

## **<sup>1</sup>H-NMR**

Proton-nucleair-magnetische resonantie spectroscopie (H-NMR) is een specialistische chemische analyse methode, die erg veel inzicht in de structuur van een molecuul kan geven. Waterstof atomen bestaan uit 1 elektron en 1 proton en worden daarom soms ook protonen genoemd. Protonen gedragen zich als kleine magneetjes en als zo'n magneetje zich in een sterk magnetisch veld bevindt, dan kan dat dat magneetje met het veld mee of juist tegen dit externe magnetische veld in gaan staan. Tussen deze twee staten, waarin het magneetje zich kan bevinden in dit veld, zit een energieverval. Door radiogolven met precies de goede frequentie (en dus energie) door het monster te sturen kan de staat van het magneetje worden omgezet, waarbij de radio golf wordt geabsorbeerd. Hoe groot het energieverval tussen de twee staten van het magneetje in het veld is, wordt bepaald door de omliggende atomen van het waterstofatoom. Door radiogolven met verschillende frequenties door een monster te sturen en te kijken welke frequenties worden geabsorbeerd, kan de chemische structuur van een molecuul erg nauwkeurig in kaart worden gebracht.

H-NMR spectroscopie wordt erg veel gebruikt in de organische chemie om gedetailleerde informatie te winnen over de molecuulstructuur van pure monsters, vooral bij ingewikkelde syntheses met meerdere tussenproducten. Er wordt nog steeds geïnnoveerd in deze techniek, om bijvoorbeeld de structuur van complexe eiwit ketens in kaart te kunnen brengen.

## **Infraroodspectroscopie**

Infraroodspectroscopie (IR-spectroscopie) is een veelgebruikte chemische analyse methode die kwalitatief en kwantitatief gebruikt kan worden. Met behulp van deze techniek kan de moleculaire structuur van een stof worden bepaald en kan er gekeken worden of de gewenste stof aanwezig is en of er andere stoffen in het monster aanwezig zijn (vervuilingen). Hiervoor wordt er gebruik gemaakt van het infrarode deel van het elektromagnetische spectrum. Infrarood licht kan geabsorbeerd worden door de bindingen tussen de atomen in een molecuul (covalente bindingen). Licht van een bepaalde frequentie dat wordt geabsorbeerd kan hierbij typerend zijn voor de aanwezigheid van een specifieke functionele groep, zoals een alcohol groep. Door licht met veel verschillende frequenties op een te onderzoeken monster te laten vallen en te kijken welke frequenties worden geabsorbeerd kan een beeld van de moleculaire structuur van het monster worden geschetst.

IR-spectroscopie is bruikbaar voor organische en anorganische vaste stoffen en vloeistoffen waar geen water in aanwezig is. IR-spectroscopie is vooral erg bruikbaar om aanwezigheid van een bepaalde stof te verifiëren. In geval van onbekende stoffen kan het een identificatie geven om wat voor een stof het gaat. De techniek is relatief simpel en kent vele toepassingen en wordt daardoor veel gebruikt, bijvoorbeeld bij het testen van de puurheid van een medicijn of het meten van alcohol in bloed van bestuurders.

## **Dunnelaagchromatografie**

Dunnelaagchromatografie (TLC) kan gebruikt worden om de aanwezigheid van een stof in een monster te bevestigen en om een indicatie te krijgen van de puurheid van dat monster. Bij TLC wordt er gebruik gemaakt van een glad oppervlak, zoals een glazen of plastic plaat, die gecoat is met een adsorberend materiaal. Deze stationaire fase wordt vervolgens in een loopvloeistof geplaatst met daarin het opgeloste monster. Door capillaire werking zal de loopvloeistof omhoog getrokken worden langs het plaatje. Tijdens dit proces kunnen stoffen uit het monster, die zijn opgelost in de loopvloeistof, aan het adsorberende materiaal op de stationaire fase gaan hechten. Hoe sneller, en dus op welke hoogte, een stof kristalliseert op het oppervlak is afhankelijk van de chemische eigenschappen van de stof en van het adsorberende materiaal. Hierdoor zullen opgeloste vaste stoffen van elkaar scheiden en op verschillende plekken op de stationaire fase hechten.

