

Sbectrosgopeg mewn siwtces

Adnodd athrawon

Cyflwyniad i sbectrometreg mâs, sbectrosgopeg isgoch, sbectrosgopeg cyseiniant magnetig niwclear a sbectrosgopeg uwchfioled – gweladwy. Mae hefyd yn cynnwys nodiadau i athrawon ar weithgareddau sbectrosgopeg.

Cyflwyniad i sbectrosgopeg

Beth ydy sbectrosgopeg?

Un o'r pethau sy'n peri rhwystredigaeth i gemegwyr ydy na allwch chi weld y moleciwlau unigol rydych chi wedi eu gwneud, dim ots pa mor galed y gwnewch chi syllu ar eich tiwb prawf neu'ch fflasg fongron! Er bod eich cynnyrch yn edrych y lliw iawn a bod canlyniadau profion cemegol arno'n ymddangos yn gall, allwch chi fod yn siŵr o'i union adeiledd?

Yn ffodus, mae help wrth law. Er na allwch chi 'weld' moleciwlau, maen nhw yn ymateb pan fydd egni golau'n eu taro, ac os gallwch chi arylwi'r ymateb hwnnw, efallai y gallwch chi gael rhywfaint o wybodaeth am y moleciwl hwnnw. Dyma le y daw **sbectrosgopeg**.

Sbectrosgopeg ydy'r broses o astudio sut mae **golau** (pelydriad electromagnetig) a mater yn rhyngweithio.

Mae sawl gwahanol fath o dechnegau sbectrosgopig a'r egwyddor gyffredin ydy goleuo paladr o belydriad electromagnetig penodol ar sampl ac arylwi sut mae'n ymateb i ysgogiad o'r fath; mae hyn yn galluogi gwyddonwyr i gael gwybodaeth am adeiledd y moleciwlau.

Beth ydy golau?

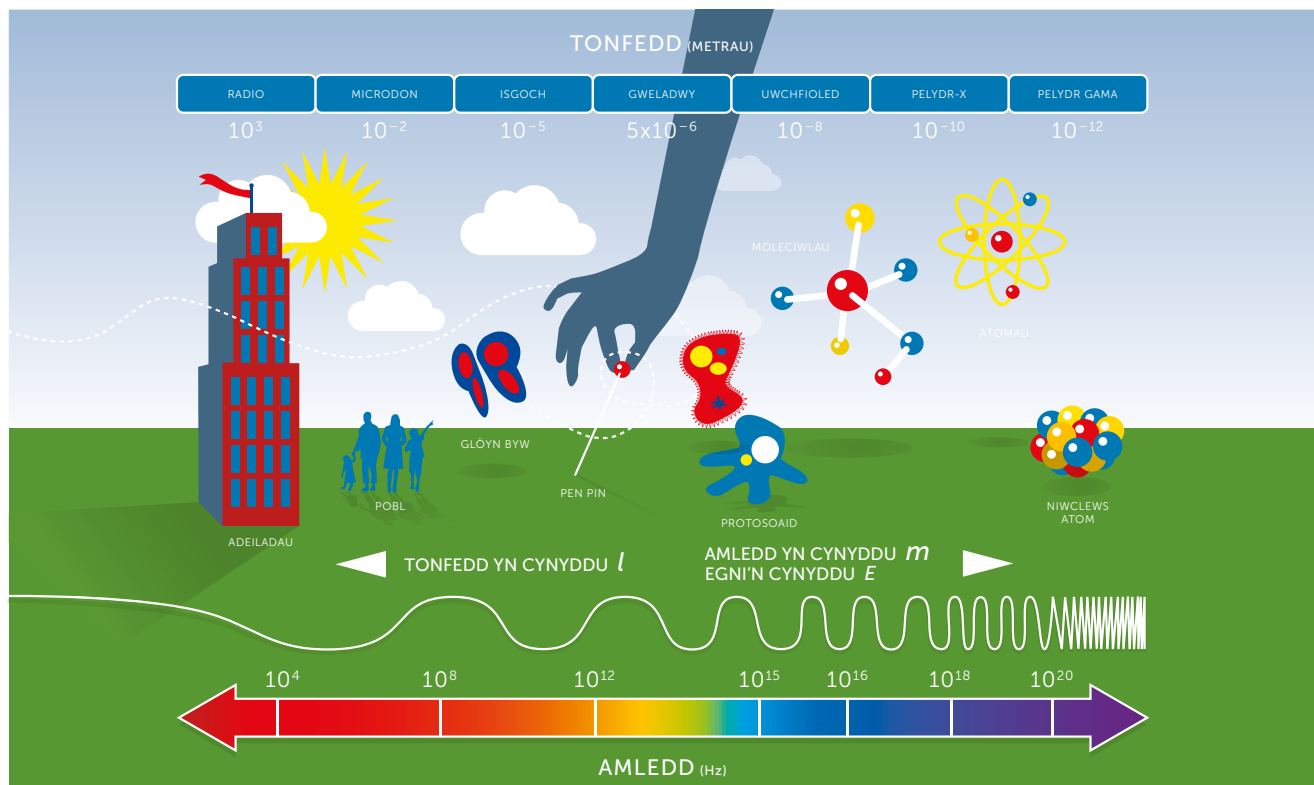
Mae golau'n cludo **egni** ar ffurf gronynnau bach iawn o'r enw ffotonau. Mae gan bob ffoton swm arwahanol o egni o'r enw cwantwm. Mae gan **olau** briodweddau ton gyda **thonfeddi** ac **amledd nodweddiadol** (edrychwch ar y diagram isod).

Mae egni'r ffotonau yn perthyn i amledd (ν) a thonfedd (λ) y golau trwy ddau hafaliad:

$$E = h\nu \text{ and } \nu = c/\lambda$$

(golyga h cysynyn Planck a golyga c buanedd golau). Felly, bydd gan belydriad egni uchel (golau) amleddau uchel a thonfeddi byr.

Enw'r amrediad o donfeddi ac amleddau mewn golau ydy'r **sbectrwm electromagnetig**. Mae'r sbectrwm wedi'i rannu'n wahanol ranbarthau sy'n ymestyn o belydriad gyda thonfedd fer iawn a llawer o egni (gan gynnwys pelydrau gama a phelydrau-x) i belydriad gyda thonfedd hir iawn a dim llawer o egni (gan gynnwys microdonnau a thonnau darlledu radio). Dim ond rhan fach o'r sbectrwm electromagnetig ydy'r rhanbarth gweladwy (golau gwyn) sy'n debyg o fod rhwng 380-770 nm. [Mae nanometr yn 10^{-9} metr].



Pan mae mater yn amsugno pelydriad electromagnetig mae'r newid sy'n digwydd yn dibynnu ar y math o belydriad ac felly ar faint o egni sy'n cael ei amsugno. Mae amsugno egni'n achosi i electron neu foleciwl fynd o gyflwr egni cychwynnol (cyflwr isaf) i gyflwr egni uwch (cyflwr cynhyrfol) a allai fod ar ffurf **cynyddu cyffroad cylchdro, dirgrynl neu electronig**. Drwy astudio'r newid hwn mewn cyflwr egni gall gwyddonwyr ddysgu mwy am briodweddau ffisegol a chemegol y moleciwlau.

- Gall **tonnau radio** achosi i niwclysau rhai atomau newid eu cyfeiriadedd magnetig a dyma ydy sail techneg o'r enw sbectrosgopeg **cyseiniant magnetig niwclear (CMN)**.
- Caiff cylchdroadau moleciwlaidd eu cynhyrchu gan **ficrodonnau**.
- Caiff electronau eu dyrchafu i orbitalau uwch gan olau **uwchfioled neu weladwy**.
- Caiff dirgryniadau bondiau eu cynhyrfu gan belydriad **isgoch**.

Yn ôl bob sôn mae'r cyflyrau egni wedi'u cwanteiddio oherwydd rhaid amsugno ffoton o egni ac amlledd (neu donfedd) penodol i gynhyrfu electron neu foleciwl o'r cyflwr isaf i gyflwr cynhyrfol penodol.

Gan fod gan foleciwlau set unigryw o gyflyrau egni sy'n dibynnu ar eu hadeiledd, bydd sbectrosgopeg **IG, UF-gweladwy** a **CMN** yn rhoi gwybodaeth werthfawr am adeiledd y moleciwl.

I 'weld' moleciwl, mae angen inni ddefnyddio golau gyda thonfedd sy'n llai na'r moleciwl ei hun (tua 10^{-10} m). Mae'r math hwn o belydriad i'w gael yn rhanbarth pelydr-x y sbectrwm electromagnetig ac fe gaiff ei ddefnyddio ym maes **grisialograffaeth pelydr-x**. Mae'r dechneg hon yn rhoi lluniau tri dimensiwn manwl iawn o adeileddau moleciwlaidd - yr unig anfantais ydy bod angen grisialau o ansawdd uchel o'r cyfansoddyn sy'n cael ei astudio. Er nad ydy technegau sbectrosgopig eraill yn rhoi llun tri dimensiwn o foleciwl, maen nhw yn rhoi gwybodaeth am ei briodweddau nodweddiadol ac felly maen nhw'n cael eu defnyddio'n rheolaidd wrth ddadansoddi adeileddau.

Mae **sbectrometreg mâs** yn dechneg ddefnyddiol arall y mae cemegwyr yn ei defnyddio i'w helpu i ganfod adeiledd moleciwlau. Er bod rhai yn cyfeirio ati weithiau fel sbectrosgopeg mâs, nid ydy hi'n dechneg sbectrosgopig yn ôl ei diffiniad gan nad ydy hi'n defnyddio pelydriad electromagnetig. Yn hytrach, caiff y moleciwlau eu hïoneiddio gydag electronau gyda llawer o egni ac yna mae'r ionau moleciwlaidd hyn yn torri'n ddarnau. Mae'r sbectrwm mâs a gawn o ganlyniad yn cynnwys mâs y moleciwl a'i ddarnau sy'n galluogi cemegwyr i roi'r adeiledd at ei gilydd.

Ym mhob techneg sbectrosgopig dim ond symiau bach iawn (miligramau neu lai) sydd eu hangen, ond mewn sbectrometreg mâs caiff y sampl ei dinistrio yn y broses o'i dorri'n ddarnau; tra bod modd adennill y sampl ar ôl defnyddio sbectrosgopeg IG, UF-gweladwy a CMN.

TECHNEG	PELYDRIAD		BETH ALL EI WELD?
Sbectrosgopeg Cyseiniant Magnetig Niwclear (CMN)	Tonnau radio (10^3 m)	<p>Sbin magnetig niwclysau'n fflipio</p> <p>10^3 m</p>	Sut mae'r atomau agosaf at rai niwclysau (e.e. ^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P) mewn moleciwl wedi'u cysylltu gyda'i gilydd yn ogystal â sawl atom o'r math hwn sy'n bresennol mewn gwahanol lefydd yn y moleciwl.
Sbectrosgopeg Isgoch	Isgoch (10^{-5} m)	<p>10^{-5} m</p> <p>NODWCH Dirgryniadau moleciwlau</p>	Y grwpiau gweithredol sy'n bresennol mewn moleciwl.
Sbectrosgopeg UF-gweladwy	Uwchfioled (10^{-8} m)	<p>10^{-8} m</p> <p>NODWCH Electronau'n cael eu dyrchafu i gyflwr egni uwch</p>	Systemau cyfun (h.y. bondiau sengl a dwbl bob yn ail) mewn moleciwlau organig yn ogystal â'r rhyngweithiadau rhwng metel a ligand mewn cymhlygion metelau trosiannol.
Grisialograffaeth pelydr-x	Pelydrau-x (10^{-10} m)	<p>10^{-10} m X-ray</p>	Sut mae'r holl atomau yn y moleciwl wedi'u cysylltu mewn trefniant tri dimensiwn.
Sbectrometreg mâs	Techneg nad ydy o'n sbectrosgopig	<p>Moleciwlau'n torri</p>	Cymhareb mâs i wefr yr ion moleciwlaidd (h.y. y pwysau moleciwlaidd) a'r patrwm torri'n ddarnau a all fod yn gysylltiedig ag adeiledd yr ion moleciwlaidd.

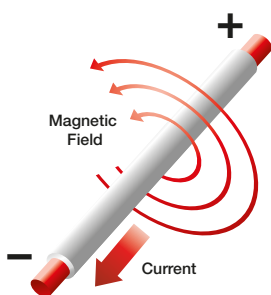
Cyflwyniad i sbectrometreg mâs (SM)

Sbectrometreg mâs (SM)

Mae hwn yn offeryn dadansoddol pwerus iawn sy'n gallu rhoi gwybodaeth am fâs moleciwlaidd ac am adeiledd moleciwlaidd.

Gwybodaeth gefndir

Mae gan unrhyw wifren sy'n cludo cerrynt trydanol – llif electronau negyddol – faes magnetig o'i chwmpas o'r enw maes electromagnetig. Os caiff gwifren sy'n cludo cerrynt ei rhoi mewn maes magnetig allanol bydd yn 'neidio' wrth iddi gael ei hallwyo wrth i'r ddau faes magnetig ryngweithio.



Mae modd cynhyrchu maes electromagnetig hefyd gan lif o ïonau gyda gwefr positif fel y rhai sydd wedi'u cynhyrchu gan sbectromedr mâs.

Sbectrometreg mâs

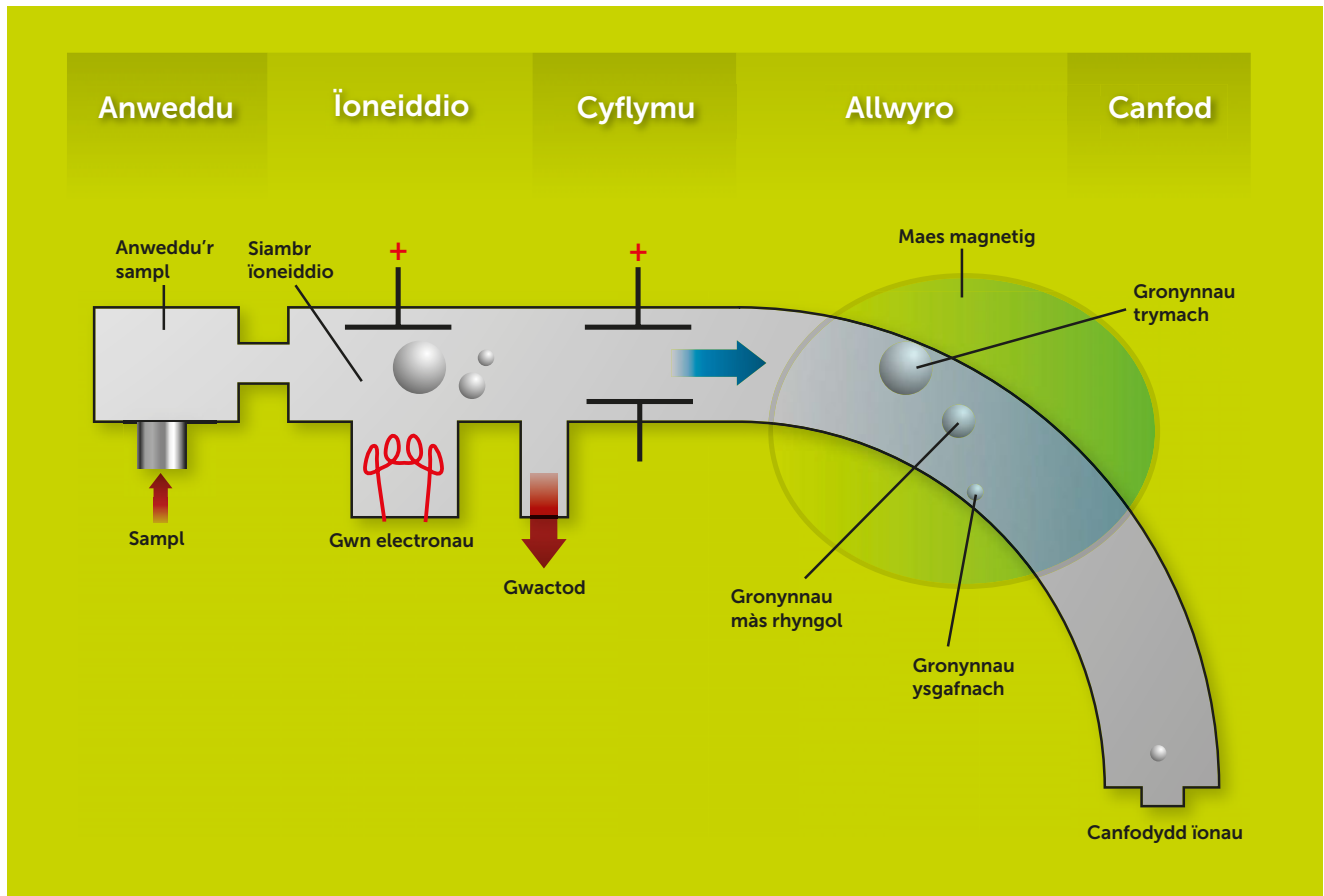
Mae'r dechneg hon tua 1000 gwaith mwy sensitif na thechnegau dadansoddi eraill fel sbectrosgopeg IG neu CMN.

GWERTH	SYMBOL	ENW
10^3 g	kg	cilogram
10^{-3} g	mg	miligram
10^{-6} g	μ g	microgram
10^{-9} g	ng	nanogram

Sut mae'n gweithio

Mewn sbectromedr mâs caiff llif o ïonau gyda gwefr bositif eu cynhyrchu ynghyd â maes magnetig cysylltiedig ac fe gaiff sut maen nhw'n allwyo mewn maes magnetig allanol wedi'i reoli ei astudio'n fanwl.

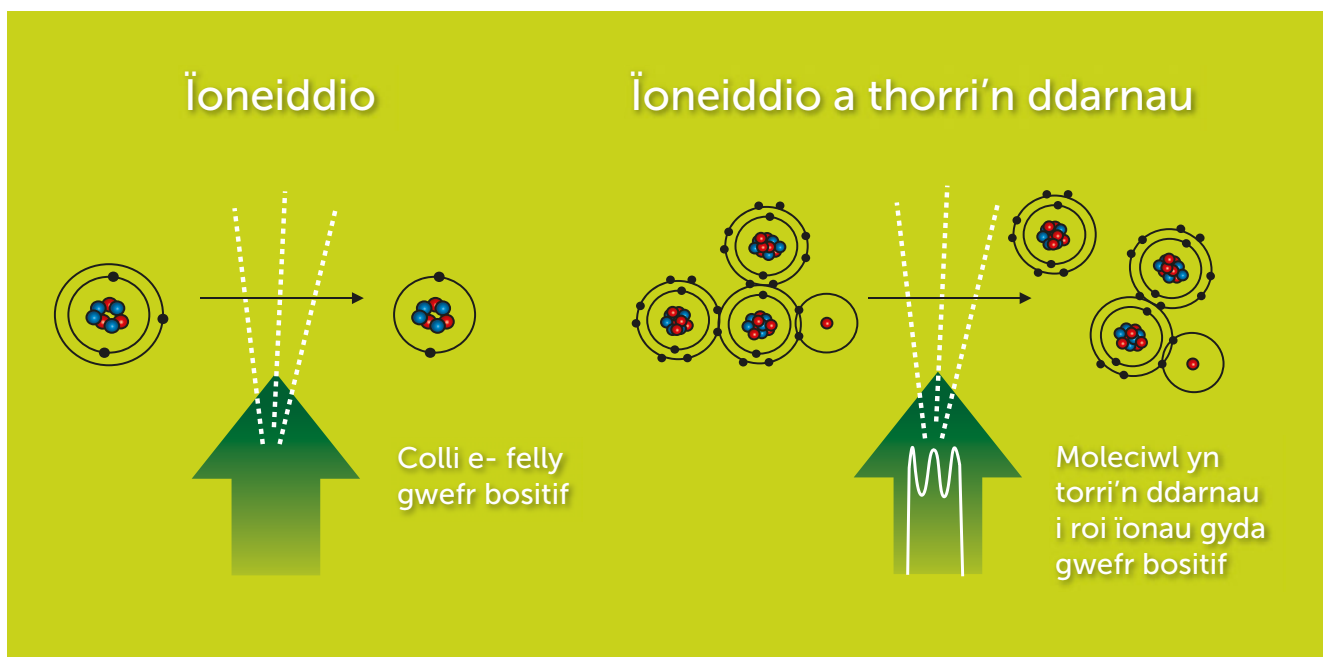
Mae hi'n bwysig fod atomau neu foleciwlau'r sylwedd gaiff ei archwilio yn rhydd i symud felly os nad ydy'r sampl yn nwy bydd angen ei **ANWEDDU** yn gyntaf.



Nesaf, rhaid i'r sampl gael ei **ÏONEIDDIO**. Mae modd gwneud hyn drwy beledu'r sampl gydag **electronau egni uchel** o wn electronau. Mae'r rhain yn taro electron i ffwrdd i gynhyrchu ïon positif.



Weithiau caiff ïonau gyda gwefr ddwbl hefyd eu cynhyrchu ond bydd hyn yn digwydd mewn symiau bach yn unig gan fod angen mwy o egni.



Gall y peledu ag electronau egni uchel hefyd achosi i foleciwlau gael eu torri i nifer o wahanol ddarnau.

e.e. gall moleciwlau methan CH_4 gael eu torri i gynhyrchu CH_3^+ + CH_2^+ + CH^+ and C^+

Byddwn ni'n edrych ar dorri'n ddarnau yn fanylach mewn adran ddiweddarach.

NODWCH: Gan fod yr ïon positif sydd wedi'i ffurfio yn cynnwys electron heb bâr weithiau caiff ei ddangos gyda dot sy'n dynodi ei fod yn radical rhydd, er enghraifft, CH_3^+ .

Yna, caiff yr ïonau positif eu **CYFLYMU** gan faes trydanol a'u ffocysu i baladr main drwy eu hanfon drwy gyfres o agennau gyda mwy a mwy o botensial negatif. Mae hi'n bwysig bod yr ïonau'n gallu symud yn rhydd drwy'r cyfarpar heb wrthdaro gyda moleciwlau aer fel bod yr holl aer yn cael ei dynnu o'r system i greu gwactod.

Caiff y paladr o ïonau sy'n symud yn gyflym ei **ALLWYRO** gan faes magnetig allanol cryf. Mae maint yr allwyro'n dibynnu ar ddau ffactor:

- Mâs (m) yr ïon – yr ysgafnaf ydy o, y mwyaf caiff ei allwyro.
- Gwefr (z) yr ïon – caiff ïonau gyda gwefr 2^+ eu hallwyro mwy na rhai 1^+ .

Caiff y ddau ffactor eu cyfuno i roi'r **gymhareb mâs i wefr (m/z)**. When m/z is small the deflection is large.

Yn olaf, mae ïonau sy'n mynd yr holl ffordd drwy'r peiriant yn cael eu CANFOD yn electronig. Wrth i'r ïonau positif gyrraedd y canfodydd maen nhw'n casglu electronau i ddod yn niwtral. Caiff y symudiad electronau ei ganfod, ei fwyhau a'i gofnodi. Mae modd addasu'r maes magnetig allanol sy'n achosi'r allwriad er mwyn canfod ïonau gyda gwahanol gymarebau m/z . Caiff argraffiad o arddwysedd ei gynhyrchu yn erbyn cymhareb m/z .

Gall cofrif syml eich helpu i gofio'r camau hyn.

AUR	Anweddu	
I'R	Ïoneiddio	
CYFLYMAF	Cyflymu	
A'R	Allwyro	
CRYFAF	Canfod	

Dehongli'r argraffiadau

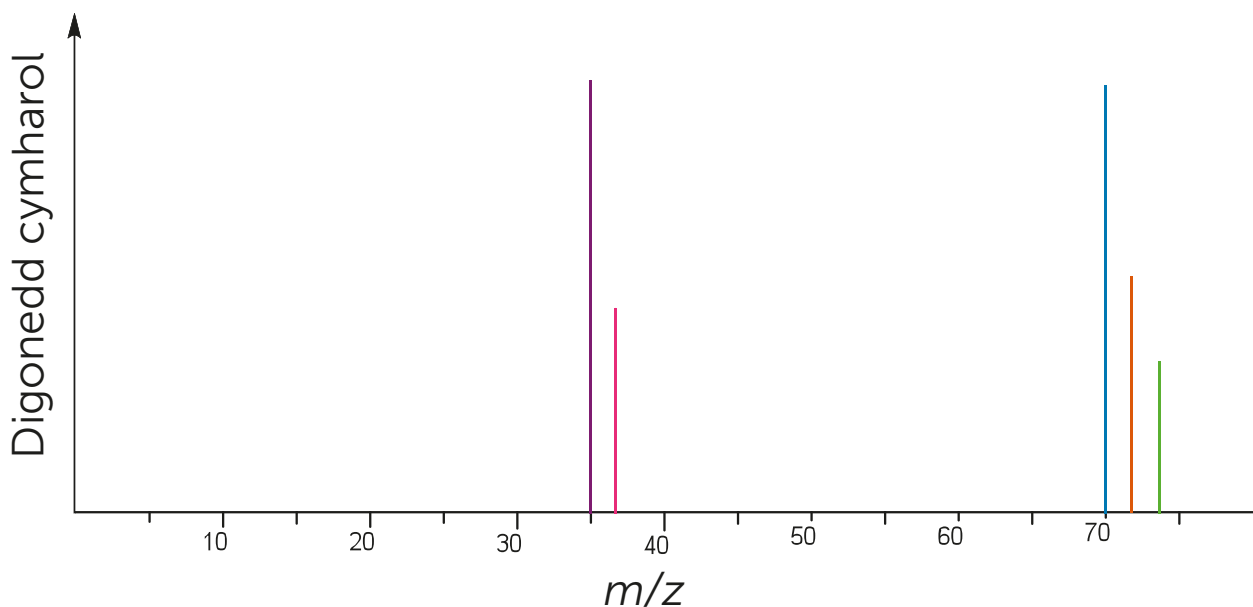
Sbectrwm mâs clorin Cl_2

ISOTOP	MÂS GAIFF EI ARSYLWI
^{35}Cl	35 m/z
^{37}Cl	37 m/z
$^{35}\text{Cl}-^{35}\text{Cl}$	70 m/z
$^{35}\text{Cl}-^{37}\text{Cl}$	72 m/z
$^{37}\text{Cl}-^{37}\text{Cl}$	74 m/z

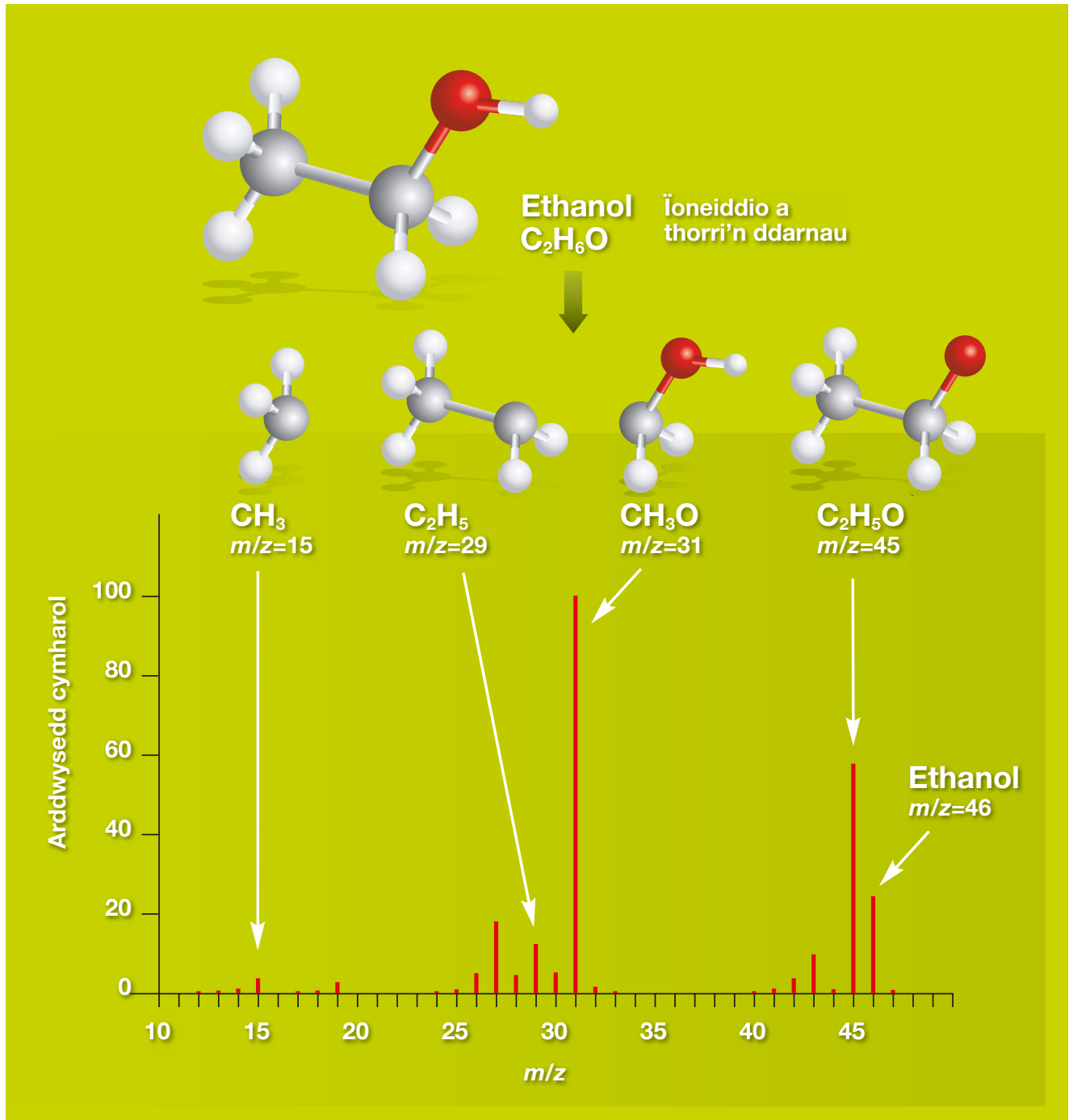
Mae modd gweld y nifer o wahanol frigau gan fod gan glorin ddau isotop cyffredin ^{35}Cl a ^{37}Cl .

Mae'r brig ar **$m/z=35$ yn cynrychioli'r ïon $^{35}\text{Cl}^+$** ion a'r un ar **$m/z=37$ ydy'r ïon $^{37}\text{Cl}^+$** . Cymhareb uchder y brigau ydy 3:1 sy'n dynodi digonedd cymharol yr isotopau hyn; mae hyn yn egluro'r mâs atomig cymharol o 35.5 a.m.u.

Mae'r clwstwr o frigau ar y mâs uwch yn digwydd o ganlyniad i'r moleciwlau deuatmig h.y. Cl_2 lle mae **$m/z=70$ yn cynrychioli'r ïon $^{35}\text{Cl}-^{35}\text{Cl}^+$** . Yr un ar **$m/z=72$ ydy'r ïon $^{37}\text{Cl}-^{35}\text{Cl}^+$** a'r un ar **$m/z=74$ ydy'r ïon $^{37}\text{Cl}-^{37}\text{Cl}^+$** .



Wrth i'r moleciwl fynd yn fwy, mae'r posibilrwydd o dorri'n ddarnau yn cynyddu ac mae'r sbectra mäs yn mynd yn fwy cymhleth. Caiff penderfyniadau terfynol am adeiledd eu gwneud ar ôl cyfuno tystiolaeth sbectrometreg mäs gydag offer dadansoddol eraill megis sbectrosgopeg isgoch, uwchfioled-gweladwy a chyseiniant magnetig niwclear.



Mae llawer mwy o sbectra mäs ar gael yn <http://www.le.ac.uk/spectraschool/>

Cymwysiadau modern SM

CH-SM (cromatograffaeth hylif-sbectrometreg mäs)

Mae'r broses hon yn galluogi gwahanu cymysgeddau cymhleth drwy gromatograffaeth hylif gan ddefnyddio colofnau capilariau bach. Mae'r rhai diweddaraf yn llai na $100\ \mu\text{m}$ ar draws sy'n golygu bod modd defnyddio symiau bach iawn o samplau. Mae hyn yn bwysig iawn gan fod sbectrometreg mäs yn dinistrio'r sampl. Wrth i'r sylweddau sydd wedi'u gwahanu adael y golofn maen nhw'n cael eu bwydo'n awtomatig i sbectromedr mäs er mwyn gallu adnabod holl gydrannau'r gymysgedd.

Mae nifer o gymwysiadau i'r dechneg hon gan gynnwys:

- Proteomeg – astudiaeth proteinau gan gynnwys cynhyrchion treulio.
- Fferylliaeth – datblygu cyffuriau, adnabod cyffuriau a metabolion cyffuriau – cofiwch y Gemau Olympaidd a phroffion cyffuriau'r cystadleuwyr.
- Amgylcheddol – canfod a dadansoddi chwynladdwyr a phlaleiddiaid a'u gweddillion mewn bwydydd.

CN-SM (cromatograffaeth nwy - sbectrometreg mâs)

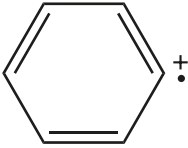
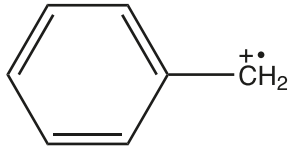
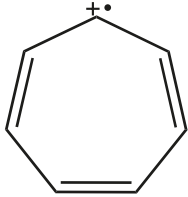
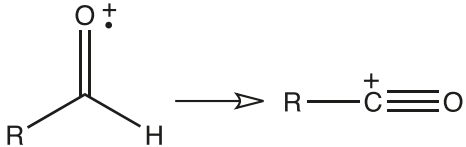
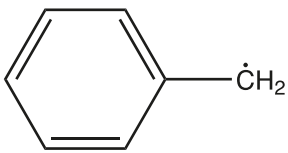
Mae'r dechneg hon yn dod yn fwy a mwy poblogaidd gan fod y cyfarpar yn fach, mae modd ei ddefnyddio'n gyflym (llai na 90 eiliad gyda'r cyfarpar gorau) ac mae'n gymharol rad. Eto mae'n cyfuno cam gromatograffaeth i wahanu cydrannau cymysgedd, y tro hwn gan ddefnyddio nwy anadweithiol fel gwedd symudol.

Mae rhai o'i nifer o gymwysiadau yn cynnwys:

- Diogelwch mewn meysydd awyr – i ganfod cyffuriau a ffrwydron.
- Prosesau fforensig yn ymwneud â than – defnyddio gweddillion tanau i geisio egluro'r achosion.
- Astrocemeg - mae stilwyr yn cynnwys CN-SM wedi'u hanfon i'r blaned Mawrth, i'r blaned Mercher ac i Titan i ddadansoddi atmosffer ac arwynebau planedau. Mae'r cyrch gofod Rosetta yn defnyddio'r dechnoleg hon i ddadansoddi cyfansoddion comed.

Darniadau cyffredin

Pan gaiff moleciwl ei hollti yn ystod y broses o dorri'n ddarnau, y mathau mwyaf sefydlog o ddarnau sy'n tueddu i gael eu ffurfio ac mae uchder y brig gaiff ei ganfod yn dynodi pa mor sefydlog ydy'r darn. Mae rhai enghreifftiau nodweddiadol wedi'u cynnwys yn y tabl.

DARNAU GAIFF EU COLLI'N GYFFREDIN		ÏONAU SEFYDLOG CYFFREDIN	
m - 15	$\cdot\text{CH}_3$	$m/z = 43$	$\text{H}_3\text{C}\overset{+\cdot}{\text{C}}\equiv\text{O}$
m - 17	$\cdot\text{OH}$	$m/z = 77$	
m - 26	$\cdot\text{C}\equiv\text{N}$	$m/z = 91$	
m - 28	$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$	$m/z = 91$	
m - 29	$\cdot\text{CH}_2\text{CH}_3$	$m/z = m - 1$	
m - 29	$\cdot\text{CHO}$		
m - 31	$\cdot\text{OCH}_3$		
m - 35	$\cdot\text{Cl}$		
m - 43	$\text{H}_3\text{C}\overset{\cdot}{\text{C}}=\text{O}$		
m - 45	$\cdot\text{OCH}_2\text{CH}_3$		
m - 91			

Sbectrometreg mâs cydraniad uchel

Gall sbectrometreg mâs cydraniad uchel wahaniaethu rhwng cyfansoddion gyda'r un mâs enwol ond gyda gwahanol fâs gwirioneddol wedi'i achosi gan wahanol gyfansoddiad elfennol. Er enghraifft, mae gan C_2H_6 , CH_2O ac NO i gyd fâs enwol o 30 ond eu hunion fasau ydy 30.04695039, 30.01056487 a 29.99798882, yn ôl eu trefn. Gall y dechneg cydraniad uchel hon wahaniaethu rhwng y mân newidiadau hyn.

Mae'n dod yn bwysicach fel techneg i ddadansoddi'r rhyngweithio rhwng cyffuriau a meinweoedd y corff ar raddfa DNA.

Cyflwyniad i sbectrosgopeg isgoch (IG)

Sbectrosgopeg isgoch (IG)

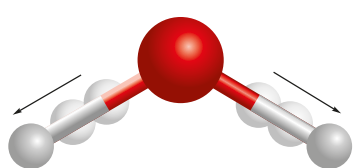
Un o'r gwyddonwyr cyntaf i arsylwi pelydriad isgoch oedd William Herschel ar ddechrau'r 19^{ed} ganrif. Sylwodd, pan oedd yn ceisio cofnodi tymheredd pob lliw mewn golau gweladwy, bod y tymheredd yn cynyddu'n sylweddol ychydig y tu hwnt i olau coch o'i gymharu â'r lliwiau gweladwy. Fodd bynnag, dim ond ar ddechrau'r 20^{fed} ganrif y dechreuodd cemegwyr ddangos diddordeb mewn sut roedd pelydriad isgoch yn rhyngweithio gyda mater ac fe gafodd y sbectromedrau isgoch masnachol cyntaf eu cynhyrchu yn UDA yn ystod y 1940au.

Rhyngweithio gyda mater

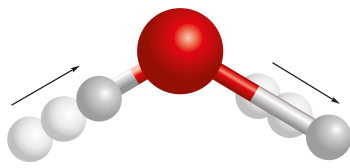
Mae'r bondiau mewn moleciwlau i gyd yn dirgrynu ar dymereddau uwch na sero absoliwt. Mae nifer o fathau o ddirgryniadau'n achosi amsugno yn y rhanbarth isgoch. Mae'n debyg mai'r rhai symlaf i'w dychmygu ydy plygu ac ymestyn; mae enghreifftiau o'r rhain i'w gweld isod gyda moleciwl dŵr.

Bydd moleciwlau yn amsugno egni isgoch ar amledd sy'n cyfateb i amledd dirgrynu naturiol y bond. Erw'r broses hon o amsugno egni sy'n achosi cynnydd yn osgled y dirgryniadau ydy **cyseiniant**.

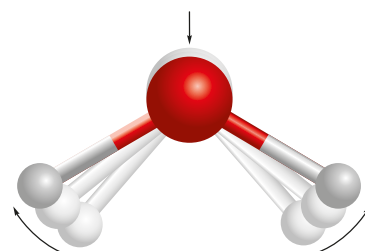
Mae sbectromedr IG yn canfod sut mae amsugnedd sampl yn amrywio gyda rhif ton, cm^{-1} , sef cilydd y donfedd mewn cm (1/tonfedd). Mae'r rhif ton mewn cyfrannedd ag egni neu amledd dirgrynu'r bondiau yn y moleciwl.



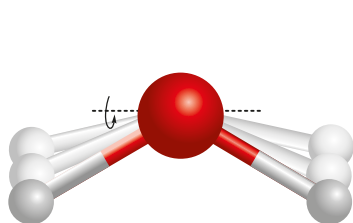
Ymestyn cymesur



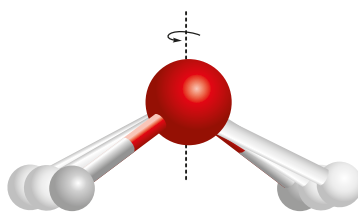
Ymestyn anghymesur



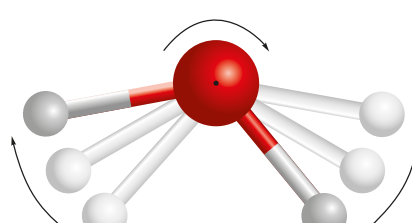
Plygu



Dirgrynu yn yr echelin-x



Dirgrynu yn yr echelin-y



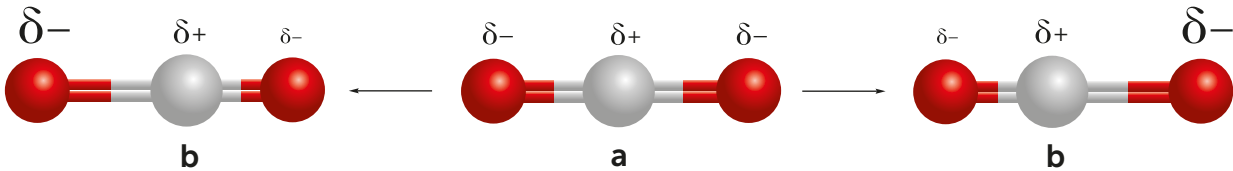
Dirgrynu yn yr echelin-z

Carbon deuocsid ac IG

Mae'n debygol mai carbon deuocsid ydy'r moleciwl y mae'r rhan fwyaf o bobl yn ei gysylltu gydag amsugno pelydriad isgoch gan fod hyn yn un o nodweddion allweddol yr effaith tŷ gwydr. Pe bai carbon deuocsid yn gwbl lonydd ni fyddai ganddo foment deupol parhaol oherwydd byddai ei wefr wedi'i gwasgaru'n hafal ar draws dwy ochr y moleciwl.

Fodd bynnag, mae'r moleciwl yn dirgrynu drwy'r amser a phan fydd yn ymestyn yn anghymesur bydd gwasgariad gwefr anwastad yn digwydd. Bydd hyn yn rhoi moment deupol dros dro i'r moleciwl gan ei alluogi i amsugno pelydriad isgoch.

Felly, gall rhai moleciwlau amsugno pelydriad IG hyd yn oed os nad oes ganddyn nhw wasgariad gwefr anwastad parhaol.



(a) Dim moment deupol parhaol pan mae'r moleciwl yn llonydd oherwydd deupolau hafal a dirgroes.

(b) Wrth i foleciwlau ymestyn yn anghymesur mae'r deupolau yn mynd yn anwastad ac fe gaiff momentau deupol dros dro eu cynhyrchu.

Ffactorau sy'n effeithio ar ddirgryniadau

Math o ddirgryniad

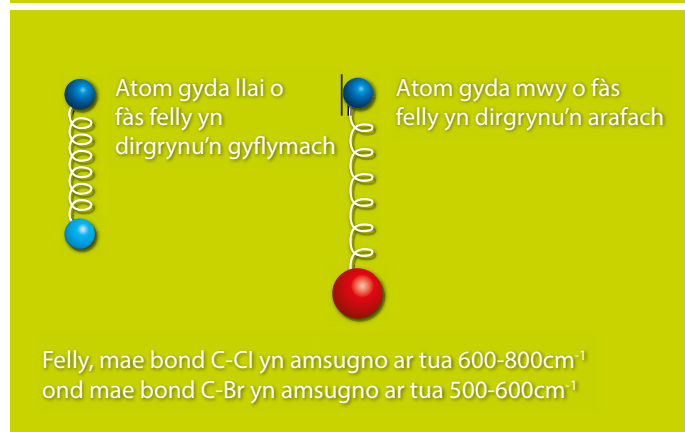
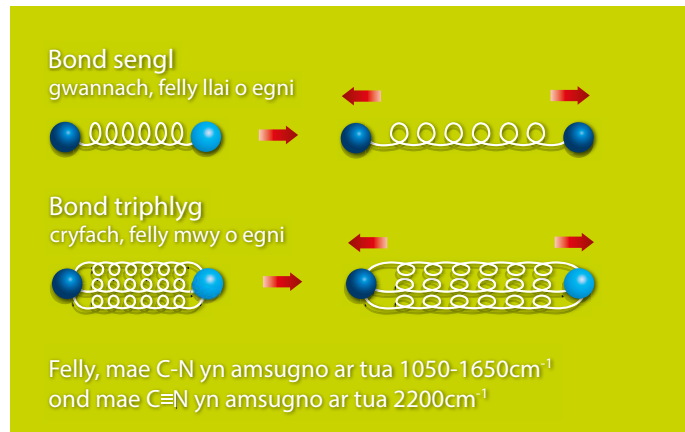
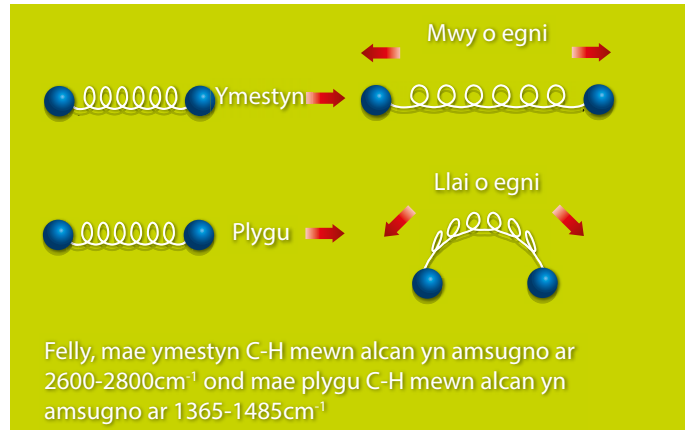
Mae'r egni gaiff ei amsugno pan fydd bondiau penodol yn dirgrynu yn dibynnu ar sawl ffactor. Gall defnyddio cydweddiad eich helpu i ddeall hyn; gallwch feddwl am fond fel sbring rhwng dau atom. Dychmygwch geisio plygu neu ymestyn y sbring. Yn gyffredinol, mae hi'n haws ei blygu na'i ymestyn, felly mae egni dirgryniadau plygu'n is na dirgryniadau ymestyn yr un bond. Felly, mae amsugno oherwydd plygu'n tueddu i ddigwydd ar rifau ton is nag ymestyniadau.

Cryfder bondiau

Fe allwch chi feddwl am fond cryf fel sbring stiff. Bydd angen mwy o egni ar hwn i wneud i'r bond 'sbring' ddirgrynu, felly mae bondiau cryfach yn amsugno ar rifau ton uwch..

Mâs atomau

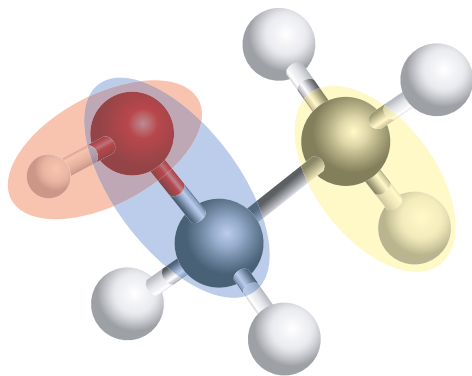
Yn olaf, mae modd meddwl am yr atomau yn y bond fel masau ar ben y sbring. Mae masau trwm ar sbring yn dirgrynu'n arafach na rhai ysgafnach. Gan ddefnyddio'r cydweddiad hwn, fe allwn ni ddychmygu bod atomau trymach yn dirgrynu ar amledd is na rhai ysgafnach. Felly, buasech chi'n disgwyl i fond C-Br amsugno ar amledd is na bond C-Cl gan fod bromin yn drymach na chlorin.



