

OPGAVE 1

In een reageerbuis bevindt zich of hexaan of hex-1-een. Men wil met een reagens uitzoeken welke stof in de reageerbuis zit.

- 01 Welk reagens gebruikt men hiervoor en wat is dan de mogelijke waarneming?
- 02 Wat voor type reactie treedt er op.
- 03 Leg uit of met gebruikte reagens bij onderdeel 01 een onderscheid gemaakt kan worden tussen hex-1-een en hex-2-een.
- 04 Leg uit of je met behulp van massaspectrometrie een onderscheid kunt maken tussen hex-1-een en hex-2-een.
- 05 Leg uit of met het gebruikte reagens bij onderdeel 01 een onderscheid gemaakt kan worden tussen *trans*-hex-3-een en *cis*-hex-3-een.
- 06 Leg uit of je met behulp van massaspectrometrie een onderscheid kunt maken tussen *trans*-hex-3-een en *cis*-hex-3-een.

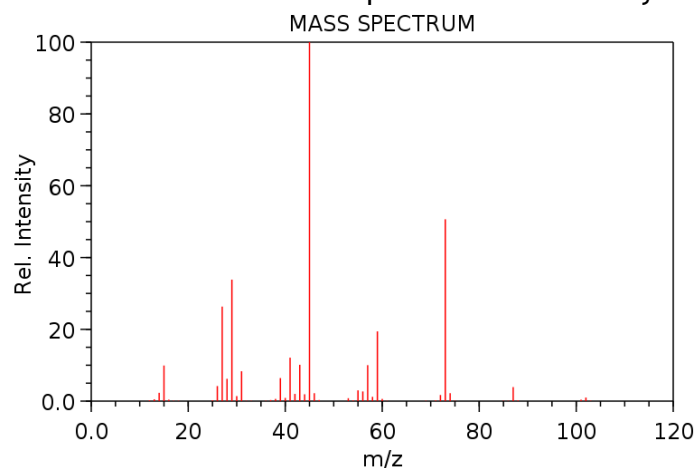
OPGAVE 2

In een massaspectrum van een stof werden brokstukken gevonden met $m/z = 15, 29$ en 45 .

- 07 Leg uit dat zowel ethoxyethaan als propaanzuur deze brokstukken kunnen geven.
- 08 Welke extra informatie is nodig om te bepalen van welke stof het massaspectrum is?
- 09 Welke pieken in een massaspectrum zeggen het meest over een stof: de pieken van brokstukken met een grote of juist met een kleine massa?

OPGAVE 3

Hieronder staat het massaspectrum van 2-ethoxybutaan.

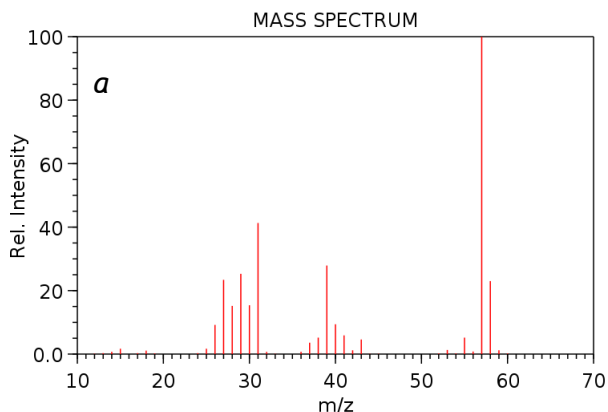


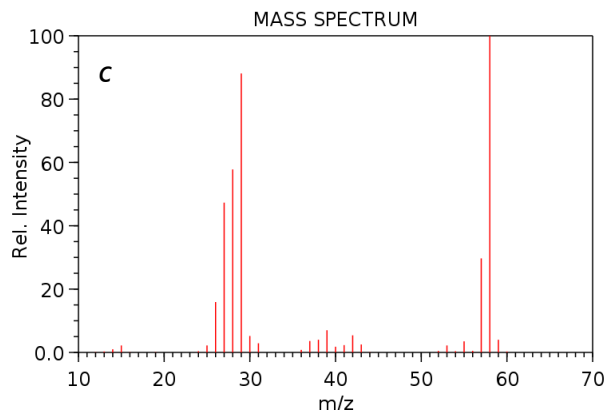
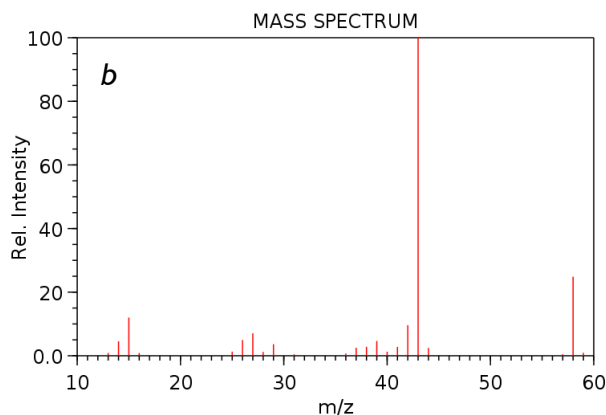
Er zijn onder meer pieken zichtbaar bij $m/z = 15, 29, 45, 57, 73$ en 87 .

