

# De spectrometrie leerlijn



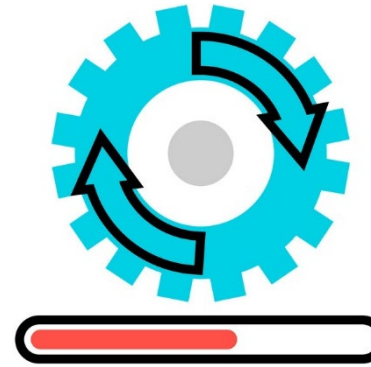
## DAS conferentie 2023

23 maart 2023



# De leerlijn spectrometrie

Waarom deze workshop?

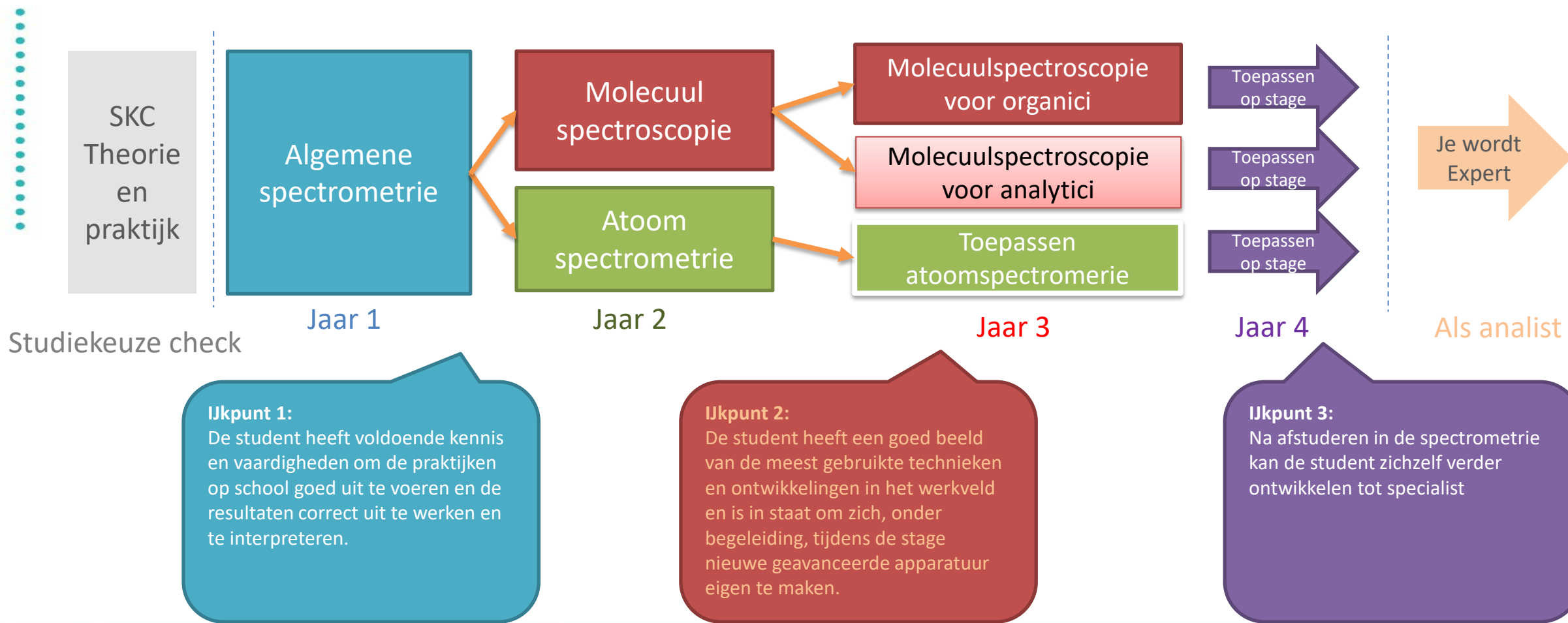


**UPDATE**

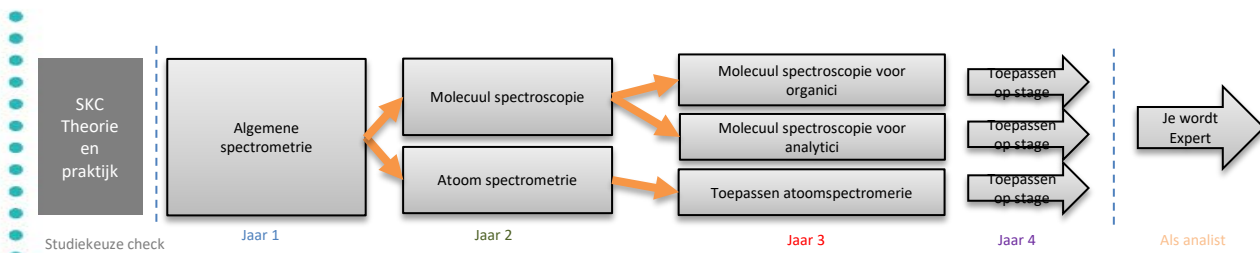


Mee naar huis nemen

# De leerlijn spectrometrie

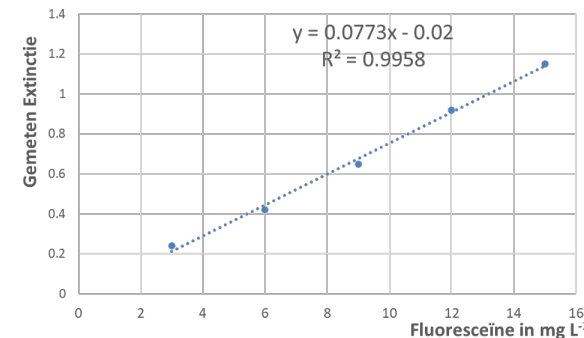