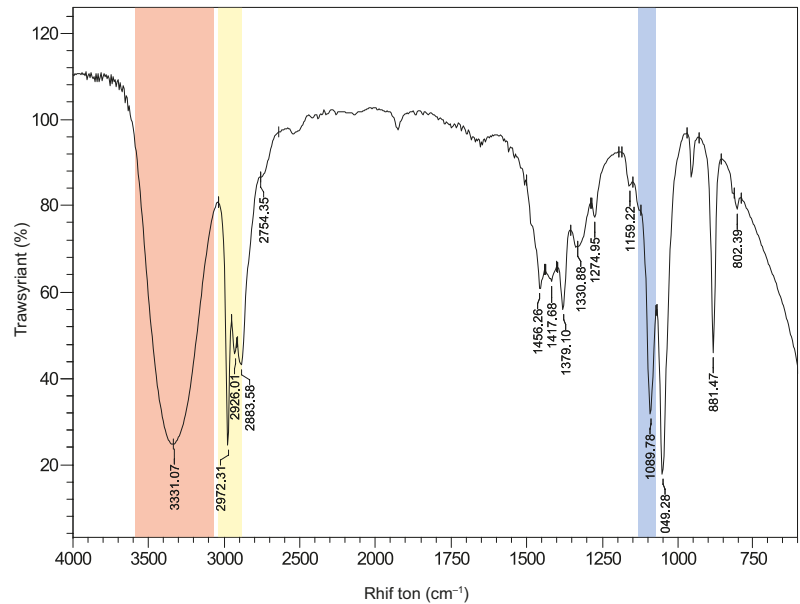
Sbectromedrau isgoch

Mae sbectromedrau isgoch yn gweithio mewn amrywiaeth o ffyrdd ond maen nhw i gyd yn pasio pelydiad isgoch ar draws yr amrediad IG llawn drwy sampl. Gall y sampl fod yn ffilm denau o hylif rhwng dau blât, yn hydoddiant wedi'i ddal mewn celloedd arbennig, yn fwl (neu bast) rhwng dau blât neu'n solid wedi'i gymysgu gyda photasiwm bromid a'i gywasgu i ddisg. Mae'r celloedd neu'r platiau wedi'u gwneud o halidau sodiwm neu botasiwm gan nad ydy'r rhain yn amsugno pelydiad isgoch.

Fodd bynnag, gall y sbectromedr IG 'yn y siwtces' ddefnyddio techneg o'r enw **gwanhau cyfanswm yr adlewyrchedd (ATR)** sy'n eich galluogi i redeg sbectra IG ar samplau solid a hylif heb unrhyw waith paratoi ychwanegol.



Ethanol
CH₂CH₃OH



Dehongli sbectrwm

Gan fod moleciwlau'n aml yn cynnwys nifer o fondiau gyda nifer o ddirgryniadau posibl gall sbectrwm IG fod â nifer o amsugniadau. Gall hyn fod o gymorth gan ei fod yn golygu bod sbectrwm pob moleciwl yn unigryw. Os ydy sbectrwm moleciwl eisoes wedi'i gofnodi ar gronfa ddata mae modd cymharu unrhyw sbectrwm gaiff ei gynhyrchu gyda'r gronfa ddata honno i helpu i adnabod y moleciwl. Mae modd defnyddio'r sbectrwm hefyd i dynnu sylw at fondiau penodol a thrwy hynny at grwpiau gweithredol o fewn moleciwl er mwyn helpu i ganfod ei adeiledd.

Edrychwch ar y sbectrwm hwn o ethanol, CH₃CH₂OH, i weld pa fondiau sy'n gyfrifol am amsugniadau penodol.

Er na all IG ddarparu digon o wybodaeth i ganfod union adeiledd moleciwl 'newydd' ar y cyd gydag offer sbectrosgopig arall megis CMN a sbectrometreg mâs, gall IG helpu i roi gwybodaeth werthfawr i roi'i adeiledd cyfan at ei gilydd.

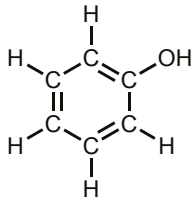
Defnyddio sbectrosgopig IG

Mae myfyrwyr a chemegwyr ymchwil yn defnyddio IG yn rheolaidd wrth ganfod adeileddau ac mae amrywiaeth eang o gymwysiadau i IG o hyd mewn cemeg ymchwil ac yn fwy cyffredinol mewn cymdeithas. Er enghraifft, mae IG yn cael ei ddefnyddio i helpu i ganfod adeileddau moleciwlau cymhleth mewn gofod, i ddadansoddi gweithiau celfyddyd ac mewn rasio ceir F1!

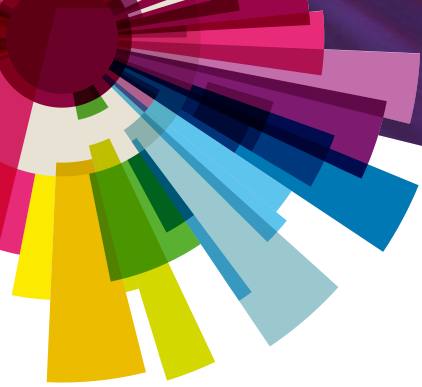
Mae nifer o heddluoedd ledled y byd yn defnyddio IG yn rheolaidd a hynny bron yn sicr heb sylwi eu bod yn ei ddefnyddio. Mae hyn gan fod nifer o 'anadlieddyddion' gaiff eu defnyddio i gasglu tystiolaeth i fesur lefelau alcohol mewn anadl yn sbectromedrau IG sy'n chwilio'n benodol am amsugniadau oddeutu 1060cm⁻¹, sy'n cyfateb i ddirgryniad y bond C-O mewn ethanol!



DATA AMSUGNO IG

BOND	AMREDIAD RHIF TON/cm ⁻¹	GRŴP GWEITHREDOL				
O-H	3400-2500 (llydan)	Alcoholau R-OH	Asidau carbocsylog R-C(=O)-OH	Ffenolau 		
N-H	3600-3100	Amidau R-C(=O)-N	Aminau C-N			
C-H	3150-2850 (miniog)	(Holl gyfansod- dion organig)				
C≡N	2260-2200	Nitrilau C≡N				
C=O	1750-1630 (miniog)	Aldehydau R-C(=O)-H	Cetonau C-C(=O)-C	Esterau R-C(=O)-O-C	Asidau carbocsylog R-C(=O)-OH	Amidau R-C(=O)-N
C=C	1680-1610	Alcenau C=C				
C-O	1300-1060	Alcoholau R-OH	Asidau carbocsylog R-C(=O)-OH	Esterau R ₁ -C(=O)-O-R ₂	Esterau C-O-C	

Mae 'R' yn dangos lle mae modd atodi nifer o grwpiau gwahanol i'r moleciwl.



Cyflwyniad i sbectrosgopeg cyseiniant magnetig niwclear (CMN)

CYFLWYNIAD

Mae sbectrosgopeg cyseiniant magnetig niwclear (CMN) yn rhoi gwybodaeth i gemegwyr am yr amgylchedd lle caiff niwclei atomau eu darganfod mewn moleciwlau a chyfansoddion. Fe allwn ni felly ddefnyddio sbectrosgopeg CMN i benderfynu ar adeiledd moleciwl.

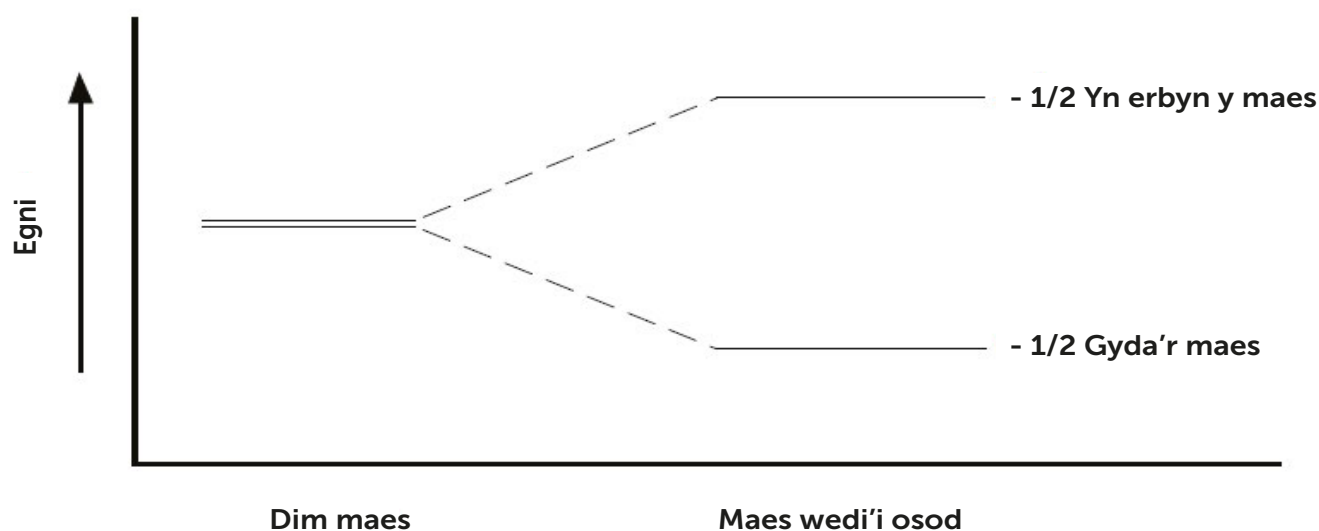
Mae'r ddamcaniaeth y tu ôl i'r dechneg hon yn fwy cymhleth nac ar gyfer sbectrometreg mâs a sbectrosgopeg IG. Ond, dydy dehongliad y sbectra ddim yn anoddach unwaith ichi ddod yn gyfarwydd ag o.

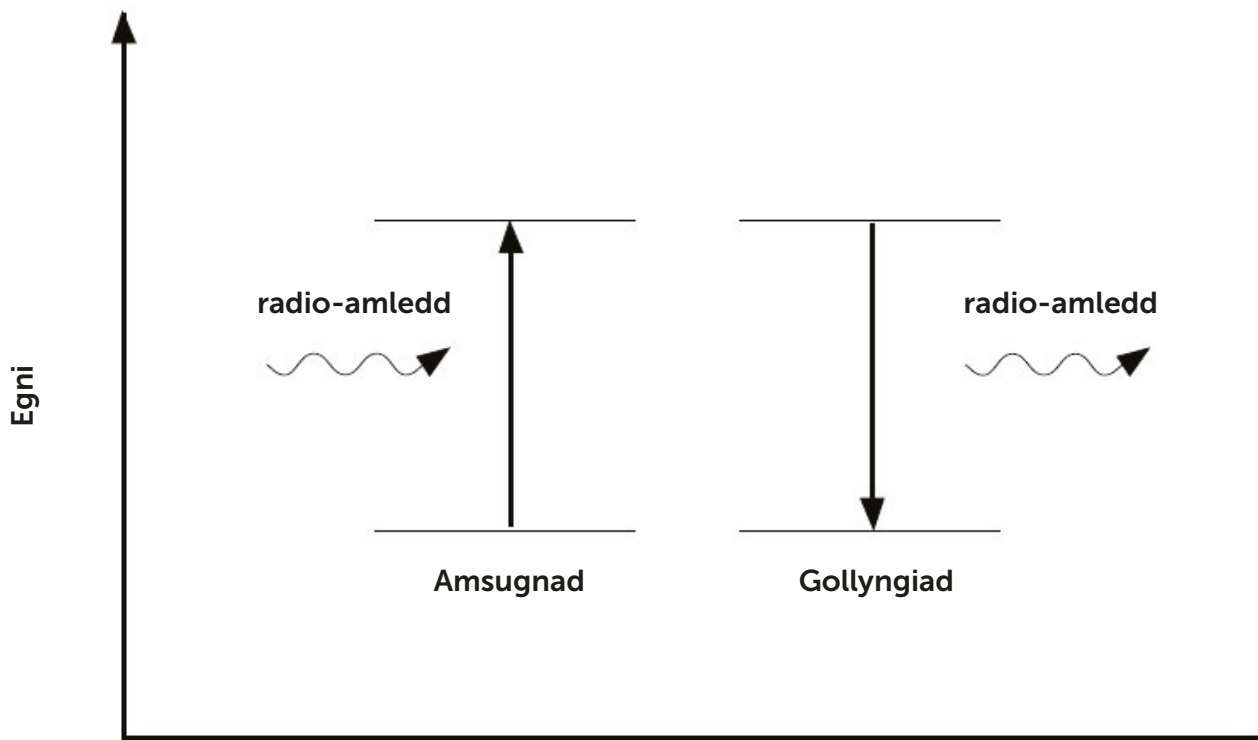
Cefndir

Pan gaiff rhai atomau eu gosod mewn maes magnetig cadarn mae eu niwclei yn ymddwyn fel magnetau bar bychain ac yn gosod eu hunain mewn rhes gyda'r maes. Mae electronau yn ymddwyn fel hyn hefyd ac oherwydd hyn mae'n debyg bod electronau a niwclei yn berchen ar 'sbin' hynny ydy, mae gan unrhyw wefr drydanol sy'n sbinio faes magnetig cysylltiedig.

Yn union fel mae electronau gyda sbin cyferbyniol yn paru gyda'i gilydd mewn orbital bondio, mae rhywbeth tebyg yn digwydd gyda phrotonau a niwtronau yn y niwclews. Os oes gan niwclews nifer eilrif o brotonau a niwtronau (er enghraifft ^{12}C) mae eu meysydd magnetig yn diddymu ei gilydd a does dim maes magnetig ar y cyfan; fodd bynnag, os ydy nifer y protonau a niwtronau yn odrif (er enghraifft ^{13}C a ^1H) mae gan y niwclews faes magnetig. Os caiff y sylwedd ei osod mewn maes magnetig allanol bydd y magnet niwclear yn gosod ei hun mewn rhes gyda'r maes, yn yr un dull y mae nodwydd cwmpawd yn gosod ei hun mewn rhes gyda maes magnetig. Gall y magnet niwclear fod â dau aliniad gydag egni isel ac egni uchel.

Er mwyn gwneud i'r niwclews newid i'r aliniad egni uchel mae angen cyflenwi egni. Mae'r egni gaiff ei amsugno yn cyfateb i radio-amleddau. Mae amledd penodol egni yn dibynnu ar amgylchedd y niwclews, hynny ydy, ar y niwclei eraill a'r electronau cyfagos.

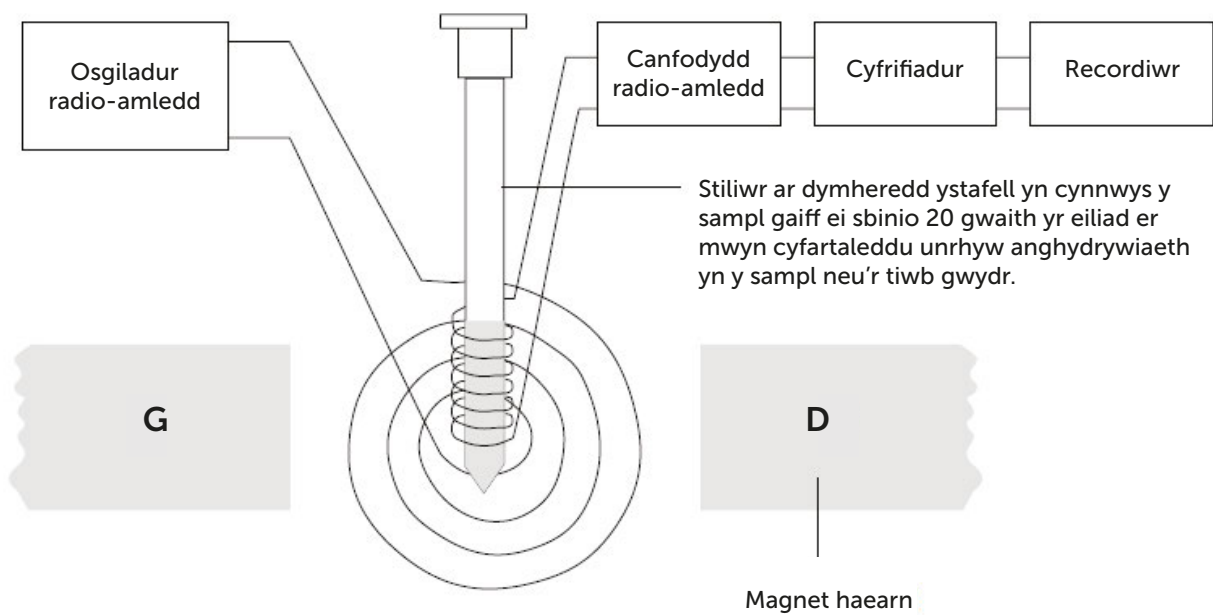




Felly, trwy osod y sampl sy'n cael ei archwilio mewn maes magnetig cadarn a mesur amledd y pelydriad mae'n ei amsugno, mae modd cael gwybodaeth am amgylcheddau'r niwclei yn y moleciwl.

Mae modd addasu dau newidyn wrth gofnodi sbectrwm CMN:

1. Mae modd cadw'r maes magnetig yn gyson a sganio'r radio-amleddau, neu
2. Mae modd cadw'r radio-amleddau yn gyson a sganio'r maes magnetig.



1H Sbectrosgopeg CMN

Mae sbectrosgopeg CMN yn ddefnyddiol yn benodol er mwyn adnabod safle atomau hydrogen (^1H) mewn moleciwlau, sy'n rhoi gwybodaeth inni am adeiledd moleciwl. Gall dadansoddi sbectra CMN fod ychydig yn debyg i geisio rhoi darnau jig-so ynghyd sy'n cynnwys:

- **Amgylcheddau hydrogen** – mae niwclei (er enghraifft atomau hydrogen) mewn gwahanol amgylcheddau yn amsugno nifer gwahanol o egni (tonau radio) wrth iddyn nhw brofi meysydd magnetig gwahanol yn y sbectromedr; mae hyn yn achosi gwahanol 'frigau' ar sbectrwm CMN ar gyfer pob amgylchedd.
- **Symudiad cemegol** – mae gan atomau hydrogen mewn math penodol o amgylchedd safleoedd tebyg ar sbectrwm CMN. Fel arfer, caiff y safle ei fesur fel symudiad cemegol o gyfeirnod penodol. Y cyfeirnod gaiff ei ddefnyddio gan amlaf ydy amsugnad sylwedd o'r enw tetramethylsilane (TMS), sydd â'r fformiwla (CH_3)₄Si.

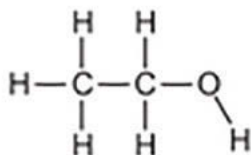
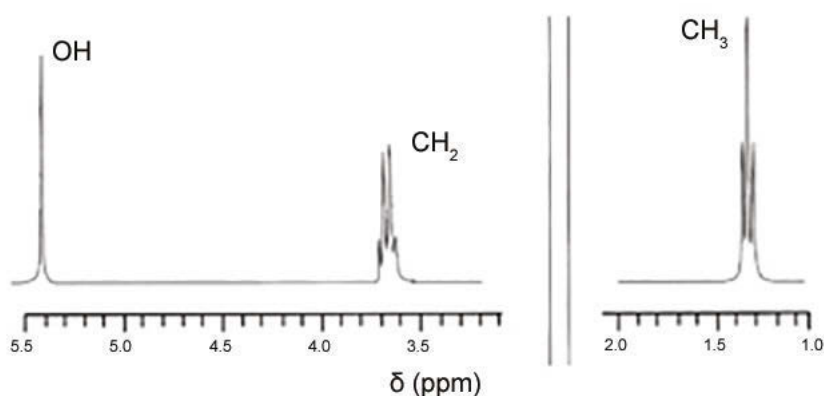
Mae TMS yn gemegyn safonol defnyddiol gan ei fod yn anwenwynig a diegri ac mae ei bwynt berwi yn weddol isel felly mae modd ei ferwi i ffwrdd os oes angen defnyddio'r sampl ar gyfer unrhyw beth arall. Mae TMS hefyd yn rhoi arwydd sy'n cyseinio ymhell i ffwrdd o bron iawn pob cyseiniant hydrogen organig arall gan fod y protonau wedi'u gwarchod mor dda. Mae 12 proton yn yr un amgylchedd ac maen nhw i gyd yn cyseinio ar yr un amledd felly caiff un brig dwys ei gynhyrchu.
- **Brig integrol** - rhan o dan bob brig sy'n gymesur â nifer y math hwnnw o atomau hydrogen yn y moleciwl, hynny ydy, y nifer o hydrogenau ym mhob amgylchedd.

- **Cyplu sbin-sbin** - mewn moleciwl gall niwclews atom achosi moment magnetig gwan iawn yn electronau'r bondiau cemegol sydd wedi'u hatodi iddo. Mae hyn yn cael effaith ar faes magnetig niwclews atom cyfagos. Enw'r rhyngweithiad hwn ydy cyplu ac mae hyn yn achosi i'r brigau hollti yn nifer o rai llai. Gan amlaf gall protonau rhyngweithio gyda phrotonau eraill sydd hyd at dri bond i ffwrdd, ond dydy protonau yn yr un amgylchedd cemegol ddim yn dangos eu bod nhw'n cyplu gyda'i gilydd.
- **Patrwm hollti** – o ganlyniad i gyplu sbin-sbin, mae'r brigau yn hollti i un rhif yn fwy na'r nifer o hydrogenau ar yr atomau carbon cyfagos. Dyma beth ydy'r '**rheol n + 1**'. Fe allwch chi gyfrifo nifer yr hydrogenau cyfagos trwy edrych ar sut mae'r brig yn hollti.

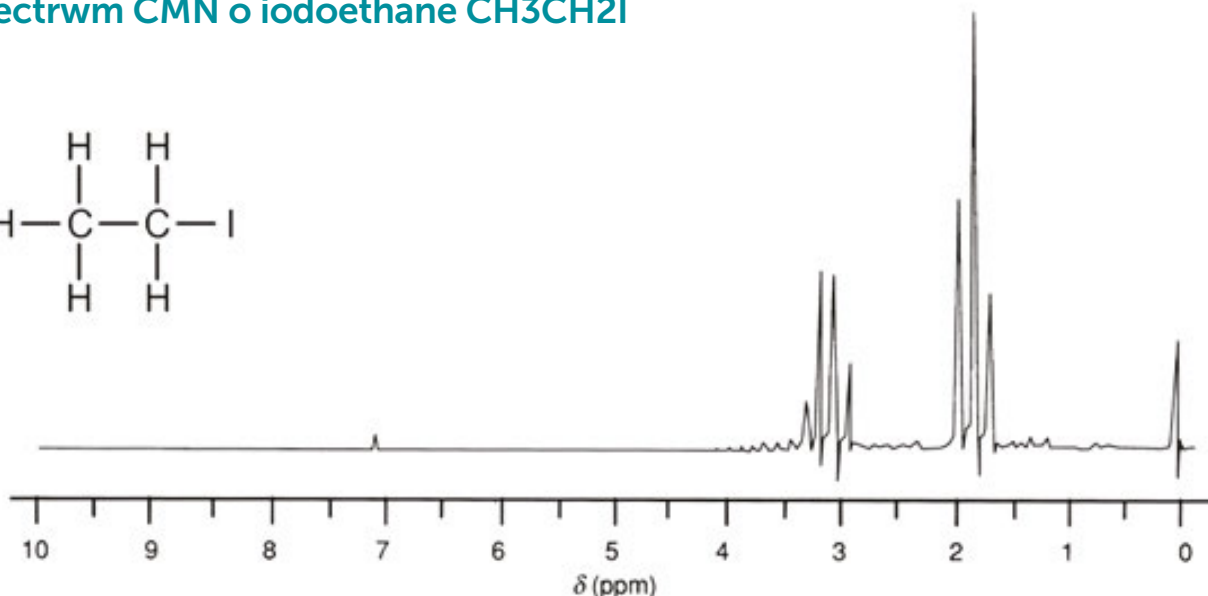
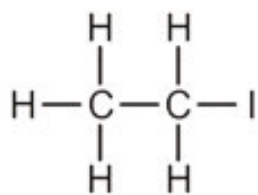
Gan edrych ar broton sbectrwm CMN ethanol isod fe allwn ni adnabod yr hawdd yr atomau hydrogen trwy archwilio rhannau'r jig-so. Mae tri phrif frig:

- Mae'r brig ar y chwith yn cynrychioli'r H sengl yn y grŵp OH (cyfuno 1).
- Mae'r brig yn y canol yn cynrychioli'r 2 H yn y grŵp CH₂ (cyfuno 2).
- Mae'r brig ar y dde yn cynrychioli'r 3 H yn y grŵp CH₃ (cyfuno 3).

Pan gaiff y sbectrwm ei gofnodi fel sbectrwm cydraniad uchel mae mwy o wybodaeth yn amlwg a'r brigau yn ymddangos fel singledi, dwbleddi, tripleddi, pedwarawd ayb oherwydd y rhyngweithiad gyda phrotonau cyfagos. Yn y sbectrwm ethanol mae'r grŵp CH₃ yn effeithio ar y grŵp CH₂ ac i'r gwrthwyneb. Mae'r brig sy'n cynrychioli'r CH₂ felly yn hollti yn bedwar gan ei fod wrth ymyl y grŵp CH₃ (3 + 1) ac mae'r brig sy'n cynrychioli'r grŵp CH₂ yn hollti yn dri gan ei fod wrth ymyl y grŵp CH₃ (2 + 1). Mae'r cyplu sbin-sbin hwn yn rhoi gwybodaeth hanfodol i dechnegydd CMN medrus i allu dehongli'r sbectrwm.



Sbectrwm CMN o iodoethane CH₃CH₂I



NMR spectrum of iodoethane CH₃CH₂I

Mae'r protonau CH₃ yn cynhyrchu brig ar δ 1.8 ond, yn hytrach nag un brig sengl, maen nhw'n cynhyrchu tripled. Mae hyn gan fod protonau CH₃ yn paru gyda'r ddau broton CH₂ cyfagos.

Mae'r protonau CH₂ yn cynhyrchu brig o δ 3.2 ond, yn hytrach nag un brig sengl, maen nhw'n cynhyrchu pedwarawd. Mae hyn gan fod protonau CH₂ yn paru gyda'r tri proton CH₃ cyfagos.



Cymhwyso sbectrosgopeg CMN

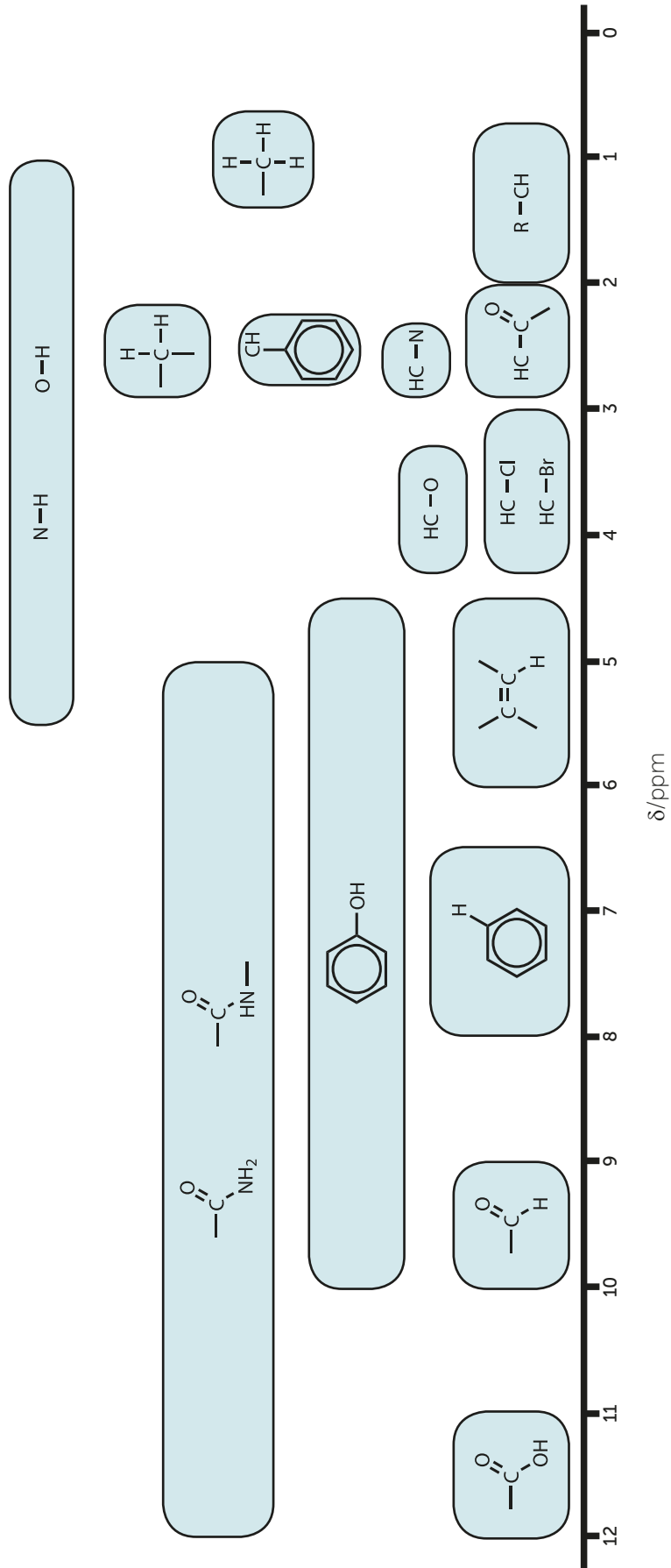
CMN ydy un o'r dulliau mwyaf pwerus i ddadansoddi samplau cemegol, cyfansoddion biolegol ayb:

- Rhoi gwybodaeth drefnus am nifer o wahanol elfennau mewn moleciwlau gan gynnwys, hydrogen, carbon, fflworin, silicon, ffosfforws a mwy.
- Gallu ei ddefnyddio i wneud y gorau o ddeinamig adweithiau, mesur cinetig adweithiau, monitro cynnydd adwaith a rheoli purdeb y cynnyrch.
- Gallu ei ddefnyddio i ddynodi siâp ac adeiledd moleciwlau cymhleth a mawr, er enghraifft sut mae proteinau yn plygu, troelli a rholio.
- Gallu ei ddefnyddio i werthuso cyfran y cyfansoddion solid a hylif mewn bwyd seimlyd fel margarin a phast braster isel.

Caiff CMN hefyd ei ddefnyddio llawer mewn gwyddoniaeth fferyllol a meddygaeth, er enghraifft:

- Canfod annormaledd meinwe
- Rheoli pH mewn clefyd siwgr
- Sganio'r corff gyda delweddu cyseiniant magnetig (MRI): caiff meysydd magnetig cadarn eu defnyddio i gyffroi protonau mewn meinweoedd sy'n cynnwys moleciwlau dŵr. Mae protonau sydd wedi cyffroi yn allyrru signal radio-amledd gaiff ei fesur a'i ddefnyddio i lunio darlun o'r corff. Caiff y gwrthgyferbyniad rhwng meinweoedd ei benderfynu yn ôl y gyfradd y mae'r protonau sydd wedi cyffroi yn dychwelyd i'r cyflwr cydbwysedd.

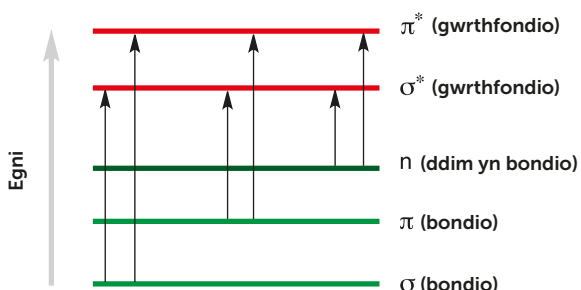
Symudiad cemegol ^1H CMN sydd a wnelo â TMS



Cyflwyniad i sbectrosgopeg uwchfioled - gweladwy (UF-gweladwy)

Amsugno pelydriad uwchfioled a gweladwy

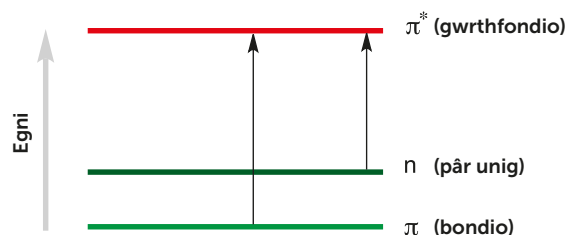
Mae amsugno pelydriad gweladwy ac uwchfioled (UF) yn gysylltiedig â **chynhyrfu electronau** mewn atomau a moleciwlau, o lefelau egni is i rai uwch. Gan fod lefelau egni mater wedi'u cwanteiddio dim ond golau gyda'r union swm cywir o egni i achosi trawsnewidiadau o un lefel i un arall fydd yn cael ei amsugno. Fyddai golau gyda lefel egni gwahanol ddim yn cael ei amsugno nac yn newid y lefel. Y trawsnewidiadau electronig posibl y gall golau eu hachosi ydy:



Ym mhob achos posibl, caiff electron ei gynhyrfu o orbital llawn (egni isel, cyflwr isaf) i orbital gwrthfondio gwag (egni uwch, cyflwr cynhyrfol). Mae egni penodol yn gysylltiedig â phob tonfedd golau. Os ydy'r swm penodol hwnnw o egni'n berffaith gywir i wneud un o'r trawsnewidiadau electronig hyn caiff y donfedd honno ei hamsugno.

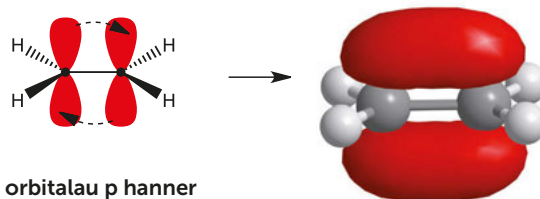
Y mwyaf ydy'r bwlch rhwng y lefelau egni, y mwyaf o egni fydd ei angen i ddyrchafu'r electron i'r lefel egni uwch. Bydd hyn yn golygu bod golau o amledd uwch, ac felly tonfedd fyrrach, yn cael ei amsugno.

Bydd pob moleciwl yn cynhyrfu'n electronig ar ôl amsugno golau, ond mae angen pelydriad egni uchel iawn (yn y gwactod uwchfioled, <200nm) ar y rhan fwyaf o foleciwlau. O ganlyniad, dim ond y trawsnewidiadau canlynol fydd yn digwydd o ganlyniad i amsugno golau yn y rhanbarth UF-gweladwy.



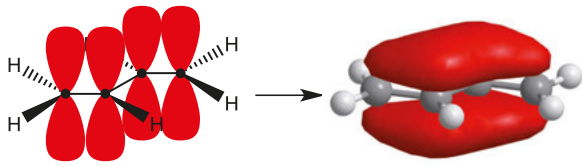
Felly, er mwyn amsugno golau yn y rhanbarth rhwng 200 – 800 nm (lle caiff sbectra eu mesur) rhaid i'r moleciwl gynnwys naill ai fondiau π neu atomau gydag orbitalau sydd ddim yn bondio. Orbitalau sydd ddim yn bondio ydy pâr unig sydd ar, er enghraifft, ocsigen, nitrogen neu halogen.

Caiff bondiau π eu ffurfio pan fydd yr orbitalau p hanner llawer ar ddau atom carbon bond dwbl yn gorgyffwrdd yn wysg eu hochr. Mae'r ddau siâp coch yn y diagram ethen isod yn rhan o'r un orbital bondio π . Mae'r ddau electron i'w gweld yn yr orbital bondio π sydd o ganlyniad yn y cyflwr isaf.

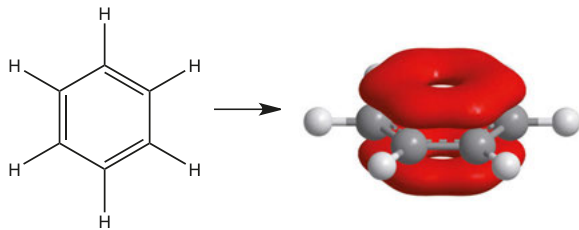


orbitalau p hanner llawn yn gorgyffwrdd yn wysg eu hochr

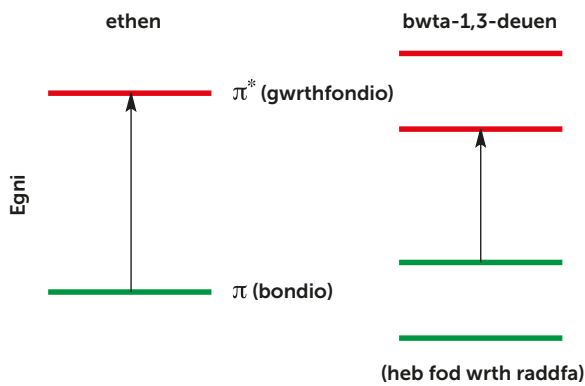
Mewn moleciwlau sy'n cynnwys **systemau cyfun**, hynny ydy, **bondiau sengl a dwbl bob yn ail**, caiff electronau eu dadleoli oherwydd bod orbitalau p y bondiau dwbl yn gorgyffwrdd. Gallwn weld hyn isod ar gyfer bwta-1,3-deuen.



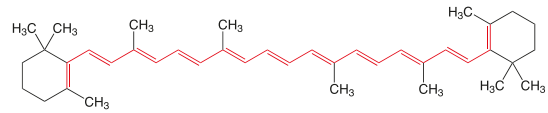
Mae bensen yn enghraifft adnabyddus o system gyfun. Mae adeiledd Kekulé bensen yn cynnwys bondiau sengl a dwbl bob yn ail ac mae'r rhain yn achosi'r system dadleoli π uwchlaw ac islaw plân y bondiau sengl carbon – carbon.



Wrth i'r dadleoli yn y moleciwl gynyddu bydd y bwlch egni rhwng yr orbitalau bondio π a'r orbitalau gwrthfondoio π^* yn lleihau felly caiff golau gyda llai o egni a thonfedd fwy ei amsugno.



Er bod bwta-1,3-deuen yn amsugno golau gyda thonfedd hwy nag ethen mae'n dal i amsugno yn y rhanbarth UF felly mae'r ddau gyfansoddyn yn ddi-liw. Fodd bynnag, os caiff y dadleoli ei ymestyn ymhellach, bydd y donfedd gaiff ei amsugno yn y pen draw'n ddigon hir i fod yn rhanbarth gweladwy'r sbectrw, gan roi cyfansoddyn gyda lliw cryf. Enghraifft dda o hyn ydy pigment y planhigyn oren, beta-caroten, sy'n cynnwys 11 o fondiau dwbl carbon-carbon cyfun.



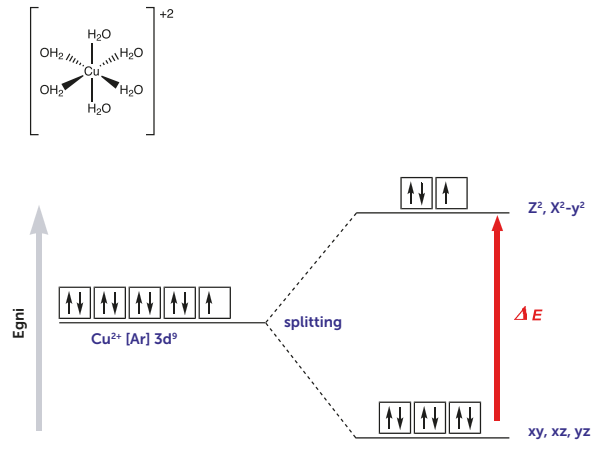
Mae beta-caroten yn amsugno drwy'r rhanbarth UF i gyd ond yn arbennig o gryf yn y rhanbarth gweladwy rhwng 400-500nm gyda brig ar 470nm.

Yr enw ar grwpiau mewn moleciwl sy'n cynnwys bondiau sengl a dwbl bob yn ail (cyfun) ac yn amsugno golau gweladwy ydy **cromofforau**.

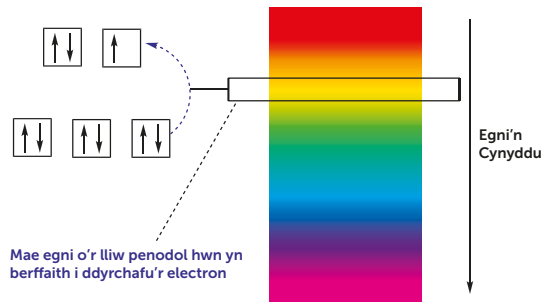
Mae gan **gymhlygion metelau trosiannol** liw cryf hefyd; mae hyn o ganlyniad i hollti'r orbitalau d pan mae'r ligandau'n dod at yr ïon metel canol ac yn bondio gydag o. Bydd rhai o'r orbitalau d yn ennill egni ac eraill yn colli egni. Mae swm yr hollti'n dibynnu ar yr ïon metel yn y canol a'r ligandau.

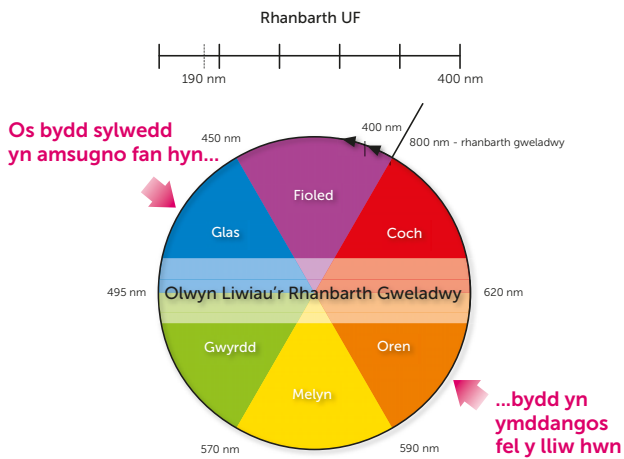
Mae'r gwahaniaeth mewn egni rhwng y lefelau newydd yn effeithio ar faint o egni gaiff ei amsugno pan gaiff electron ei ddyrchafu i lefel uwch. Bydd swm yr egni yn pennu lliw'r golau gaiff ei amsugno.

Er enghraifft, yn y cymhlygyn copr wythochrog, $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$, mae gan olau melyn ddigon o egni i ddyrchafu electron d yn y lefel egni isaf i'r un uchaf.



Wrth i ligandau fondio, mae orbitalau 3d yn hollti i 3 orbital egni isel (xy, xz, yz) a 2 orbital egni uchel (z^2 , x^2-y^2)

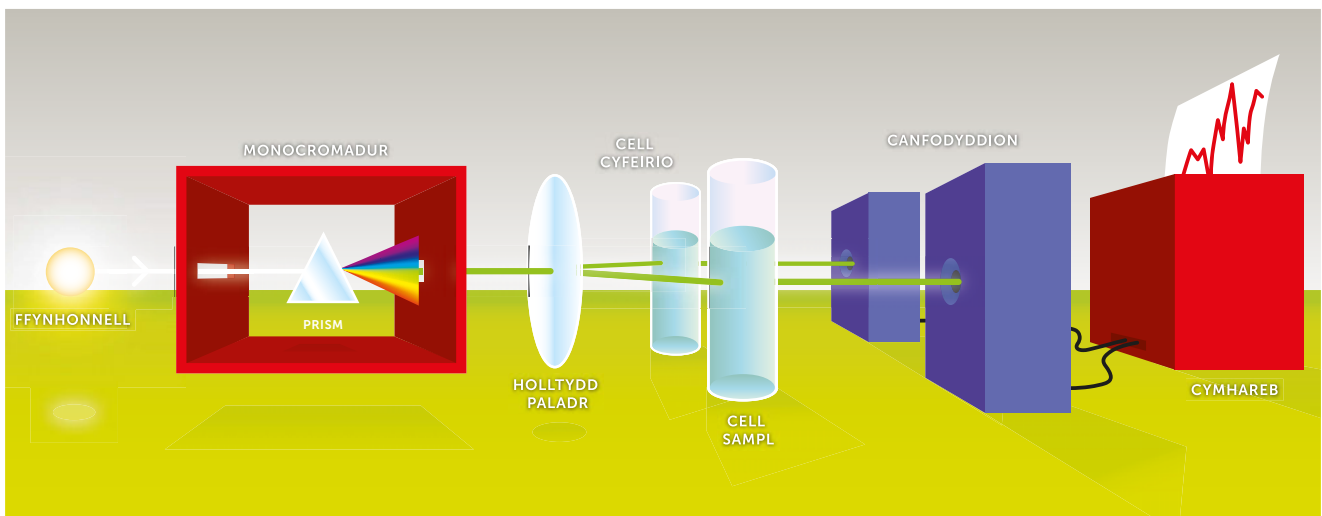




Coch	620–750 nm
Oren	590–620 nm
Melyn	570–590 nm
Gwyrdd	496–570 nm
Glas	450–495 nm
Fioled	380–450 nm

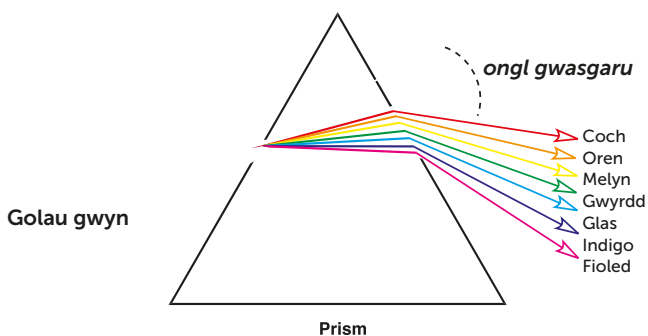
Mae'n bosibl rhagfynegi pa donfeddi sy'n debygol o gael eu hamsugno gan sylwedd lliw. Pan fydd golau gwyn yn pasio drwy sylwedd lliw neu'n cael ei adlewyrchu ganddo caiff cyfran nodweddiadol o'r tonfeddi cymysg ei hamsugno. Yna, bydd y golau sy'n weddill yn cymryd lliw cyflenwol y donfedd/y tonfeddi gaiff eu hamsugno. Mae'r berthynas hon i'w gweld ar yr olwyn liwiau ar y dde. Mae lliwiau cyflenwol gyferbyn â'i gilydd.

Sbectromedr UF-gweladwy



Mae modd defnyddio sbectromedrau UF-gweladwy i fesur amsugnedd golau uwchfioled neu weladwy gan sampl, naill ai ar un donfedd neu drwy sganio dros amrediad yn y sbectrwm. Amrediad y rhanbarth UF ydy 190 i 400 nm ac amrediad y rhanbarth gweladwy ydy 400 i 800 nm. Mae modd defnyddio'r dechneg yn feintiol ac yn ansoddol. Mae diagram cynllunio o sbectromedr UF-gweladwy i'w weld uchod.

Mae'r ffynhonnell golau (cyfuniad o lampau twngsten/halogen a dewteriwm) yn darparu'r pelydriad gweladwy ac uwchfioled agos yn yr amrediad 200 - 800 nm. Caiff allbwn y ffynhonnell golau ei ffocysu ar y gratin diffreithiant sy'n hollti'r golau a ddaw i mewn i'w liwiau cydrannol o wahanol donfeddi, fel prism (sydd i'w weld isod) ond yn fwy effeithlon.



Ar gyfer hylifau, caiff y sampl ei chadw mewn cynhwysydd tryloyw, optegol a fflat o'r enw **cell** neu **cuvette**. Mae'r gell neu cuvette cyfeirio'n cynnwys yr hydoddydd y mae'r sampl wedi'i hydoddi ynddo. Caiff ei alw'n gyffredin yn **flanc**.

Ar gyfer pob tonfedd, caiff arddwysedd y golau sy'n mynd drwy gell cyfeirio (I_0) a chell y sampl (I) ei fesur. Os ydy I yn llai nag I_0 , mae'r sampl wedi amsugno rhywfaint o'r golau.

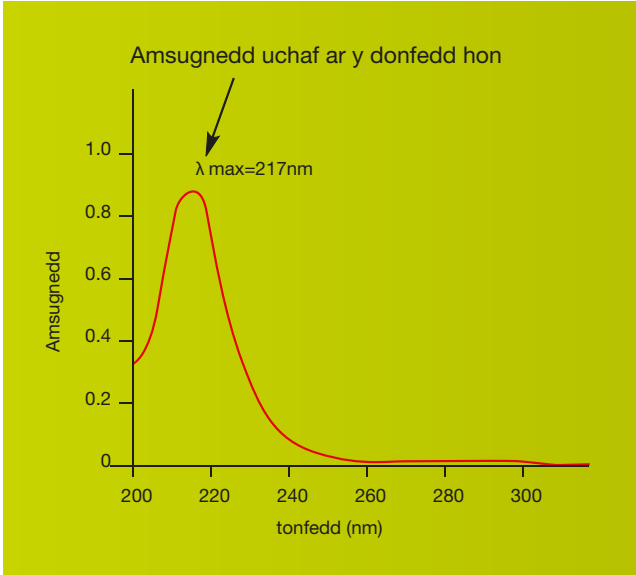
Mae perthynas rhwng amsugnedd (A) y sampl ac I_0 ac I yn ôl yr hafaliad canlynol:

$$A = \log_{10} \frac{I_0}{I}$$

Mae'r canfodydd yn trosi'r golau a ddaw i mewn yn gerrynt a'r uchaf ydy'r cerrynt y mwyaf ydy'r arddwysedd. Mae'r cofnodydd siart fel rheol yn ploto'r amsugnedd yn erbyn tonfedd (nm) yn adrannau UF a gweladwy'r sbectrwm electromagnetig. (Nodwch: does gan amsugnedd ddim unedau).