- 10 Geef een verklaring voor elk van deze pieken.

OPGAVE 4

De stoffen propanon, propanal en prop-2-een-1-ol hebben dezelfde molecuulmassa. Hun massaspectrum is echter verschillend. Hiernaast en hieronder staan de drie massaspectra, aangeduid met *a*, *b* en *c*.

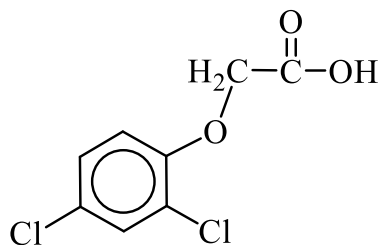




11 Leg uit welk massaspectrum bij welke stof hoort.

OPGAVE 5

Eén van de toepassingen van massaspectrometrie is het zoeken naar verboden stoffen bij doping of bij een milieuschandaal. Een veel gebruikt verdelingsmiddel is 2,4-dichloor-fenoxyethaanzuur. Deze stof is beter bekend onder de handelsnaam 2,4-D met de structuurformule:

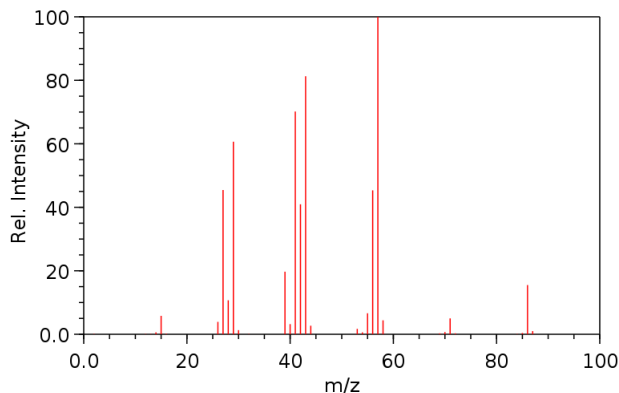
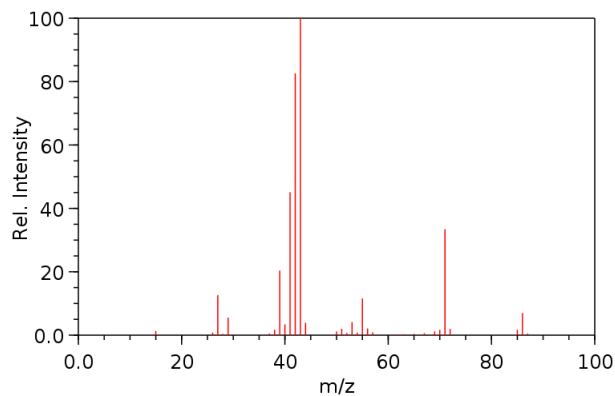


Dit verdelingsmiddel kan via regen- of grondwater in een sloot terechtkomen. Dat is met behulp van massaspectrometrie op te sporen. Het massaspectrum geeft dan pieken bij $m/z = 162$, 175 en 220 . Neem voor Cl uitsluitend de isotoop Cl-35.

12 Geef een verklaring voor de aanwezigheid van deze pieken in het massaspectrum.

OPGAVE 6

Hieronder staan de massaspectra van twee isomeren van een alkaan. Het ene alkaan is niet vertakt, het andere bevat op plaats 2 en 3 van de hoofdketen een methylgroep.



13 Leg uit wat de molecuulformule is van beide alkanen.

In beide spectra zijn pieken te zien bij $m/z = 29$, 43 , 57 en 71 .