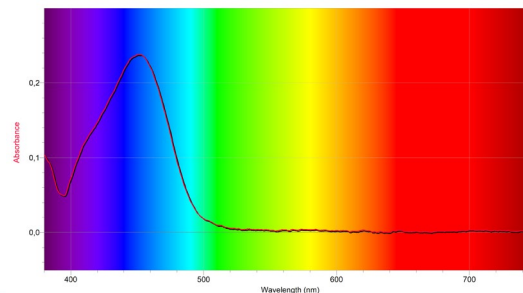
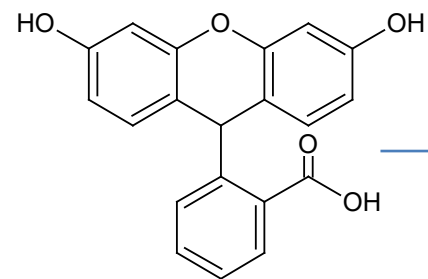


# Spectrometrie en SKC

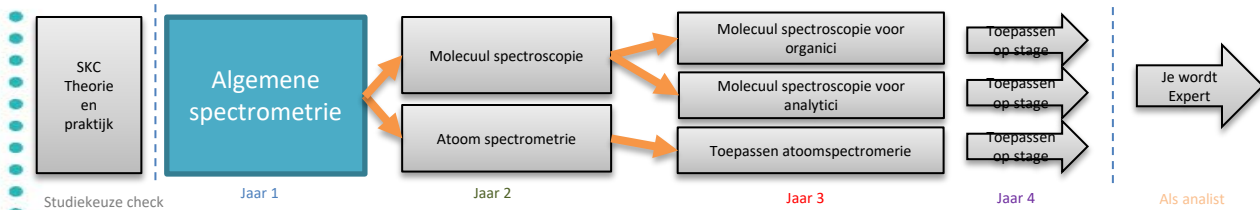


1. Wat is nu een experiment
2. Theorie en praktijk op de Hogeschool
3. Hoe zit wiskunde en natuurkunde in de opleiding
4. Kijken naar moleculen via functionele groepen
5. Uitwerken met Excel