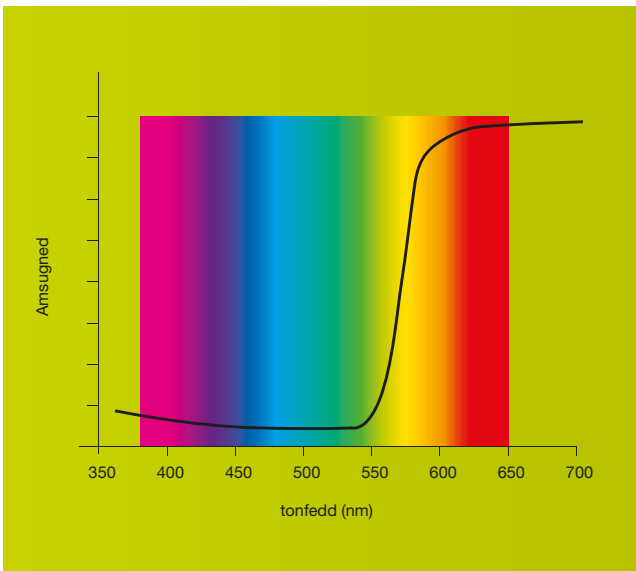
Y sbectrwm UF-gweladwy

Mae'r diagram isod yn dangos sbectrwm amsugno UF-gweladwy syml bwta-1,3-deuen. Mesur o faint o olau gaiff ei amsugno ydy amsugnedd (ar yr echelin fertigol). Mae'n hawdd gweld pa donfeddi golau gaiff eu hamsugno (brigau) a pha donfeddi golau gaiff eu trawsyrru (cafau). Yr uchaf ydy'r gwerth, y mwyaf o donfedd benodol sy'n cael ei hamsugno.



Mae gan y brig amsugno werth o 217 nm yn y rhanbarth uwchfioled felly ni fyddai unrhyw arwydd gweladwy bod golau'n cael ei amsugno. Mae hyn yn golygu bod bwta-1,3-deuen yn ddi-liw. Fel rheol, caiff y donfedd sy'n cyfateb i'r amsugnedd uchaf ei chyfeirio ati fel 'lambda-max' (λ_{max}).

Mae sbectrwm y cymhylyn copr glas yn dangos bod y lliw cyflenwol melyn yn cael ei amsugno.



Deddf Beer-Lambert

Yn ôl Deddf Beer-Lambert, mae'r **amsugnedd** mewn **cyfrannedd** gyda **chrynodiad** y sylwedd mewn hydoddiant sy'n golygu bod modd defnyddio sbectrosgopeg UF-gweladwy hefyd i fesur cynodiad sampl.

Mae modd mynegi Deddf Beer-Lambert ar ffurf yr hafaliad canlynol:

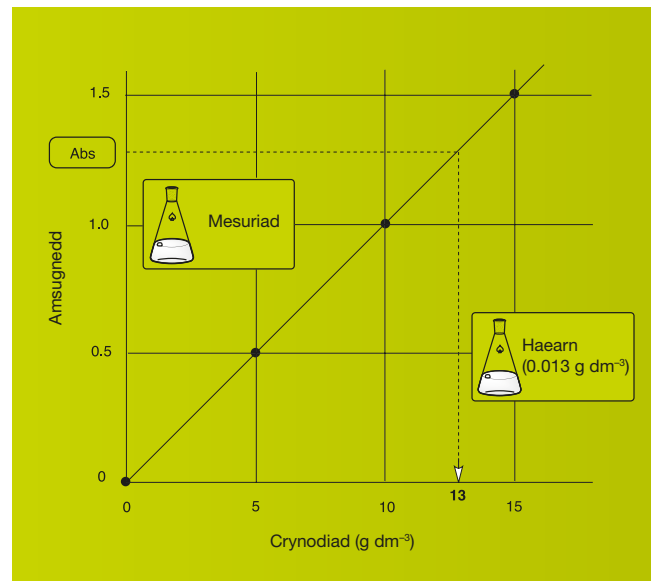
$$A = \epsilon cl$$

Lle golyga

- A** = amsugnedd
- l** = hyd y llwybr optegol, hynny ydy, dimensiwn y gell neu'r cuvette (cm)
- c** = crynodiad yr hydoddiant (mol dm^{-3})
- ϵ** = diddymu molar, sy'n gyson i sylwedd penodol ar donfedd benodol ($\text{dm}^3 \text{mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$)

Os caiff amsugnedd cyfres o hydoddiannau sampl o grynodiad hysbys eu mesur a'u plotio yn erbyn eu crynodiadau cyfatebol dylai'r plot **amsugnedd yn erbyn crynodiad** fod yn llinol os caiff deddf Beer-Lambert ei ufuddhau. Enw'r math hwn o graff ydy **graff calibro**.

Mae modd defnyddio graff calibro i fesur crynodiad hydoddiant sampl anhysbys drwy fesur ei amsugnedd, fel sydd i'w weld isod.



Gan fod amsugnedd hydoddiannau gwanedig mewn cyfrannedd union â chrynodiad, ffordd arall ddefnyddio iawn o ddefnyddio sbectrosgopeg UF-gweladwy ydy astudio cineteg adweithiau. Mae modd canfod cyfradd newid crynodiad adweithyddion neu gynhyrchion drwy fesur y cynnydd neu'r lleihad yn amsugnedd hydoddiannau lliw dros amser. Drwy blotio amsugnedd yn erbyn amser mae modd canfod gradd yr adwaith yn nhermau'r adweithyddion ac felly'r hafaliad cyfradd y mae modd ei ddefnyddio i gynnig mecanwaith i'r adwaith.

Cymwysiadau modern sbectrosgopeg UF

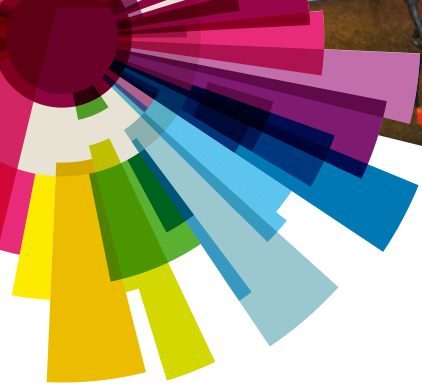
Mae sbectrosgopeg UF-gweladwy'n dechneg sy'n ein galluogi i fesur crynodiadau sylweddau, felly mae'n galluogi gwyddonwyr i astudio cyfraddau adweithiau a chanfod hafaliadau cyfradd adweithiau, y mae modd eu defnyddio i gynnig mecanwaith. Felly, caiff sbectrosgopeg UF-gweladwy ei defnyddio llawer wrth addysgu ac ymchwilio ac mewn labordai dadansoddol at ddibenion dadansoddi meintiol unrhyw foleciwl sy'n amsugno pelydiad electromagnetig uwchfioled a gweladwy.

Mae cymwysiadau eraill yn cynnwys:

- Mewn cemeg glinigol caiff sbectrosgopeg UF-gweladwy ei defnyddio llawer wrth astudio cineteg ensymau. Does dim modd astudio ensymau'n uniongyrchol ond mae modd astudio eu gweithgarwch drwy ddadansoddi cyflymder yr adweithiau y maen nhw'n eu catalyddu. Hefyd, mae modd atodi adweithyddion neu labeli at foleciwlau er mwyn canfod a mesur gweithgarwch ensymau'n anuniongyrchol. Eu defnydd ehangaf ym maes diagnosteg glinigol ydy fel dangosydd o niwed i feinweoedd.

Pan gaiff celloedd eu niweidio gan glefyd, bydd ensymau'n gollwng i lif y gwaed a bydd faint ohonyn nhw sy'n bresennol yn dynodi pa mor ddifrifol ydy'r niwed i'r feinwe. Mae modd defnyddio'r cyfrannau cymharol o wahanol ensymau i roi diagnosis o glefyd, er enghraifft, yn yr iau, y pancreas neu organau eraill sydd fel arall yn dangos symptomau tebyg.

- Caiff sbectrosgopeg UF-gweladwy ei defnyddio i brofi hydoddi tabledi a chynhyrchion yn y diwydiant fferyllol. Mae hydoddi'n brawf cymeriadaeth gaiff ei ddefnyddio'n aml yn y diwydiant fferyllol fel canllaw i ddylunio fformweiddiadau ac er mwyn rheoli ansawdd cynhyrchion. Dyma'r unig brawf hefyd sy'n mesur cyfradd rhyddhau cyffuriau in-vitro fel ffwythiant amser sy'n gallu adlewyrchu pa mor hawdd ydy atgynhyrchu proses cynhyrchu'r cynnyrch neu, mewn achosion cyfyngedig, rhyddhau cyffuriau in vivo.
- Ym meysydd biocemeg a geneteg caiff sbectrosgopeg UF-gweladwy ei defnyddio i feintoli gweithgarwch proteinau/ensymau a DNA yn ogystal â dadnatureiddio thermol DNA.
- Yn y diwydiannau llifynnau, inc a phaent caiff sbectrosgopeg UF-gweladwy ei defnyddio i reoli ansawdd datblygu a chynhyrchu adweithyddion llifo, inc a phaent ac i ddadansoddi adweithyddion llifo rhyngol.
- Mewn meysydd amgylcheddol ac amaethyddol mae modd defnyddio sbectrosgopeg UF-gweladwy i feintoli deunydd organig a metelau trwm mewn dŵr glân.



Ymarferion Sbectrosgopeg mewn Siwtces

GWEITHDY YN Y DOSBARTH

Adnabod cyfansoddion: Ymarfer 1 Dadansoddiad SM ac IG (dewis i gynnwys CMN)

Adnabod cyfansoddion: Ymarfer 2 Dadansoddiad IG a CMN

Dadansoddi llifynnau bwyd: Ymarfer 3 Dadansoddiad UF-gweladwy

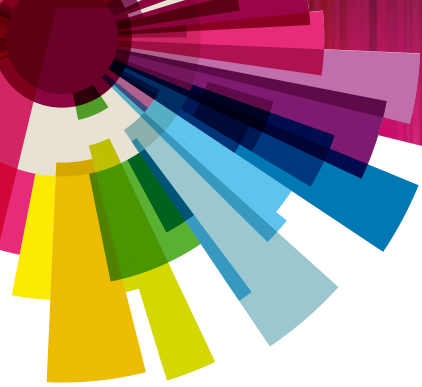
Corff mewn labordy: Ymarfer 1 Adnabod cyfansoddion Dadansoddiad SM ac IG

Corff mewn labordy: Ymarfer 2 Dos gormodol o asbirin Dadansoddiad UF-gweladwy

Corff mewn labordy: Ymarfer 3 Dirgelwch Llofruddiaeth "Pwy Wnaeth?" Dadansoddiad SM

Sgandal cyffuriau y Gemau Olympaidd: Ymchwiliad dadansoddiad IG

D.S. Mae Ymarfer 1 a Chorff mewn labordy Ymarfer 1 yn defnyddio'r un samplau a sbectra. Mae un yn canolbwyntio ar adnabod cyfansoddion a'r llall yn llunio'r ymchwiliad mewn amgylchedd ffforensig.



Adnabod cyfansoddion: Ymarfer 1

Dadansoddiad SM ac IG (dewis i gynnwys CMN)



Cefndir

Mae **Sbectrosgopeg IG** yn dechreg gaiff ei defnyddio gan gemegwyr i adnabod sylweddau anhysbys yn seiliedig ar faint mae bondiau cemegol yn amsugno pelydriad IG. Mae gan sbectrosgopeg IG lawer o fanteision ym maes gwyddoniaeth a thechnoleg ac fe gaiff sbectromedrau cludadwy gan amlaf eu defnyddio mewn gwaith dadansoddi ffforensig mewn safle trosedd i roi dadansoddiad cyflym, synhwyrus ac annistrywiol o samplau gwaed neu sylweddau anhysbys. Mae gan fasau data cyfrifiadurol gofnodion o graffiau amsugno IG adnabyddus fel bod modd adnabod bron i unrhyw sylwedd neu ddeunydd yn hyderus iawn.

Amcan

Ceisio canfod y grwpiau gweithredol sy'n bresennol yn y samplau cemegol. Mae'r sbectra SM, IG a CMN wedi'u darparu ar gyfer yr holl samplau. Cewch ddefnyddio rhai o'r rhain yn unig neu'r cyfan ohonyn nhw yn eich ymchwiliad. Caiff y gweithgaredd hwn ei ailadrodd ar ddiwedd y llyfr yn ymarfer 'Corff mewn labordy Ymarfer 1' lle caiff yr un samplau eu defnyddio mewn safle trosedd.

DULL

Caiff samplau anhysbys A-F eu rhoi ichi

1. Dadansoddwch bob sampl gan ddefnyddio'r sbectromedr IG ATR. **(Nodwch: Rhaid bod yn ofalus wrth ddefnyddio'r cyfarpar drud a brau hwn; peidiwch â'i ddefnyddio heb oruchwyliaeth arddangoswr).**

Dehongli sbectra

I ddehongli'r sbectra sydd i'w cael o sampl mae angen cyfeirio at siartiau cydberthyniad a thablau o ddata isgoch.

2. Gan ddefnyddio'r data amsugno IG sydd wedi'i ddarparu dehonglwch eich sbectra a chanfod pa grwpiau gweithredol sy'n bresennol ym mhob sampl. Cofnodwch eich canlyniadau yn y tabl sydd wedi'i ddarparu.

Adnabod cyfansoddyn anhysbys

Er bod sbectrosgopeg IG yn offeryn defnyddiol iawn i ganfod pa grwpiau gweithredol sydd mewn cyfansoddyn anhysbys, dydy hi ddim yn rhoi digon o dystiolaeth i gadarnhau'r union adeiledd. Mae cemegwyr yn defnyddio amrywiaeth o dechnegau i roi adeiledd moleciwl at ei gilydd.

3. Defnyddiwch eich sbectra IG wedi'u dehongli a'r sbectra mâs gaiff eu darparu i ganfod adeileddau'r holl gyfansoddion anhysbys.
4. Awgrymwch pa dechneg neu dechnegau offerynnol eraill fyddai eu hangen i gadarnhau pa gemegau ydyn nhw. (Bydd eich arddangoswr yna'n gallu rhoi data ychwanegol ichi i gadarnhau eich dadansoddiad).

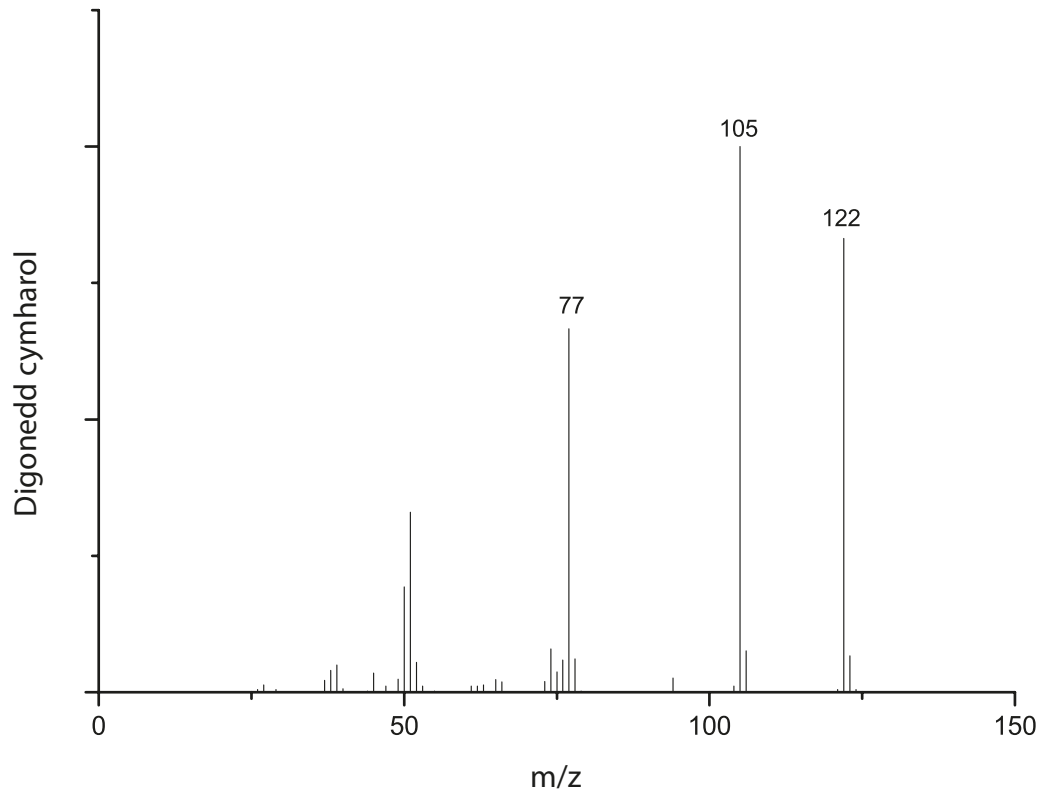
TAFLEN WAITH MYFYRIWR

Sampl	GWERTHOEDD BRIG PWYSIG (cm ⁻¹)	GRŴP GWEITHREDOL AC AMREDIAD (cm ⁻¹)	DADANSODDIAD MANYLEB MÂS (mâs y cyfansoddion a'r darnau sydd wedi'u hadnabod)	ENW AC ADEILEDD RHAGWELEDIG Y CEMEGYN
A				
B				
C				
Ch				
D				
Dd				
E				
F				

