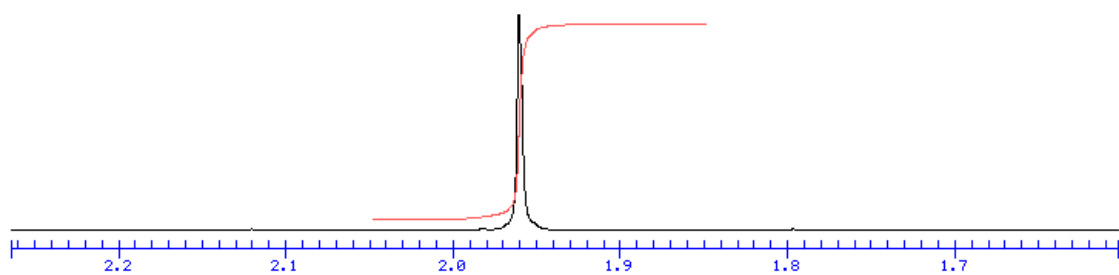


Van de pieken 1, 2 en 3 (vlnr) zijn vergrote deelspectra gegeven met meer zicht op de details.

Deelspectrum piek1

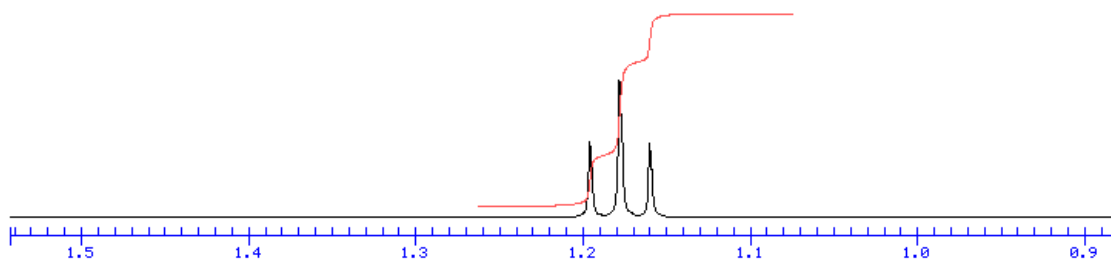


Deelspectrum piek 2



---

### Deelspectrum piek 3



### Verder onderzoek

Een website waarop spectra van een groot aantal organische stoffen te vinden zijn is:

[http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre\\_index.cgi?lang=eng](http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi?lang=eng)

Kies een of meer stoffen uit en interpreteer de bijbehorende NMR-spectra.

### Product

Bedenk met elkaar welke informatie je aan je docent en je medeleerlingen wilt/moet presenteren. Welke vorm (poster, PowerPoint, demo van een experiment, ...) past daar het beste bij?

Bedenk goed wat je publiek volgens jullie (ten minste) geleerd moet hebben als ze kennis hebben genomen van jullie product. Besteed aan die boodschap de meeste aandacht. Bedenk een vraag die een medeleerling moet kunnen beantwoorden als hij/zij jullie product heeft bestudeerd.