Opstellen van een onderzoeksdoel



# Algemene spectrometrie



Via theoriecolleges, praktijken en workshops:

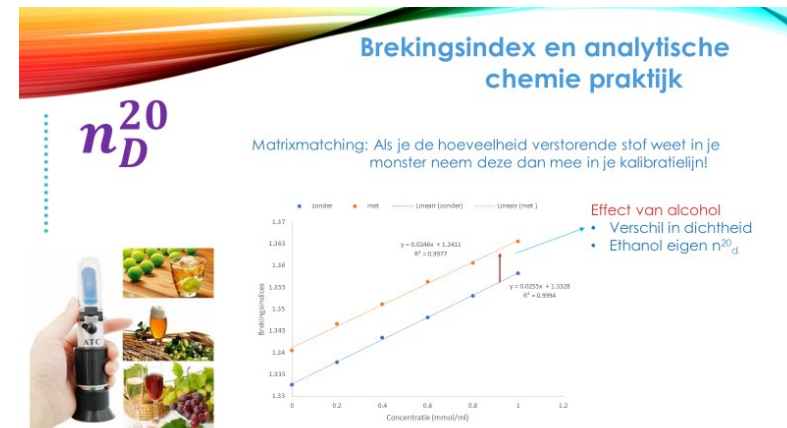
1. IR spectroscopie (workshop)
2. UV-VIS spectra (workshop)
3. Licht, kleur en Lambert Beer
4. Brekingsindex
5. Interferentie en diffractie
6. Atoomspectrometrie
7. Fluorescentie
8. H-NMR spectrometrie (workshop)



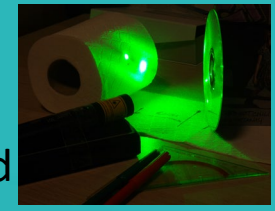
praktijk experiment



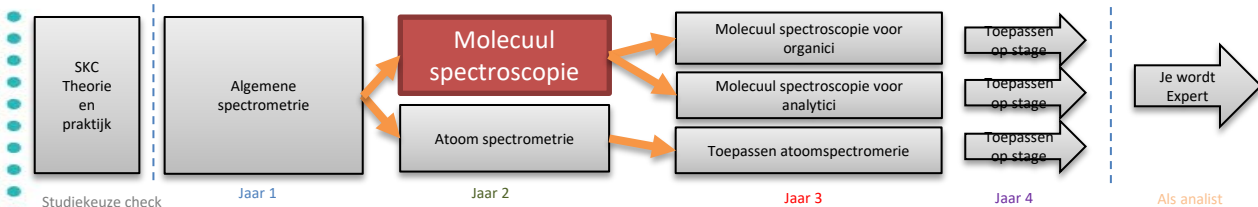
## Theorie en praktijk



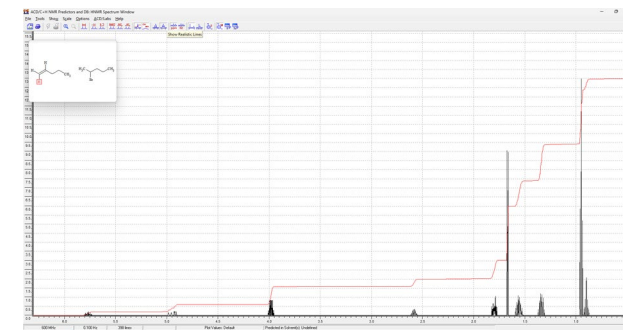
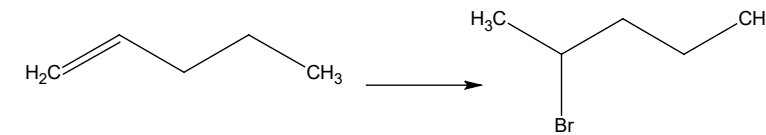
Diverse kennisclips beschikbaar op Youtube kanaal: Opleiding Chemie Hogeschool Leiden