SBECTRA MÂS I'W DEHONGLI

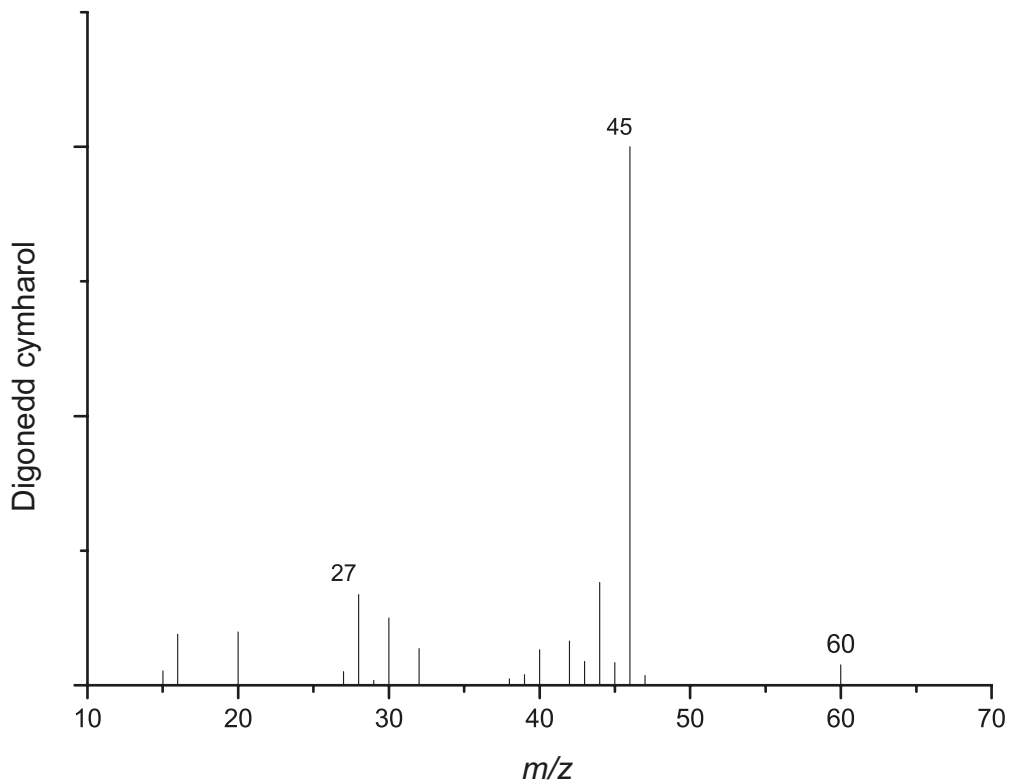
Sampl A – SM

Fformiwla empirig $C_7H_6O_2$



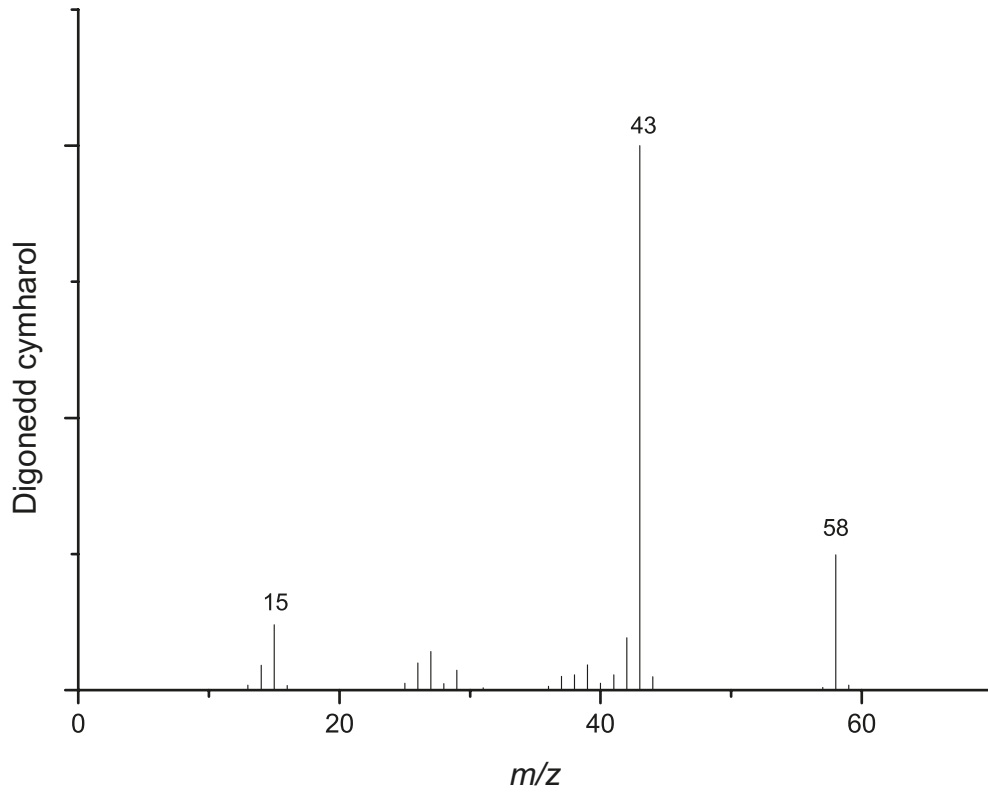
Sampl B – SM

Fformiwla empirig C_3H_8O



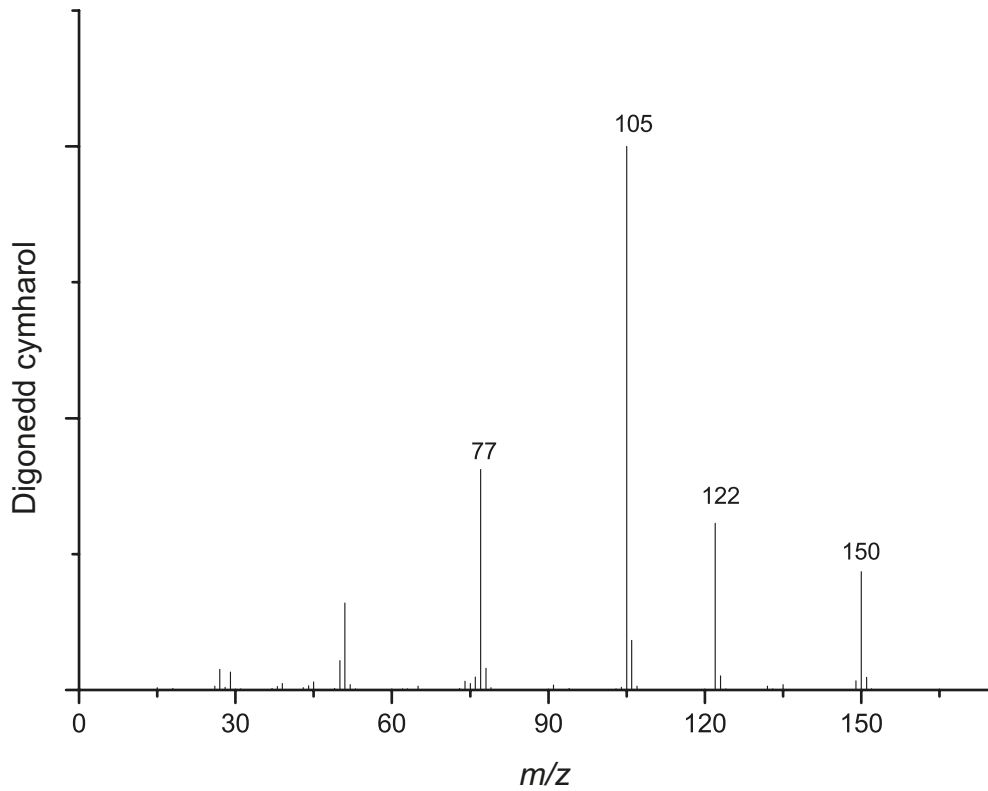
Sampl C – SM

Fformiwla empirig C_3H_6O



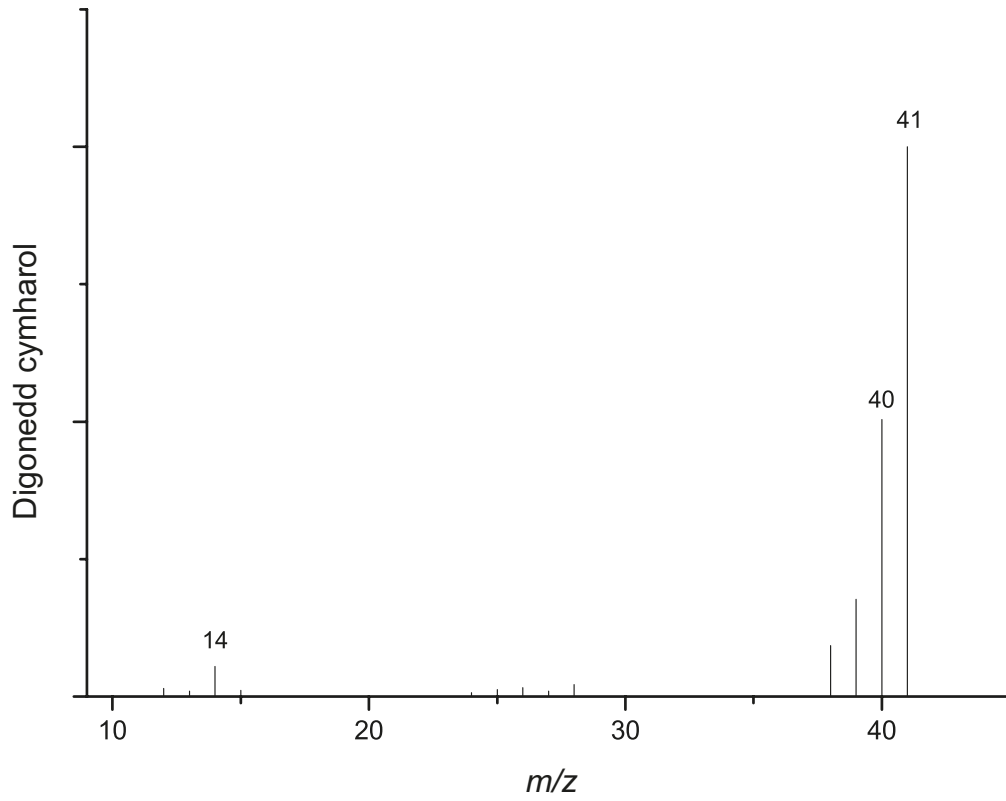
Sampl Ch – SM

Fformiwla empirig $C_9H_{10}O_2$



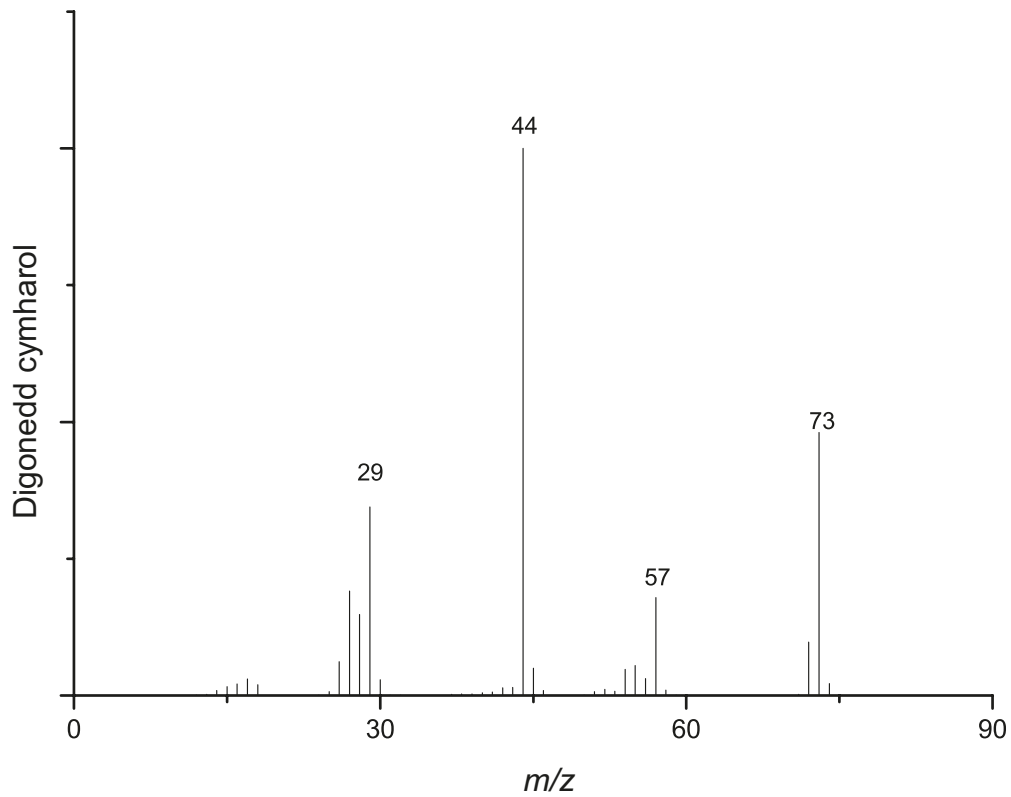
Sampl D – SM

Fformiwla empirig C_2H_3N



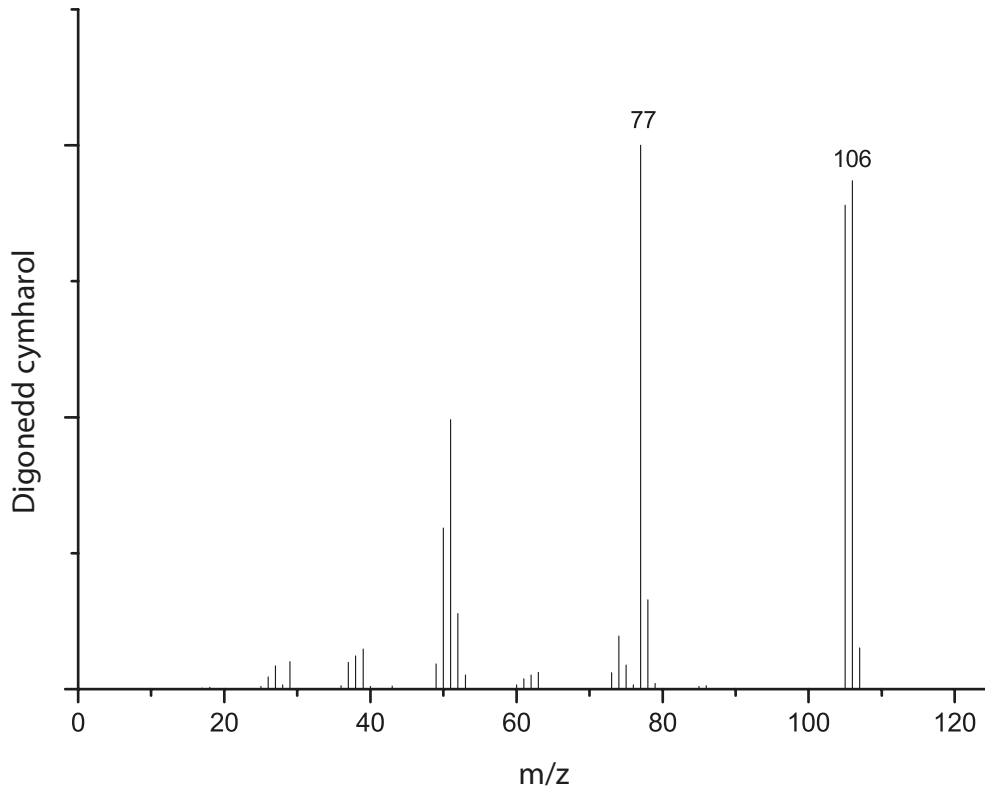
Sampl Dd – SM

Fformiwla empirig C_3H_7NO



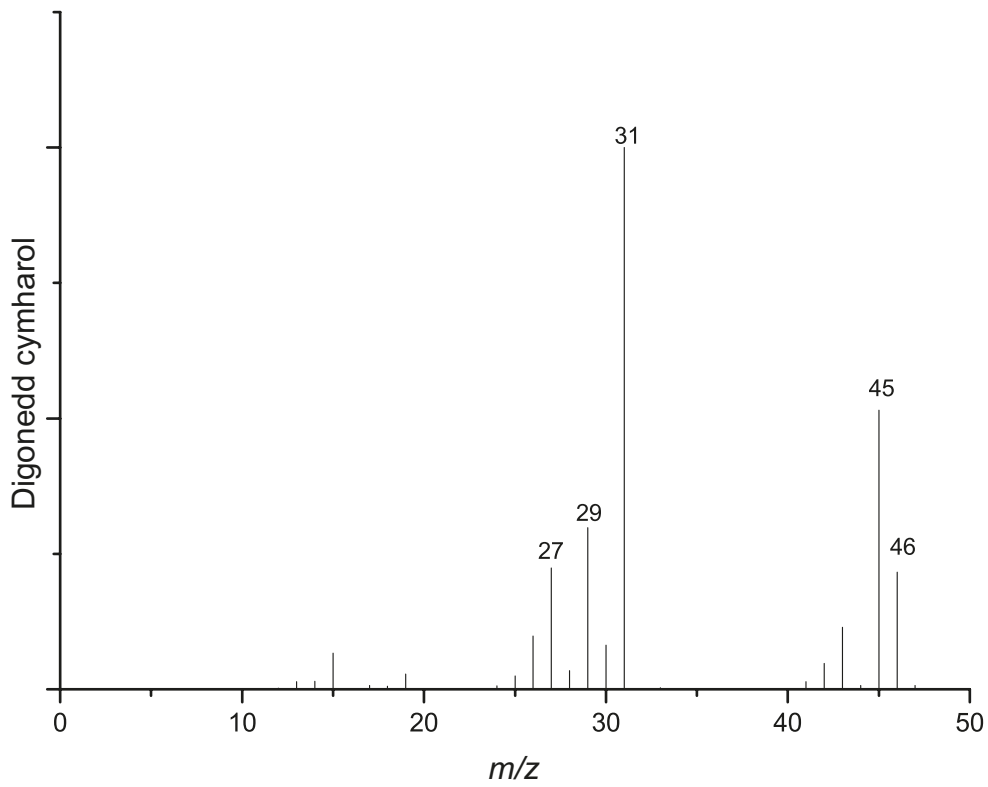
Sampl E – SM

Fformiwla empirig C_7H_6O



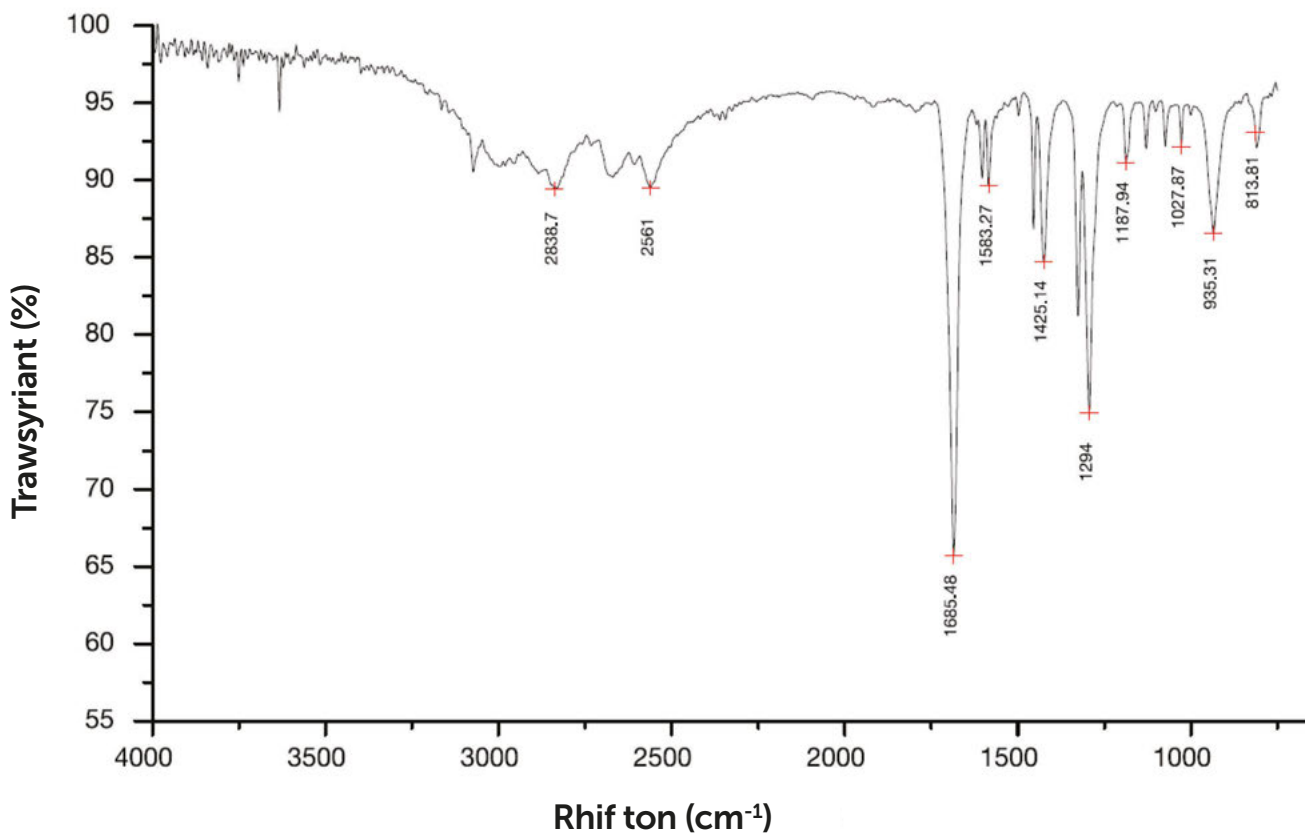
Sampl F – SM

Fformiwla empirig C_2H_6O

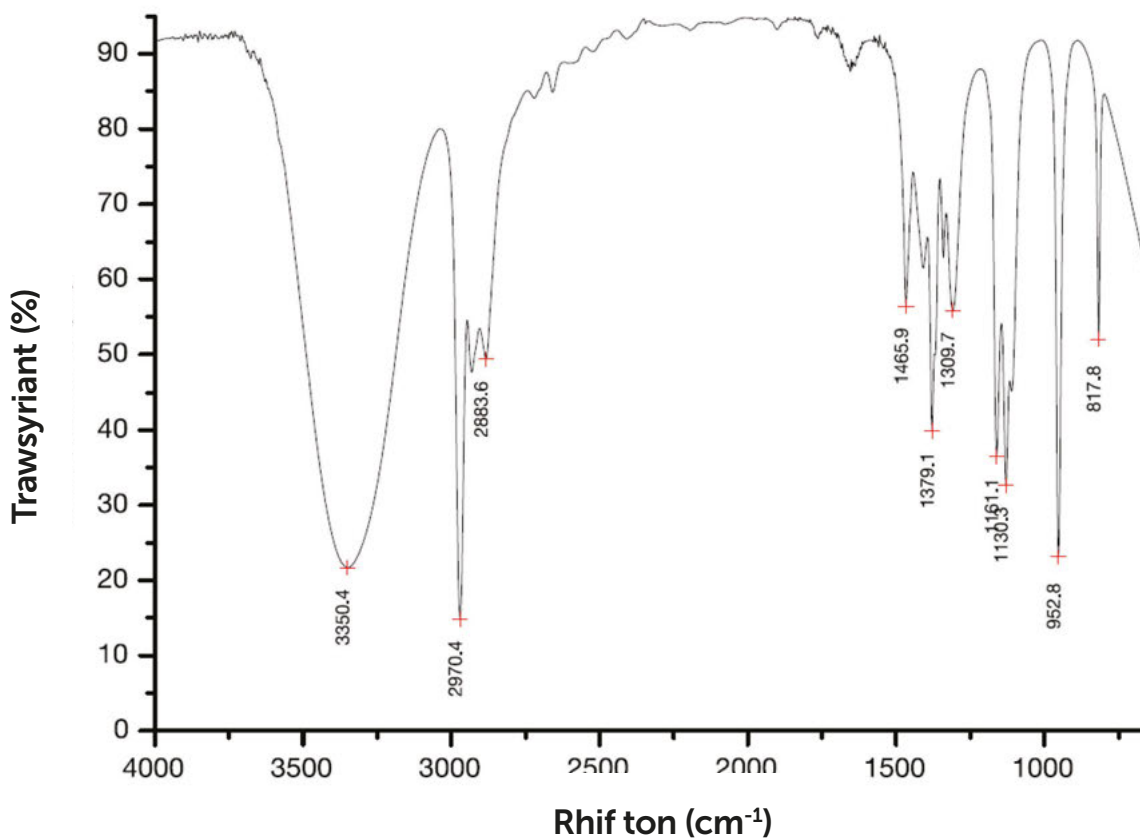


SBECTRA IG I'W DEHONGLI

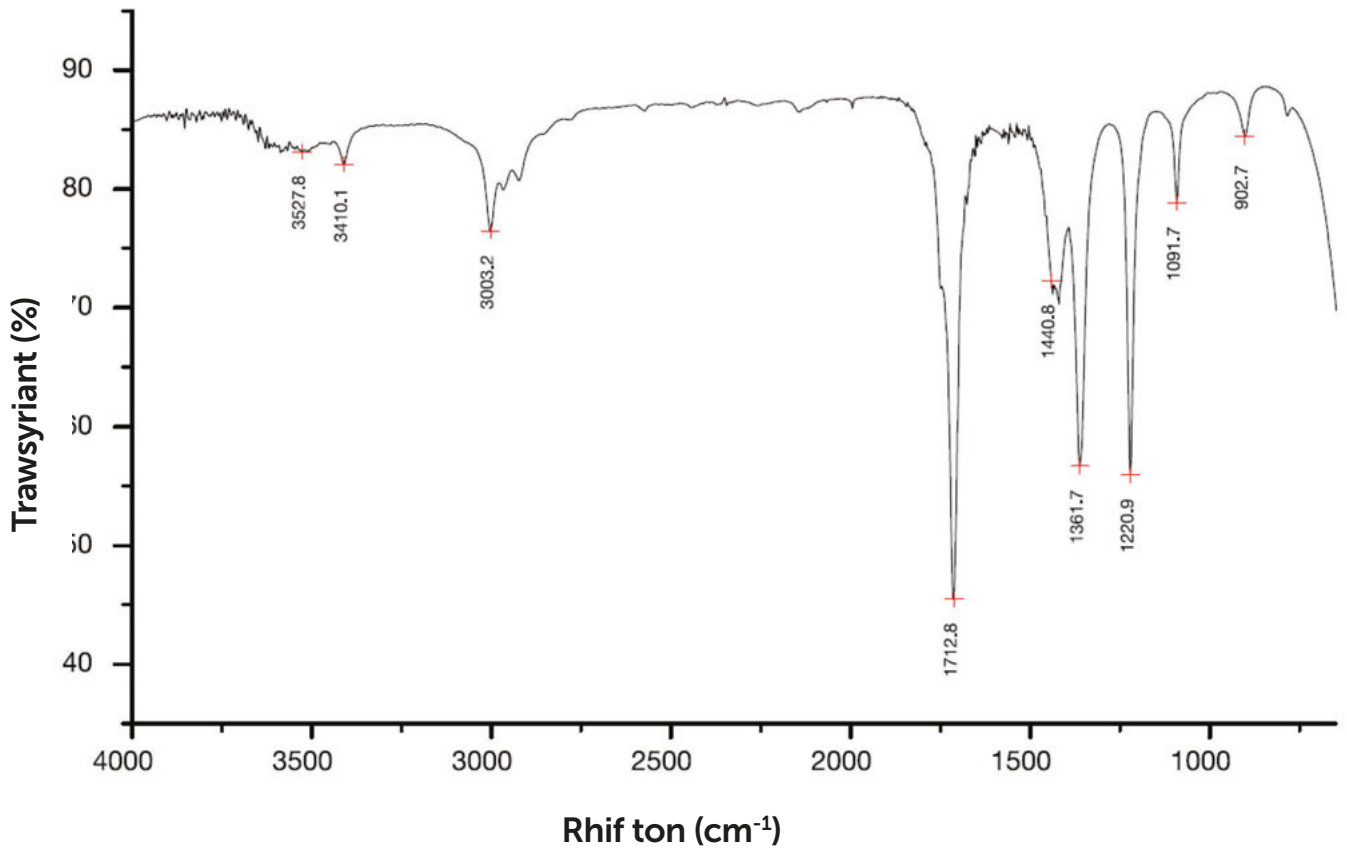
Sampl A – IG



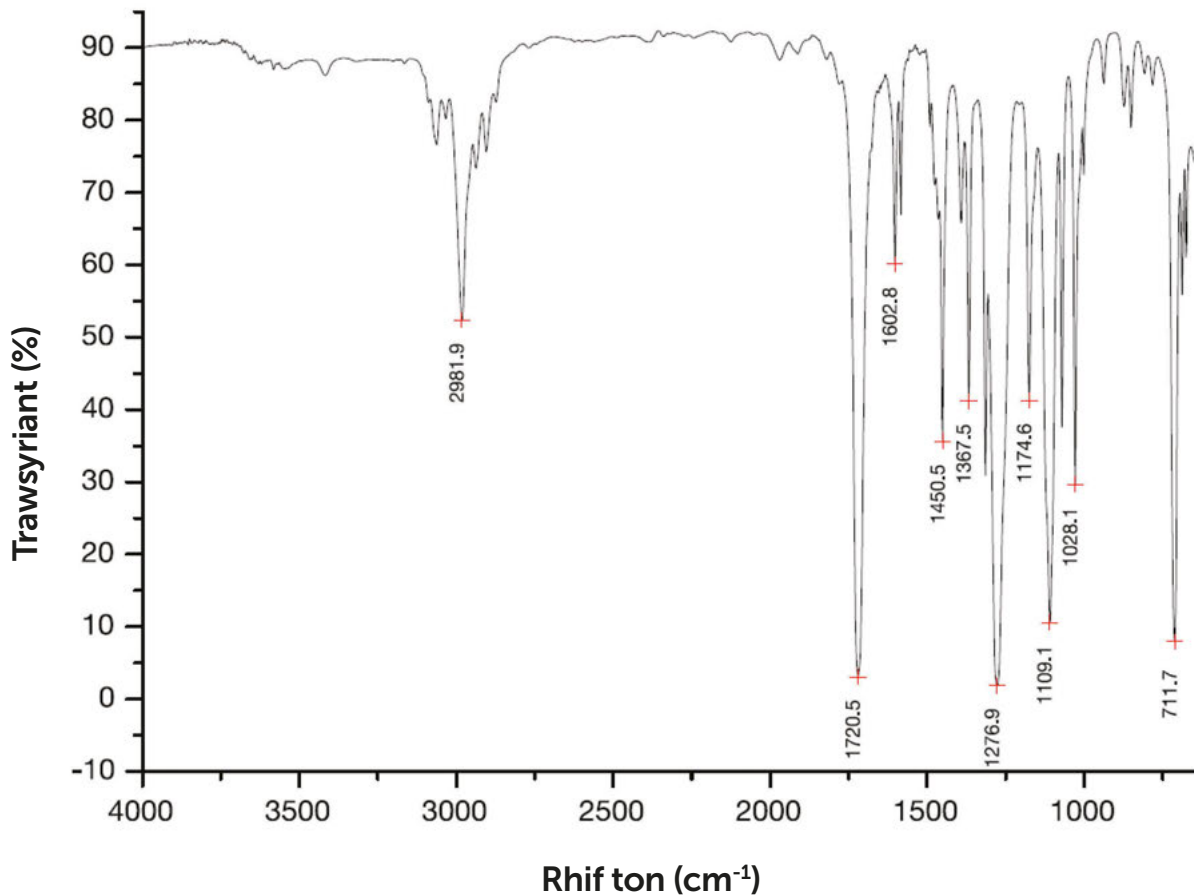
Sampl B – IG



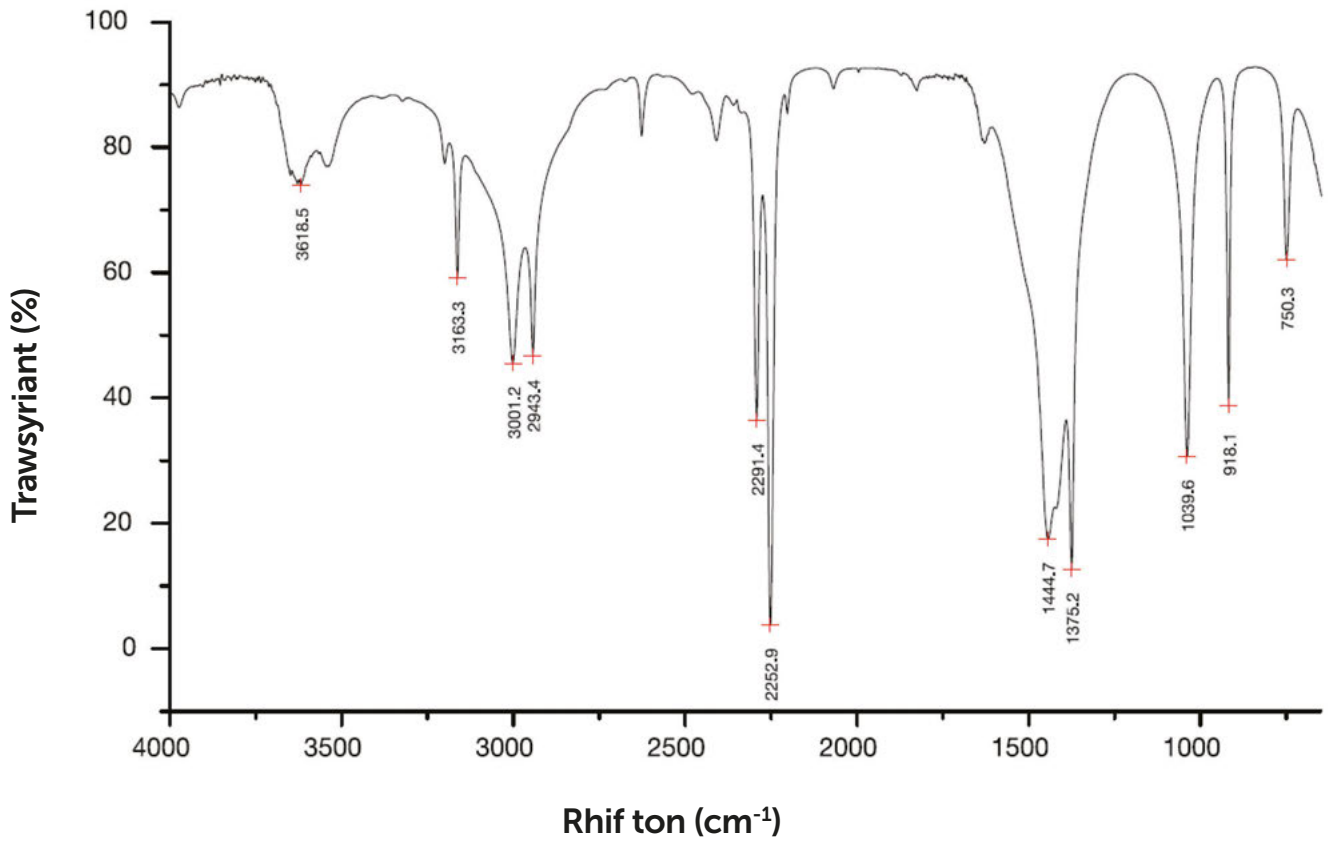
Sampl C – IG



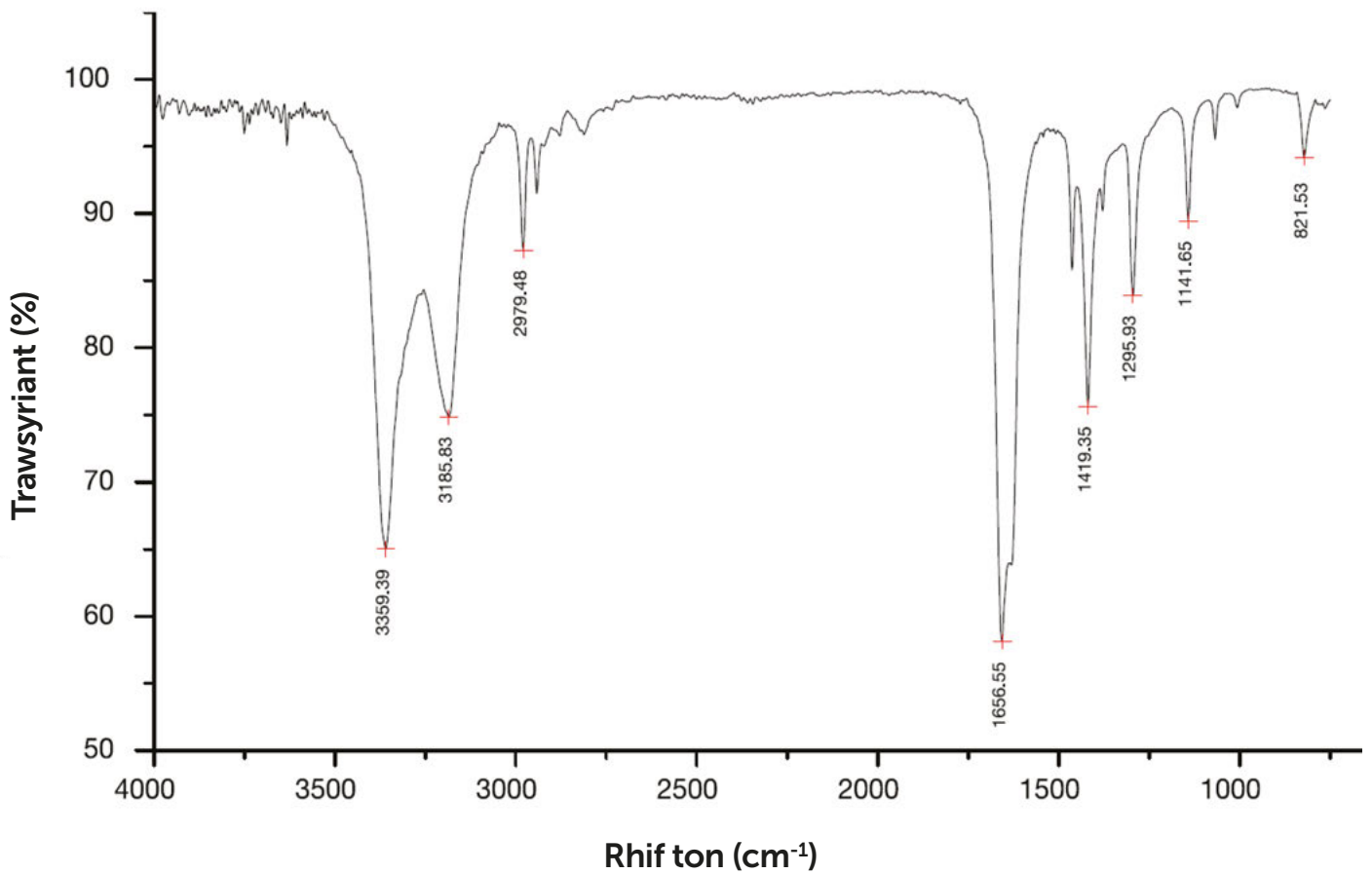
Sampl Ch – IG



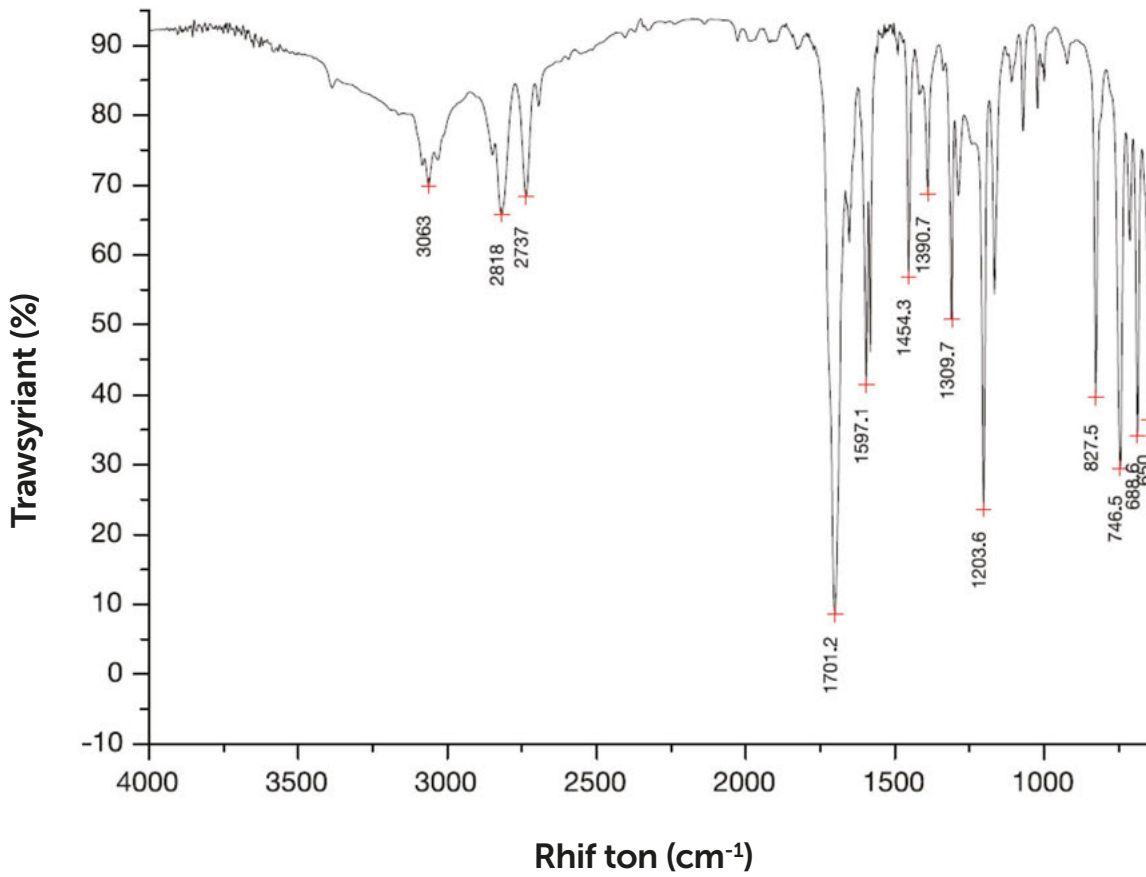
Sampl D – IG



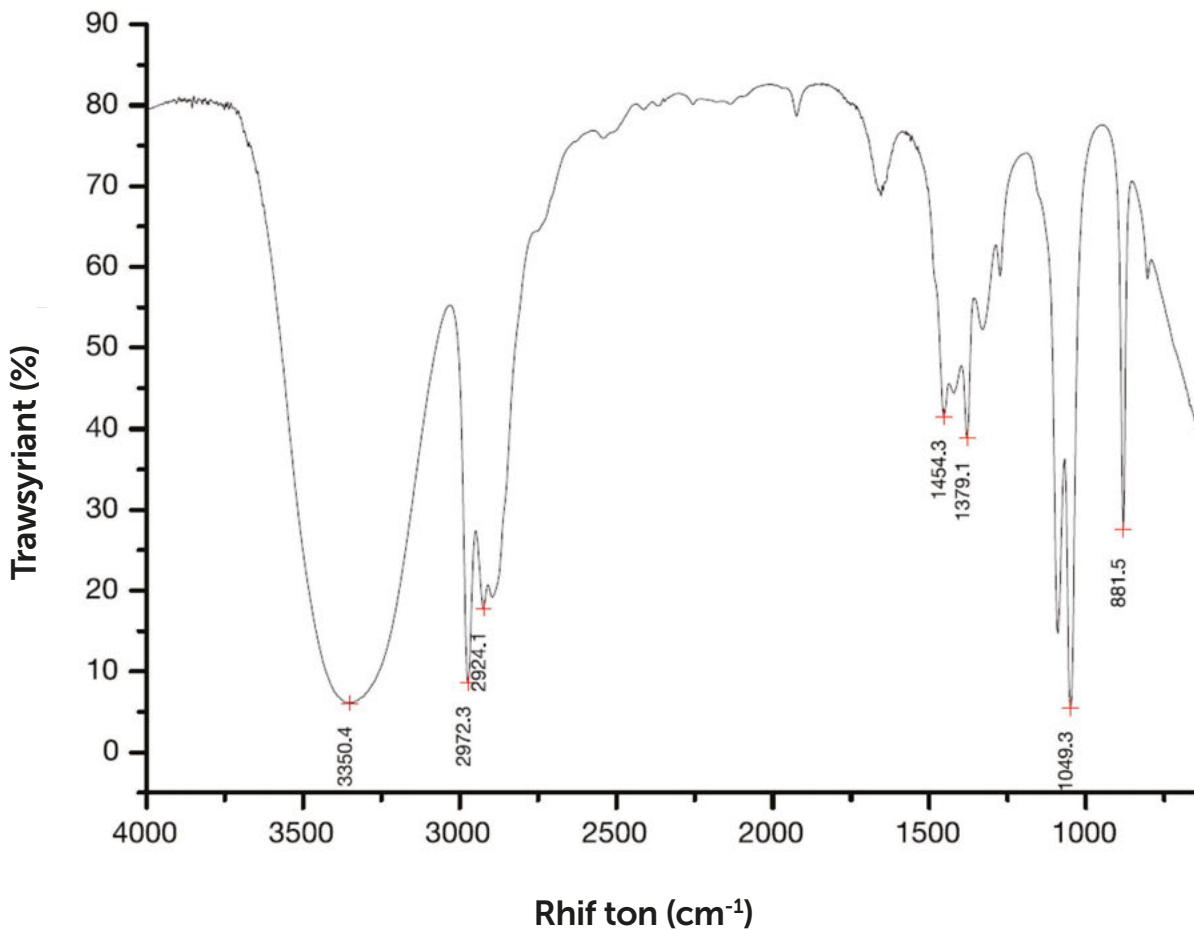
Sampl Dd – IG



Sampl E – IG

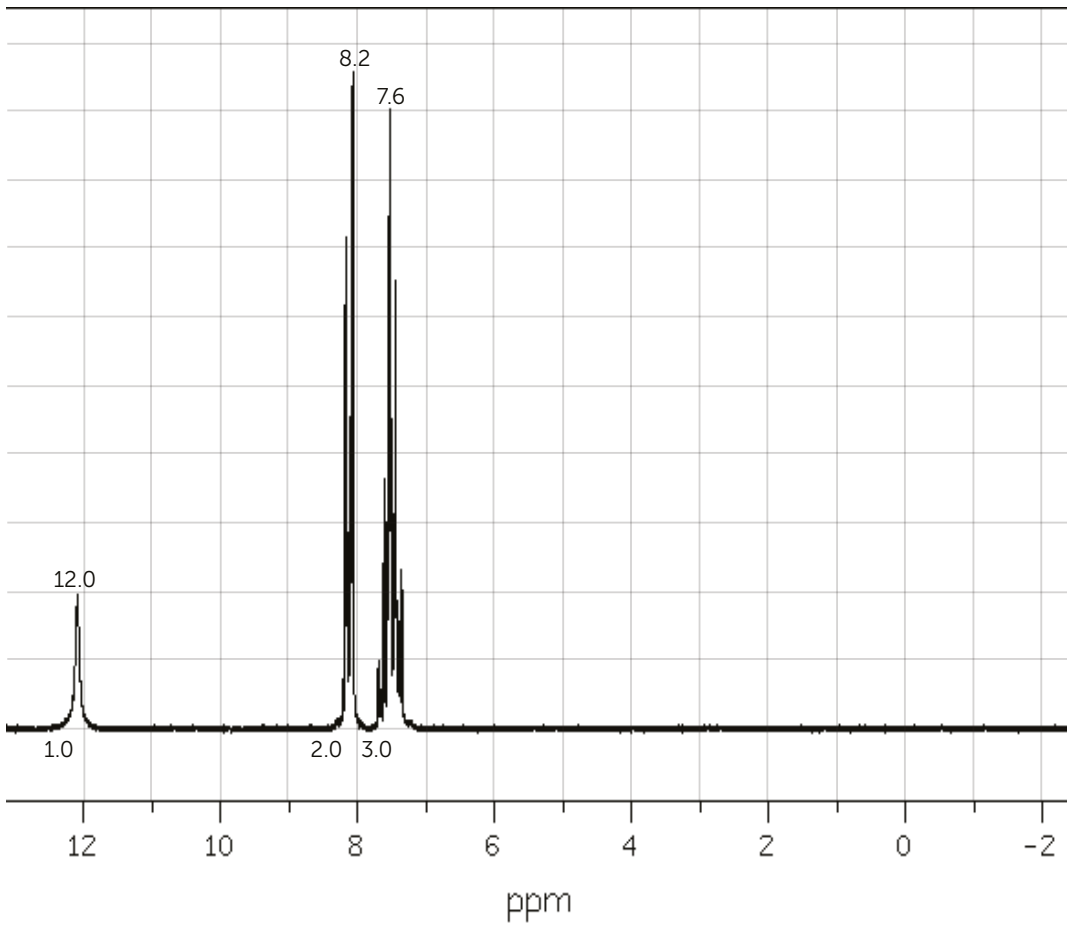


Sampl F – IG

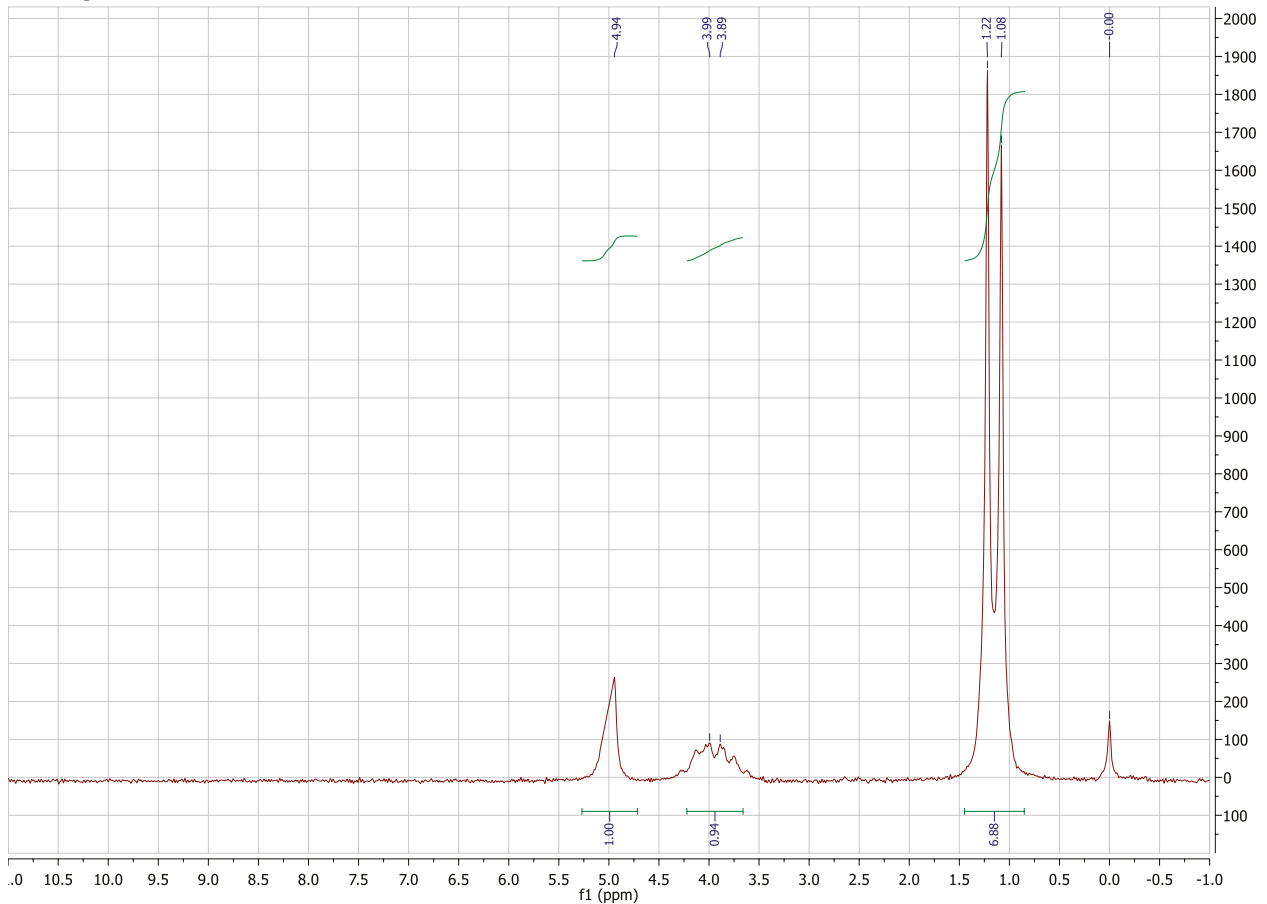


SBECTRA CMN I'W DEHONGLI

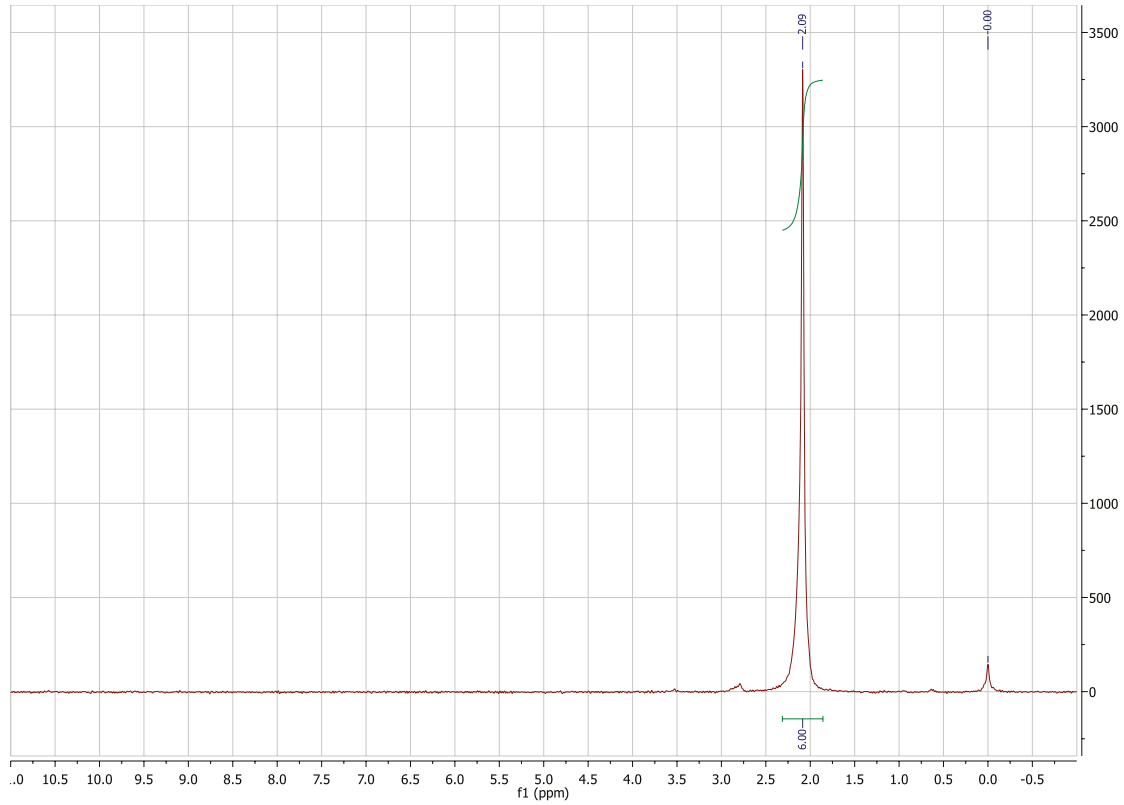
Sampl A – CMN



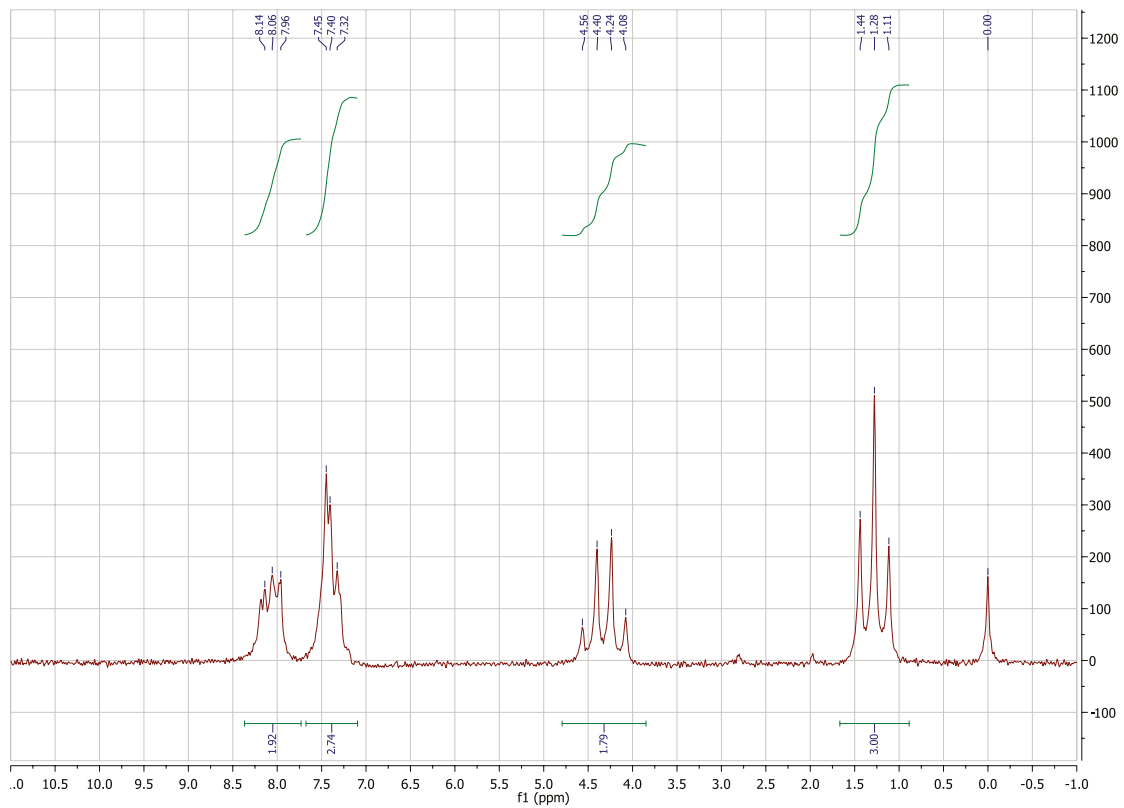
Sampl B – CMN



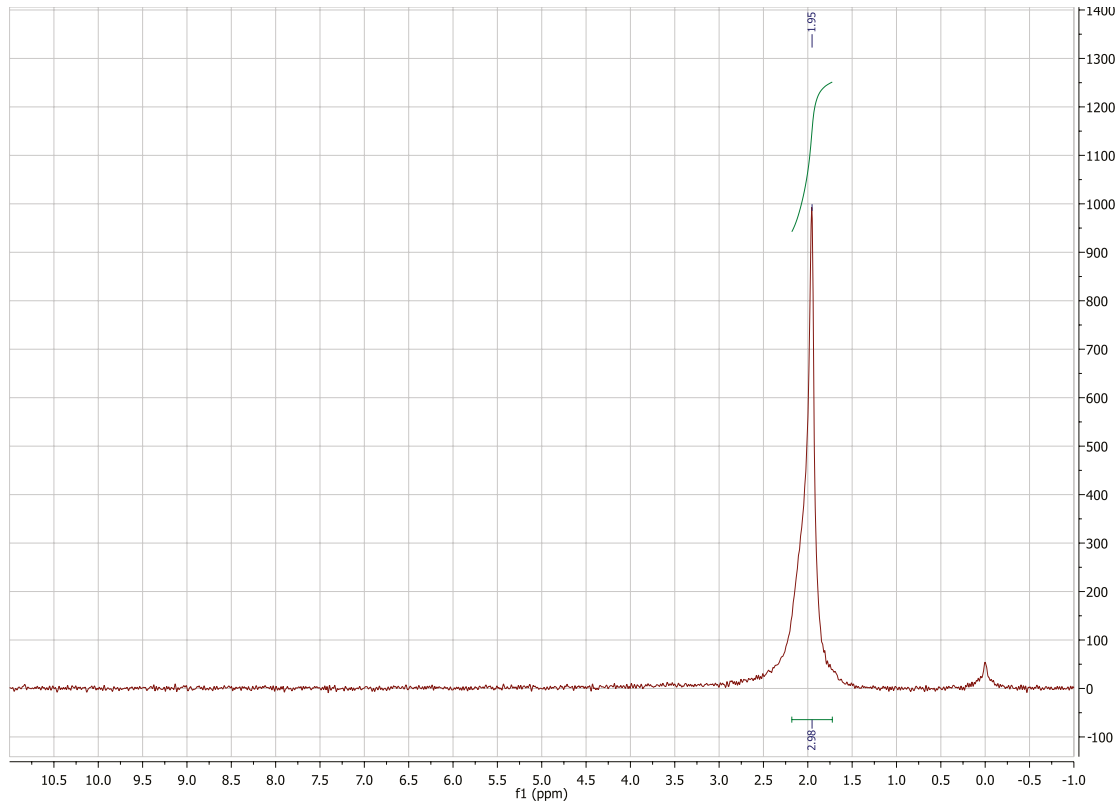
Sampl C – CMN



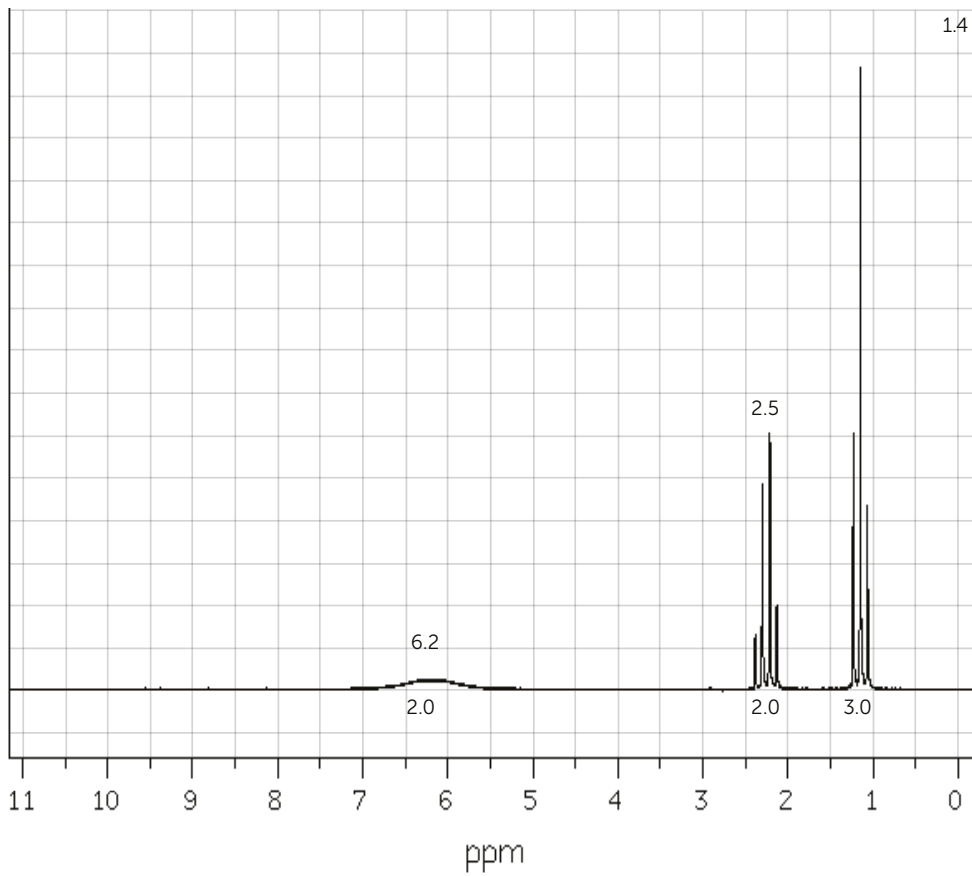
Sampl Ch – CMN



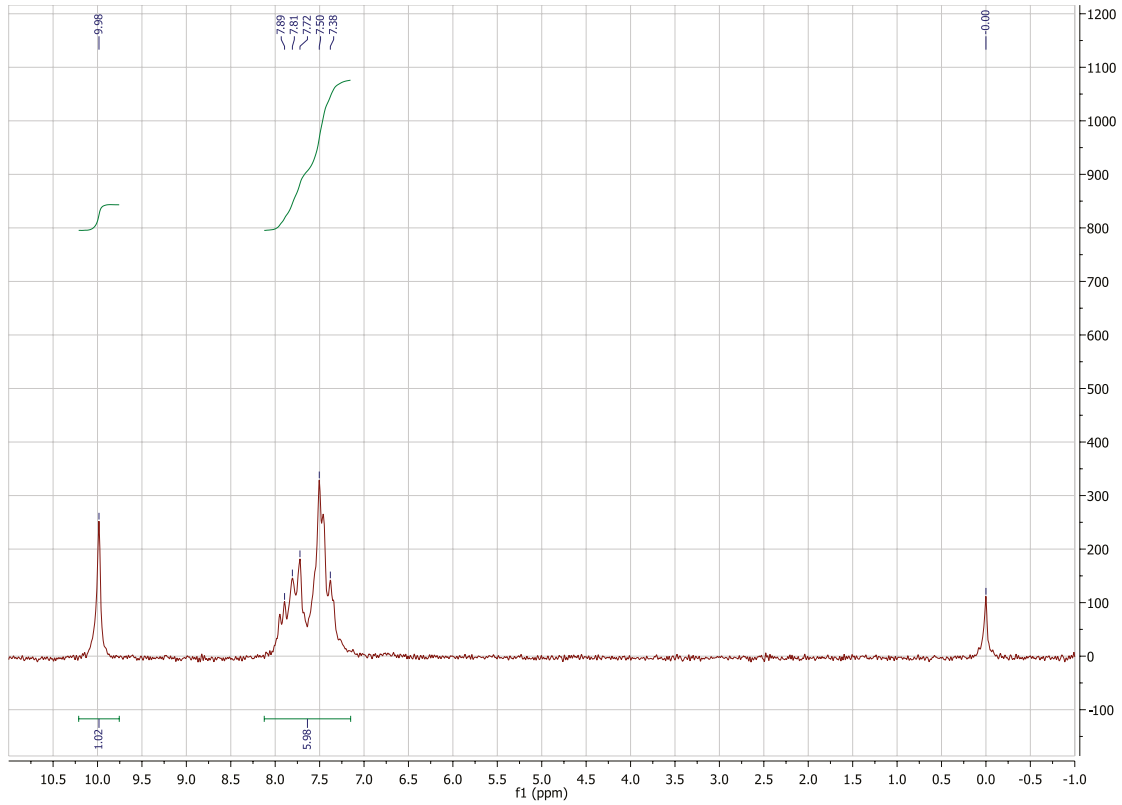
Sampl D – CMN



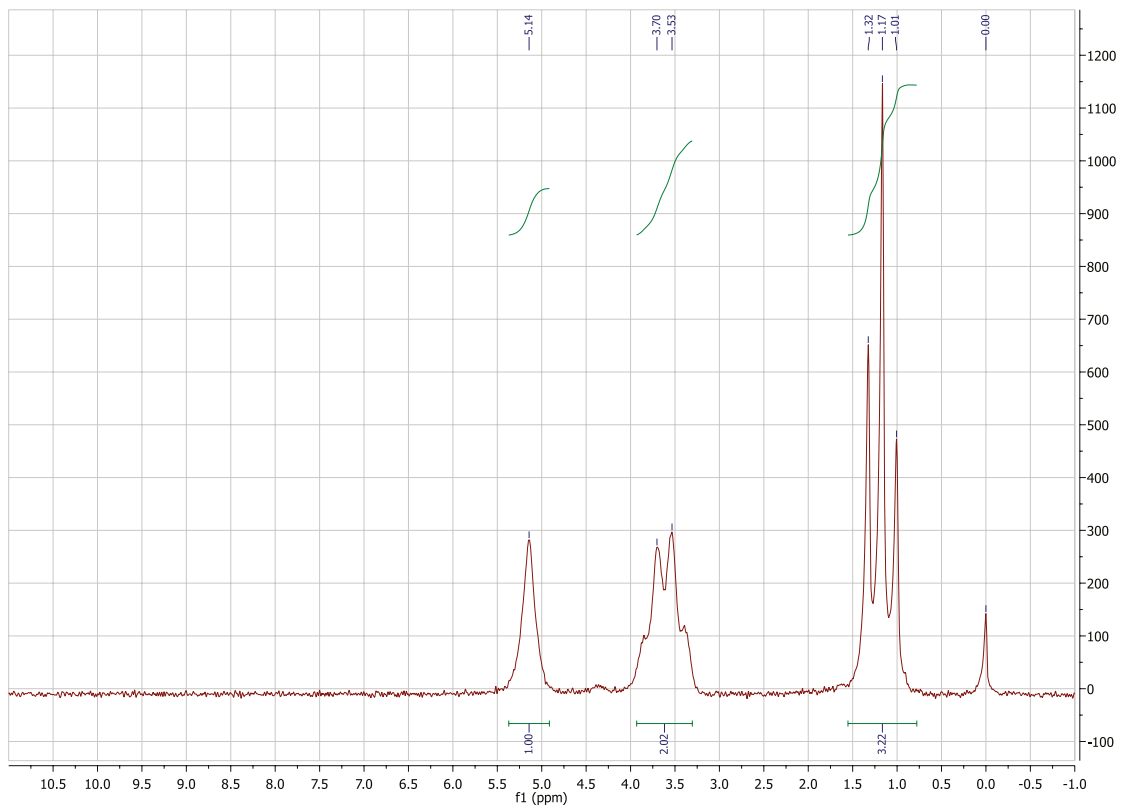
Sampl Dd – CMN

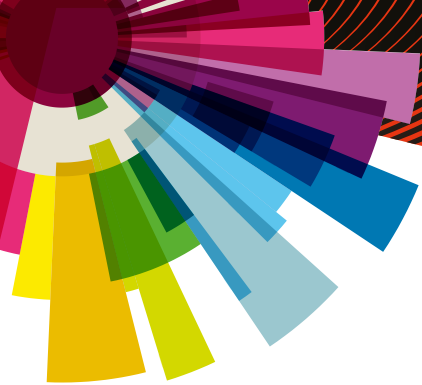


Sampl E – CMN



Sampl F – CMN





Adnabod cyfansoddion: Ymarfer 2

Dadansoddiad IG a CMN



CYFLWYNIAD

Mae sbectrosgopeg CMN yn rhoi gwybodaeth ddefnyddiol inni am adeiledd moleciwl. Gall dadansoddi sbectra CMN fod ychydig yn debyg i geisio rhoi darnau jig-so ynghyd sy'n cynnwys:

- Amgylcheddau hydrogen – mae niwclei mewn gwahanol amgylcheddau yn amsugno nifer gwahanol o egni (tonau radio) wrth iddyn nhw brofi meysydd magnetig gwahanol yn y sbectromedr; mae hyn yn achosi gwahanol 'frigau' ar gyfer pob amgylchedd.
- Symudiad cemegol – caiff y gwahaniaethau mewn amsugno eu mesur yn gymharol i gemegyn safonol (er enghraifft tetramethylsilane) sy'n achosi 'symudiad cemegol' i'r holl amgylcheddau cemegol eraill.
- Brig integrol - rhan o dan bob brig sy'n dweud wrthym ni'r nifer o niwclei hydrogen ym mhob amgylchedd.
- Patrwm hollti - gall y brigau sy'n cynrychioli amgylchedd hydrogen penodol hollti o ganlyniad i ryngweithiadau gyda hydrogenau neu atomau carbon cyfagos. Mae'r brigau yn hollti i un rhif yn fwy na'r nifer o hydrogenau ar yr atomau carbon cyfagos. Dyma beth ydy'r 'rheol n + 1'. Fe allwch chi gyfrifo nifer yr hydrogenau cyfagos trwy edrych ar sut mae'r brig yn hollti.

DULL

Byddwch chi'n defnyddio'r technegau canlynol i adnabod cyfansoddion organig anhysbys A i Ff:

- Sbectrosgopeg IG – rhoi gwybodaeth am y grwpiau gweithredol sy'n bresennol.
- Sbectrosgopeg CMN – rhoi gwybodaeth am yr adeiledd.
- Cyfansoddiad elfennol - gallu ei ddefnyddio i gyfrifo'r fformiwla foleciwlaidd.

1. Defnyddiwch y cyfansoddiadau elfennol a'r masau moleciwlaidd ar y dudalen nesaf i gyfrifo fformiwla foleciwlaidd pob cyfansoddyn anhysbys a chofnodwch hyn ar eich taflen waith.
2. Dadansoddwch sampl anhysbys gan ddefnyddio'r sbectromedr IG ATR a chanfod y grŵp/grwpiau gweithredol sy'n bresennol gan ddefnyddio'r siart cydberthyniad sydd wedi'i darparu.

(Nodwch: Defnyddiwch dan oruchwyliaeth arddangoswr yn unig.)

3. Mewn grwpiau, dadansoddwch sampl gan ddefnyddio'r sbectromedr CMN.

(Nodwch: Defnyddiwch dan oruchwyliaeth arddangoswr yn unig.)

- Cyfrwch nifer y brigau i ddarganfod nifer yr amgylcheddau hydrogen.
 - Cymharwch integrynnau i ganfod nifer y protonau ym mhob amgylchedd.
 - Darganfyddwch y patrwm hollti ar gyfer pob brig (cofiwch y rheol n+1).
 - Os bydd amser, edrychwch ar y symudiadau cemegol gan ddefnyddio'r tablau data sydd wedi'u darparu.
4. Defnyddiwch eich sbectra IG a CMN sydd wedi'u dehongli a'r copiâu o'r sbectra sydd wedi'u darparu i ganfod adeiledd yr holl gyfansoddion anhysbys a chofnodi eich aseiniadau ar eich taflen waith.