14 Geef een verklaring voor het optreden van deze pieken.

Er is een opvallend verschil tussen beide massaspectra. Zo is de piek met $m/z = 57$ in het rechter spectrum veel intenser dan in het linker spectrum.

- 15 Geef een verklaring voor dit verschil en leg uit welk spectrum hoort bij het onvertakte alkaan.

OPGAVE 7

Er bestaan drie isomeren met de molecuulformule C_4H_8O , waarin een $C=O$ groep aanwezig is.

- 16 Geef de structuurformules en de namen van deze isomeren.

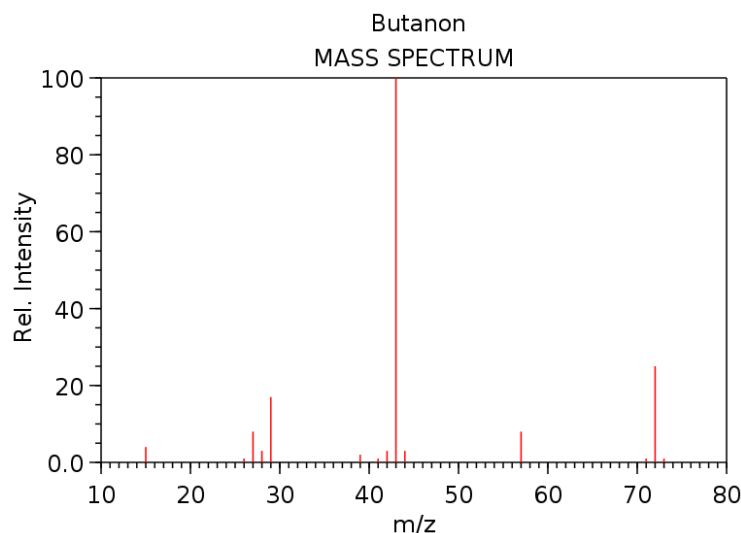
Leonie heeft een voorraadpot met één van deze isomeren. Met behulp van een massaspectrometer kan ze erachter komen welk isomeer ze in handen heeft.

- 17 Geef de ionisatie van C_4H_8O in molecuulformules weer.

Van de stoffen met een $C=O$ groep is bekend dat bij de fragmentatie van het molecuulion als eerste een binding naast de $C=O$ groep wordt verbroken. De $C=O$ groep bevat dan de positieve lading.

- 18 Teken van één van de isomeren die je bij onderdeel 16 hebt gegeven de mogelijk brokstukken die je dan krijgt. Geef ook de massa van dat brokstuk.

Hieronder staat het massaspectrum van de stof van Leonie:



De piek bij $m/z = 73$ duidt erop, dat in de moleculen van de stof isotopen ^{13}C aanwezig zijn.

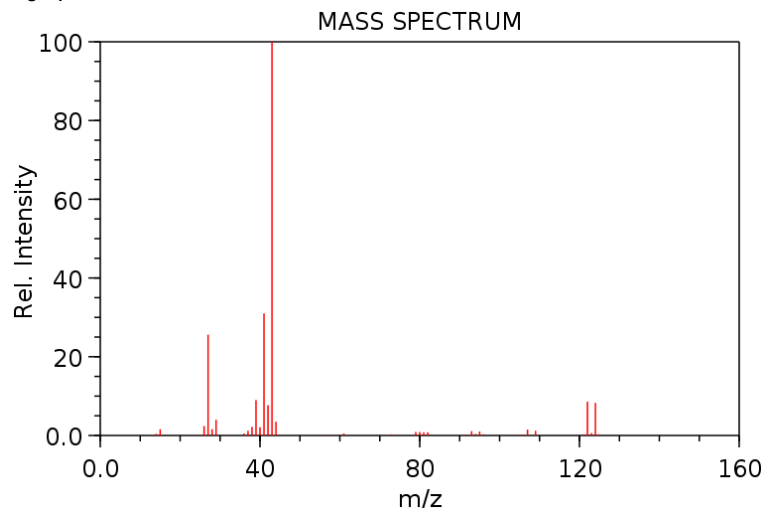
- 19 Leg dit uit.

Op grond van het massaspectrum trekt Leonie de conclusie dat de stof die zij in handen heeft butanon moet zijn.

- 20 Op grond waarvan kan Leonie deze conclusie trekken?