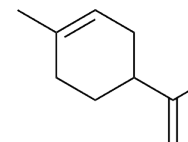
# Molecuulspectroscopie



## Synthese practicum bij organische chemie

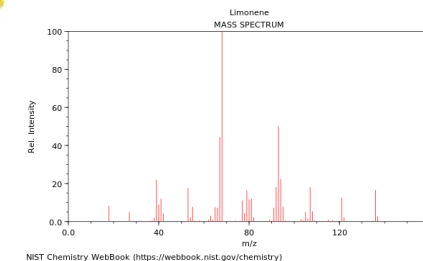


## Analyse practicum bij analytische chemie



Limonene

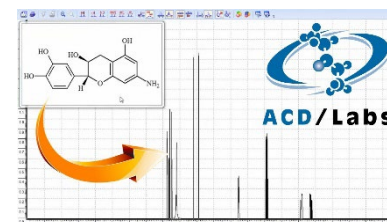
### GC-MS analyse



NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

Via theoriecolleges en praktijken:

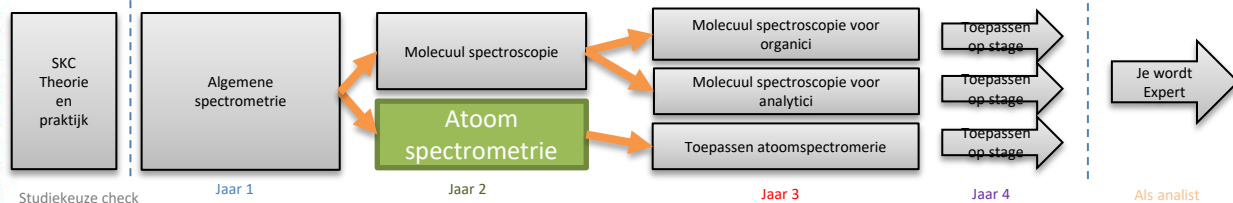
1. IR spectroscopie
2. Massa spectrometrie
3. H-NMR spectra
4. H-NMR mengsels
5. Combinatie spectra



Focus ligt op experimenten uit onze praktijken

Diverse kennisclips beschikbaar op Youtube kanaal: Opleiding Chemie Hogeschool Leiden

# Atoomspectrometrie



Fosfaat gehalte in Struviet



Element samenstelling in babymelkpoeder



Via theoriecolleges en praktijken:

1. XRF
2. ICP-OES
3. ICP-MS
4. Stabiele isotopen
5. Geavanceerde technieken

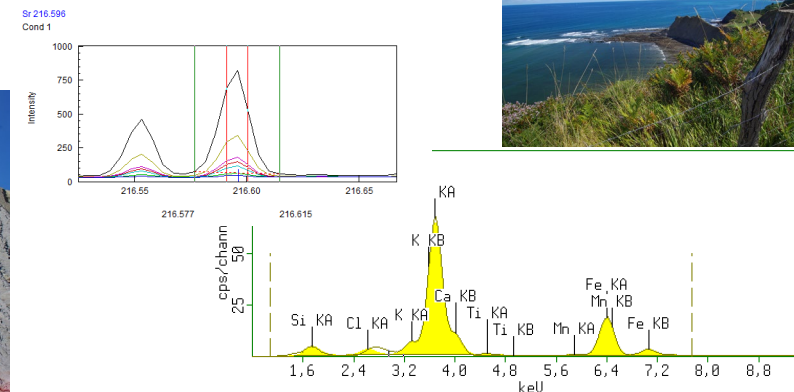
Colleges behandelen:

1. De techniek
2. Meetplan
3. Rekenstrategie

Geavanceerde technieken zoals:

1. Ablatie
2. Scanning en Mapping
3. High res sector field
4. Multicollector
5. QQQ

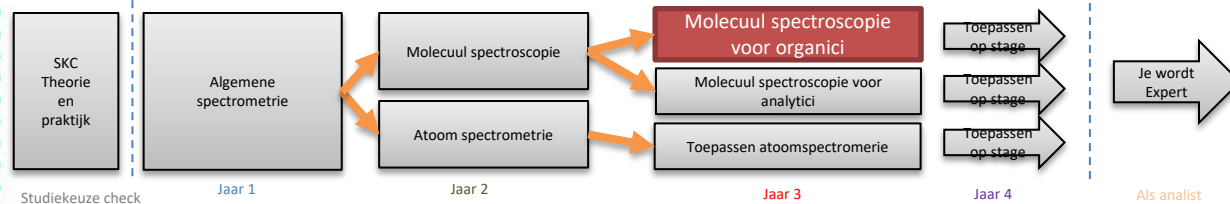
Afronding met een grote opdracht over gemeten datasets



Focus ligt op experimenten uit onze praktijken en werkveld

Diverse kennisclips beschikbaar op Youtube kanaal: Opleiding Chemie Hogeschool Leiden

# Molecuulspectroscopie



Bij de derdejaars synthese experimenten worden de IR en H-NMR routinematig ingezet voor identificatie



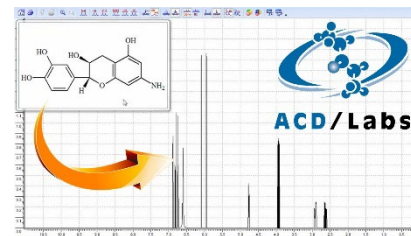
We kunnen Hiermee  $^{13}\text{C}$  en 2D NMR doen. We stimuleren 3<sup>de</sup> jaars dit te doen.

Via theoriecolleges

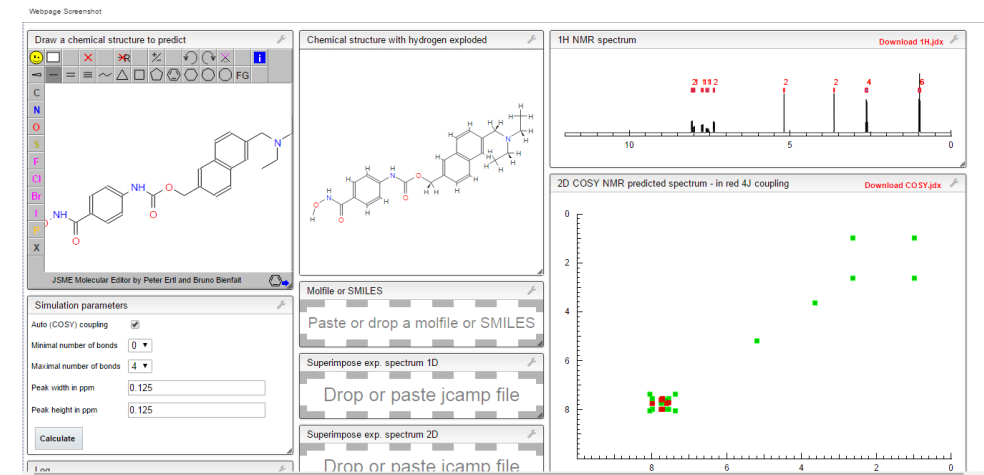
1. IR spectroscopie
2. Massa spectrometrie
3. H-NMR en  $^{13}\text{C}$ -NMR spectra en DEPT
4. 2D NMR: Hetcor en Cosy
5. Combinatie spectra

*Deze module wordt afgerond via opdrachten en een assessment (mondeling)*

Focus ligt op experimenten uit de beroepspraktijk



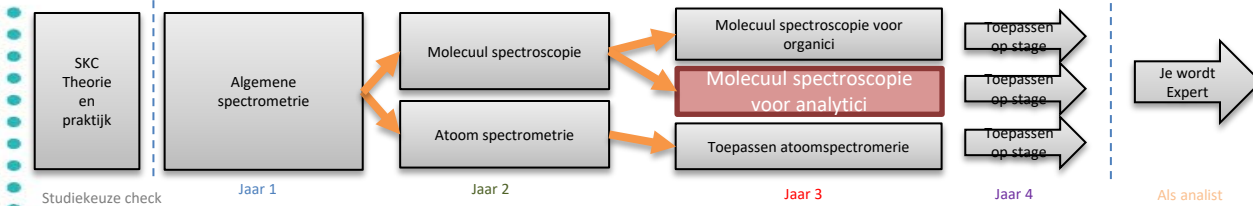
<https://www.nmrdb.org>



Diverse kennisclips beschikbaar op Youtube kanaal: Opleiding Chemie Hogeschool Leiden