TAFLEN WAITH MYFYRIWR

Data mâs moleciwlaidd a chyfansoddion elfennol:

Sampl A C: 59.96% H: 13.42% O: 26.62% M_r : 60	Sampl B C: 62.04% H: 10.41% O: 27.55% M_r : 58	Sampl C C: 69.72% H: 11.70% O: 18.58% M_r : 86
Sampl Ch C: 66.63% H: 11.18% O: 22.19% M_r : 72	Sampl D C: 48.64% H: 8.16% O: 43.20% M_r : 74	Sampl Dd C: 69.72% H: 11.70% O: 18.58% M_r : 86
Sampl E C: 54.53% H: 9.15% O: 36.32% M_r : 88	Sampl F C: 59.96% H: 13.42% O: 26.62% M_r : 60	Sampl Ff C: 54.53% H: 9.15% O: 36.32% M_r : 88

Cyfrifo fformiwlaû moleciwlaidd o gyfansoddiad elfennol a mâs moleciwlaidd: **Sampl A**

M_r : 60 g mol⁻¹
C: 59.96%
H: 13.42%
O: 26.62%

- 1) Cymerwch fod 100g o'r cyfansoddiad yn bresennol a newidwch y canrannau i ramau:
C = 59.96 g
H = 13.42 g
O = 26.62 g
- 2) Troschwch y masau i folau:
C = 59.96 g / 12 g/mol = **5.0 môl**
H = 13.42 g / 1 g/mol = **13.4 môl**
O = 26.62 g / 16 g/mol = **1.66 môl**

- 3) Rhannwch gyda'r rhif lleiaf i ganfod y gymhareb rhif cyfan lleiaf:

$$\begin{aligned}C &= 5.0 / 1.66 = \mathbf{3} \\H &= 13.4 / 1.66 = \mathbf{8} \\O &= 1.66 / 1.66 = \mathbf{1}\end{aligned}$$

- 4) Ysgrifennwch y fformiwla empirig:



- 5) Canfyddwch y fformiwla foleciwlaidd:
Pwysau gwirioneddol y fformiwla = (3 x 12) + (8 x 1) + 16
= 60 g/mol
60 / 60 = 1

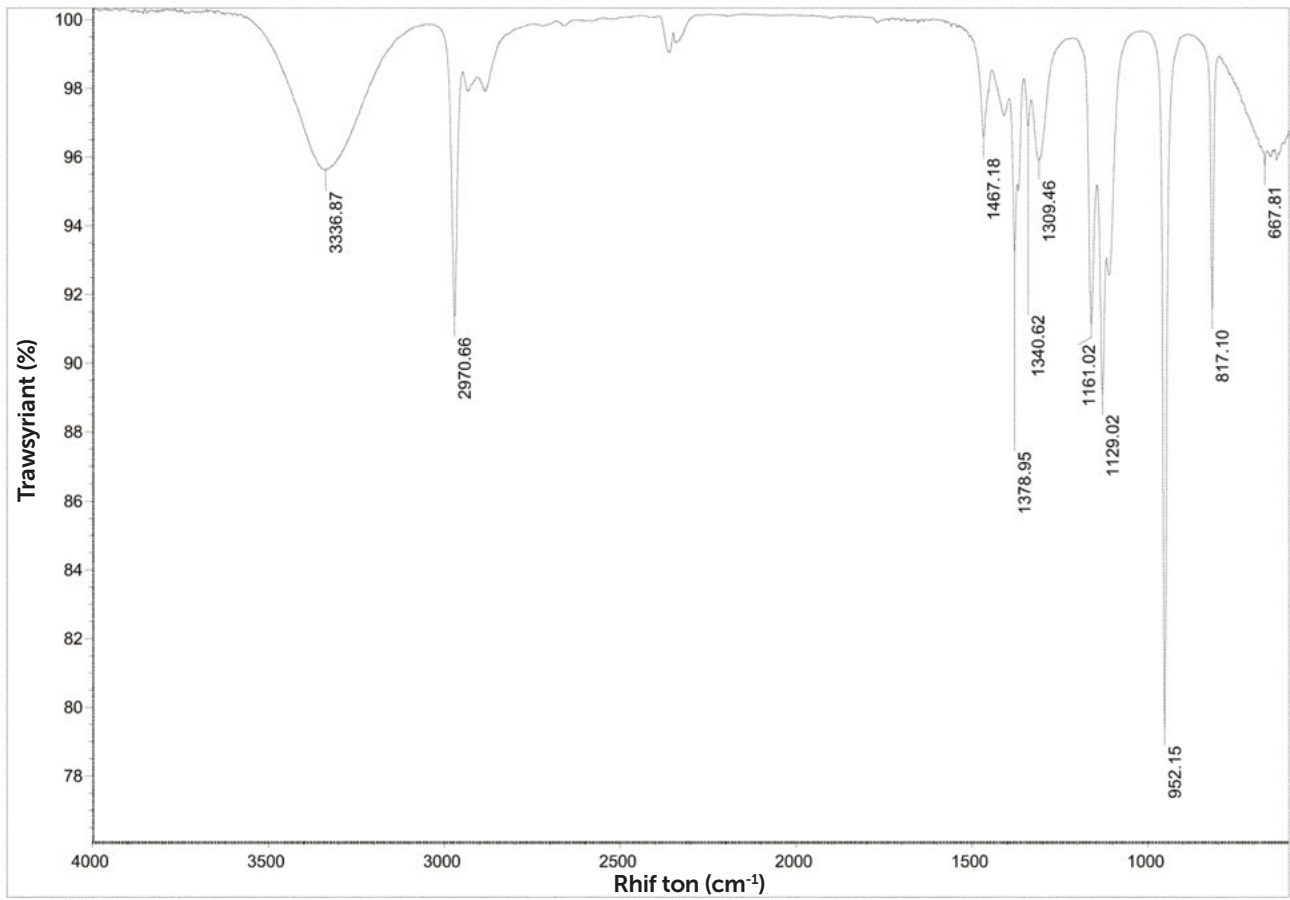


TAFLEN WAITH MYFYRIWR

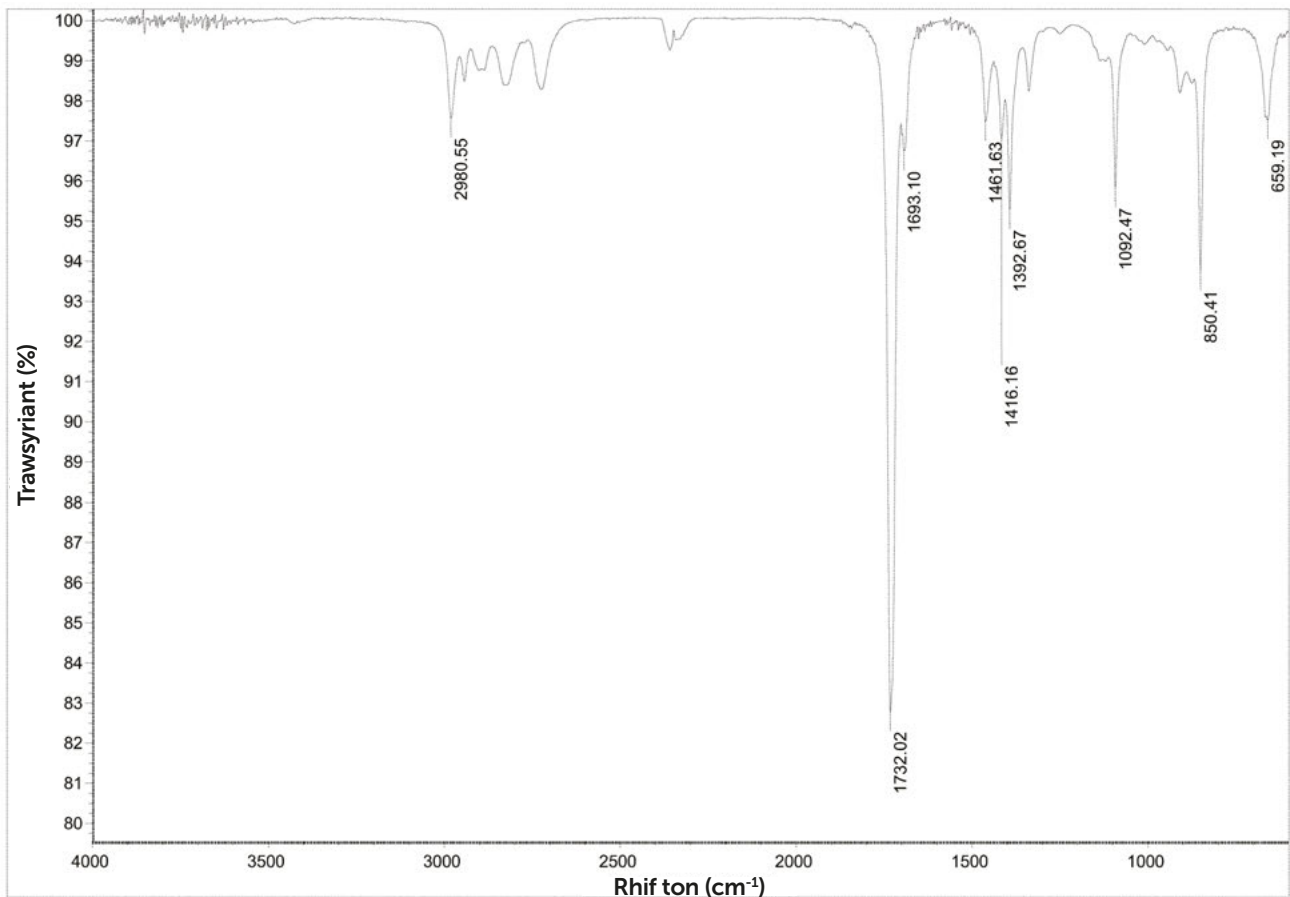
Anhysbys	Fformiwla foleciwlaidd	Grwpiau gweithredol a rhifau ton	Aseiniadau CMN	Enw (yn cynnwys enw cyffredin)	Adeiledd
Sampl A					
Sampl B					
Sampl C					
Sampl Ch (copi ar bapur yn unig)					
Sampl D (copi ar bapur yn unig)					
Sampl Dd					
Sampl E					
Sampl F					
Sampl Ff					