OPGAVE 8

In de onderstaande figuur staat het massaspectrum van een stof met de molecuulformule C_3H_7Br .



- 21 Geef de structuurformules van de twee isomeren met de formule C_3H_7Br .
22 Geef de ionisatievergelijking van C_3H_7Br .

In het spectrum tref je op verschillende plaatsen een piekenpaar met $m/z = M$ en $m/z = M + 2$ aan. Deze pieken hebben bijna dezelfde intensiteit. Voorbeelden daarvan zijn de piekenparen bij $m/z = 122, 124$; $79, 81$; $80, 82$.

- 23 Leg door gebruik te maken van tabel 25 van BINAS de aanwezigheid van zo'n piekenpaar uit en verklaar waarom deze pieken (vrijwel) dezelfde intensiteit hebben.
24 Welk deeltje heeft met het piekenpaar $80, 82$ te maken?
25 Leg uitgaande van de structuurformules uit welk deeltje verantwoordelijk is voor de basispiek met $m/z = 43$ u.

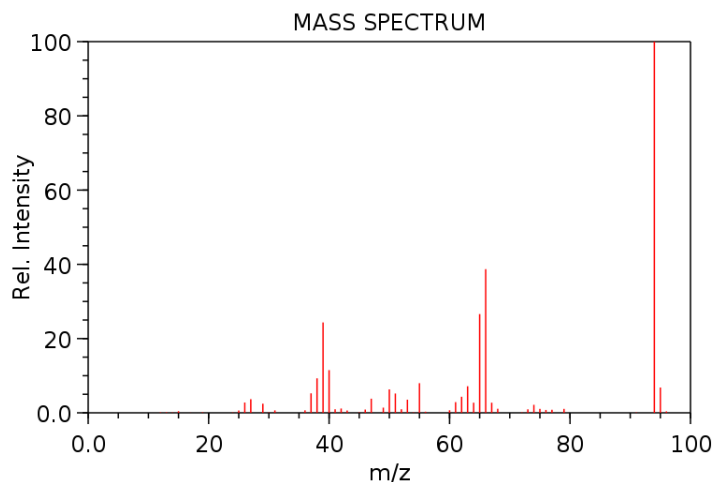
In het spectrum van deze isomeer is een (klein) piekje te zien bij $m/z = 29$. Dit piekje ontbreekt in het spectrum van het andere isomeer.

- 26 Leg uit van welk isomeer het massaspectrum in de opgave getoond is.

OPGAVE 9

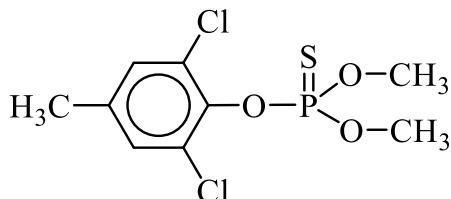
Hieronder staat een massaspectrum.

- 27 Bepaal of dit het spectrum is van een aromatische verbinding (a), een carbonzuur (b), fenol (c), benzeencarbonzuur (d).