# Molecuulspectroscopie



## Via theoriecolleges

1. Massaspectrometrie
2. Vibratiespectroscopie (IR, NIR, Raman en PCA)
3. H-NMR en <sup>13</sup>C-NMR spectra en DEPT
4. Combinatiespectra

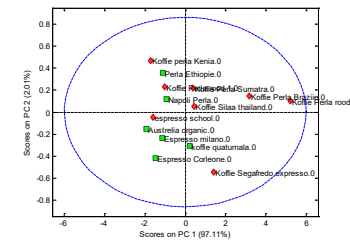
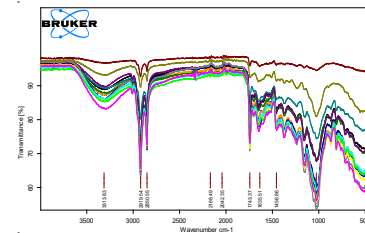
*Deze worden afgerond met opdrachten, zoveel mogelijk via gemeten data*

Focus ligt op experimenten uit de beroepspraktijk

Bij de derdejaarsprojecten komen de apparatuur zoals GC-MS, UVVIS, DAD, Fluorescentiedetector en IR-aanbod



## PCA IR van koffie



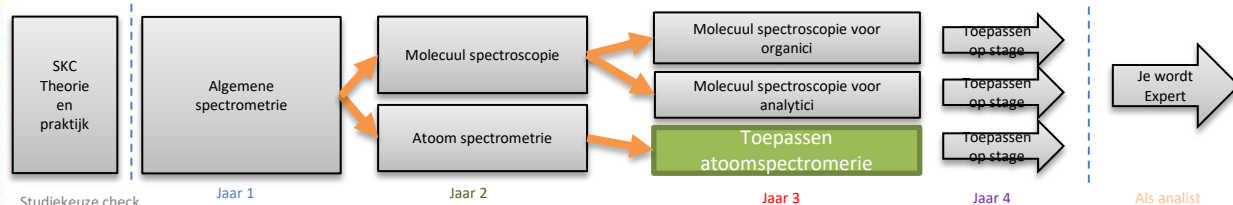
## Toekomst (volgend jaar)

1. Vibratiespectroscopie (Meer aandacht voor Raman technieken en data verwerking in mapping, PCA en PLS)
2. NMR-Techniek (H, <sup>13</sup>C, dept, 2D) (verdere diepgang in <sup>13</sup>C, 2D en actuele voorbeelden)

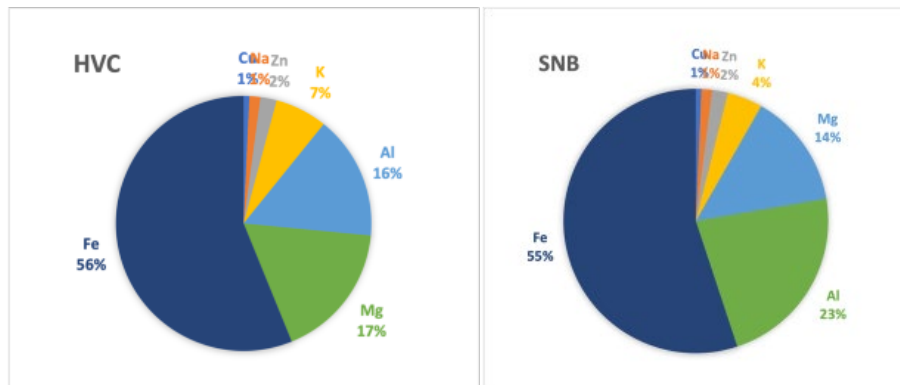
Opdracht: via R zelf gemeten data uitwerken (PCA/PLS)  
Opdracht: gebruik van NMR bij Metabolomics