SBECTRA IG I'W DEHONGLI

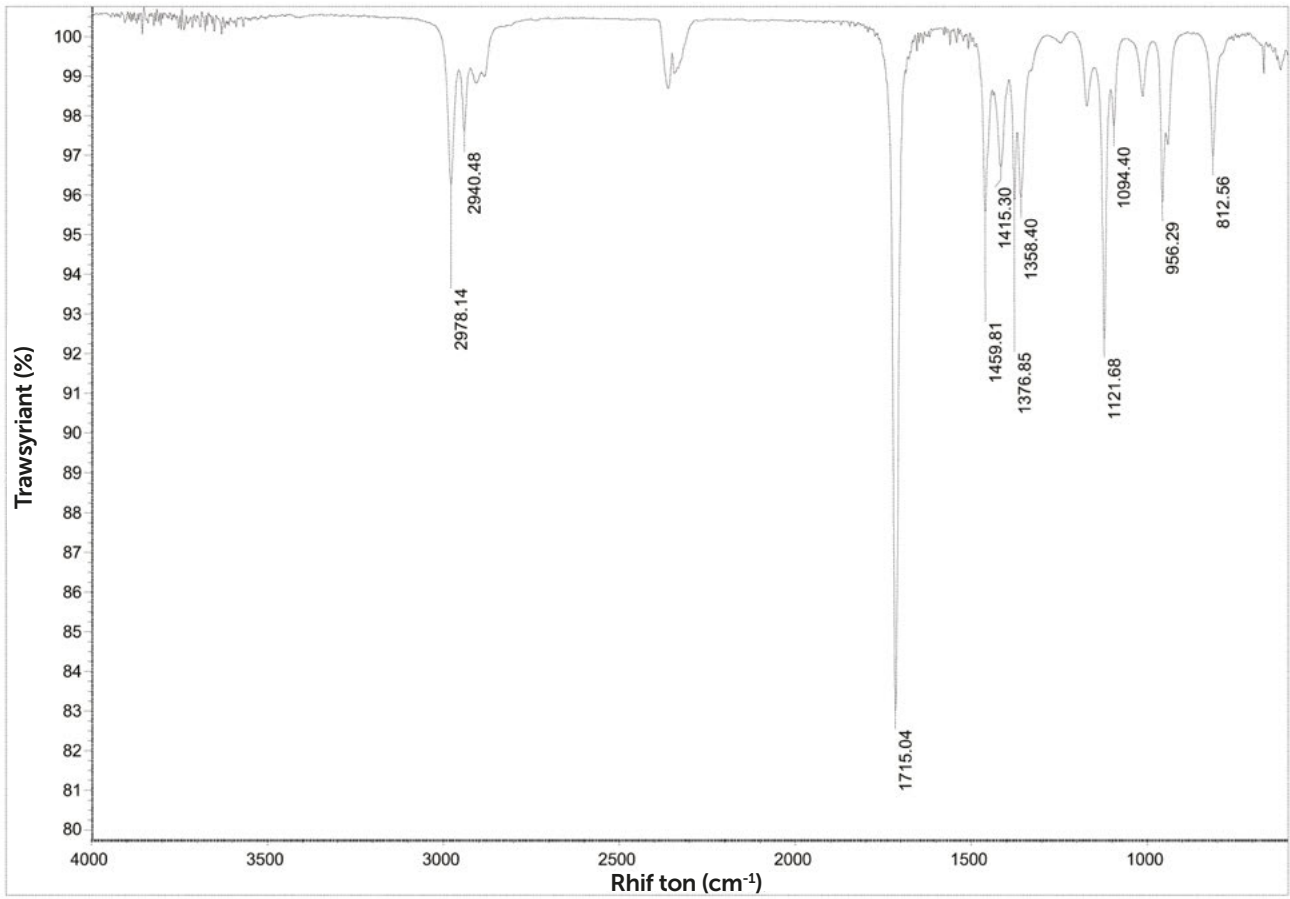
Sampe A – IG



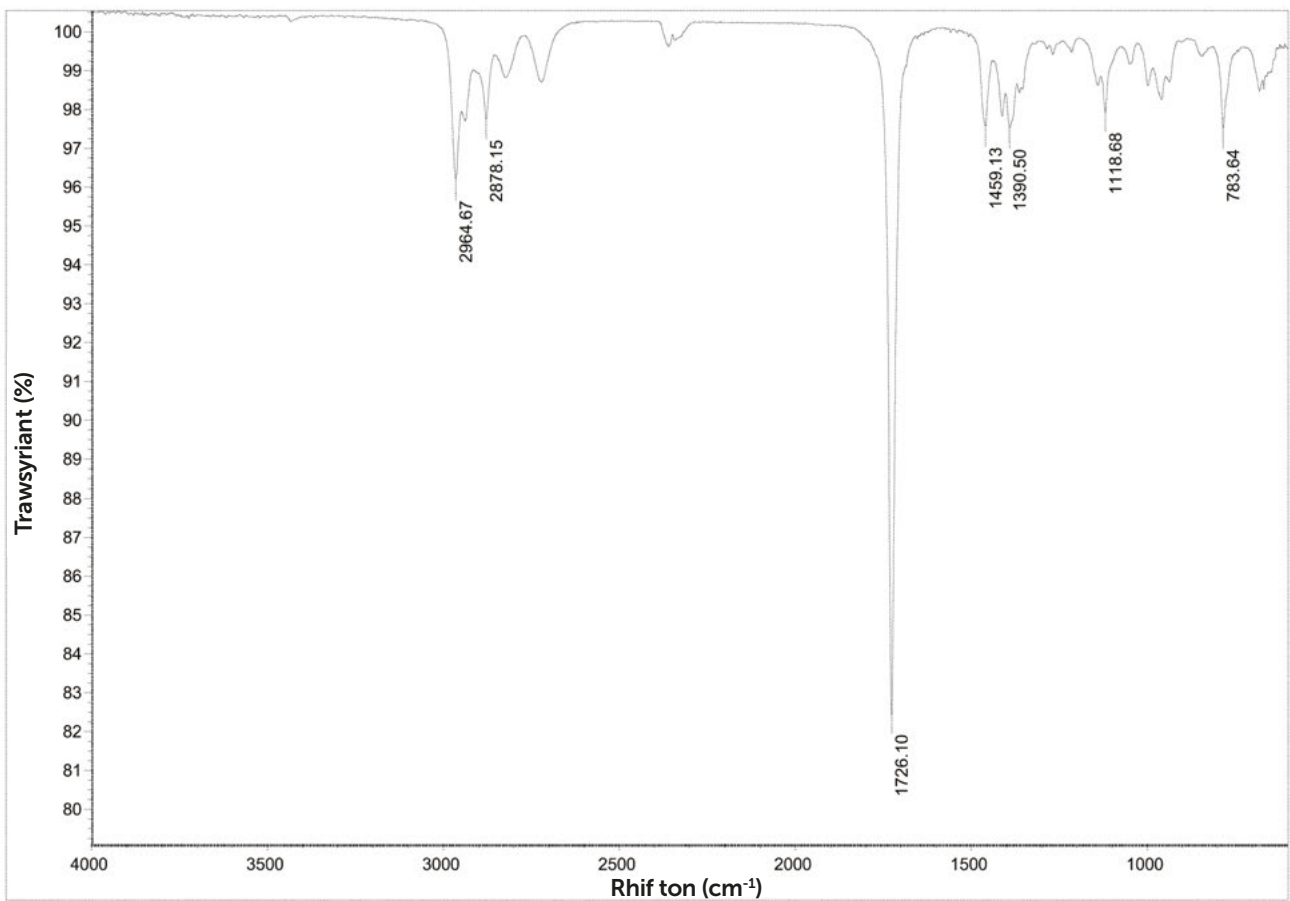
Sampl B – IG



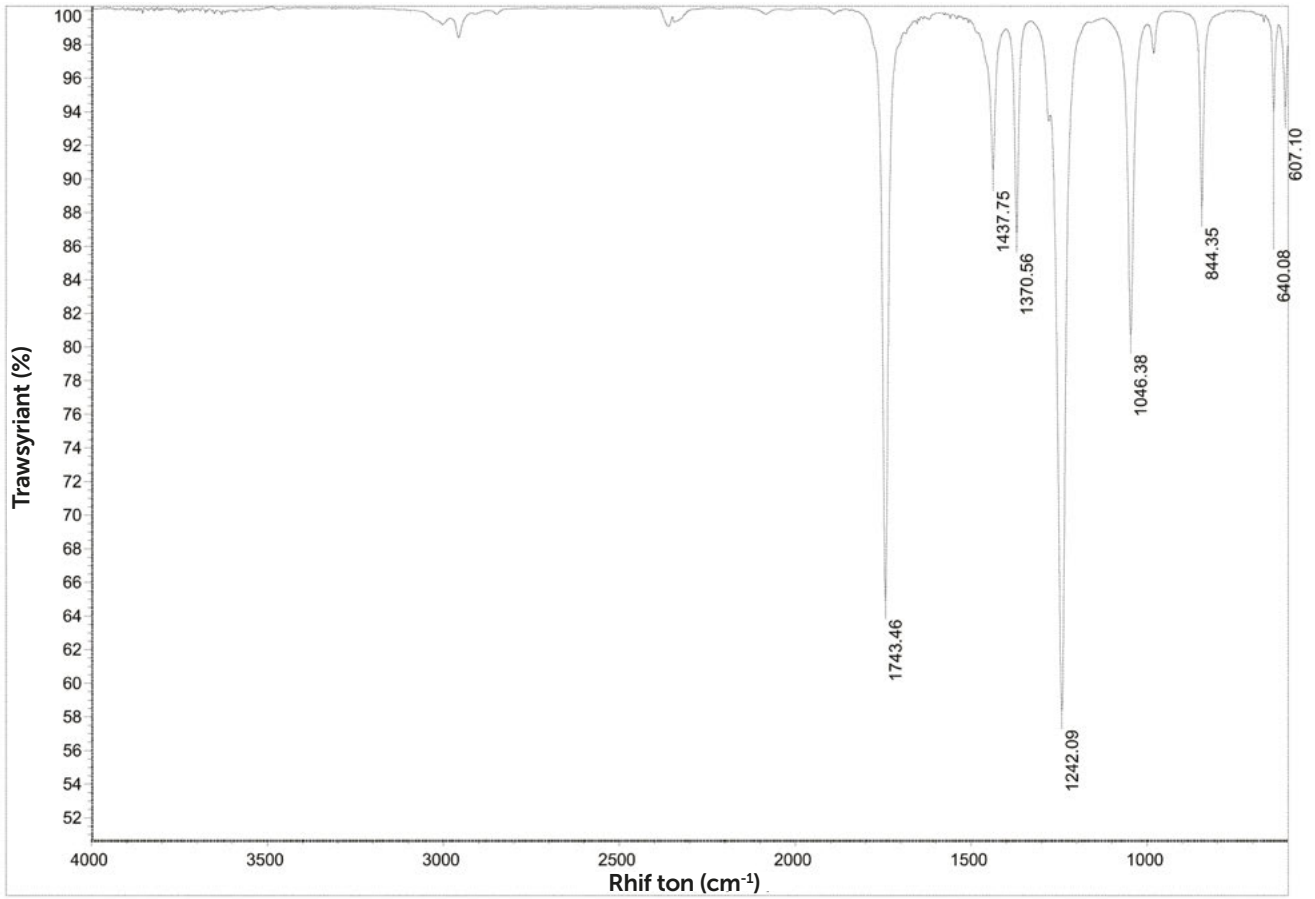
Sampl C – IG



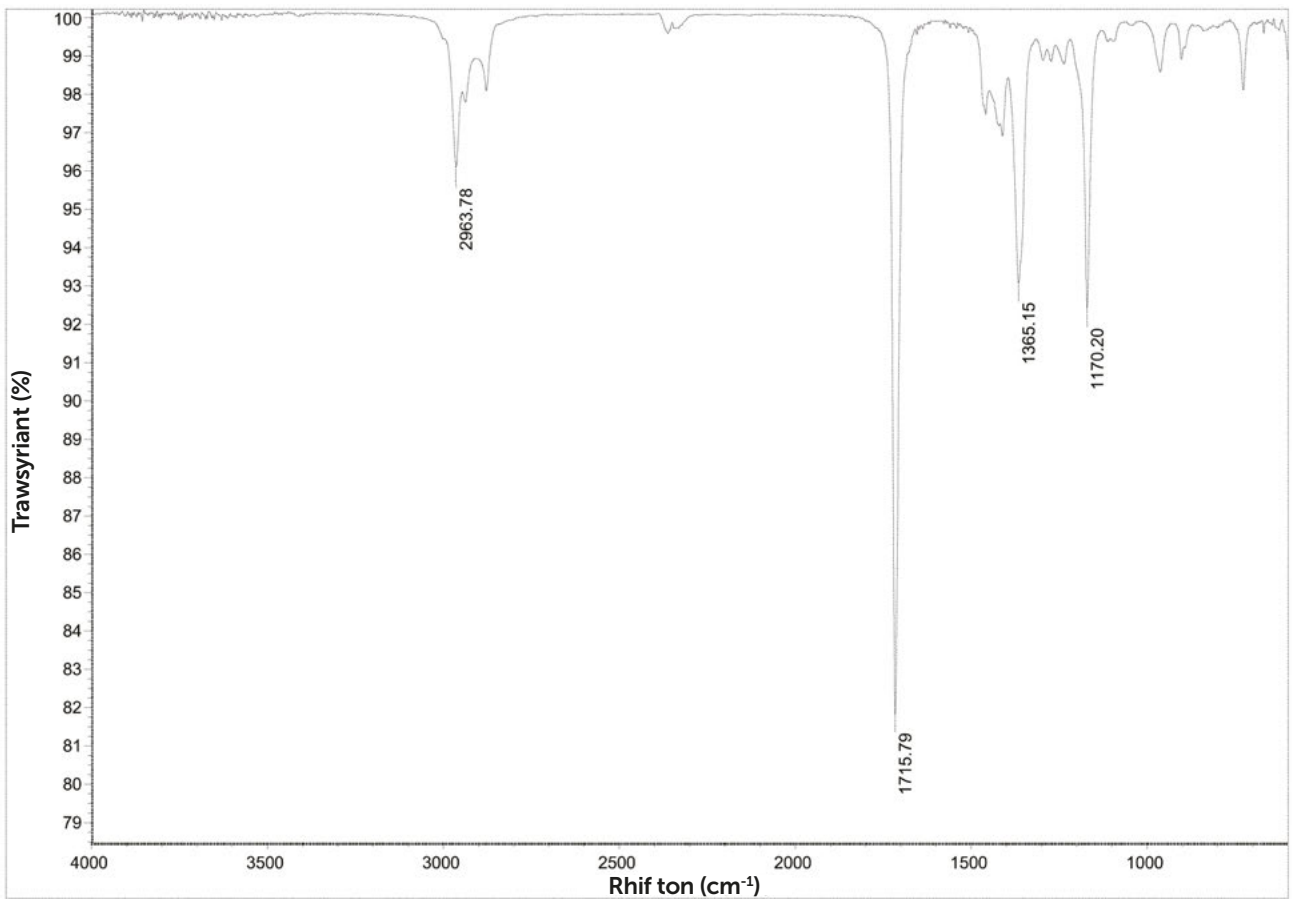
Sampl Ch – IG



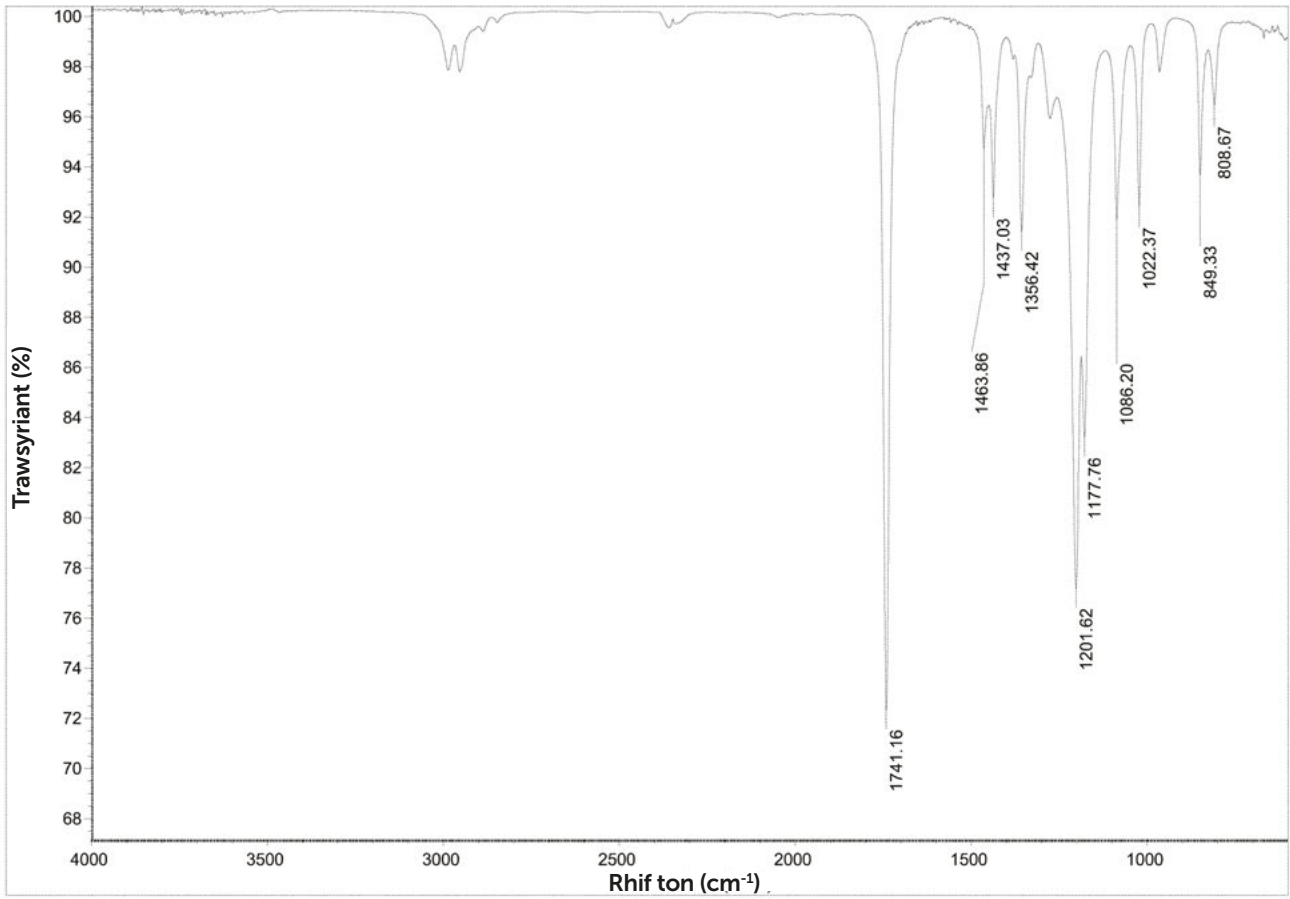
Sampl D – IG



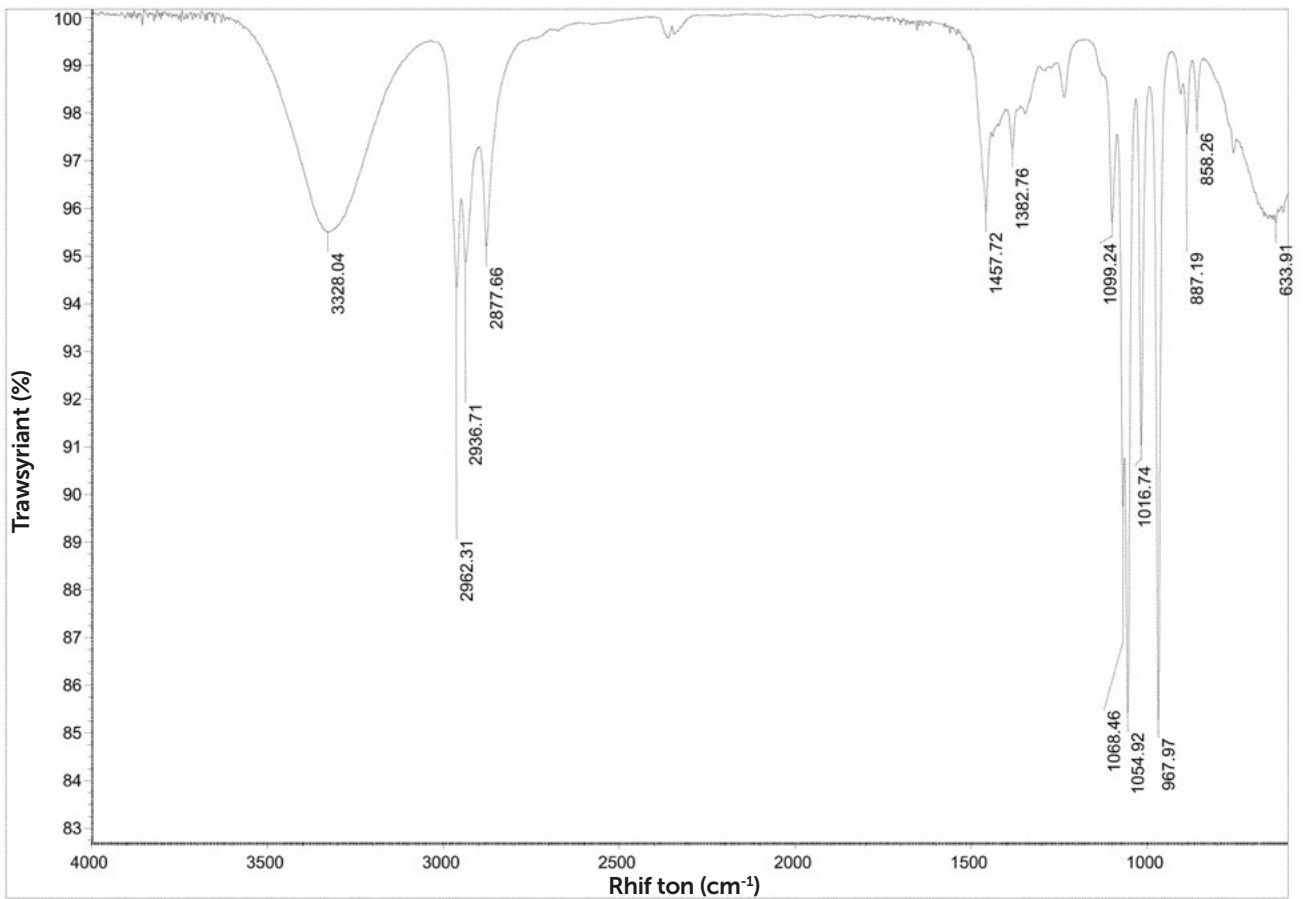
Sampl Dd – IG



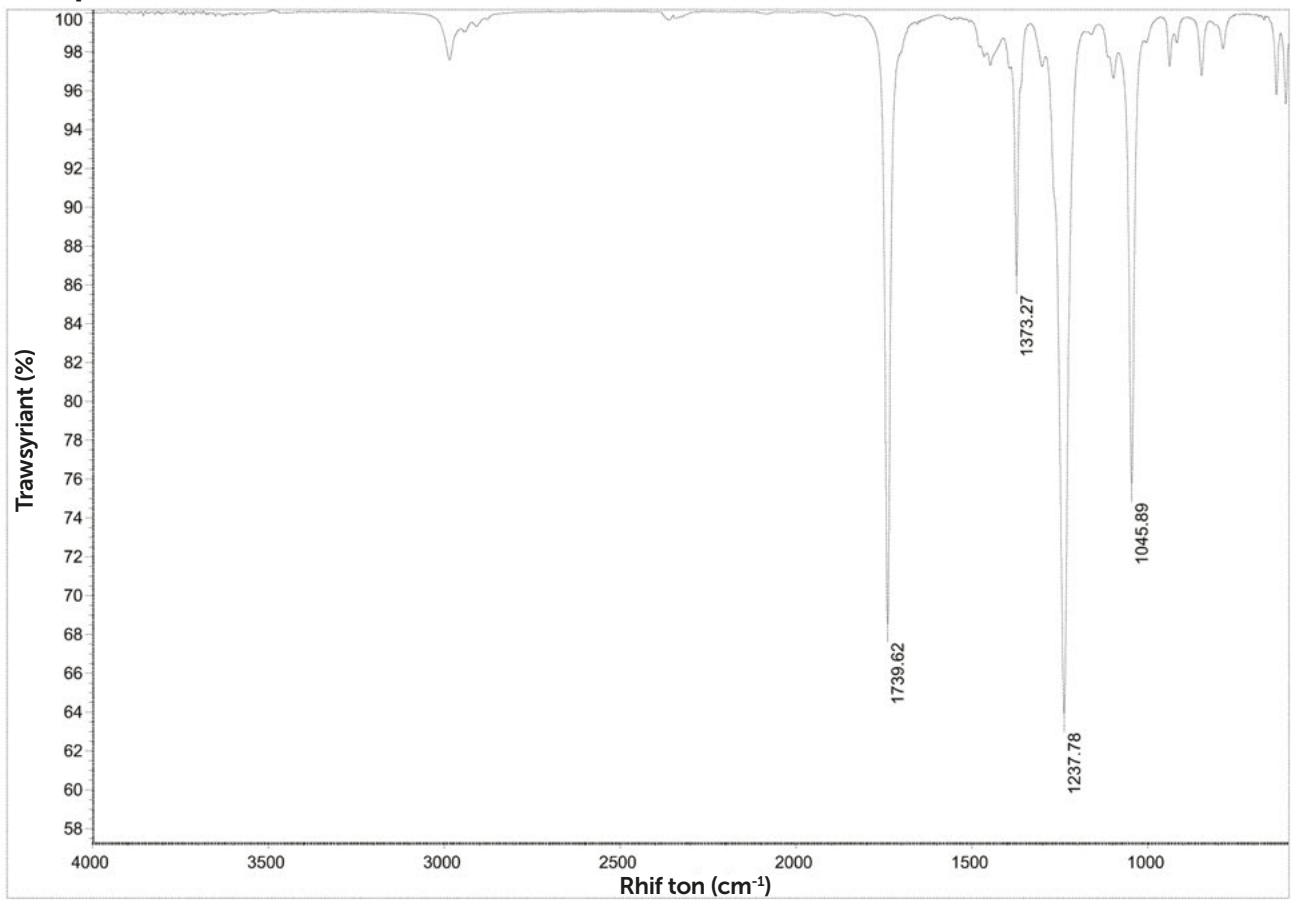
Sampl E – IG



Sampl F – IG

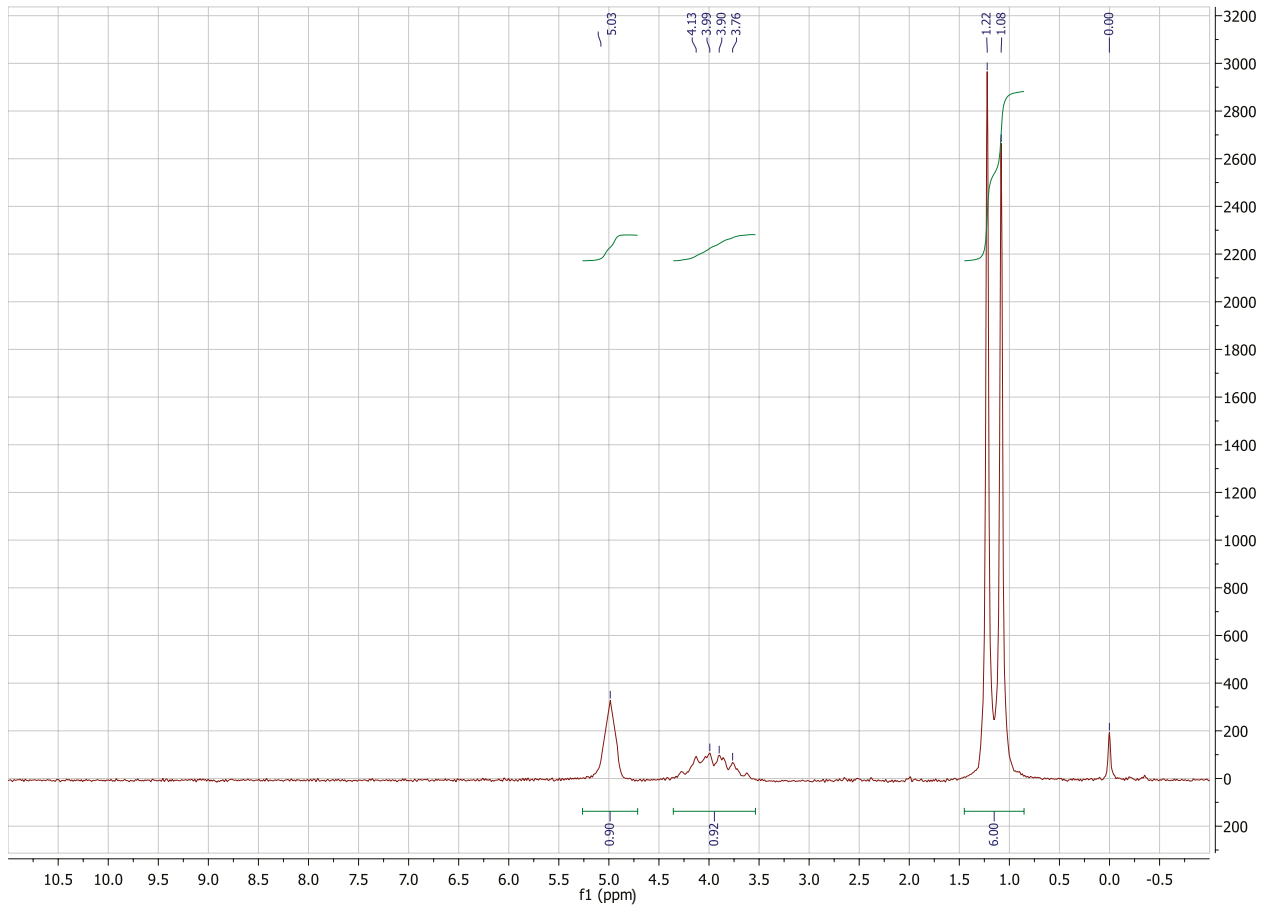


Sampl Ff – IG

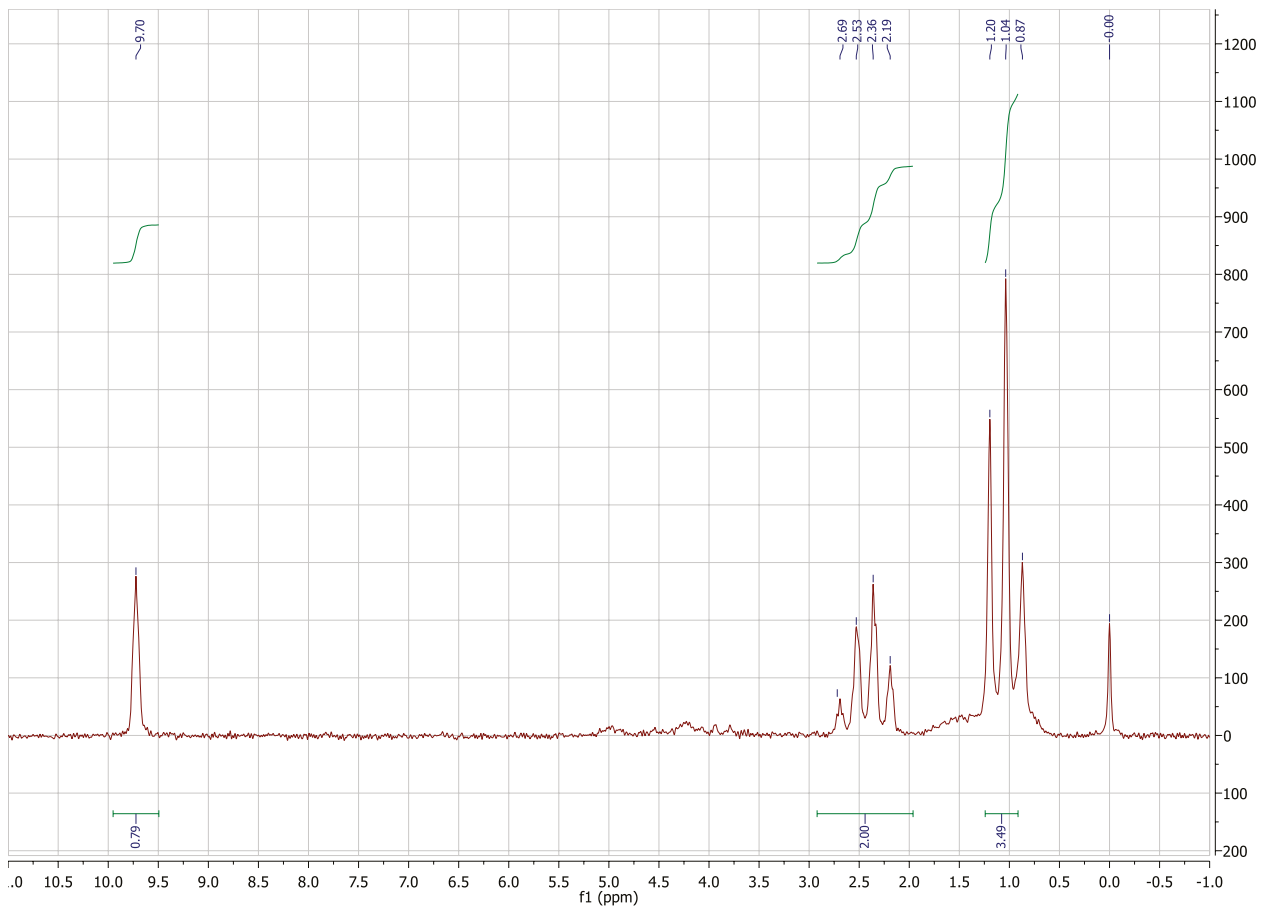


SBECTRA CMN I'W DEHONGLI

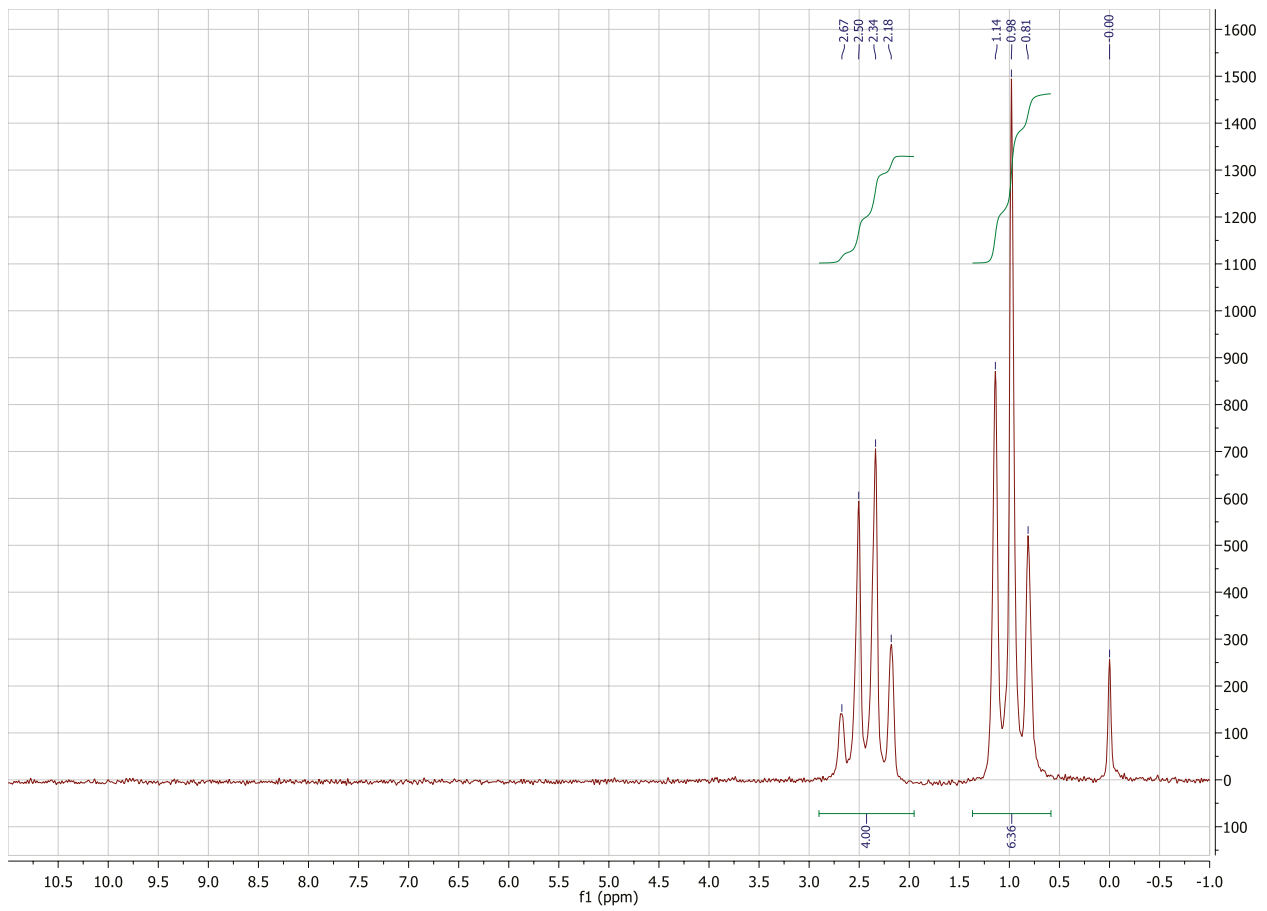
Sampl A – CMN



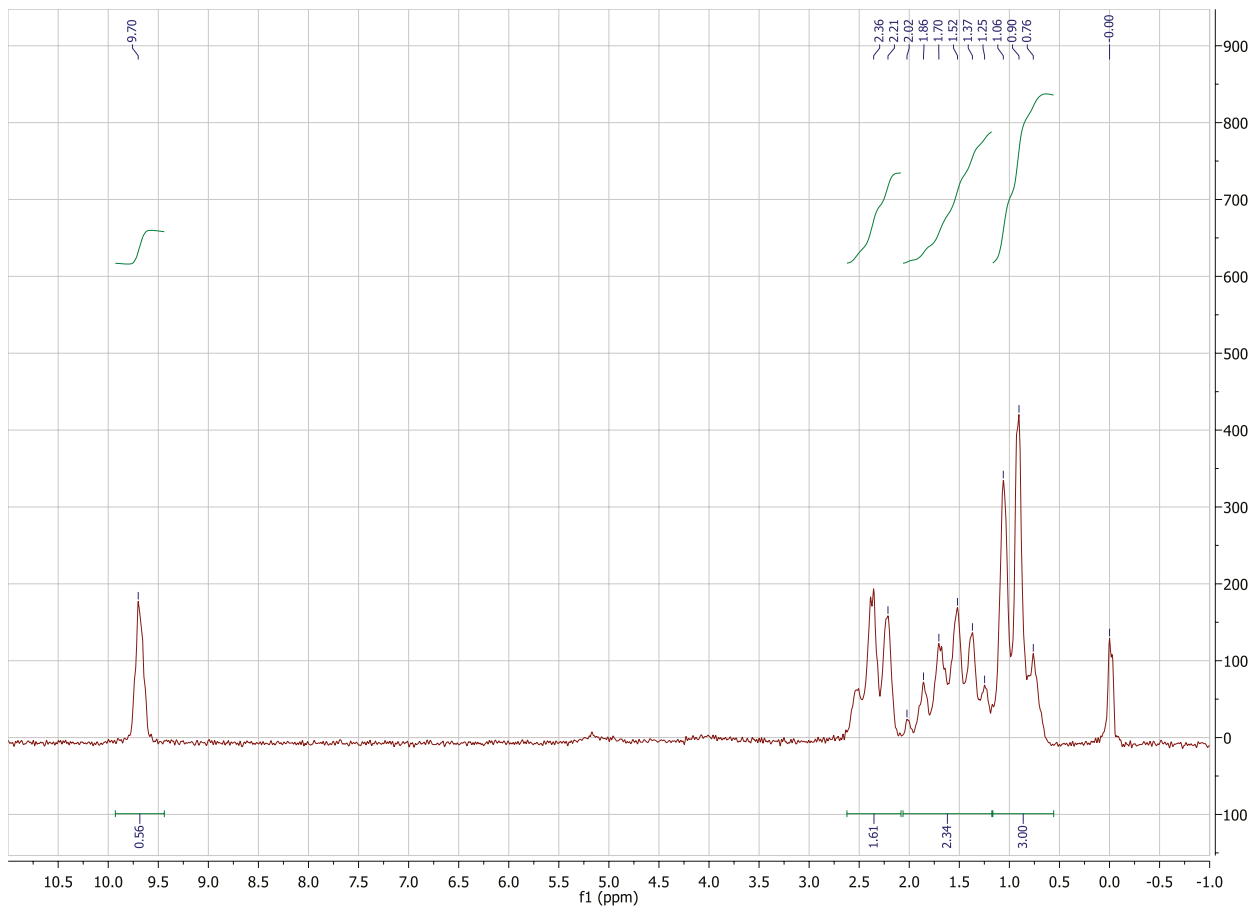
Sampl B – CMN



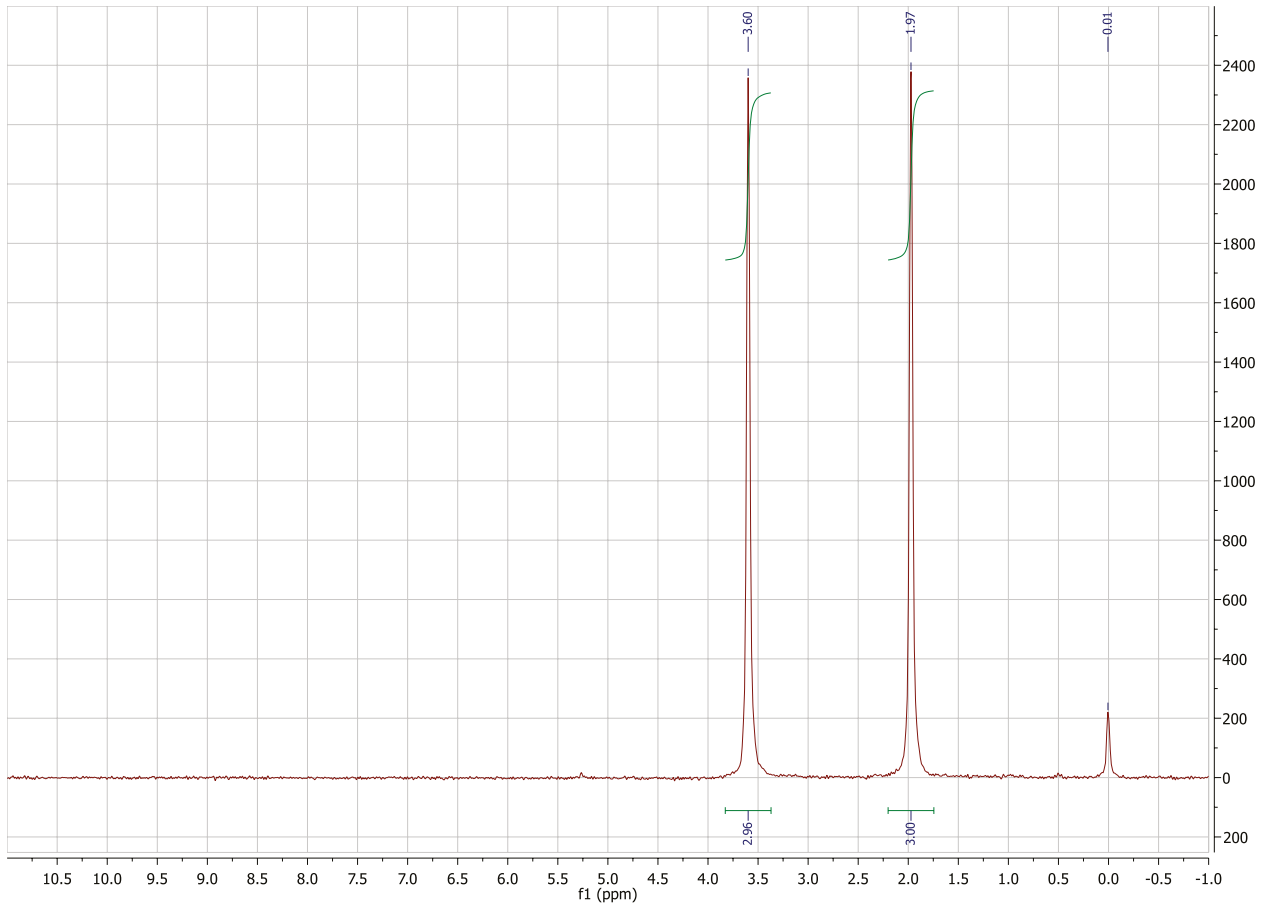
Sampl C – CMN



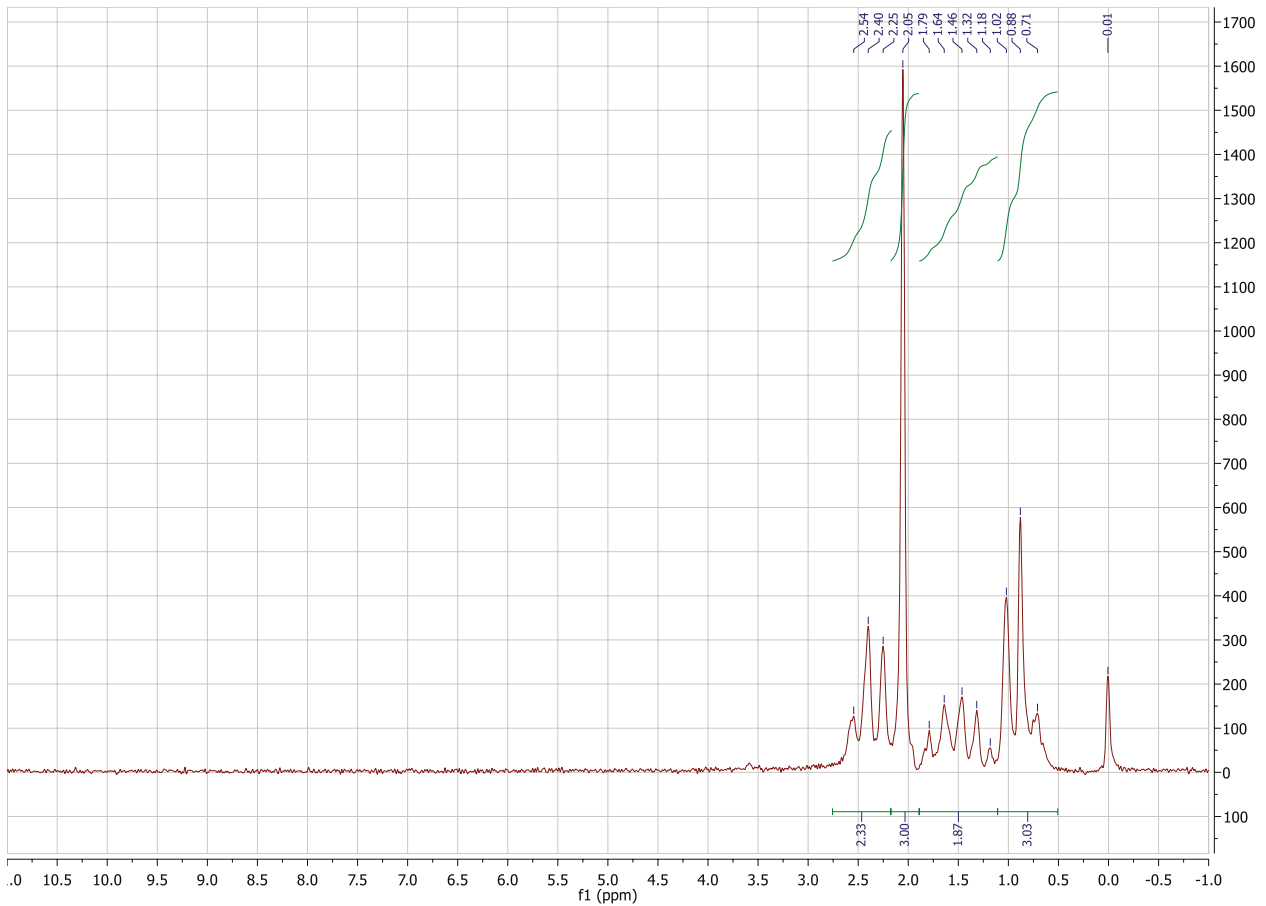
Sampl Ch – CMN



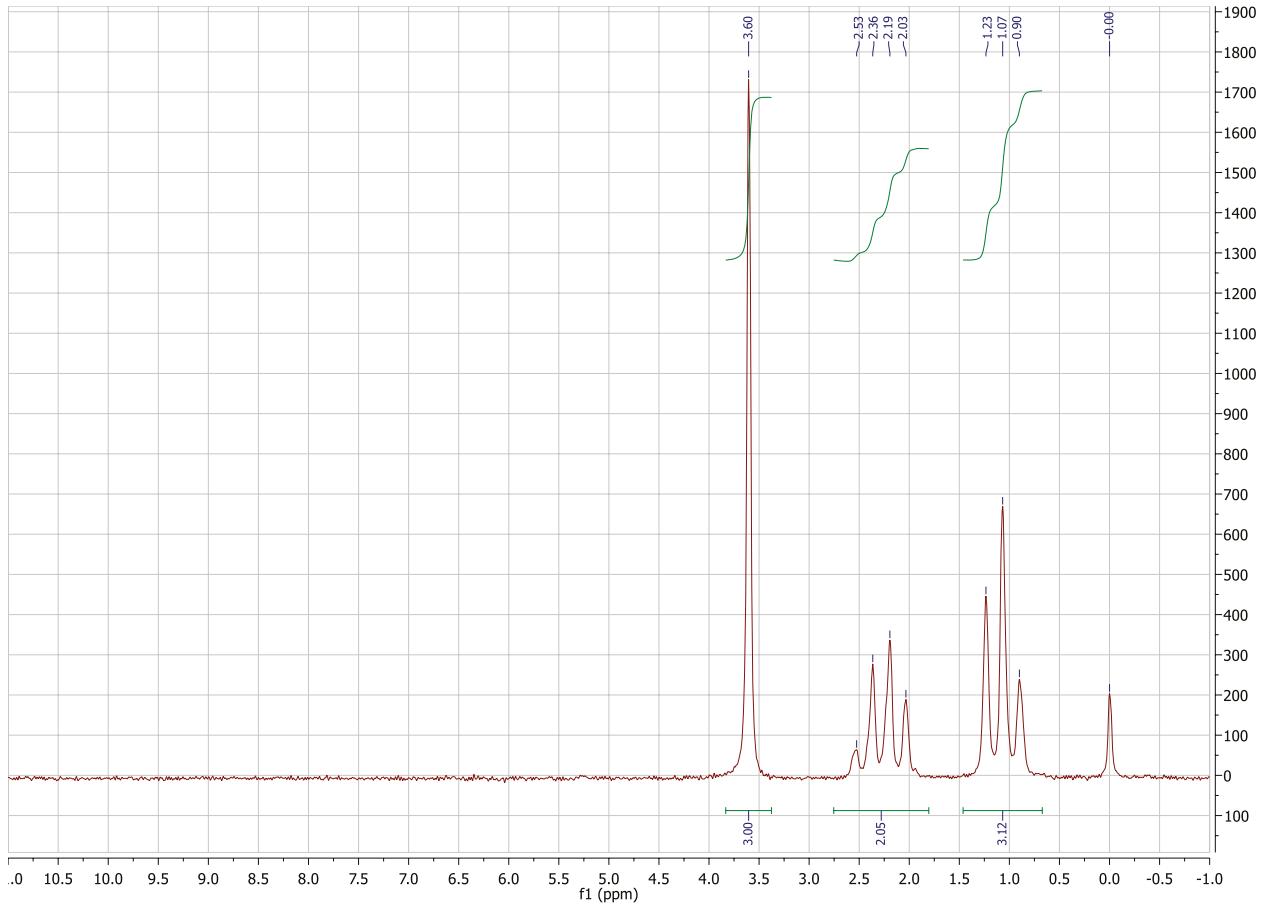
Sampl D – CMN



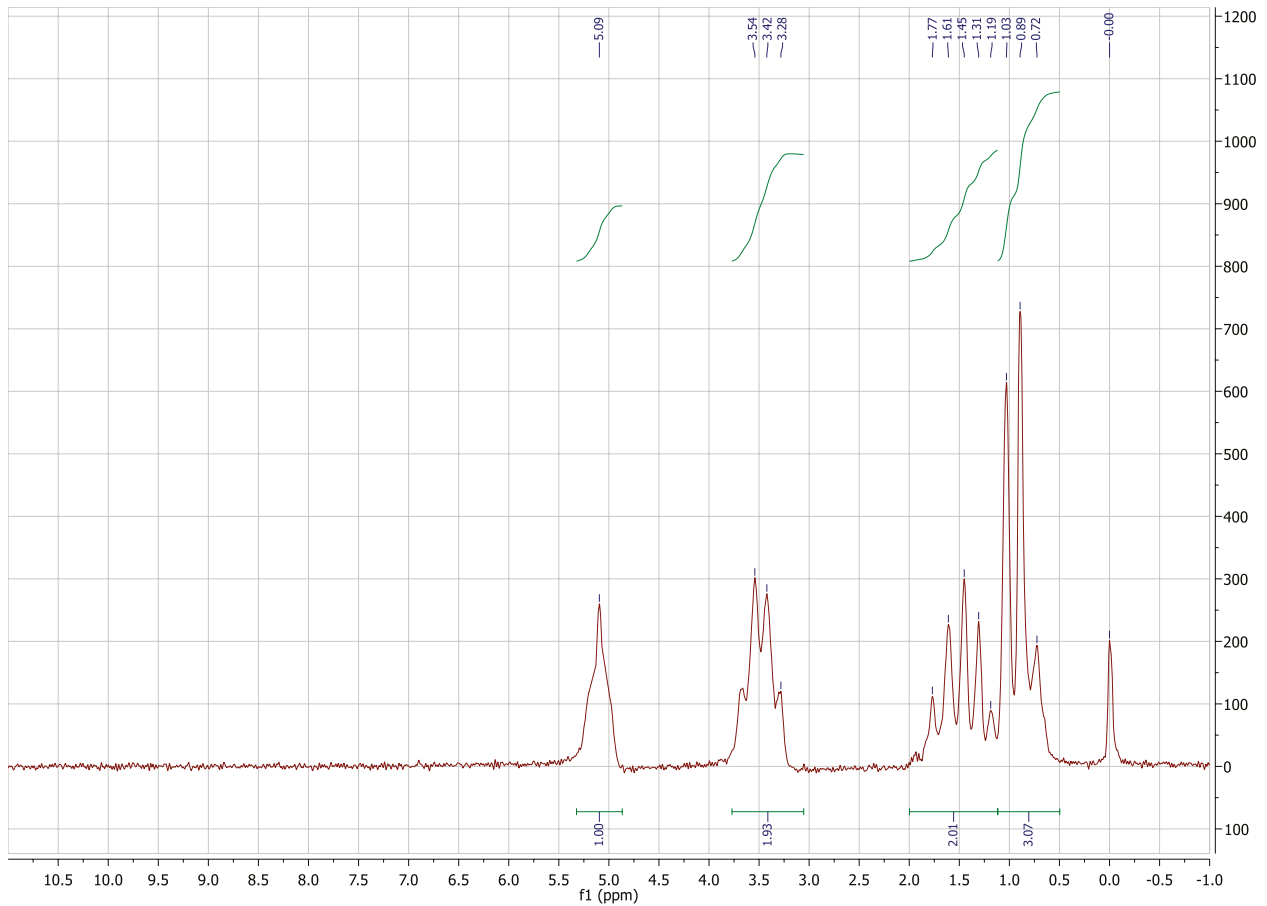
Sampl Dd – CMN



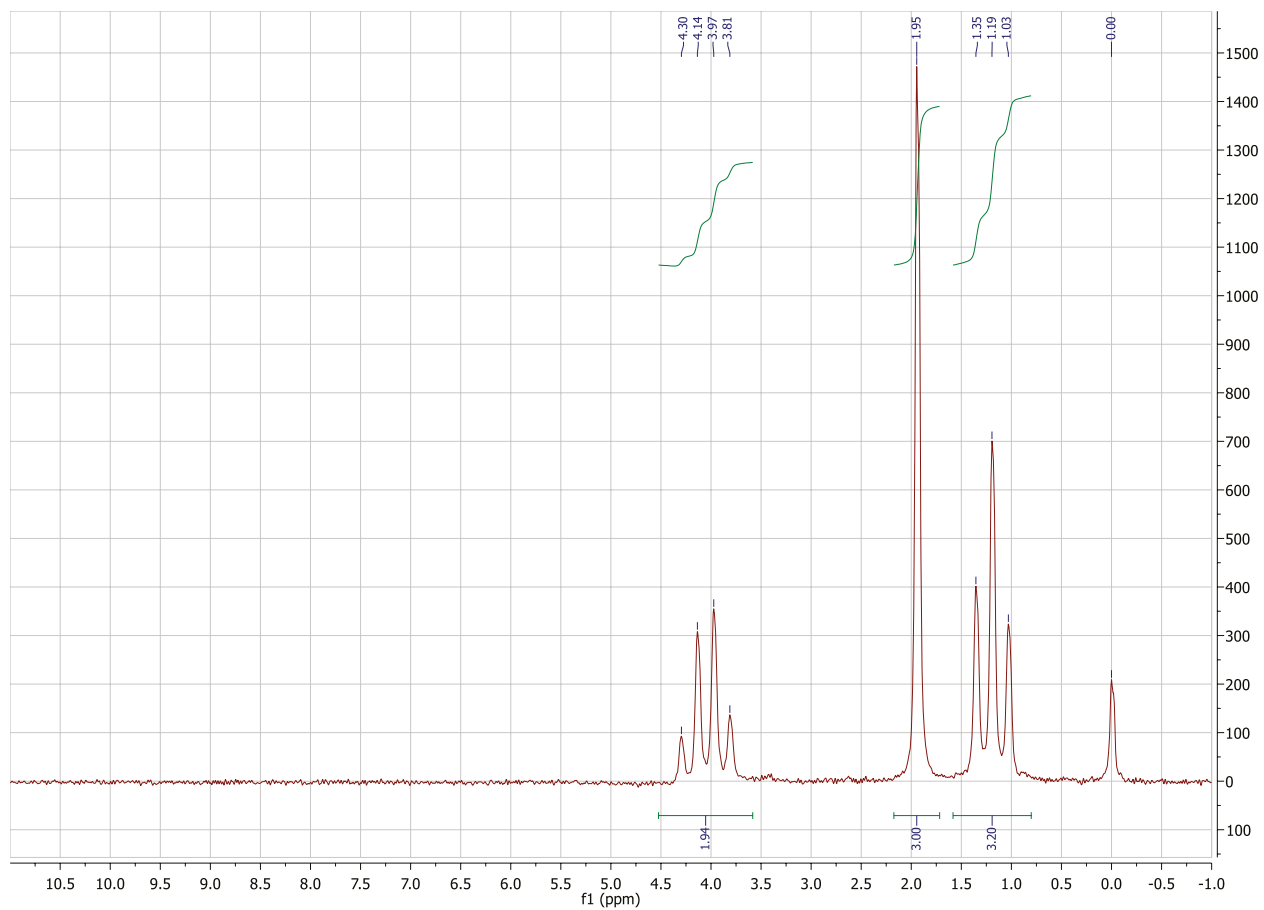
Sampl E – CMN



Sampl F – CMN



Sampl Ff – CMN

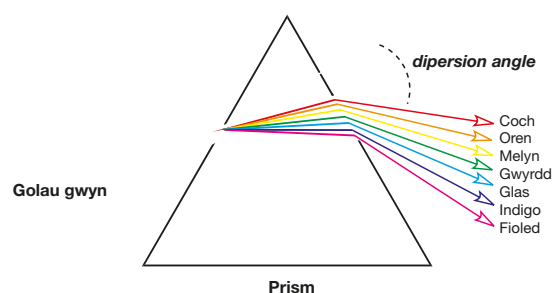




Dadansoddi llifynnau bwyd: Ymarfer 3 Dadansoddiad UF-gweladwy

CYFLWYNIAD

Mae'r sbectrwm electromagnetig yn amrywio o donnau radio gyda thonfeddi'r un maint ag adeiladau i lawr at belydrau gama sydd yr un maint â niwclei atomig. Mae golau gwyn yn ffurfio rhan fach o'r sbectrwm hwn ac mae'n cynnwys amrediad o wahanol donfeddi y mae modd eu gwasgaru gyda phrism i roi ei liwiau cydrannol. Bydd y lliw y bydd gwrthrych neu hydoddiant yn ei ymddangos yn dibynnu ar ba olau sy'n cael ei drawsyrnu neu ei adlewyrchu yn y sbectrwm gweladwy a pha olau sy'n cael ei amsugno. Drwy ddefnyddio sbectromedr UF-gweladwy ac amrywiaeth o lifynnau bwyd byddwch yn profi'r berthynas rhwng gwerth tonfedd yr amsugnedd a lliw'r hydoddiant.

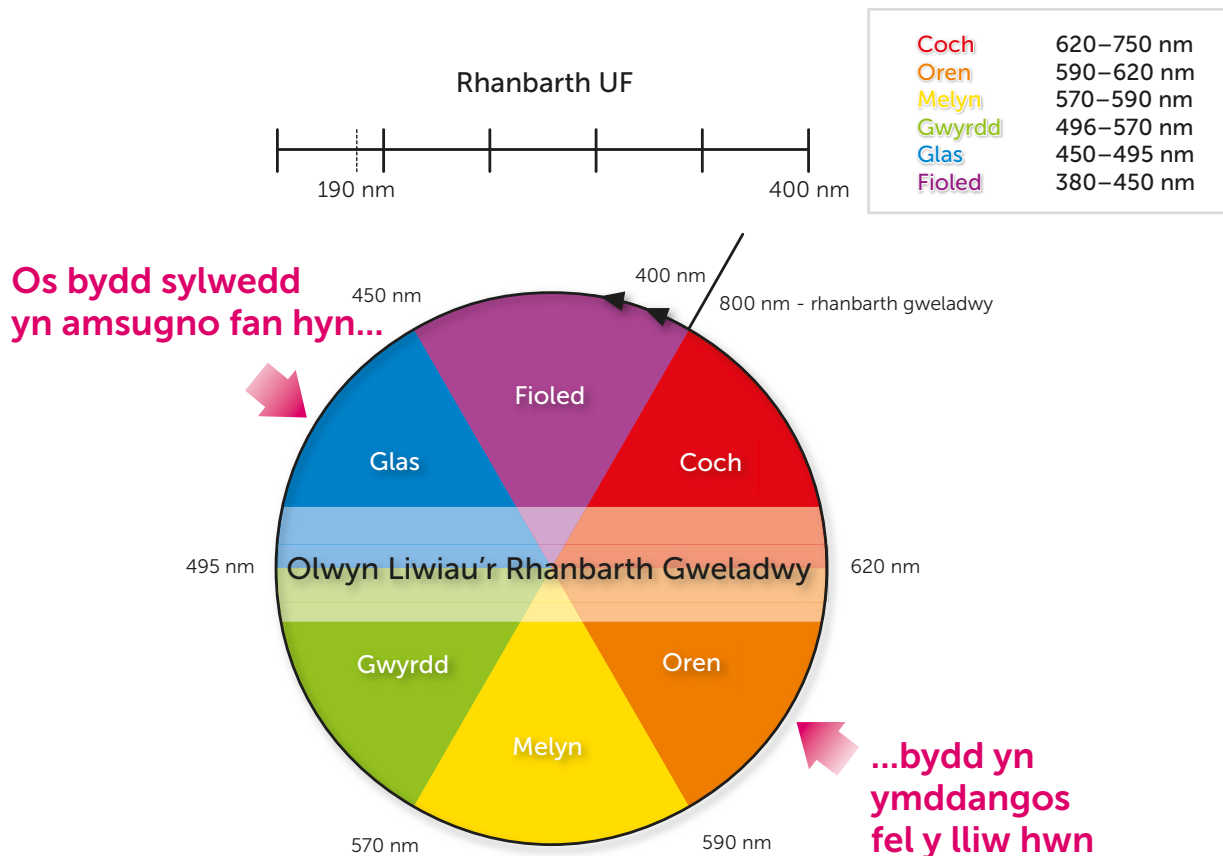


Sbectromedr UF-gweladwy

Mae modd defnyddio sbectromedrau UF-gweladwy i fesur amsugnedd golau uwchfioled neu weladwy gan sampl. Mae'r sbectrwm gaiff ei gynhyrchu yn blot o amsugnedd yn erbyn tonfedd (nm) yn adrannau UF a gweladwy'r sbectrwm electromagnetig. Mae modd defnyddio offerynnau i fesur ar un donfedd benodol neu i sganio dros amrediad yn y sbectrwm. Mae'r rhanbarth UF yn amrywio o 190 i 400 nm a'r rhanbarth gweladwy yn amrywio o 400 i 800 nm. Mae modd defnyddio'r dechneg yn feintiol ac yn ansoddol.

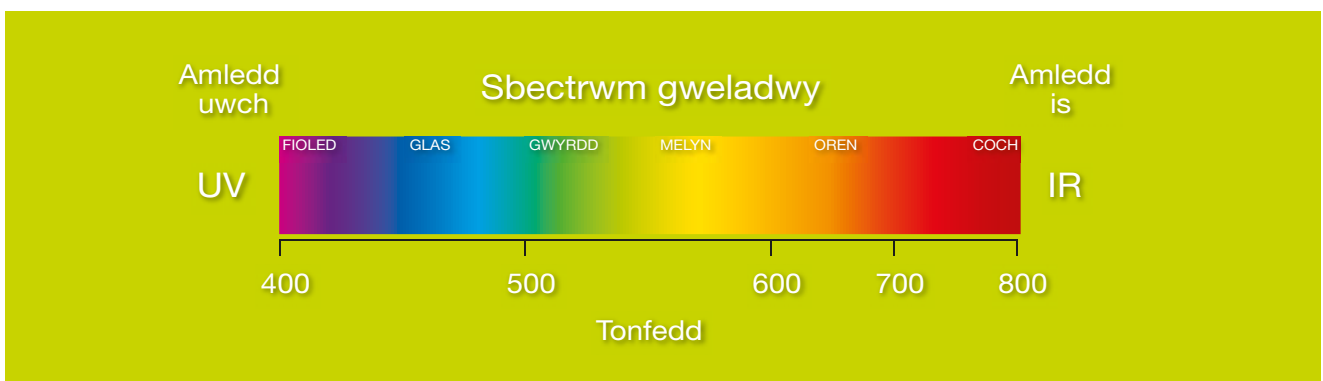
DULL

1. Paratowch sampl gwanedig o bob lliw i'w brofi gan ddefnyddio cuvette a dŵr distyll (tuag 1 diferyn o liw bwyd i bob 100cm³ o ddŵr distyll).
2. Llenwch cuvette plastig gyda phob sampl lliw a rhowch gaeadau arnyn nhw i'w cau.
3. Paratowch cuvette sampl blanc sy'n cynnwys dŵr distyll yn unig a rhowch gaead arno i'w gau.
4. Defnyddiwch yr olwyn liwiau i ragfynegi gwerthoedd amsugno pob hydoddiant a chofnodwch eich rhagfynegiadau yn y tabl sydd wedi'i ddarparu.
5. Cydosodwch y sbectromedr i sganio'r rhanbarth gweladwy o 350-800nm a rhedwch bob sampl. Argraffwch y sbectrwm gan nodi tonfedd pob un o'r brigau amsugno. Cymharwch y rhain gyda'ch rhagfynegiadau.



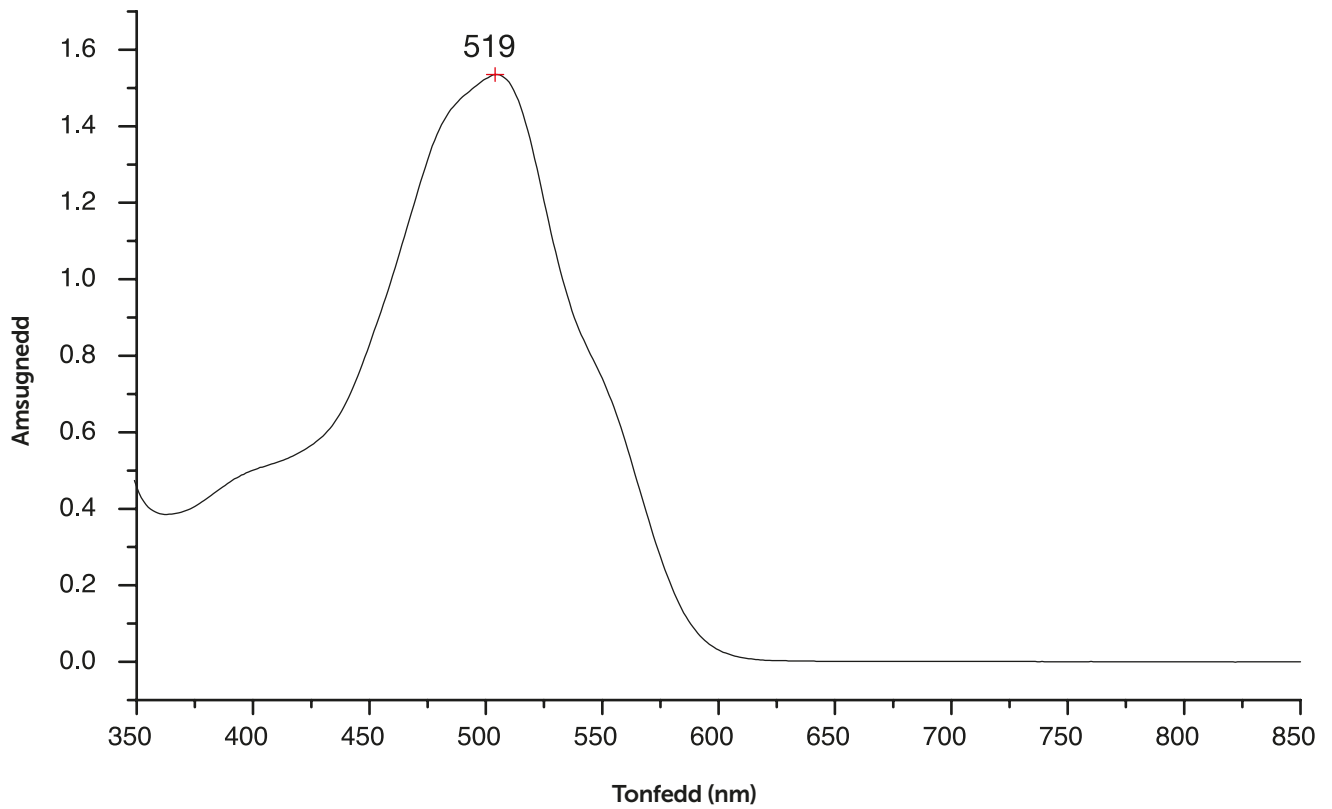
TAFLEN WAITH MYFYRIWR

LLIW	GWERTH AMSUGNO SYDD WEDI'I RAGFYNEGI (nm)	GWERTH AMSUGNO GWIRIONEDDOL (nm)	NODIADAU
Coch			
Melyn			
Gwyrdd			
Glas			
Pinc			
Du			

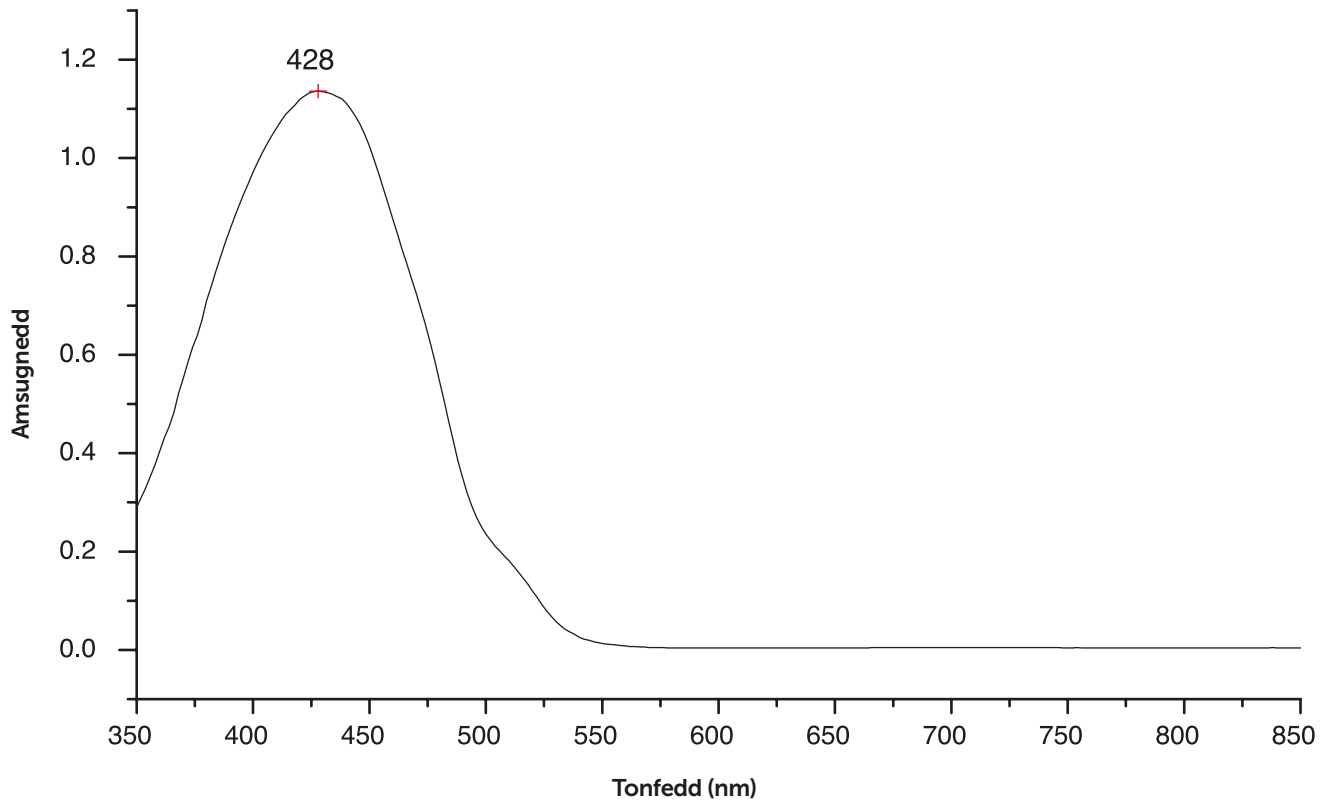


SBECTRA ENGHREIFFTIOL

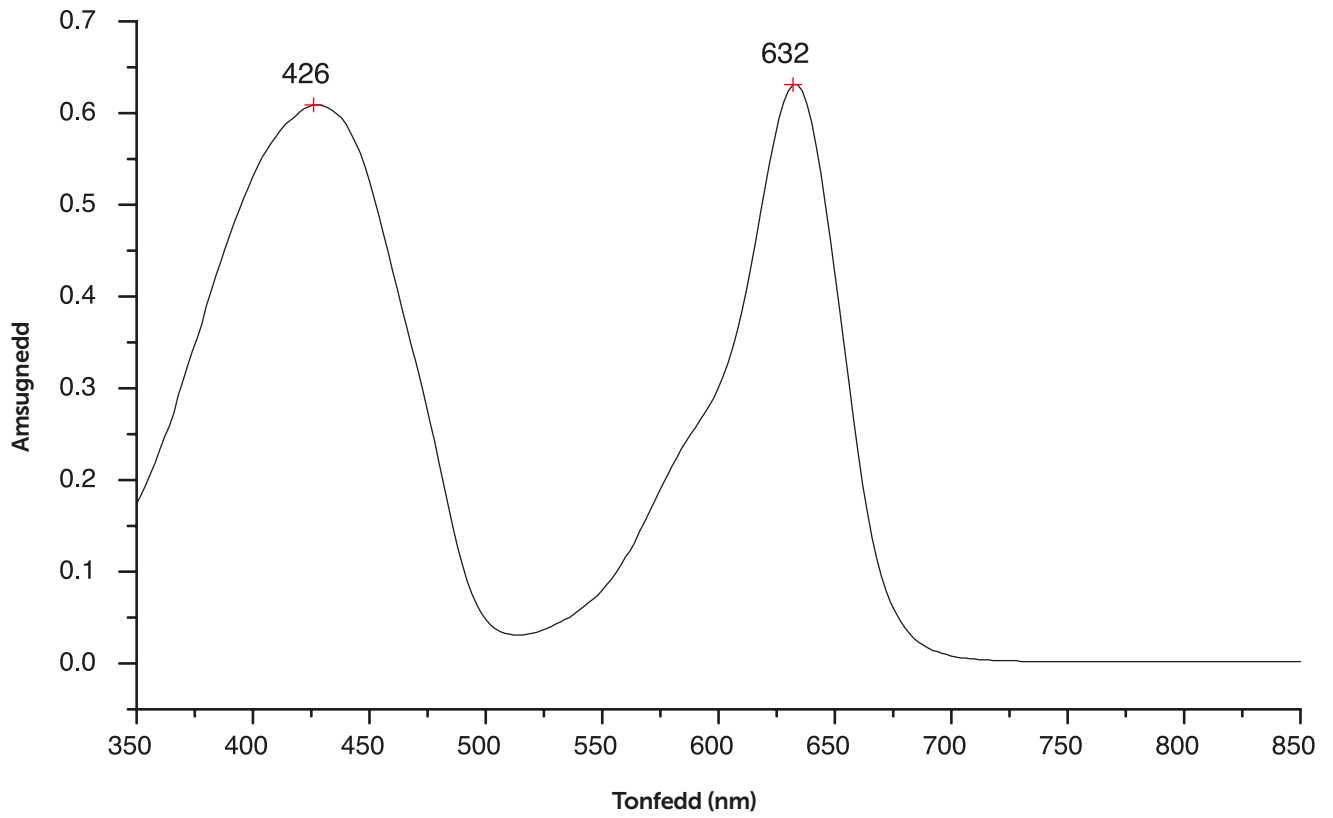
Coch: 519 a 528 nm



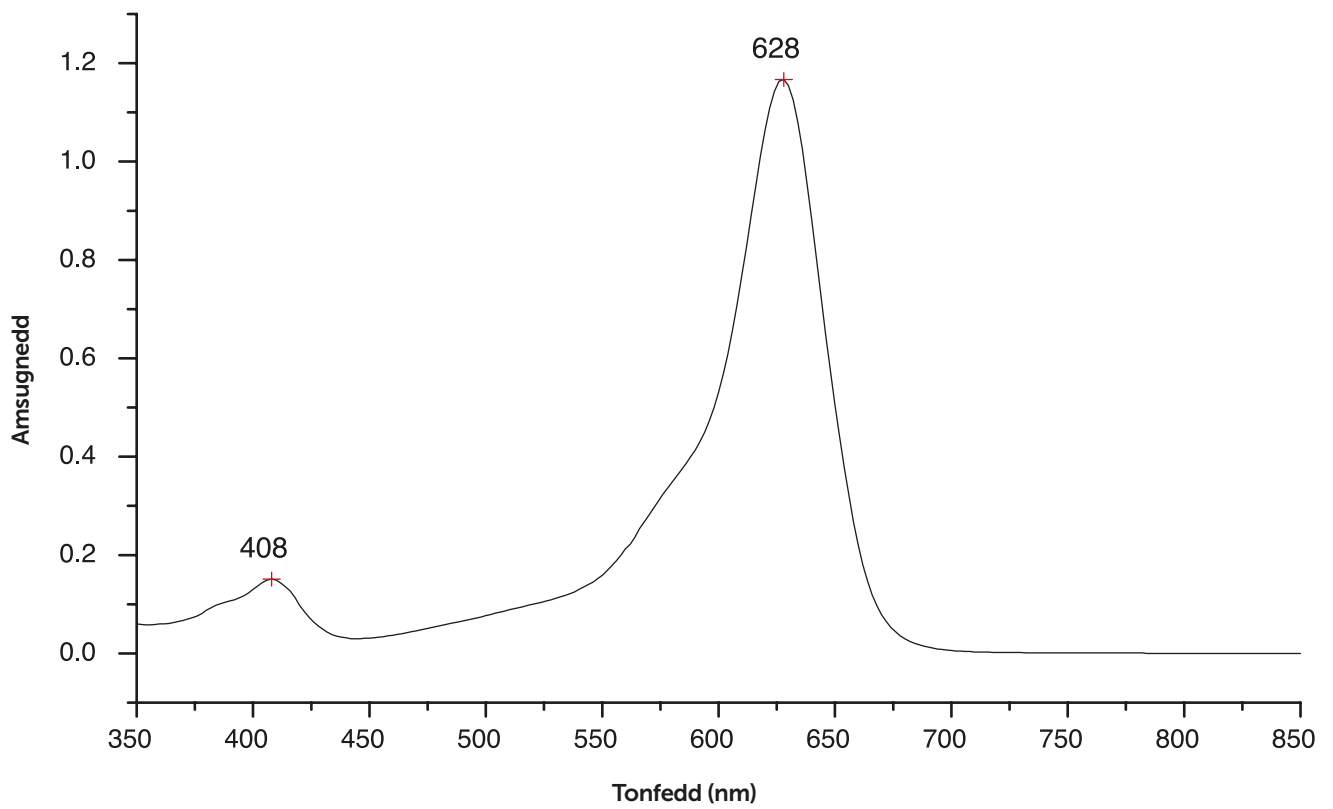
Melyn: 428 nm



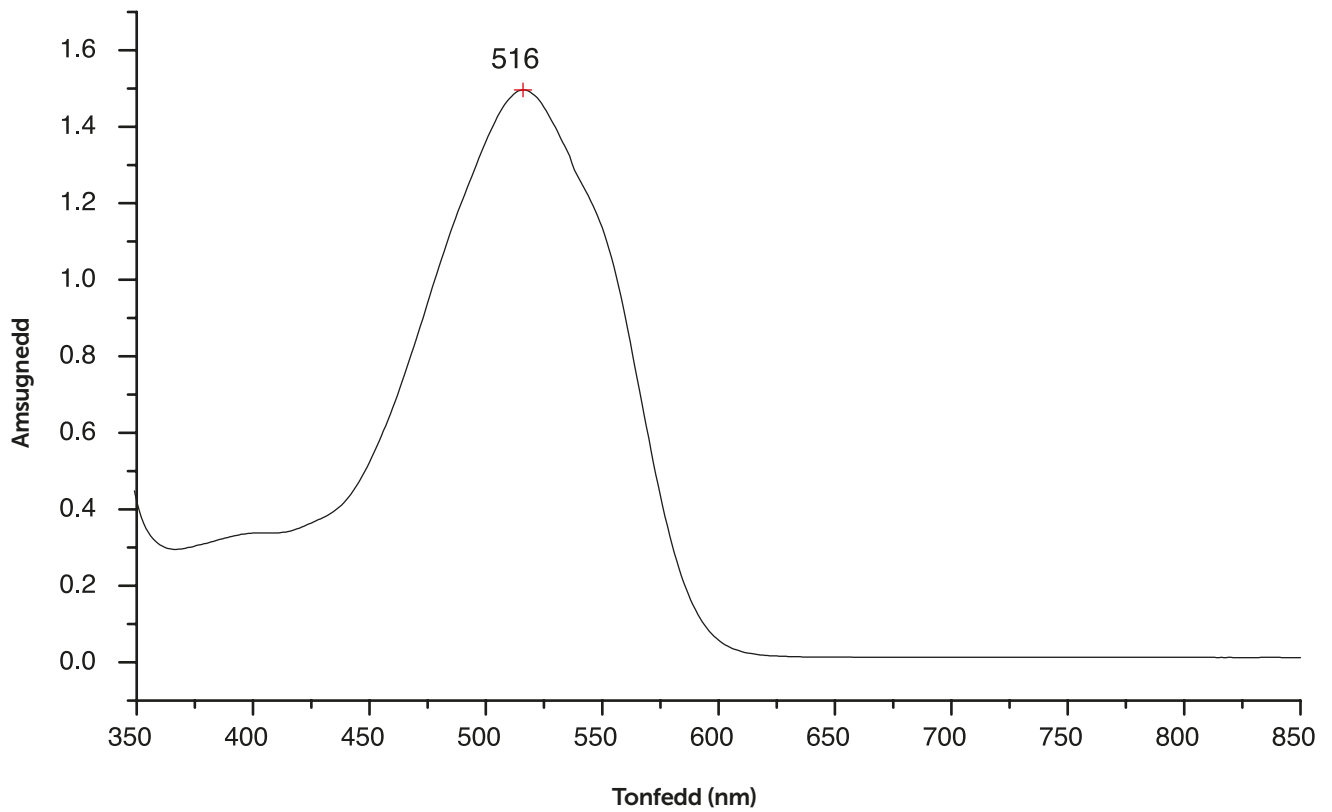
Gwyrdd: 635 nm



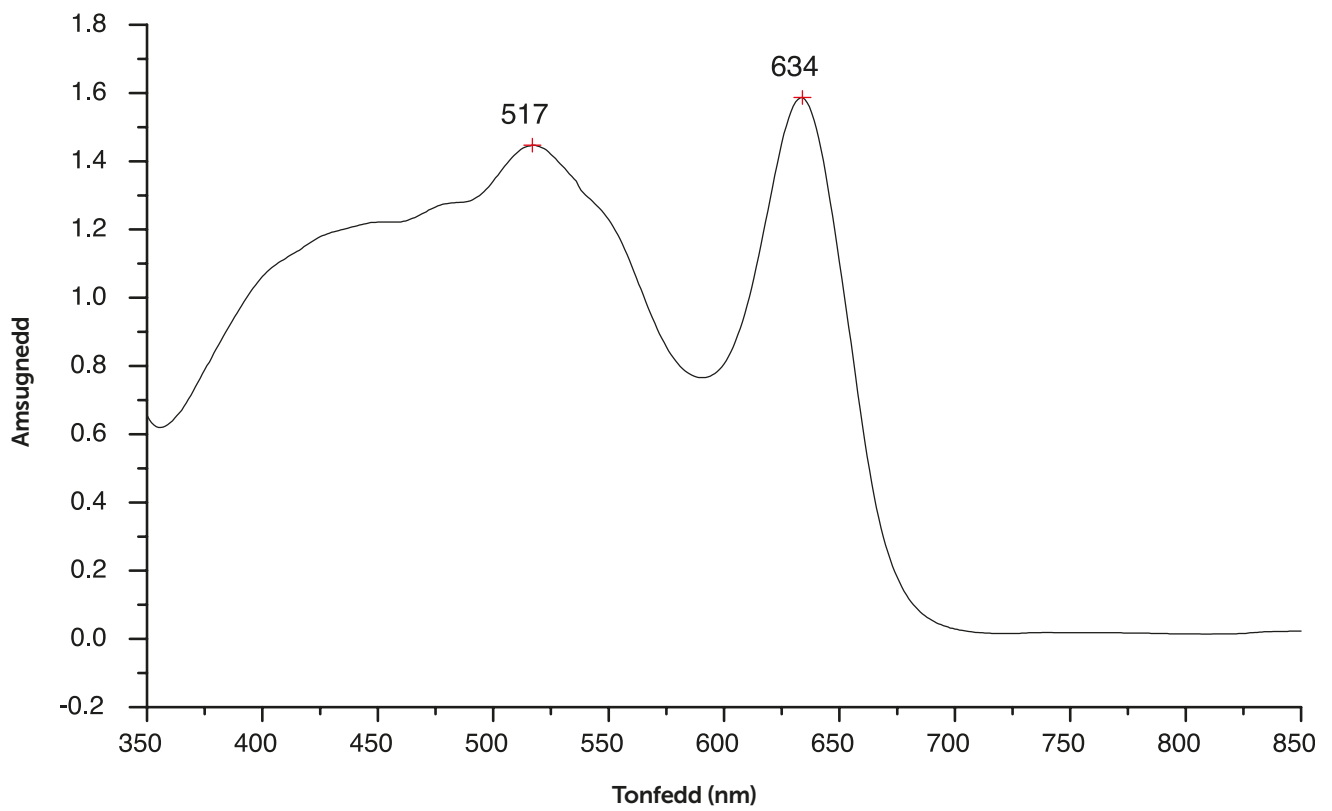
Glas: 628 nm

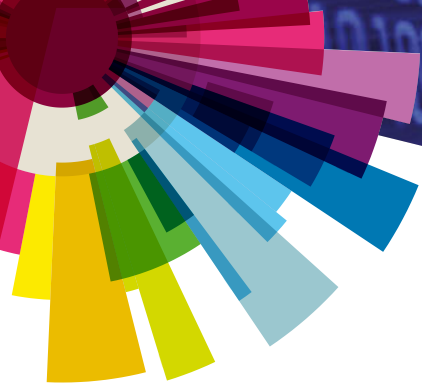


Pinc: 510 nm



Du: 519 a 635 nm





Corff mewn labordy: Ymarfer 1

Adnabod cyfansoddion

Dadansoddiad SM ac IG



CYFLWYNIAD

Cefndir

Mae corff wedi'i ddarganfod yn y labordy!

Roedd gan y dioddefwr, Mr Glas, gyflwr calon. Ond, ar y fainc lle'r oedd y dioddefwr wedi bod yn gweithio roedd potel fawr o asid crynodedig wedi'i throï drosodd a'i thywallt. Roedd poteli gwahanol gemegau o gwmpas yr asid hwn ac roedden nhw hefyd wedi'u taro drosodd ac o bosibl wedi cymysgu gyda'r asid. Roedd potel moddion hefyd yno gyda thabledi anhysbys ynddi (Sampl X – mae'r tabledi wedi'u malu'n barod i'w dadansoddi).

Amcan

Ceisiwch ganfod beth oedd achos y farwolaeth drwy ddefnyddio dadansoddiad IG i ganfod pa grwpiau gweithredol sy'n bresennol yn y samplau cemegol sydd wedi'u casglu. Penderfynwch ydy unrhyw un o'r rhain yn debygol o fod yn wenwynig neu wedi ffurfio nwy gwenwynig marwol wrth ddod mewn cysylltiad â'r asid sydd wedi'i dywallt. Canfyddwch beth oedd y moddion gafodd eu darganfod drwy gymharu'r sbectra gyda rhai o'r llyfrgell ac awgrymwch oblygiadau posibl.

DULL

Caiff samplau anhysbys A-F eu rhoi ichi a sampl moddion X

1. Dadansoddwch bob sampl gan ddefnyddio'r sbectromedr IG ATR.

(Nodwch: Rhaid bod yn ofalus wrth ddefnyddio'r cyfarpar drud a brau hwn; peidiwch â'i ddefnyddio heb oruchwyliaeth arddangoswr).

Dehongli sbectra

I dehongli'r sbectra sydd i'w cael o sampl mae angen cyfeirio at siartiau cyberthyniad a thablau o ddata IG.

2. Gan ddefnyddio'r siart cyberthyniad sydd wedi'i darparu, dehonglwch eich sbectra a chanfyddwch pa grwpiau gweithredol sy'n bresennol ym mhob sampl. Cofnodwch eich canlyniadau yn y tabl sydd wedi'i ddarparu.

Adnabod cyfansoddyn anhysbys

Er bod sbectrosgopeg IG yn offeryn defnyddiol iawn i ganfod pa grwpiau gweithredol sydd mewn cyfansoddyn anhysbys, dydy hi ddim yn rhoi digon o dystiolaeth i gadarnhau'r union adeiledd. Mae cemegwyr yn defnyddio amrywiaeth o dechnegau i roi adeiledd moleciwl at ei gilydd.