Als bekend is hoe ver een stof op een bepaalde stationaire fase komt (retardatie factor), kan deze techniek gebruikt worden om kwalitatief te bevestigen dat een stof aanwezig is in een vaste stof monster. Daarnaast kan het aantal componenten dat aanwezig is in een monster bepaald worden. Dunnelaagchromatografie wordt bijvoorbeeld gebruikt om de aanwezigheid van pesticiden in drinkwater te detecteren.

## **IJzerchloride test**

De ijzerchloride test is een colorimetrische analyse methode, waarmee snel de aanwezigheid van phenolen in een monster aangetoond kan worden. Bij de test wordt de te onderzoeken stof opgelost in water of ethanol. Aan deze oplossing wordt vervolgens een ijzerchloride oplossing toegevoegd. Als er phenolen aanwezig zijn in het monster, zal de oplossing een intense blauwe, rode of groene kleur krijgen. Dit komt doordat ijzer(III) ionen complexen vormen met phenolen, die deze typische kleuren geven. Deze test is een simpele en erg snelle manier om phenolen in een monster aan te kunnen tonen. De test wordt bijvoorbeeld gebruikt om salicylzuur in urine aan te tonen bij het vermoeden van een aspirine overdosis.

## **Smeltpuntbepaling**

Smeltpuntbepaling is een erg eenvoudige techniek die gebruikt kan worden om de zuiverheid van een monster te bepalen. Daarnaast kan het helpen bevestigen dat een monster uit een bepaalde stof bestaat. Het smeltpunt is een vaste fysische eigenschap die typerend is voor een bepaalde stof. In pure vorm smelt een stof altijd op dezelfde temperatuur en de temperatuur zal weinig veranderen gedurende de fase overgang. Bevat het monster echter verontreinigingen, dan zal het temperatuurgebied waarin het monster smelt steeds groter worden. Daarnaast zal de stof eerder beginnen te smelten als er verontreinigingen aanwezig zijn. Door een monster langzaam te verwarmen en bij te houden wanneer de stof begint te smelten en volledig gesmolten is, kan het smeltpunt of het smelttraject bepaald worden.

Smeltpuntbepaling is vooral bruikbaar bij synthese van een vaste stof om te bepalen of de verwachte stof inderdaad aanwezig is in het monster en om een indicatie te krijgen van de puurheid van het monster. Vaak wordt smeltpuntbepaling gecombineerd met andere analysemethoden, om met zekerheid de compositie van een monster te kunnen bepalen.

## **UV-VIS spectroscopie**

Ultraviolet-visible spectroscopy (UV/VIS spectroscopie) is een analytische methode die gebruikt kan worden om de concentratie van een bepaalde stof in een monster kwantitatief te bepalen. Bij deze techniek wordt gebruik gemaakt van licht uit het zichtbare- of het UV spectrum. Dit licht kan geabsorbeerd worden door moleculen. Hierbij is de golflengte van het geabsorbeerde licht specifiek voor een molecuul en is de totale absorptie recht evenredig met de concentratie van de stof via Lambert-Beer's formule. Bij gebruik van deze methode wordt eerst gekeken bij welke golflengte de stof absorbeert. Vervolgens wordt er een ijklijn gemaakt met de pure stof, waarbij de totale absorptie uitgezet wordt tegen de concentratie. Door vervolgens de absorptie te meten van een oplossing van het te onderzoeken monster, kan de hoeveelheid van de onderzochte stof die aanwezig is in het monster uitgerekend worden.

Deze methode is erg bruikbaar om kwantitatief iets te kunnen zeggen over de puurheid van een monster. Helaas zijn er externe factoren die de meting kunnen beïnvloeden. Om deze reden is de uitkomst van deze techniek niet altijd even nauwkeurig. Een interessante toepassing van UV/VIS spectroscopie is bijvoorbeeld het bepalen van de reactie snelheid van een reactie, door te meten hoe snel een product vormt of een reactant verdwijnt.