Diverse kennisclips beschikbaar op Youtube kanaal: Opleiding Chemie Hogeschool Leiden

# Toepassen *Atoomspectrometrie*



In het 3de-jaar wordt er momenteel geen extra theorie aangeboden voor atoomspectrometrie  
De kennis wordt toegepast in 3de-jaars projecten met oa. XRF, ICP-OES en AAS



Figuur 1. Samenstelling in massapercentages van de monsters. HVC links en SNB rechts

## Gerelateerd aan de leerlijn

Ondersteunde modules:

### ***Atoombouw, structuur en binding***

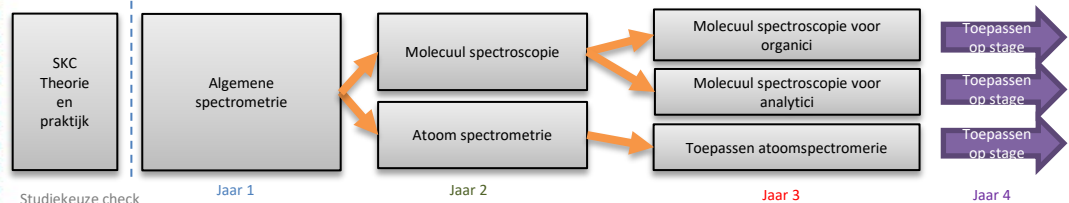
Vooral conjugatie van organische moleculen en kristalveldtheorie bij d-blok metalen zijn voor deze leerlijn van belang

### ***Structuur activiteit relatie***

Hier behandelen we elektronische overgangen welke relevant zijn voor (V)UV-VIS spectra

Diverse kennisclips beschikbaar op Youtube kanaal: Opleiding Chemie Hogeschool Leiden

# Stage en afstuderen



Methodeontwikkeling voor de analyse van 29 elementen in brak en zeewater met ICP-QQQ-MS  
**Loes van Vliet**



Rijkswaterstaat  
 Ministerie van Infrastructuur en Milieu

*The influence of water and acid/base catalyst on alkoxysilane crosslinks in siloxane containing resins*

**Amud Ahmed**

*Creating a method for identification and quantification of surfactants in water-borne polymers & paints with NMR and FIA-MS*

**Gaya Ling**



*Validatie en optimalisatie van de synthese van  $\alpha$ - &  $\beta$ -Ub-ADPr met native link op arginine 42.*

**Marnix Verdegaal**



*Developing a chemical procedure for determining Mg isotope ratios in foraminifera shells.*

**Bridget Zoetemelk**



*In situ pH measurements of electroactive microbial biofilms with surface-enhanced Raman spectroscopy*

**Eliane van Dam**



*Towards the synthesis of cyclophellitol aziridine phosphonate and epoxy-carba-D- fructofuranose*