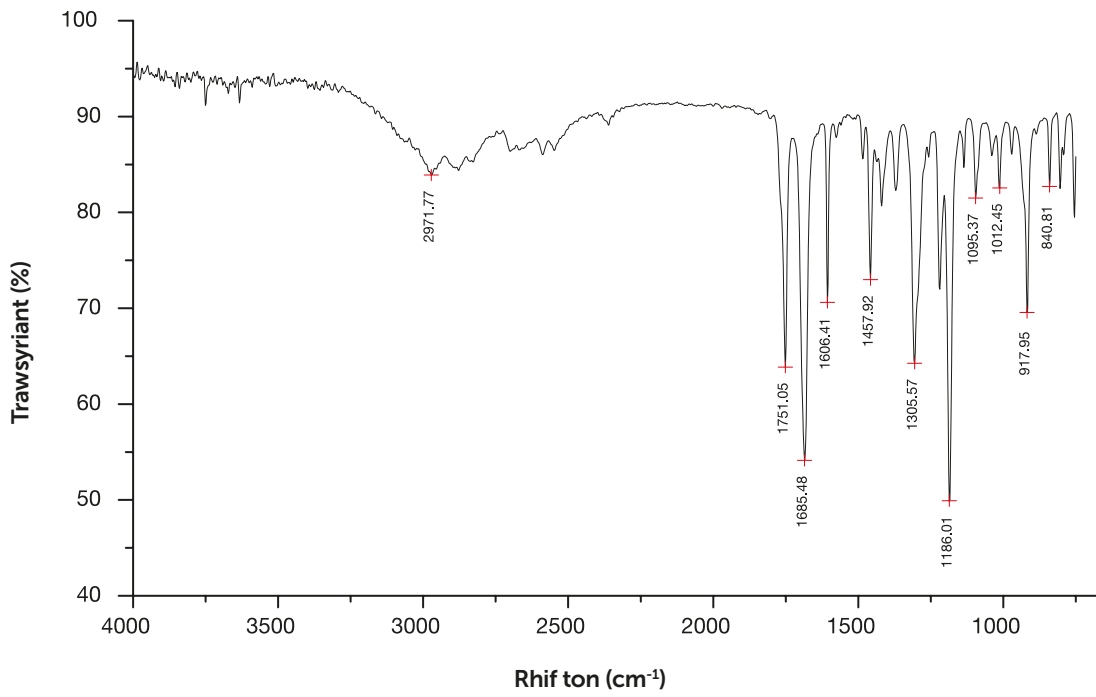
3. Defnyddiwch eich sbectra IG sydd wedi'u dehongli a'r sbectra mâs sydd wedi'u darparu i awgrymu adeileddau'r holl gyfansoddion anhysbys.
4. Nodwch unrhyw gemegau rydych chi'n credu y gallan nhw fod yn wenwynig neu lle gall grŵp gweithredol ryddhau nwy gwenwynig wrth ddod mewn cysylltiad gydag asid.
ATEB: Buasai'r asid wedi gallu adweithio gydag asetoneitril i ryddhau nwy hydrogen syanid.
5. Awgrymwch pa dechneg neu dechnegau offerynnol eraill fyddai eu hangen i gadarnhau pa gemegau ydyn nhw. (Bydd eich arddangoswr yna'n gallu rhoi data ychwanegol ichi i gadarnhau eich dadansoddiad).
6. Defnyddiwch sbectra'r llyfrgell i enwi sampl X.

TAFLEN WAITH MYFYRIWR

SAMPL	GWERTHOEDD BRIG PWYSIG (cm-1)	GRŴP GWEITHREDOL AC AMREDIAD (cm-1)	DADANSODDIAD MANYLEB MÂS (mâs y cyfansoddion a'r darnau sydd wedi'u hadnabod)	ENW AC ADEILEDD RHAGWELEDIG Y CEMEGYN
A				
B				
C				
Ch				
D				
Dd				
E				
F				
X				

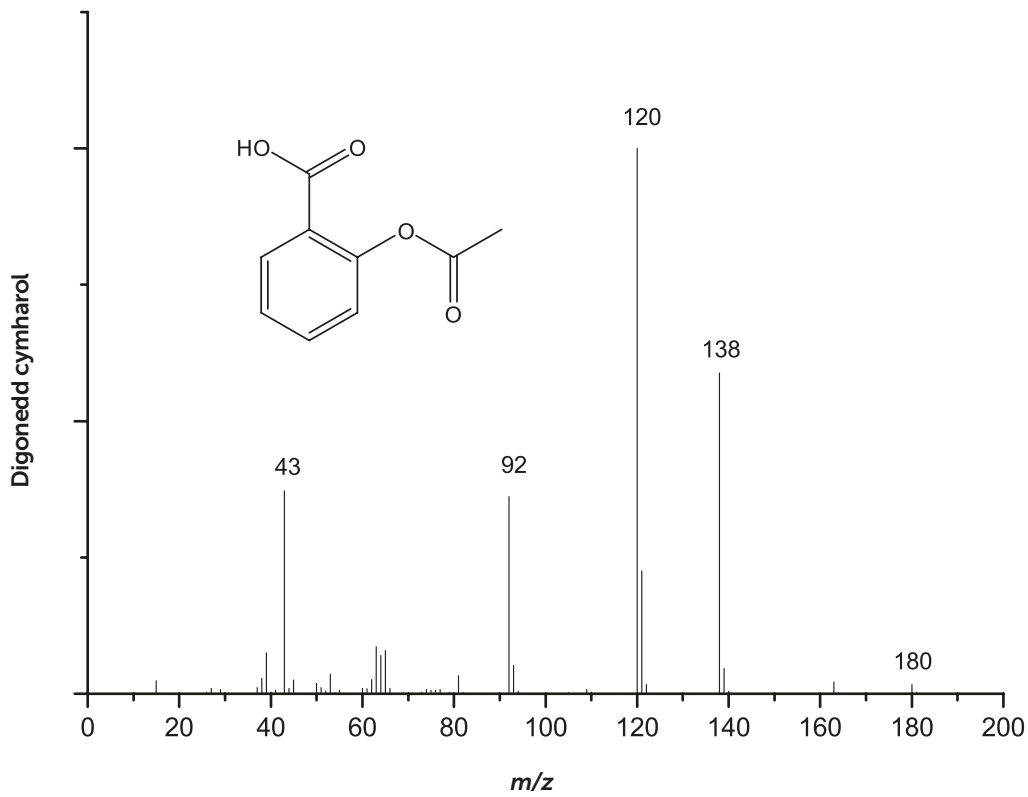
Sampl X

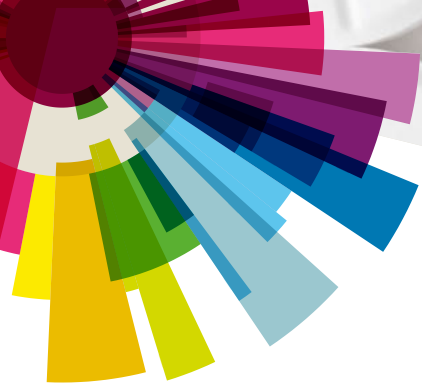
Sbectrwm IG



Sbectrwm mâs

Fformiwla empirig C₉H₈O₄





Corff mewn labordy: Ymarfer 2

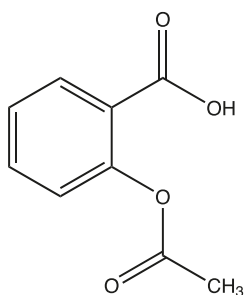
Dos gormodol o asbirin

Dadansoddiad UF-gweladwy



CYFLWYNIAD

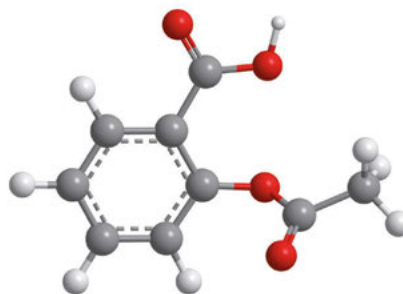
Mae corff wedi'i ddarganfod yn y Labordy! Roedd yr unigolyn a fu farw, Mr Glas, yn cymryd asbirin ac fe gafodd sampl o'i blasma gwaed ei anfon i'w ddadansoddi. Defnyddiwyd sbectrosgopeg UF i fesur crynodiad yr asbirin yn y corff a chanfod oedd y swm oedd yn bresennol yn ddigon i achosi'r farwolaeth.



DADANSODDIAD UV-GWELADWY

Dadansoddi salisylad mewn plasma gwaed drwy sbectrosgopeg UF-gweladwy

Mae asbirin, neu asid asetyl salisylig, yn gyffur sydd ar gael yn rhwydd ac mae ganddo nifer o briodweddau defnyddiol. Hwn oedd un o'r cyffuriau cyntaf i fod ar gael yn gyffredin ac fe gaiff ei ddefnyddio llawer o hyd; caiff tua 35,000 tunnelli ei gynhyrchu a'i werthu bob blwyddyn, sy'n gyfwerth â thua 100 biliwn o dabledi asbirin.



CORFF MEWN LABORDY (YMARFER 2): DOS GORMODOL O ASBIRIN 1

Caiff asbirin ei baratoi drwy ddefnyddio anhydrid asetig i asetyleiddio acid salisylig. Mae ei nifer o briodweddau fel cyffur yn cynnwys ei ddefnyddio fel poenleddfwr i leihau poen, fel cyffur gwrthlidiol i leihau llid, fel cyffur gwrthdwymynol i leihau tymheredd ac fel atalydd cydgasglu platennau i deneuo'r gwaed ac atal ceulo.

Mae'r lefelau therapiwtig gaiff eu cymryd ar ôl trawiad ar y galon fel rheol tua $<0.3 \text{ mg dm}^{-3}$ ac ar ôl llawdriniaeth ddargyfeiriol tua 0.075 mg dm^{-3} .

Mae modd dadansoddi lefelau'r salisylad sy'n bresennol mewn plasma gwaed gan ddefnyddio sbectrosgopeg UF-gweladwy i ddynodi ydy'r unigolyn wedi cymryd dos therapiwtig neu ddos gormodol. (edrychwch ar y tabl canlynol).

DULL

Mae'r dull hwn yn cynnwys mesur amsugnedd cymhlygyn coch-fioled ionau fferrig a salisylad ar tua 530 nm gan ddefnyddio sbectromedr UF-gweladwy.

Mae hydoddiant haearn (III) clorid 5% wedi'i baratoi ar eich cyfer (5g o haearn (III) clorid mewn 100 cm^3 o ddŵr wedi'i ddad-ïoneiddio).

1. Paratoi hydoddiannau safonol calibro salisylad

Mae hydoddiant stoc o 2 mg dm^{-3} salisylad mewn 250 cm^3 o ddŵr wedi'i ddad-ïoneiddio wedi'i baratoi ar eich cyfer drwy hydoddi 580 mg o sodiwm salisylad mewn fflasg safonol 250 cm^3 .

Paratowch hydoddiannau safonol calibro (os nad ydy hyn eisoes wedi'i wneud ar eich cyfer)

Mewn fflasg safonol 100 cm^3 gwanedwch gyfeintiau priodol o'r hydoddiant stoc i roi hydoddiannau safonol calibro salisylad 0.1 , 0.2 , 0.3 , 0.4 a 0.5 mg dm^{-3} gan ddefnyddio'r gwannediadau isod.

Therapiwtig	$<0.3 \text{ mg dm}^{-3}$
Dos gormodol cymedrol	$0.5\text{--}0.75 \text{ mg dm}^{-3}$
Dos gormodol difrifol	$>0.75 \text{ mg dm}^{-3}$

Mae'r rhan fwyaf o farwolaethau oedolion yn digwydd pan mae'r lefel gaiff ei fesur yn y plasma dros 0.7 mg dm^{-3} . (Nodwch: fel arfer, bydd lefelau uchaf y salisylad yn y plasma'n digwydd tua 4-6 awr ar ôl ei lyncu).

2. Paratoi blanc

Mewn tiwb profi, paratowch hydoddiant blanc drwy gymryd **1 cm^3** o ddŵr wedi'i ddad-ïoneiddio ac ychwanegu **4 cm^3 o hydoddiant haearn (III) clorid 5%**.

3. Paratoi hydoddiannau safonol a sampl plasma anhysbys ar gyfer dadansoddi UF-gweladwy

Paratowch bob un o'r hydoddiannau safonol a'r sampl plasma anhysbys drwy bipedu 1 cm^3 i diwbiau profi ar wahân ac ychwanegu **4 cm^3** o hydoddiant **haearn (III) clorid 5%** at bob un (gan ofalu eu bod i gyd wedi'u cymysgu'n ofalus.)

4. Cofnodi'r amsugnedd

Trosglwyddwch yr hydoddiannau calibro, y sampl blanc a'r sampl anhysbys i cuvettes ar wahân i gofnodi'r amsugnedd. Ar gyfer pob sampl, cofnodwch yr amsugnedd yn y rhanbarth gweladwy rhwng 400 a 600 nm . Dylech sylwi ar frig oddeutu 530 nm (siaradwch gyda'ch arddangoswr i gael cyfarwyddiadau ar sut i ddefnyddio'r sbectromedr UF-gweladwy).

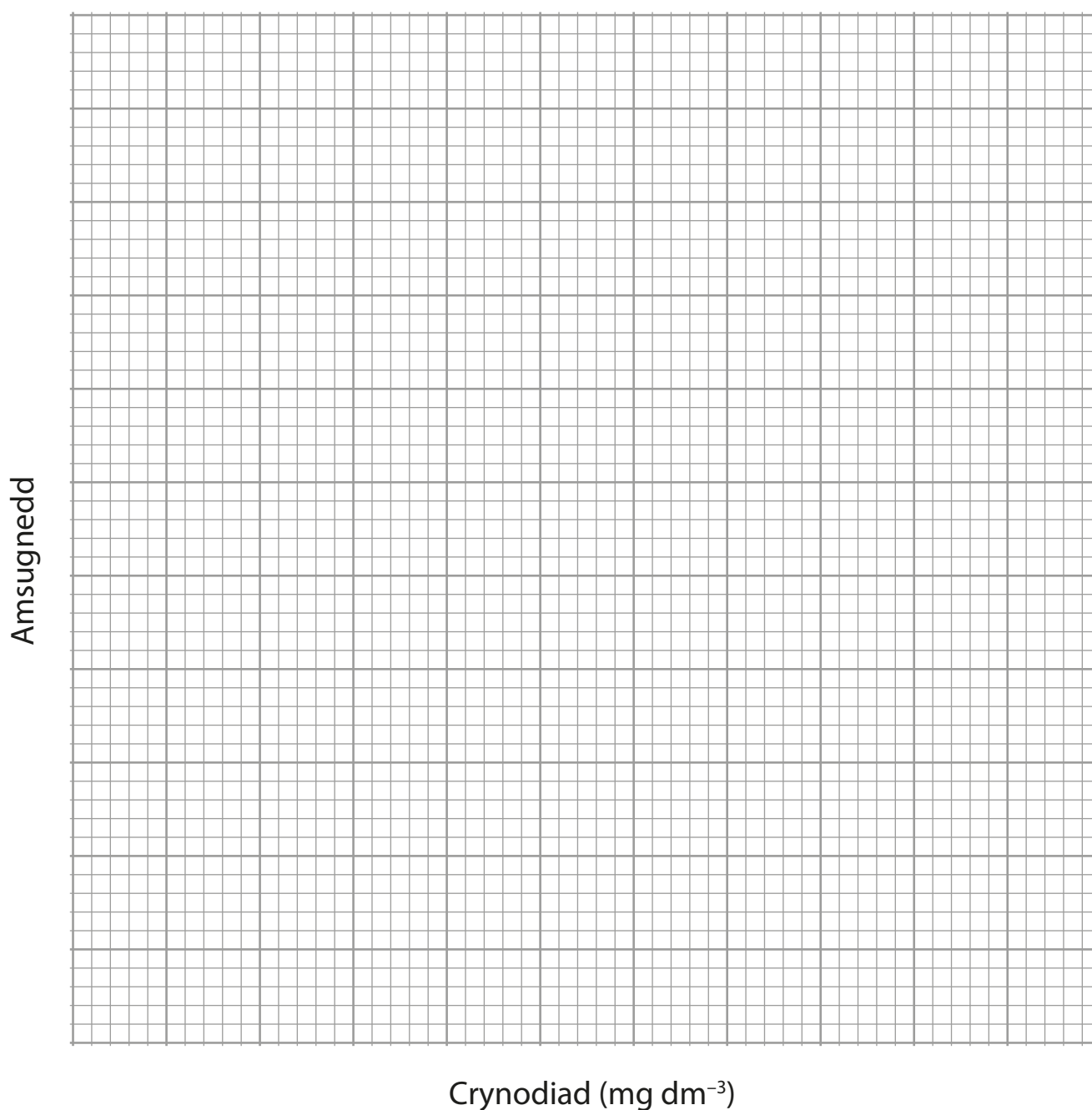
CRYNODIAD	GWANEDIAD
0.1 mg dm^{-3}	5 cm^3 o hydoddiant salisylad stoc mewn 100 cm^3 o ddŵr wedi'i ddad-ïoneiddio
0.2 mg dm^{-3}	10 cm^3 o hydoddiant salisylad stoc mewn 100 cm^3 o ddŵr wedi'i ddad-ïoneiddio
0.3 mg dm^{-3}	15 cm^3 o hydoddiant salisylad stoc mewn 100 cm^3 o ddŵr wedi'i ddad-ïoneiddio
0.4 mg dm^{-3}	20 cm^3 o hydoddiant salisylad stoc mewn 100 cm^3 o ddŵr wedi'i ddad-ïoneiddio
0.5 mg dm^{-3}	25 cm^3 o hydoddiant salisylad stoc mewn 100 cm^3 o ddŵr wedi'i ddad-ïoneiddio

DADANSODDI'R CANLYNIADAU

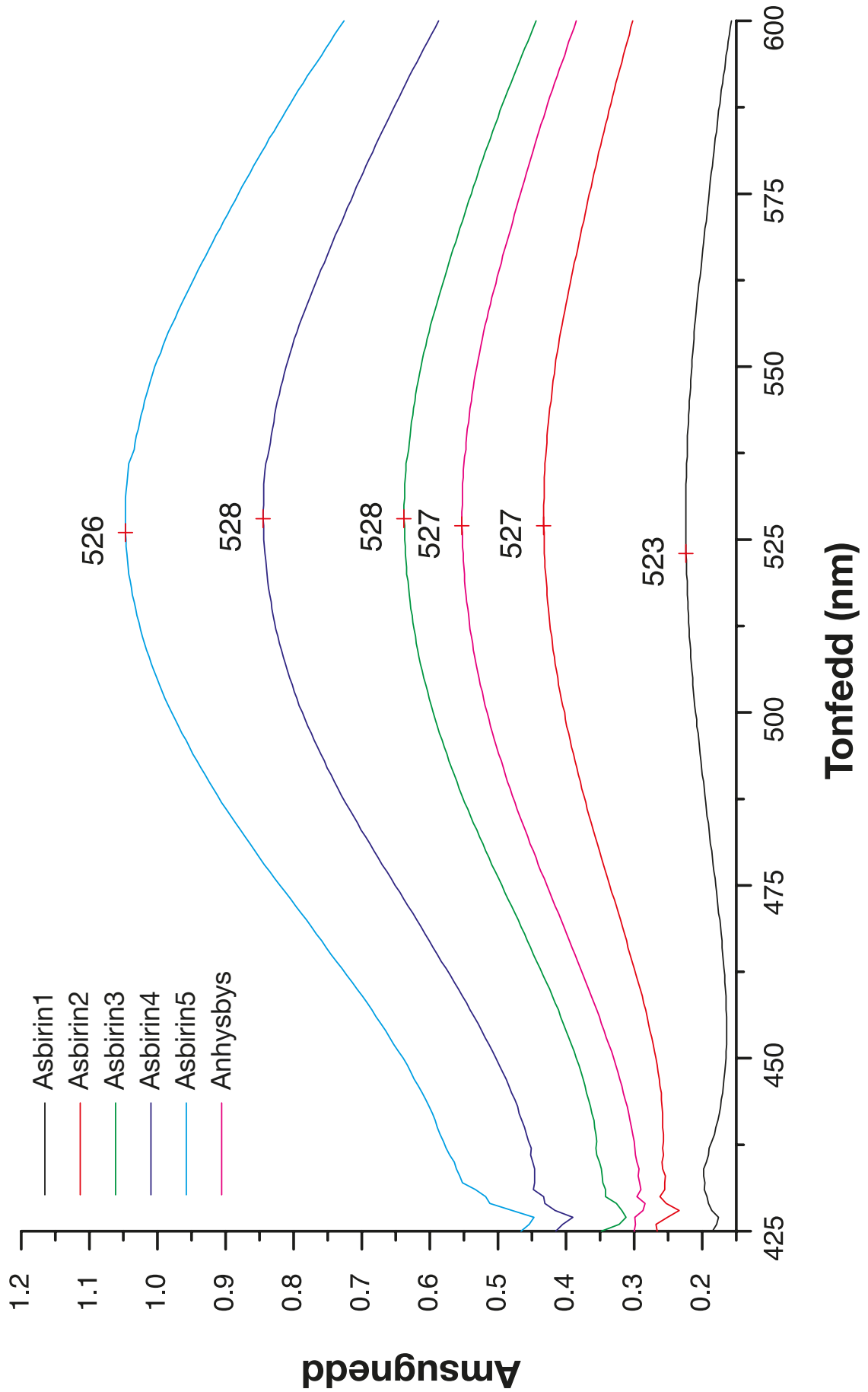
- Gan ddefnyddio deddf Beer-Lambert, plotiwch graff calibro **amsugnedd yn erbyn crynodiad** y safonau a defnyddiwch hwn i ganfod crynodiad anhysbys y salisylad sy'n bresennol yn y plasma.
- Defnyddiwch y canlyniad hwn i benderfynu a oedd yr unigolyn dan sylw wedi cymryd dos therapiwtig neu ddos sy'n peryglu bywyd.

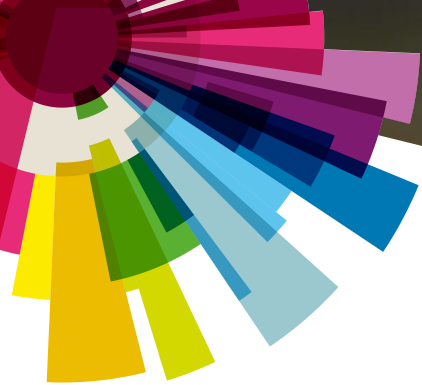
TAFLEN WAITH MYFYRIWR

SAMPL	AMSUGNEDD	TONFEDD BRIG WEDI EI DDEWIS (nm)
Blanc dŵr wedi'i ddad-ïoneiddio		
Hydoddiant calibro 0.1 mg dm ⁻³		
Hydoddiant calibro 0.2 mg dm ⁻³		
Hydoddiant calibro 0.3 mg dm ⁻³		
Hydoddiant calibro 0.4 mg dm ⁻³		
Hydoddiant calibro 0.5 mg dm ⁻³		
Sampl plasma		



SBECTRA ENGHREIFFTIOL





Corff mewn labordy: Ymarfer 3 Dirgelwch Llofruddiaeth "Pwy Wnaeth?" Dadansoddiad SM



CYFLWYNIAD

Gwybodaeth gefndir

Y stori hyd yma...

Mae corff wedi'i ddarganfod mewn labordy ac mae ymchwiliad yn cael ei gynnal i ganfod beth achosodd y farwolaeth.

Sbectrosgopeg IG

Mae IG wedi'i ddefnyddio i ganfod a gafodd marwolaeth Mr Glas ei hachosi gan unrhyw un o'r cemegau amrywiol gafodd eu darganfod o gwmpas y corff. Yn y cam hwn o'r ymchwiliad y casgliad oedd nad damwain oedd y farwolaeth ac fe gafodd potel o asbirin ei darganfod yn agos at y corff.

Sbectrosgopeg UF

Cafodd sbectrosgopeg UF ei defnyddio i ddadansoddi sampl plasma gwaed Mr Glas i ganfod a oedd y swm o asbirin oedd yn bresennol yn ddos anghuol. Profodd y canlyniad mai dim ond lefelau therapiwtig o'r feddyginiaeth oedd gan Mr Glas yn ei waed oedd yn gyson gyda'r ddos y bu i'r meddyg ei argymell.

Ar yr adeg hon, mae'r farwolaeth yn edrych yn fwy a mwy amheus ac mae'r ymchwiliad yn canolbwyntio ar y bobl a fu mewn cyswllt gyda Mr Glas cyn ei farwolaeth.

TYSTIOLAETH

Detholiad o'r adroddiad safle trosedd

Cafodd Mr Glas, ymchwilydd mewn prifysgol, ei ddarganfod yn farw wedi'i amgylchynu gan boteli cemegau oedd wedi'u taro i lawr a'u tywallt. Cafodd asid crynodedig a chemegau organig amrywiol eu darganfod ar y fainc. Roedd potel o dabledi heb label hefyd wrth ymyl y corff. Cafodd olion bysedd pedwar person arall eu darganfod yn y safle: Mr Gwyrdd, technegydd y labordy, Mrs Glas (cyn-wraig) a Mr Piws, dau ymchwilydd arall a Miss Coch, myfyrwraig PhD. Cafodd llythyr ei ddarganfod ym mhoced Mr Glas wedi'i gyfeirio at Adran Adnoddau Dynol y brifysgol. Yn y llythyr roedd yn hawlio ei fod yn amau bod Mr Gwyrdd yn gaeth i gyffuriau a'i fod wedi ei ddal yn archebu cemegau i gynhyrchu cyffuriau ac y dylai'r brifysgol ei ddiswyddo ar unwaith.

Detholiad o adroddiad y meddyg

O adroddiad y meddyg mae modd gweld bod y dioddefwr, Mr Glas, wedi cael trawiad ysgafn ar ei galon o'r blaen a'i fod yn cymryd asbirin yn ddyddiol fel meddyginiaeth.

Datganiadau gan dystion/y rhai sy'n cael eu drwgdybio

Mr Gwyrdd – Technegydd y labordy

Roedd Mr Gwyrdd wedi gweithio ers blwyddyn fel technegydd yn y labordai ymchwil. Dywedodd Mr Gwyrdd ei fod wedi gweld y dioddefwr yn dadlau gyda Mr Piws am ganlyniadau ymchwil. Dywedodd fod y dioddefwr wedi hawlio bod Mr Piws wedi dwyn y canlyniadau ganddo a'u cyhoeddi fel ei waith ei hun. Roedd Mr Piws am gael llawer o arian a chyhoeddusrwydd blaenllaw o'r gwaith ymchwil hwn. Pe bai'n dod i'r amlwg ei fod wedi dwyn y canlyniadau gan gydweithiwr byddai hynny'n dinistrio ei yrfa a'i enw da. Dywedodd Mr Gwyrdd ei fod hefyd wedi gweld Mr Glas yn dychwelyd o ginio gyda Miss Coch ychydig yn gynharach. Roedd yn ymddangos ei fod wedi bod yn yfed a gwnaeth Miss Coch ddiod iddo.

Miss Coch – Myfyrwraig PhD

Dywedodd Miss Coch ei bod wedi bod mewn perthynas gyda'r dioddefwr am y 6 mis diwethaf a hawliodd eu bod yn bwriadu dyweddio yn y flwyddyn newydd. Roedd Miss Coch yn hoff o reidio ceffylau ac roedd hi'n treulio ei hamser sbâr yn helpu mewn stablau proffesiynol lle'r oedd hi'n ffrindiau da gydag Mrs Arian, y milfeddyg.

Mrs Glas – Ymchwilydd a chyn-wraig

Dywedodd Mrs Glas, oedd wedi gwahanu gyda Mr Glas y flwyddyn flaenorol, nad oedd y dioddefwr yn bwriadu priodi Miss Coch o gwbl. Dywedodd fod Miss Coch wedi camddeall bwriad Mr Glas a'i fod mewn gwirionedd yn bwriadu symud i weithio mewn prifysgol arall heb Miss Coch. Dywedodd hefyd fod Mr Glas hyd yn oed wedi sôn am fynd yn ôl at ei wraig. Yn ddiweddar, bu Mrs Glas ar daith i India ar gyfer cynhadledd am feddyginiaethau naturiol Indiaidd.

Mr Piws – Athro

Mae Mr Piws wedi gweithio yn y brifysgol ers deuddeg mlynedd fel Athro ymchwil uchel ei broffil ond doedd o ddim wedi gwneud llawer o gynnydd yn ei faes yn ddiweddar. Roedd yn rhaid i Mr Piws sicrhau mwy o gyllid ac roedd dan bwysau i gynhyrchu canlyniadau. Dywedodd Mr Piws hefyd fod gan Mr Gwyrdd broblemau ariannol a'i fod wedi gofyn iddo am fenthyciad. Yn ddiweddar, roedd Mr Piws wedi trefnu i'r dinistrwyr ddod i ymdrin â phroblem gyda llygod mawr yn un o labordai'r islawr.

Adroddiad y labordy fforensig

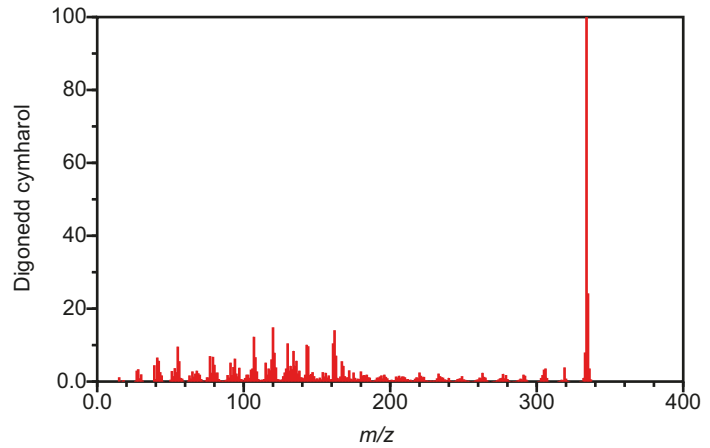
Sampl:

Sampl troeth post-mortem gan Mr Glas

Dadansoddiad y gofynnwyd amdano:

Dadansoddiad CN-SM am gyffuriau neu wenwynau cyffredin

Canlyniadau: Sampl troeth Mr Glas



Cyf gwelyfr Cemeg NIST

Adroddiad y labordy fforensig

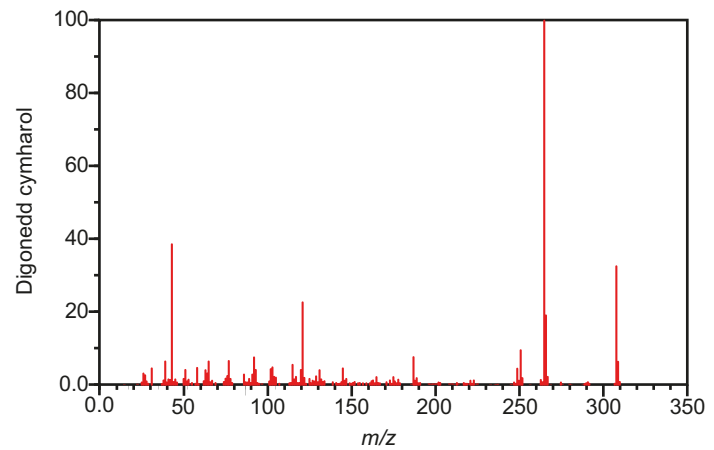
Sampl:

Sampl gwenwyn llygod mawr o'r labordy

Dadansoddiad y gofynnwyd amdano:

Dadansoddiad CN-SM

Canlyniadau: Sampl gwenwyn llygod mawr



Cyf gwelyfr Cemeg NIST

DULL

Pwy wnaeth?

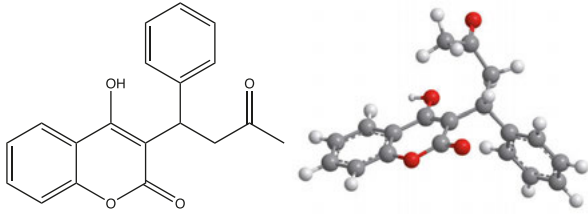
Amcan

Defnyddiwch y gronfa ddata fach o wenwynau cyffredin a'r adroddiad fforensig sydd wedi'i ddarparu i enwi'r cemegyn gafodd ei ddarganfod yn sampl troeth y dioddefwr. O'r dystiolaeth hon, nodwch pa wybodaeth ychwanegol fyddai ei hangen i wirio mai'r gwenwyn hwn achosodd y farwolaeth, yna defnyddiwch ddatganiadau'r tystion i ganfod pwy sy'n fwyaf tebygol o fod yn euog.

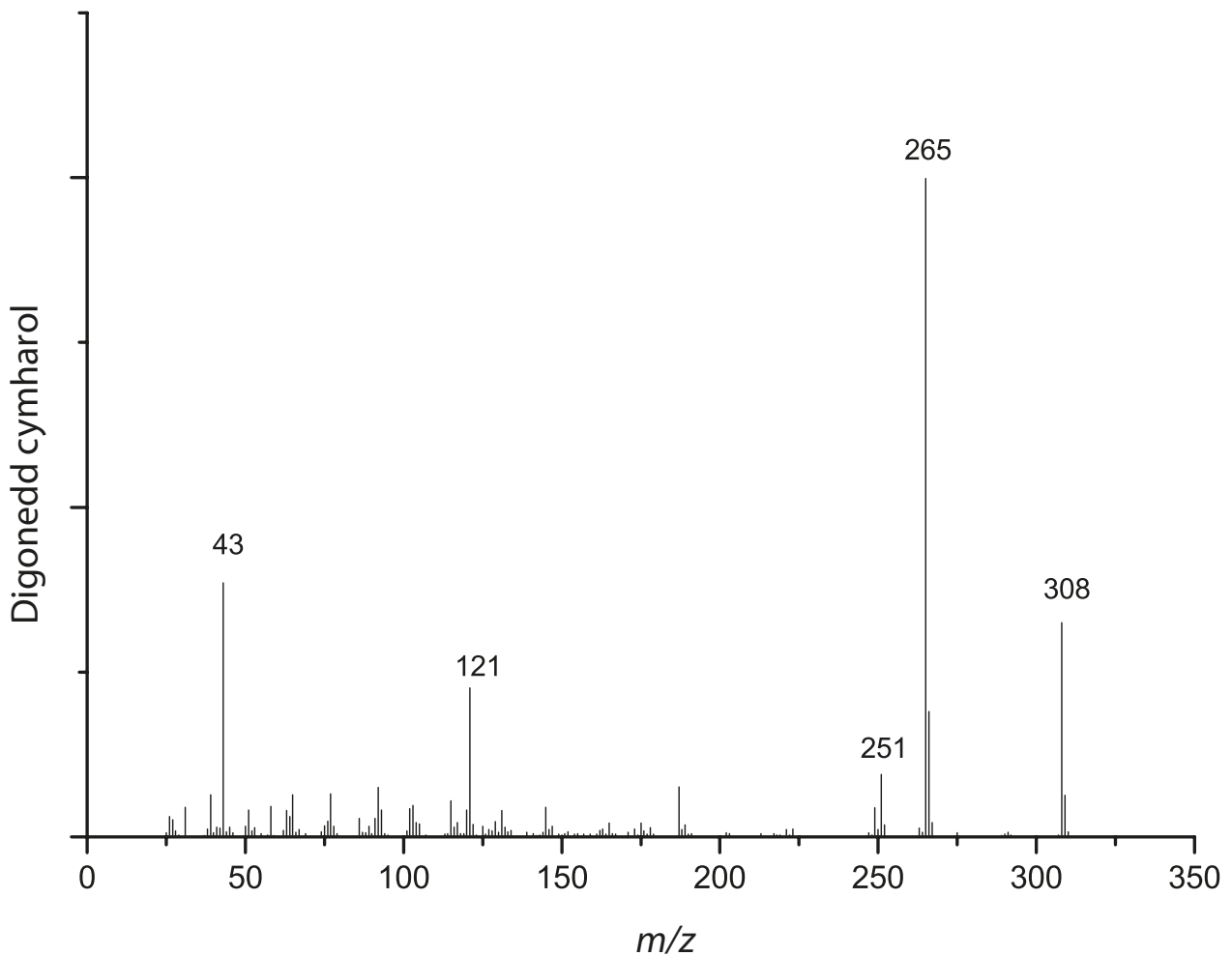
GWYBODAETH GEFNDIR SBECTROMETREG MÂS

Cyffuriau a gwenwynau cyffredin

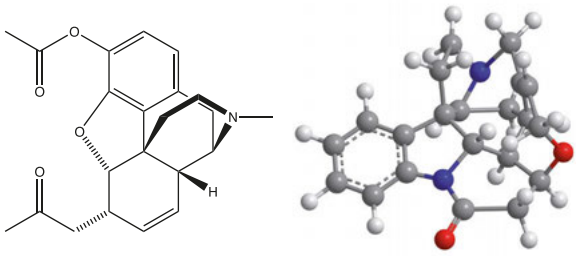
Warffarin C₁₉H₁₆O₄ RMM: 308.33



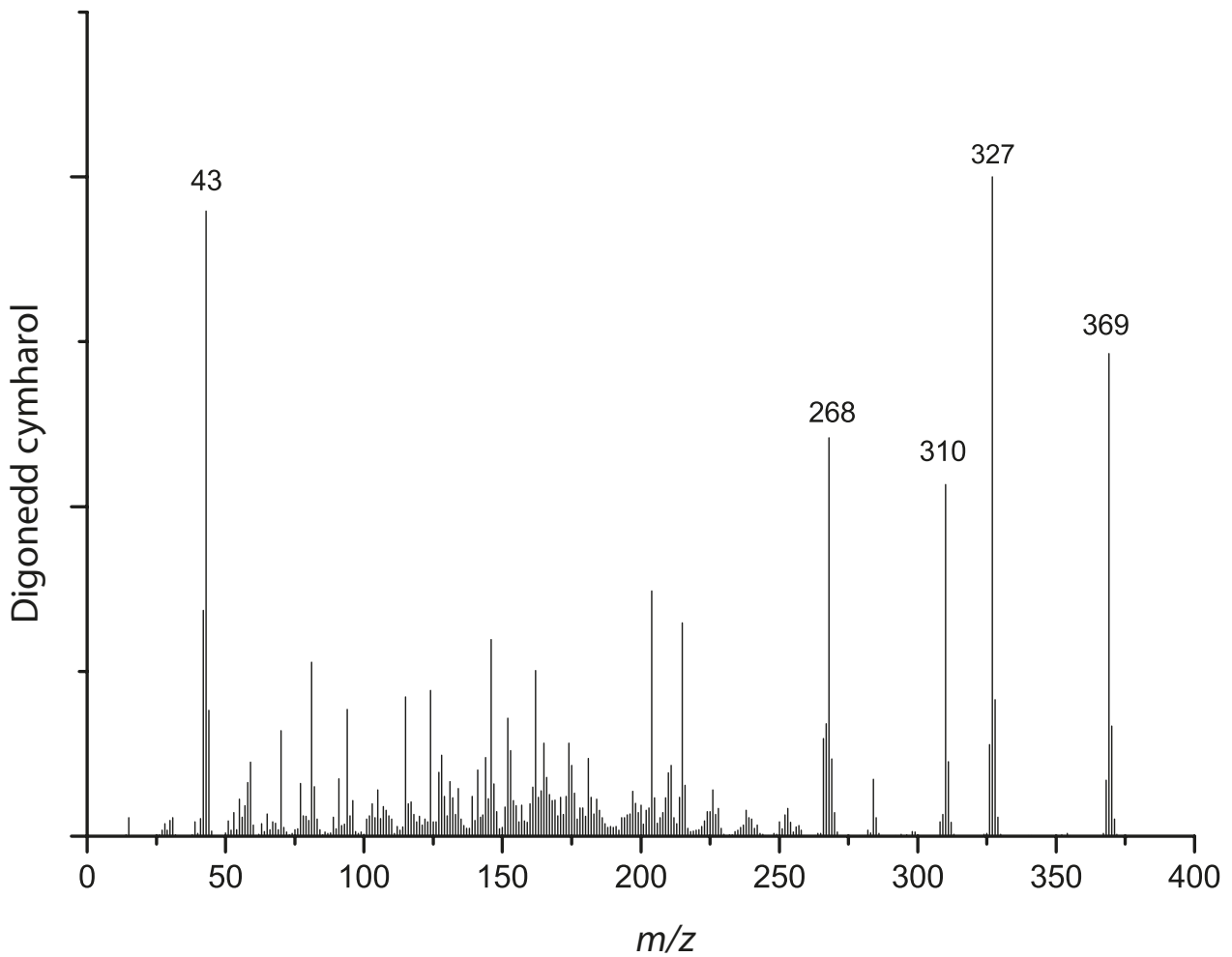
- Cyffur gwrthgeulol gaiff ei roi yn gyffredin i atal thrombosis a tholchenni.
- Caiff ei ddefnyddio yn gyffredin fel plaeiddiad i ladd llygod a llygod mawr.
- Gall dos gormodol achosi marwolaeth drwy waedu mewnol megis gwaedlif gastroberfeddol.



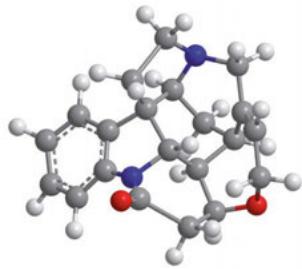
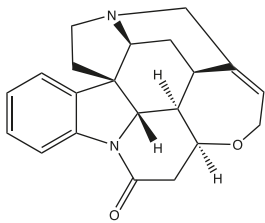
Heroin $C_{21}H_{23}NO_5$ RMM: 369.41



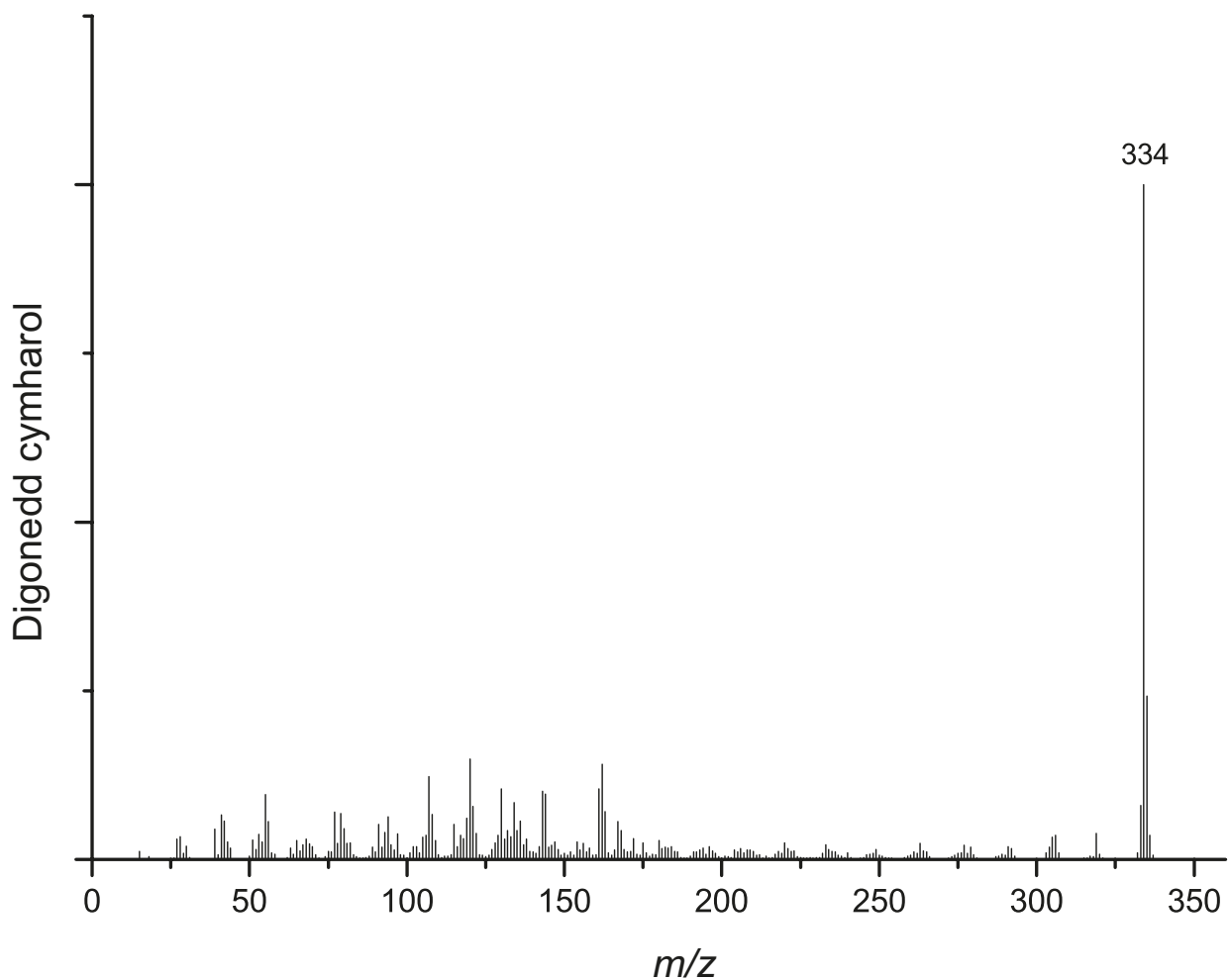
- Caiff ei ddefnyddio fel cyffur lleddfu poen ac fel cyffur adloniant anghyfreithlon a chaethiwus iawn.
- Gall dosiau mawr o heroin achosi diwasgedd resbiradol angheuol ac mae'r cyffur wedi cael ei ddefnyddio ar gyfer hunanladdiad neu fel arf llofruddiaeth.



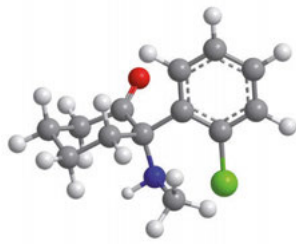
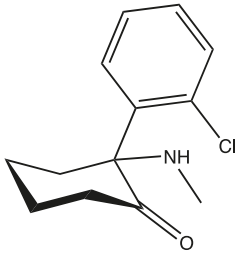
Strychnin $C_{21}H_{22}N_2O_2$ RMM: 334.41



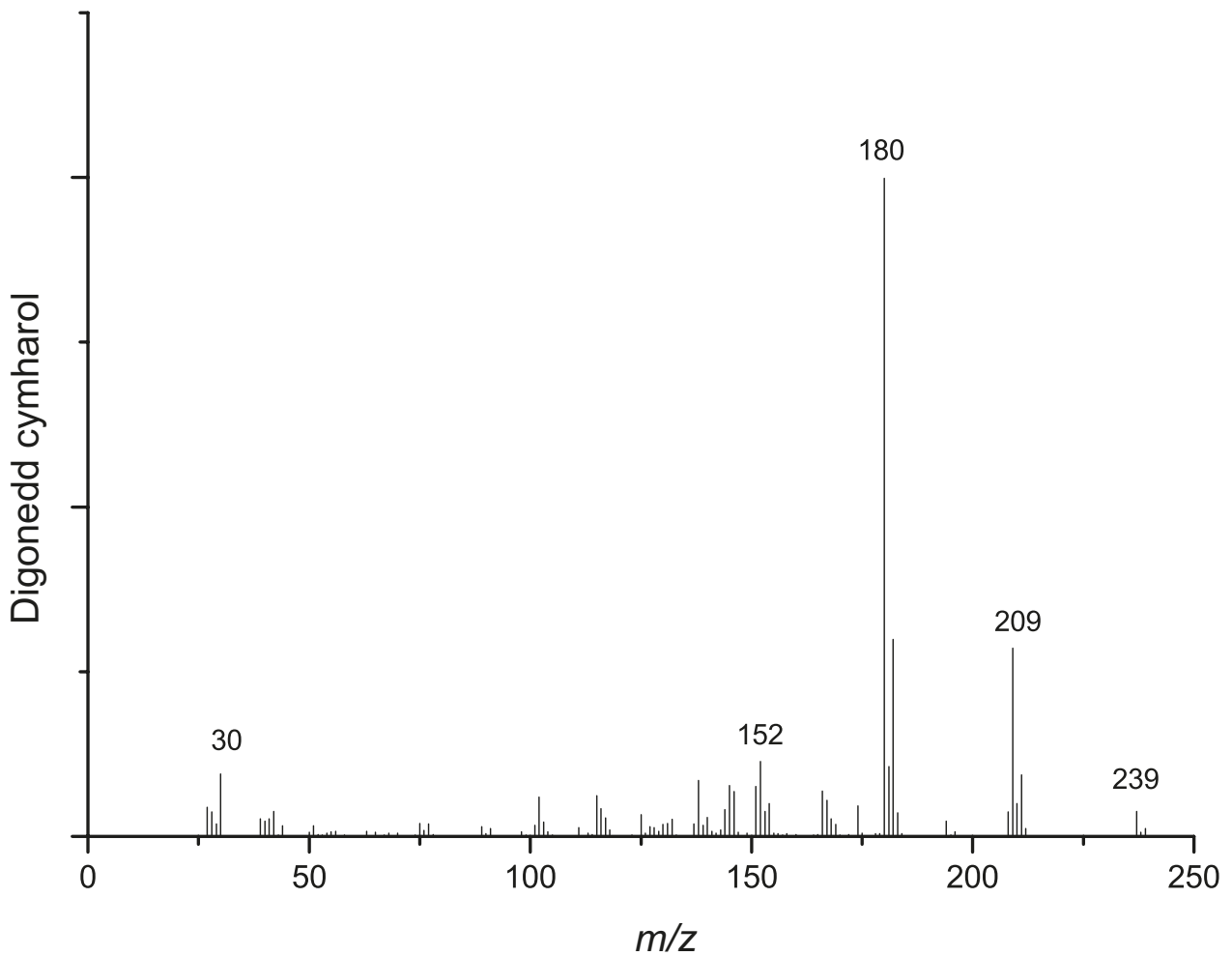
- Caiff ei ddefnyddio fel pleiddiad i ladd mamolion bach, adar a chnoflod.
- Mae strychnin yn achosi confylsiynau cyhyrol a marwolaeth yn y pen draw drwy fyctod neu orludedd.
- Rhoddwyd y gorau i ddefnyddio strychnin fel meddyginiaeth ar ôl i ddewisiadau eraill mwy diogel ddod i'r amlwg.
- Y ffynhonnell fwyaf cyffredin ydy hadau'r goeden *Strychnos nux-vomica* o Asia.

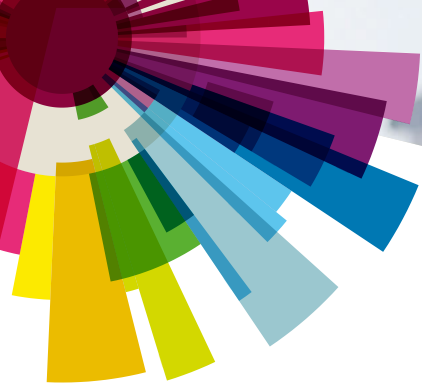


Cetamin C₁₃H₁₆ClNO RMM: 237.73



- Cyffur gaiff ei ddefnyddio mewn meddygaeth fel anaesthetig neu boenleddfwr.
- Caiff ei ddefnyddio yn aml hefyd mewn milfeddygaeth fel anaesthetig.
- Mae'n gyfansoddyn cirol ac mae'n bodoli fel dau enantiomer; mae'r enantiomer (S) yn fwy gweithredol.
- Yn ôl y sôn mae cetamin wedi achosi marwolaethau drwy dagu, chwydu a gorboethi.





Sgandal cyffuriau y Gemau Olympaidd: Ymchwiliad dadansoddiad IG



Hanes:

Y Gemau Olympaidd ydy un o'r cystadlaethau chwaraeon mwyaf yn y byd. Mae athletwyr yn cystadlu am fedalau Aur gan ddefnyddio sgiliau, pŵer a chyflymder. Mae emosiynau yn uchel, mae'r gystadleuaeth yn ffyrnig a bydd pobl yn gwneud unrhyw beth er mwyn ennill. Weithiau bydd pobl yn mynd yn rhy bell a gall hyn arwain at ddefnyddio cyffuriau gwella perfformiad mewn sawl cystadleuaeth chwaraeon. Un o'r achosion mwyaf drwg-enwog o gymryd cyffuriau mewn athletau oedd yn ystod y Gemau Olympaidd yn 1976 pan fu i dim Dwyrain yr Almaen ennill bron iawn i bob un o'r cystadlaethau. Pan ailymunodd yr Almaen, bu i'r athletwyr erlyn y llywodraeth am eu gorfodi i gymryd steroidau anabolig a chyfnerthwyr.¹ Yn ystod Gemau Olympaidd Llundain yn 2012, roedd y Gymdeithas Olympaidd Brydeinig yn gofyn am ataliadau mwy llym ar athletwyr oedd yn cael eu dal yn defnyddio cyffuriau gwella perfformiad.^{2,3} Yn gyntaf, mae'n rhaid bod yn sicr eu bod nhw'n cymryd sylweddau anghyfreithlon cyn bod gyrfa unrhyw un yn cael ei difetha.

Mae'r cyffuriau anghyfreithlon caiff eu darganfod mewn chwaraeon yn amrywio llawer; steroidau anabolig sy'n cynyddu màs cyhyrol; cyfnerthwyr fel amffetaminau; ac yn fwy diweddar, proteinau gaiff eu defnyddio i gynyddu faint o gelloedd gwaed sy'n cael eu cynhyrchu ac felly'n cynyddu faint o ocsigen sy'n mynd i'r cyhyrau.^{4,5} Mae llawer o gyffuriau dan drafodaeth ac yn cael eu monitro o flwyddyn i flwyddyn.⁶ Mae sawl ffordd y caiff profion cyffuriau eu cynnal: samplau plasma gwaed, samplau troeth a samplau gwallt. Caiff sbectrosgopeg yn aml ei defnyddio i ganfod pa gyffuriau sydd yn y samplau hyn neu mewn sylweddau anhysbys gaiff eu darganfod ym meddiant athletwr.

Senario

Mae'r Gemau Olympaidd wedi dechrau. Mae pum cystadleuydd wedi'u dal gyda phils heb label yn eu loceri. Mae Cymdeithas Profi Cyffuriau Gemau'r Olympaidd wedi eich cyflogi i ganfod beth sydd ym mhob pilsen a phenderfynu ydyn nhw'n anghyfreithlon yn y gystadleuaeth ai peidio. Mae'r pils wedi'u malu yn barod i'w dadansoddi.

Eich nod ydy canfod y grwpiau gweithredol sy'n bresennol ym mhob pilsen. Gan ddefnyddio rhestr o foleciwlau cyffuriau hysbys fe allwch chi gyfyngu eich dewisiadau a defnyddio llyfrgell o sbectra i adnabod y cyfansoddion yn y pils yn well. Fe allwch chi yna benderfynu a oes gan unrhyw un o'r pils bosiblirwydd o fod yn anghyfreithlon mewn chwaraeon.

DULL

1. Caiff pum pilsen anhysbys, un gan bob cystadleuydd, eu darparu a dylech gael sbectrwm IG ar gyfer pob sampl.
 - Defnyddiwch yr atodiad ATR i redeg y samplau.
 - Gwnewch yn siŵr eich bod dan oruchwyliaeth arddangoswr gan fod y peiriant yn ddrud ac yn frau.
2. Fel grŵp, gan ddefnyddio'r tabl cyfeirnod grŵp gweithredol sydd wedi'i ddarparu, canfyddwch pa grwpiau gweithredol sy'n bresennol ym mhob un o'r moleciwlau cyffuriau sydd wedi'u darparu ar y taflenni sydd wedi'u lamineiddio.
3. Dehonglwch eich sbectra a phenderfynwch ydy unrhyw grwpiau gweithredol pwysig yn ymddangos ac os ydy sbectra IG y pils yn gallu cyd-fynd ag unrhyw un o'r cyfansoddion ar y daflen waith cyffuriau.
4. Gan ddefnyddio'r llyfrgell IG sydd wedi'i darparu, penderfynwch ydy unrhyw un o sbectra'r moleciwlau cyffuriau yn cyd-fynd ag unrhyw un o'r cyfansoddion anhysbys.
 - Os ydy unrhyw un o'r cyfansoddion yn cyd-fynd ag unrhyw un o'r cyffuriau ar y daflen waith, ydych chi'n meddwl y gallan nhw fod yn anghyfreithlon mewn chwaraeon?

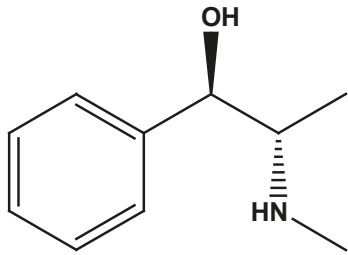
Cwestiynau

1. Os ydy unrhyw un o'r cyfansoddion yn cyd-fynd ag unrhyw un o'r cyffuriau ar y daflen waith, ydych chi'n meddwl y gallan nhw fod yn anghyfreithlon mewn chwaraeon?
 - *Cyffuriau sy'n anghyfreithlon mewn chwaraeon ar y daflen waith ydy: ephedrine (amffetamin), cocên (mwy o ymwybyddiaeth ayb), heroin (poenladdwr), morffin (poenladdwr) a thestosteron (mwy o fâs cyhyrol).*
 - *Cyffuriau sy'n cael eu monitro ac sydd wedi bod yn anghyfreithlon yn y gorffennol ydy: caffein (mwy o ymwybyddiaeth ac effeithiau poenladdwr) a pseudoephedrine (tebyg i ephedrine heb yr effeithiau, ond yn rhy debyg o ran adeiledd ar gyfer profion cynnar).*
 - *Mae'r cyffuriau eraill yn gyffuriau cyffredin y mae modd eu cael dros y cownter ac sydd ddim yn anghyfreithlon mewn unrhyw faint mewn chwaraeon.*
2. Pa ddulliau eraill neu dechnegau offerynnol y mae modd eu defnyddio i ganfod beth ydy'r pils? A fuasech chi'n ymddiried yng nghanlyniadau'r IG yn unig? Pam fuasech chi yn ymddiried/ddim yn ymddiried?
 - UF-gweladwy, CMN, SM ayb.
 - Dylech chi byth ymddiried mewn dim ond un prawf!
3. Mae testosterone/epitestosteron ac ephedrine / pseudoephedrine yn isomerau optegol. Sut fuasech chi'n gallu gwahaniaethu rhyngddynt nhw?
 - Mae profion arbennig fel deuliwedd cylchol sy'n seiliedig ar y gwahaniaeth ym mholaredd isomerau optegol.
 - Yn dechnegol mae rhanbarth ôl bys yr isomerau optegol yn wahanol ond dim ond sbectra o safon a rhaglen paru dda fyddai'n dangos hyn.

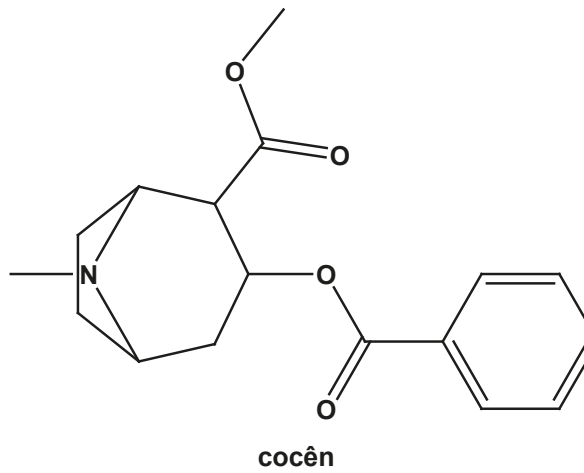
TAFLEN WAITH MYFYRIWR

SAMPL	GRŴP GWEITHREDOL	GWERTHOEDD BRIGAU PWYSIG (cm ⁻¹)	ENW'R CEMEGYN (gan ddefnyddio gwybodaeth ychwanegol)
Cystadleuydd 1			
Cystadleuydd 2			
Cystadleuydd 3			
Cystadleuydd 4			
Cystadleuydd 5			

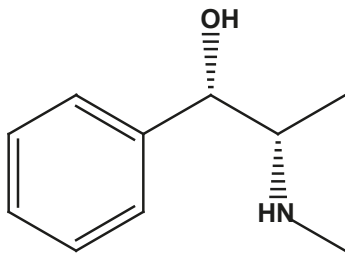
TAFLEN WAITH MYFYRIWR MOLECIWLAU CYFFURIAU



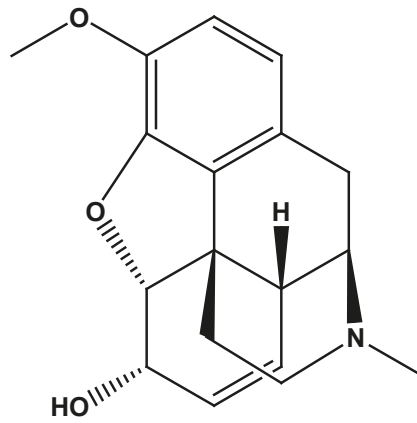
ephedrine



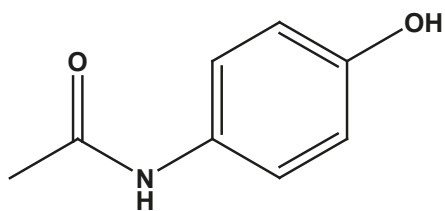
cocên



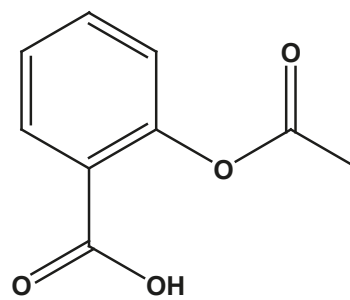
pseudoephedrine



codin

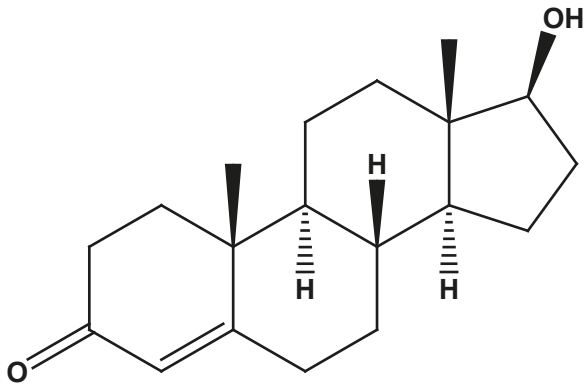


parasetamol

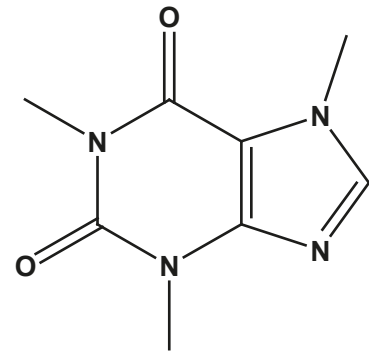


asbirin

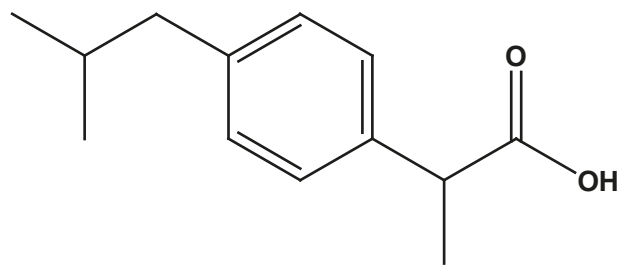
TAFLEN WAITH MYFYRIWR MOLECIWLAU CYFFURIAU



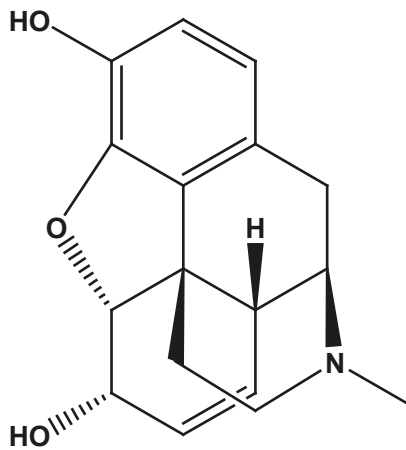
testosteron



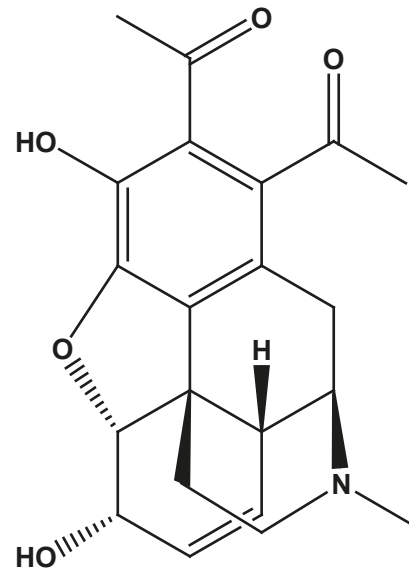
caffein



ibuprofen



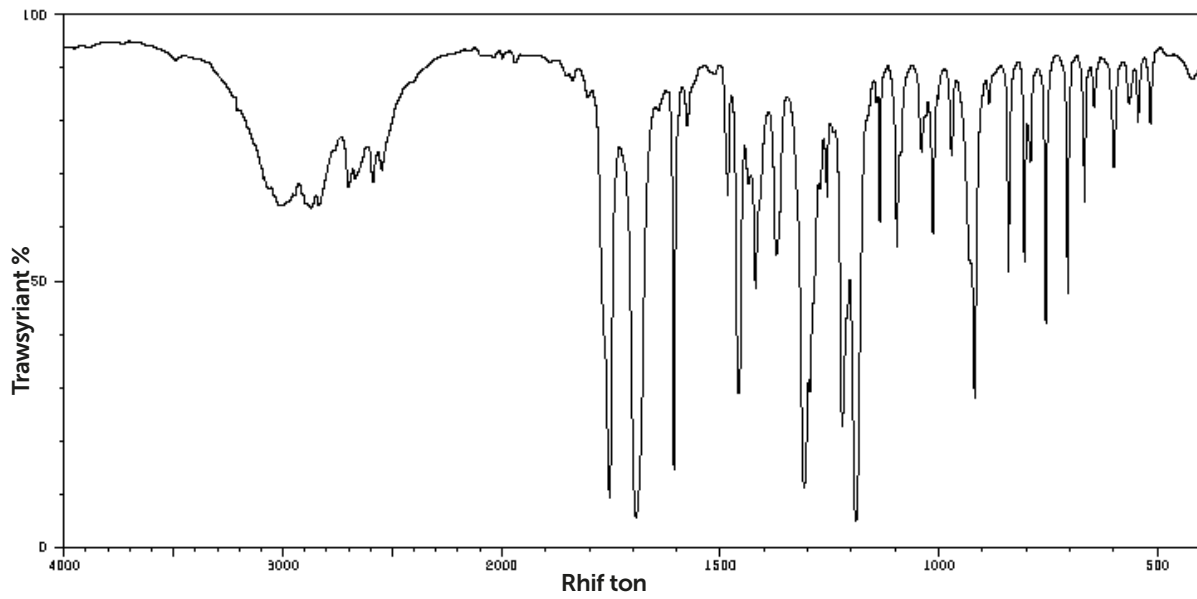
morffin



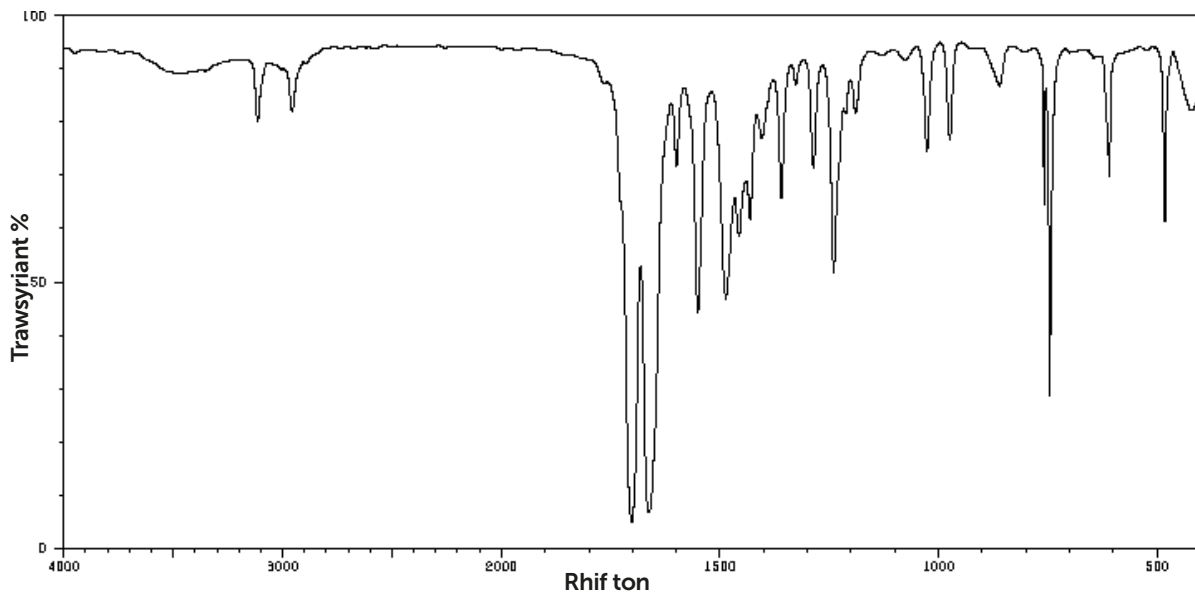
heroin

LLYFRGELL SBECTROL ISGOCH

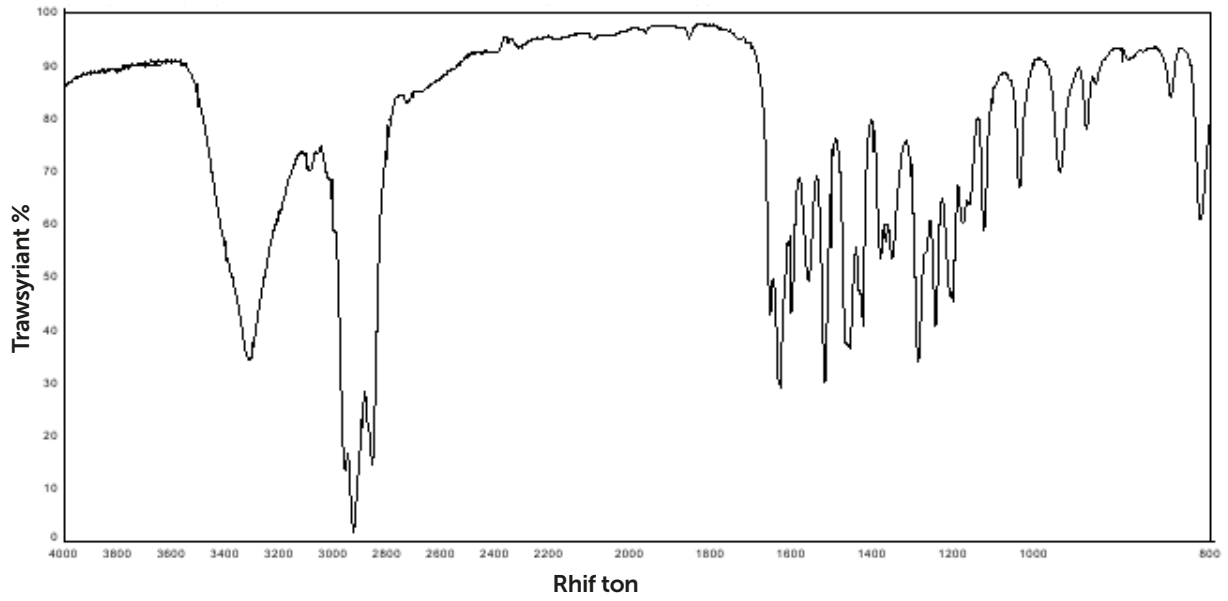
Asbirin⁷



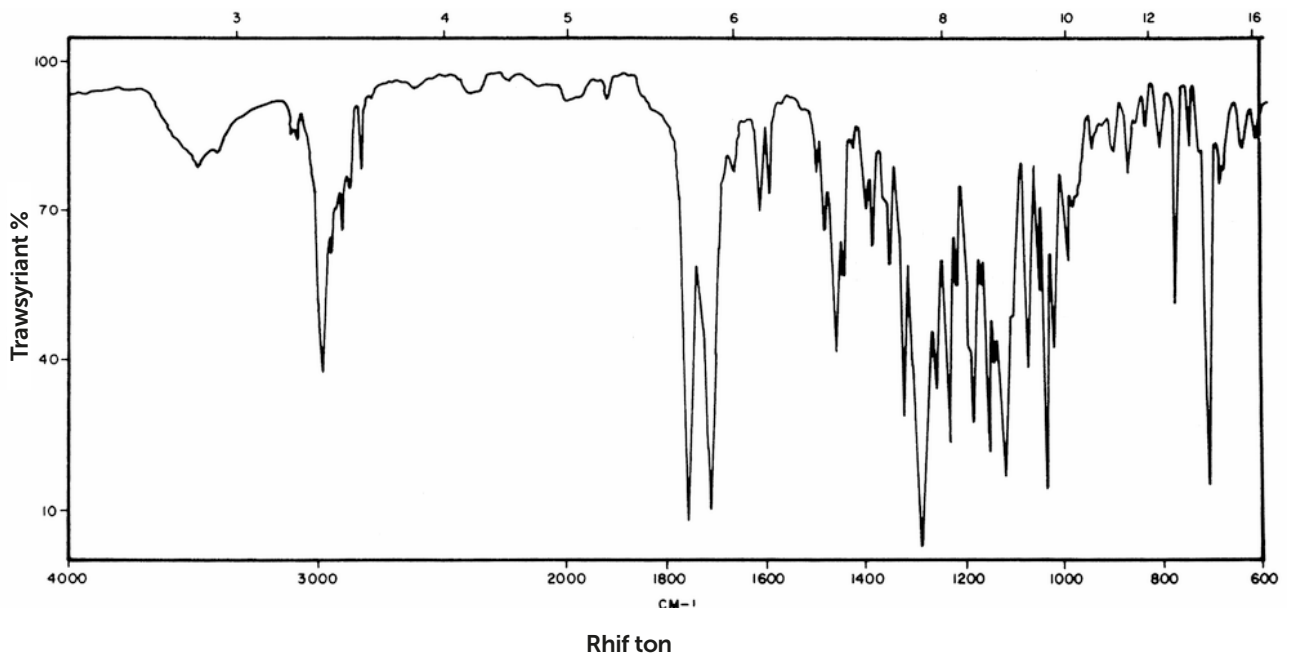
Caffein⁷



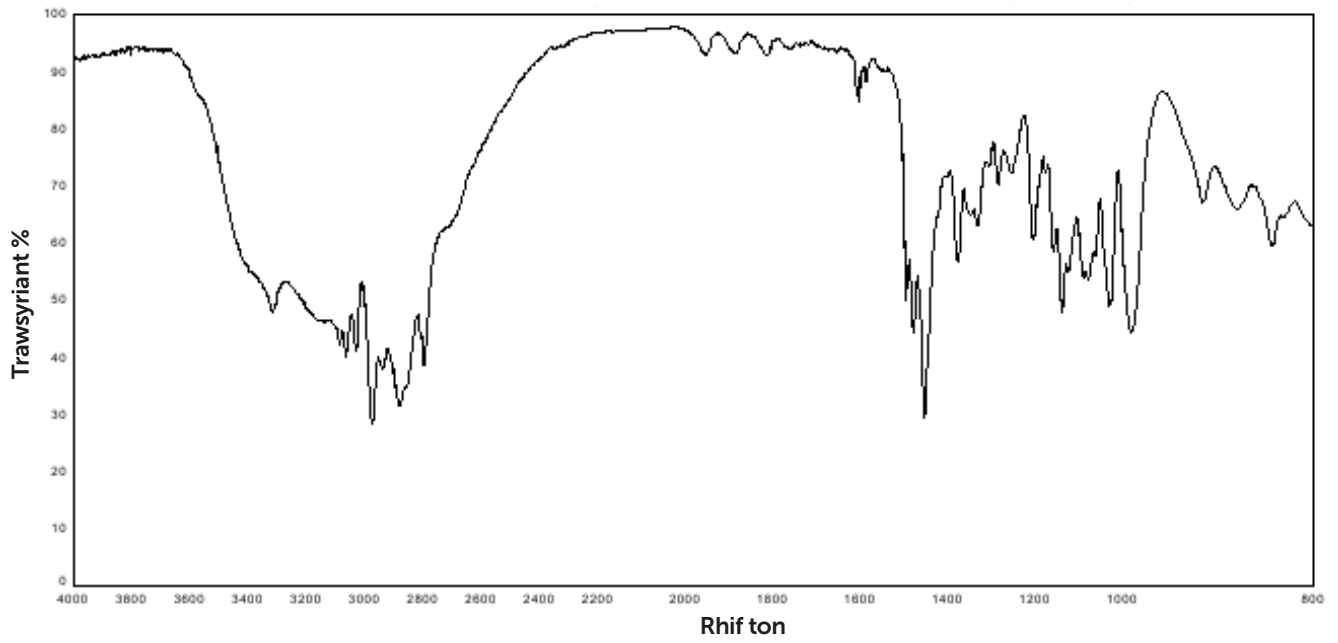
Capsaisin⁸



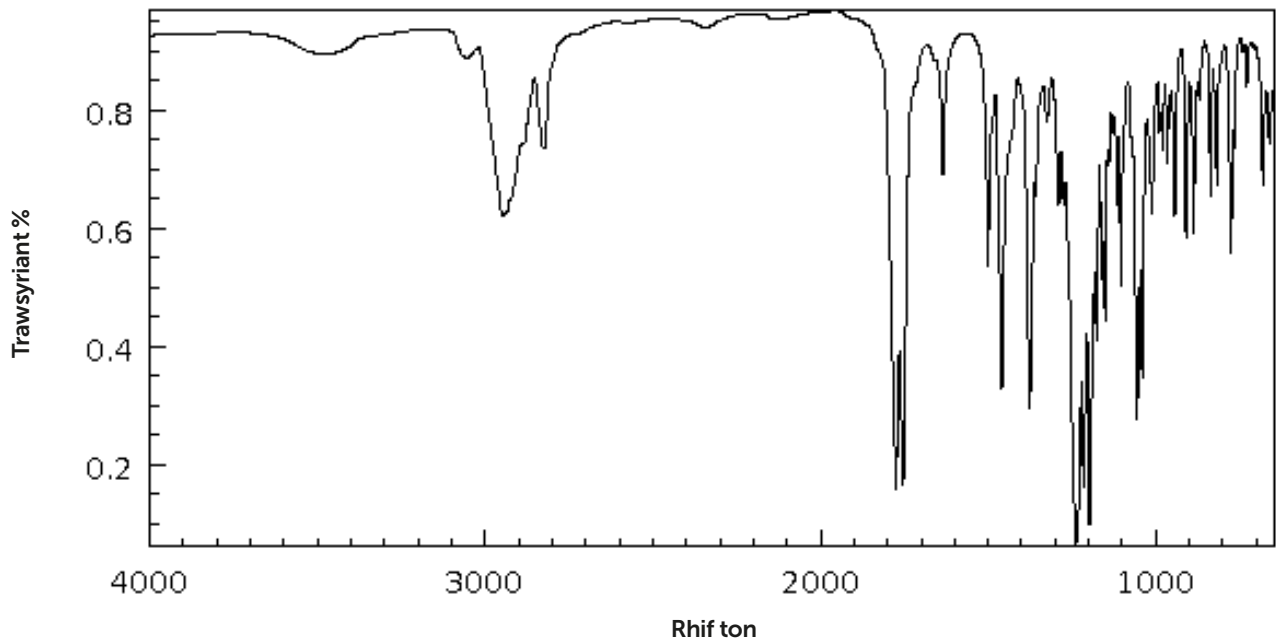
Cocên⁹



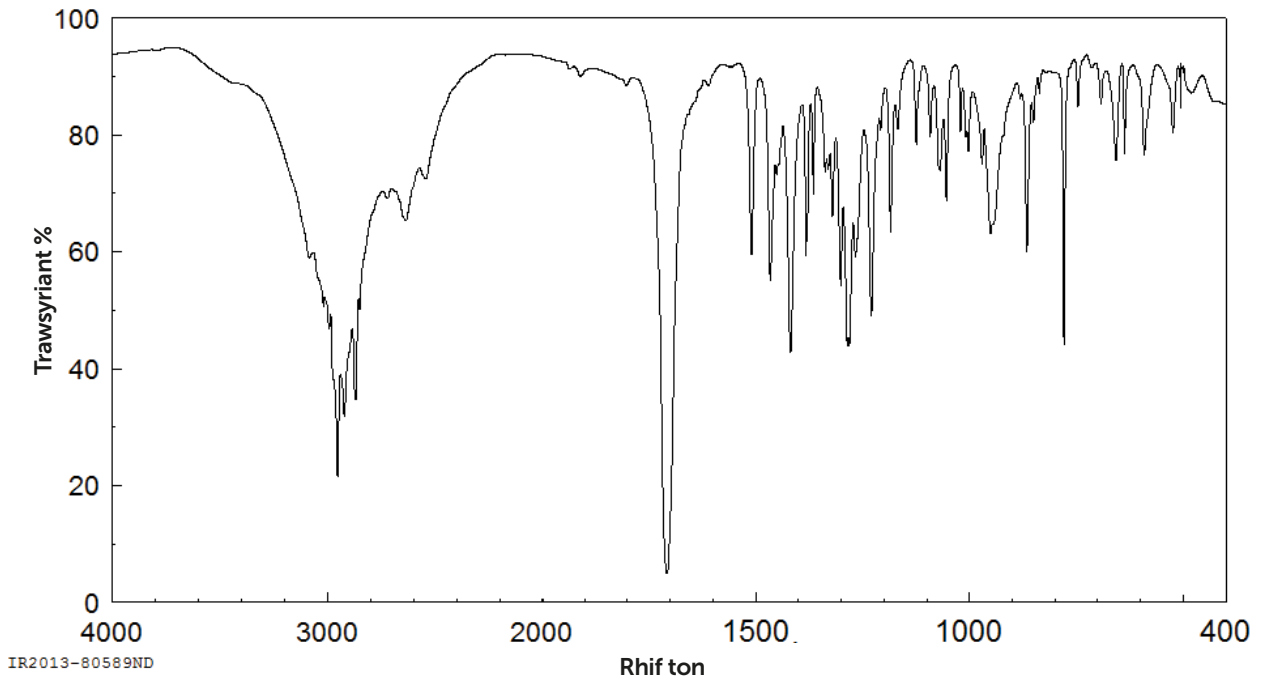
Ephedrine/Pseudoephedrine⁸



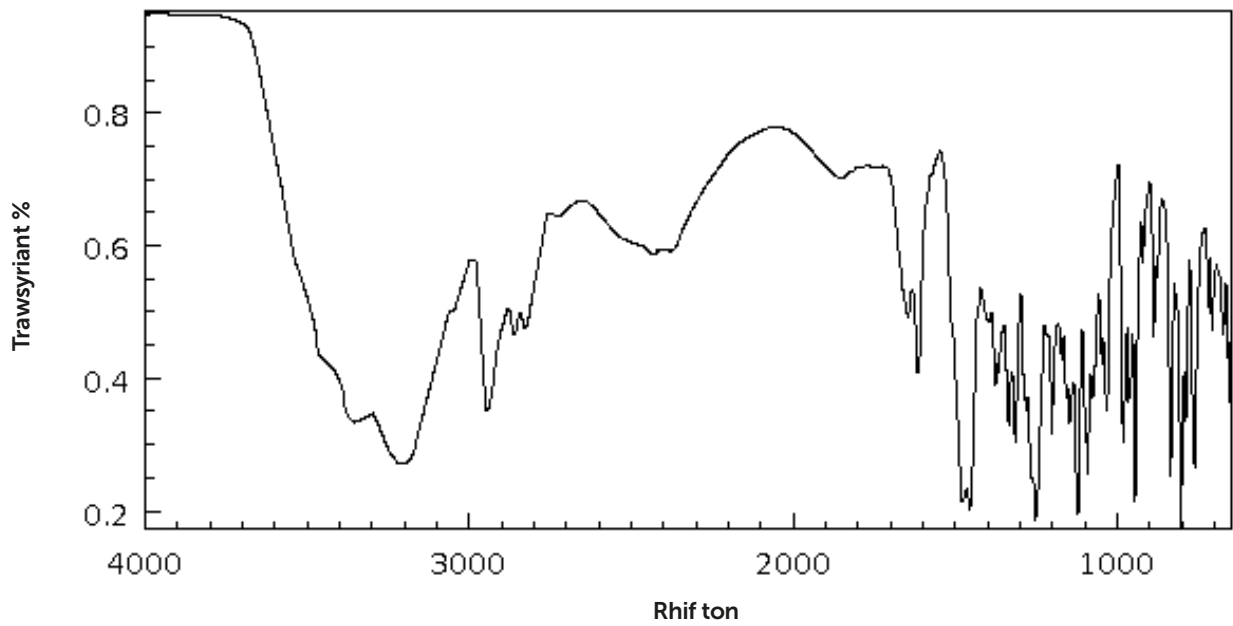
Heroin⁷



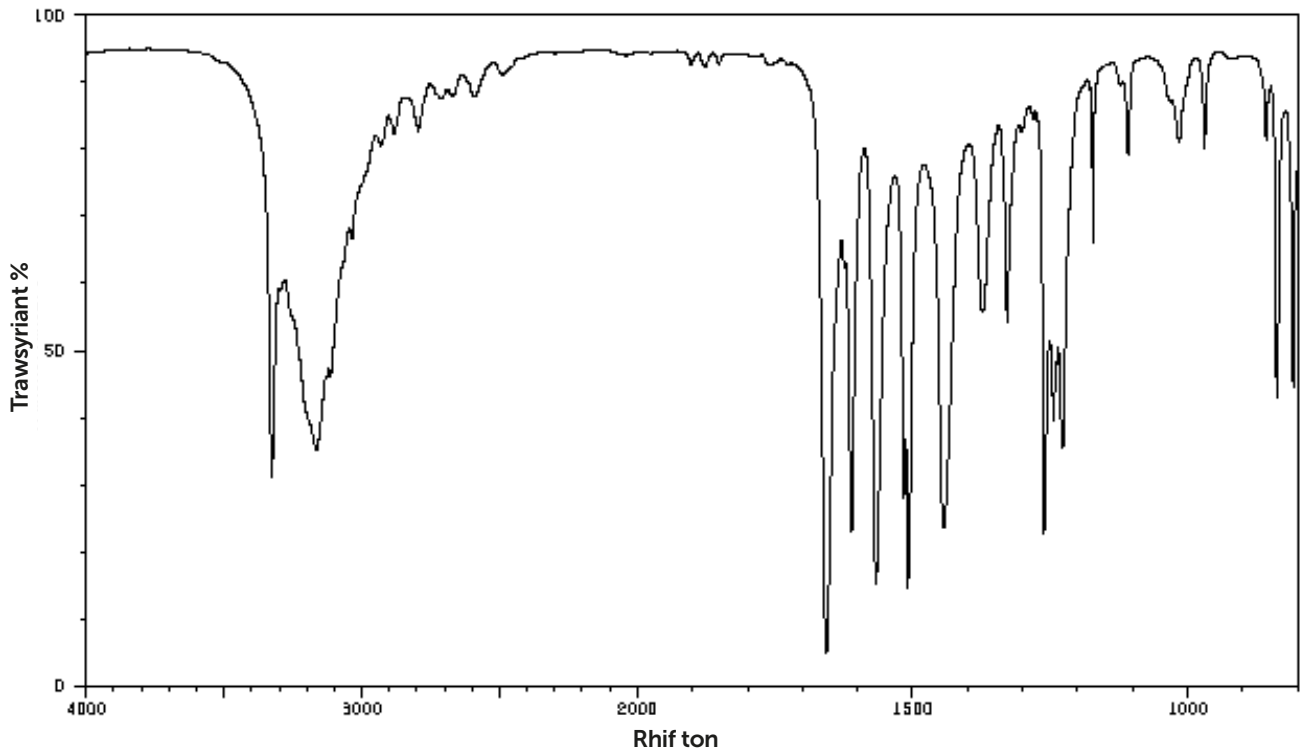
Ibuprofen⁷



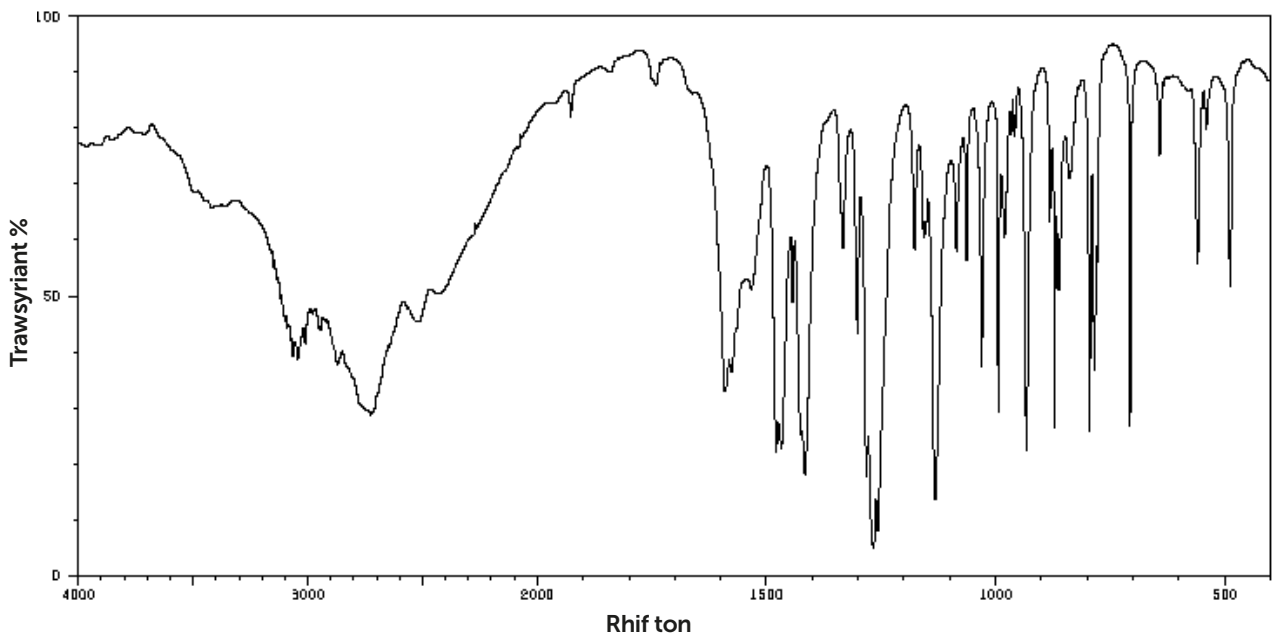
Morffin¹⁰



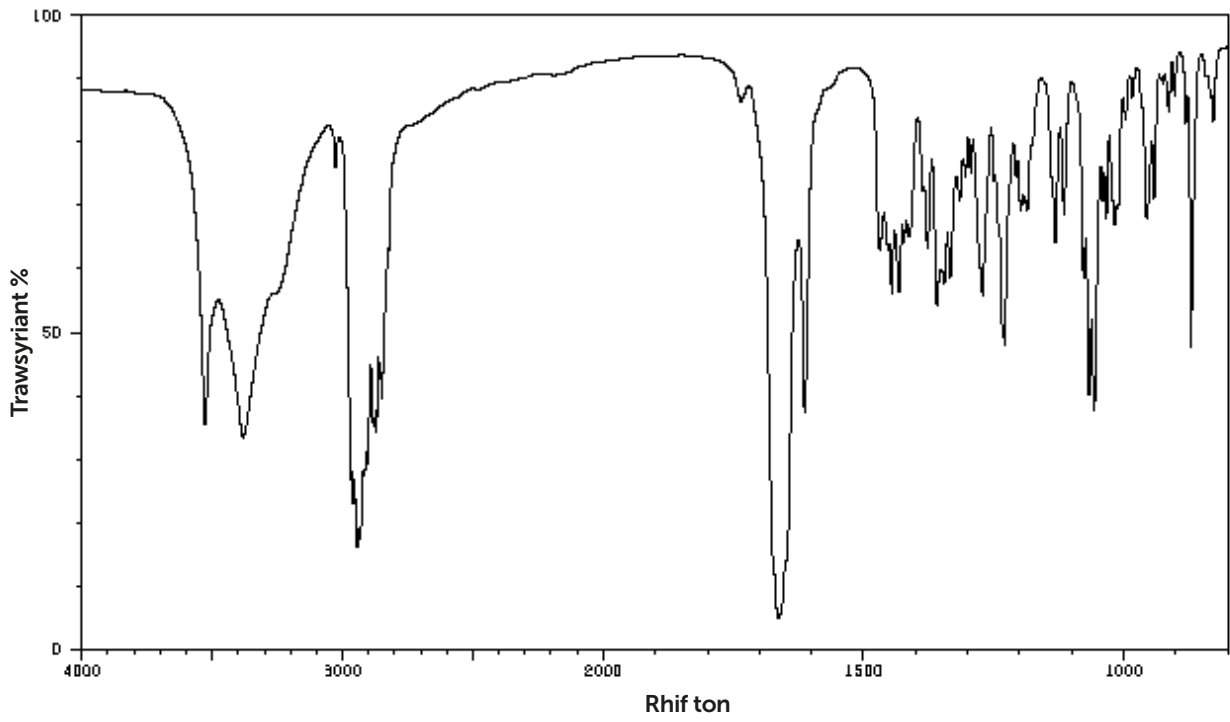
Parasetamol⁷



Phenylephrine⁷



Testosteron/epitestosteron⁷



CYFEIRIADAU

¹Savalescu, J., B. Foddy a M. Clayton. "Why we should allow performing enhancing drugs in sport." *British Journal of Sports Medicine*, 38, (2004), 666-670.

²Kelso, P. "London 2012 Olympics: British Olympic Association Calls for Stiffer Doping Sanctions." *The Telegraph*, 11 Ebrill 2012.

³MacMichael, S. "WADA president to urge re-banning of caffeine". *Road.cc*, 11 Awst 2010, road.cc/content/news/21341-wada-president-urgere-banning-caffeine
Defnyddiwyd ar 12 Medi 2016.

⁴Chwaraeon y BBC, "Olympic Horses Fail Drug Tests". *Chwaraeon y BBC*, 21 Awst 2008.

⁵Asiantaeth Ryngwladol i Atal Camddefnyddio Cyffuriau mewn Chwaraeon. "2012 Monitoring Programme", www.wada-ama.org/en/resources/science-medicine/monitoring-program
Defnyddiwyd ar 12 Medi 2016.

⁶Asiantaeth Ryngwladol i Atal Camddefnyddio Cyffuriau mewn Chwaraeon. "2012 Prohibited List", www.wada-ama.org/Documents/World_Antidoping_Program/WADP-Prohibited-list/2012/WADA_Prohibited_List_2012_EN.pdf
Defnyddiwyd ar 30 Ebrill 2012.

⁷Sbectra wedi'u cymryd o Spectral Database for Organic Compounds, SDBS. National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Japan.

⁸Sbectra wedi'u cymryd o gatalog ar-lein Sigma-Aldrich, www.sigmaaldrich.com/united-kingdom.html
Defnyddiwyd
ar 30 Ebrill, 2012

⁹John F. Casale, "A Practical Total Synthesis of Cocaine's Enantiomers". *Forensic Science International*, 33 (1987) 275-298.

¹⁰Sbectra wedi'u cymryd o National Institute of Standards and Technology, Gwelyfr Cemeg, webbook.nist.gov/chemistry
Defnyddiwyd ar 12 Medi 2016)



Cafodd y gweithgaredd hwn ei wneud fel rhan o Raglen Genedlaethol HE STEM, trwy'r South West Spoke. Am fwy o wybodaeth am brosiectau South West Spoke ewch i www.hestem-sw.org.uk. Am fwy o wybodaeth am y rhaglen genedlaethol ar y cyfan ewch i www.hestem.ac.uk.



Mae Sgandal Cyffuriau y Gemau Olympaidd ar gyfer IG - Ffynhonnell ar gyfer Sbectrosgopeg mewn Siwtces (Fersiwn Athro) gan Dr Gan Shermer ac Emily M MacCready yn drwyddedig dan Drwydded Cymru a Lloegr: **Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 2.0 UK** ac eithrio sbectra unigol yn y llyfrgell sbectrol isgoch. Mae'r gwaith hwn wedi'i gynllunio a'i ffurfio i gyd-fynd â ffynonellau presennol ar gyfer Sbectrosgopeg mewn Siwtces gan y Gymdeithas Gemeg Frenhinol.