**Bob van Puffelen**

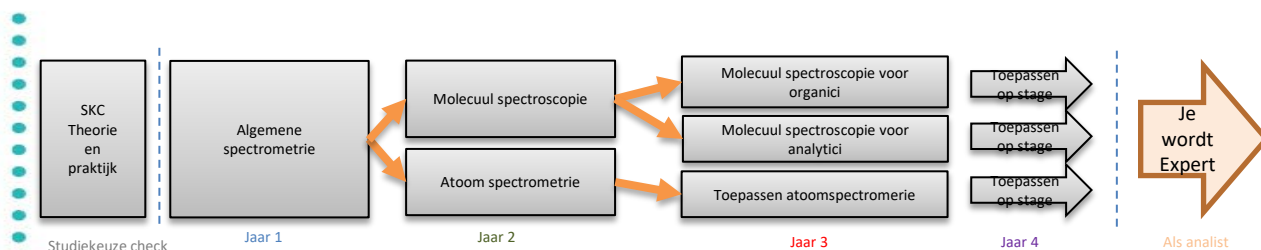


**Universiteit Leiden**



DAS conferentie 2023

# Algemene spectrometrie – vanuit het werkveld



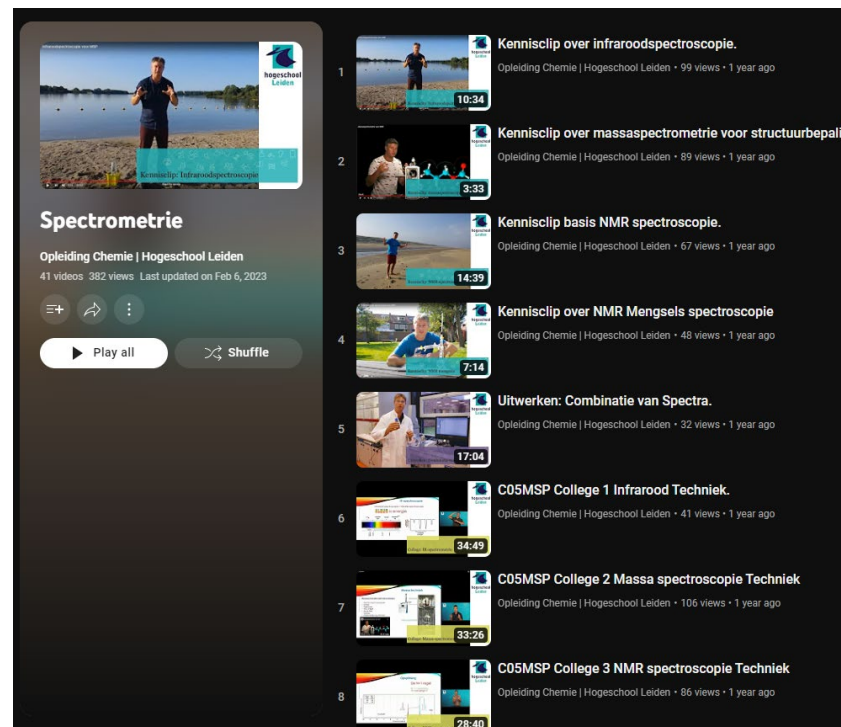
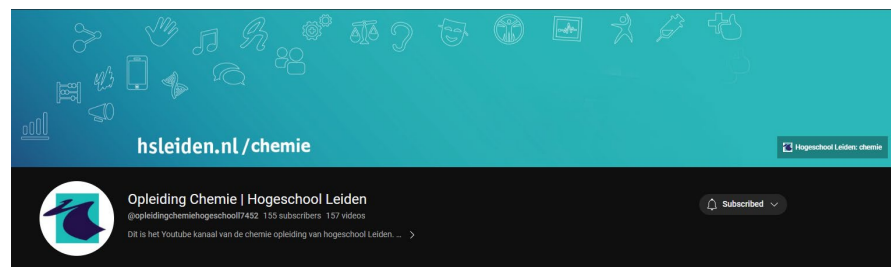
**Nico van Beelen (Akzonobel)** spectra interpretatie blijft de basis, maar meer aandacht over het gebruik en bouwen van bibliotheken

**Peter de Peinder (Vibspec)** metingen kunnen steeds sneller en je verkrijgt meer data: data-tools zoals mapping, PCA en PLS worden steeds belangrijker.  
Voor Raman: onthoud Spatially offset Raman (SORS) en Time Resolved

**Bas van der Wagt (NIOZ)** we kunnen steeds meer met stabiele isotopen! Deze studies worden ook al buiten de academia toegepast

**Rembert Breidenbach (Rijkswaterstaat)** ICP-QQQ-MS wordt de toekomst door zijn betere selectiviteit en “leuke reacties die je kunt doen in de reactiecel”

# Interesse of verder in gesprek?



Contact:

[Kaspers.k@hsleiden.nl](mailto:Kaspers.k@hsleiden.nl)