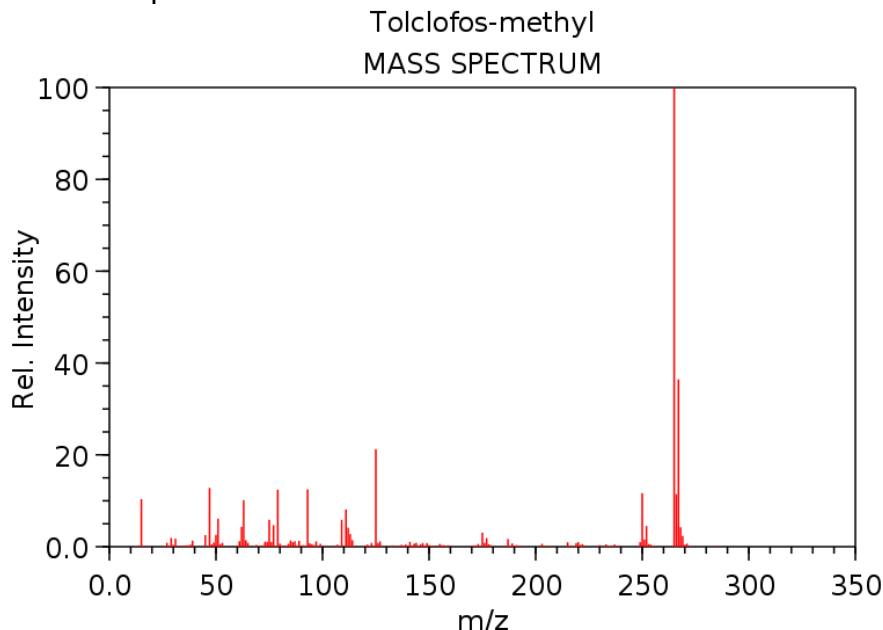


OPGAVE 10

Tolclofos-methyl is een fungicide dat bij koken van groenten zoals andijvie smaakafwijkingen veroorzaakt. De wettelijke norm voor sla is 1 mg per kg, voor radijs 0,1 mg per kg. De structuurformule van tolclofos-methyl is:



Het massaspectrum staat hieronder.



- 28 Laat met een berekening zien dat de molecuulpiek geheel ontbreekt.
29 Geef aan de hand van het spectrum aan dat het fragment met $m/z = 265$ slechts één chlooratoom bevat.
30 Leg uit welk molecuul is afgesplitst bij de vorming van het ion dat een signaal geeft bij $m/z = 250$.
31 Geef de formule van het deeltje dat een signaal kan geven bij $m/z = 175$.

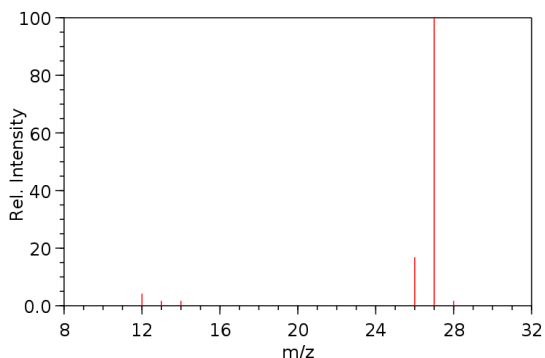
OPGAVE 11

Van waterstofcyanide (HCN) bestaat een isomeer met de naam waterstofisocyanide (HNC).

- 32 Teken van HCN en van HNC de Lewisstructuur. Geef waar nodig een formele lading aan.

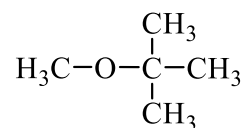
Hiernaast staat het massaspectrum van HCN. Hierin zijn zes pieken zichtbaar.

- 33 Verklaar de positie van alle zes pieken ($m/z = 12, 13, 14, 26, 27, 28$). Geef waar nodig ook verschillende mogelijkheden aan voor één piek.
34 Leg uit of het massaspectrum van HNC anders zal zijn dan dat van HCN.



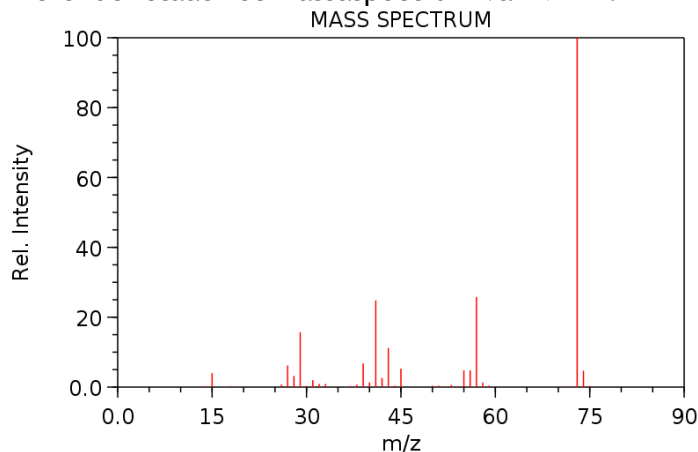
OPGAVE 12

MTBE is een stof die aan benzine wordt toegevoegd voor een betere verbranding (de klopvastheid wordt vergroot). MTBE staat voor Methyl Tertiaire Butyl Ether. Hiernaast staat de structuurformule:



- 35 Geef de systematische naam van MTBE.

Hieronder staat het massaspectrum van MTBE.



De meeste koolstofverbindingen verliezen 1 elektron onder de omstandigheden waarbij een massaspectrum wordt gemaakt. Hierbij ontstaat het zogenoemde molecuulair ion, dat vrijwel dezelfde massa heeft als het complete molecuul.

Vervolgens wordt het molecuulair ion verder afgebroken, waarbij ionen met een kleinere massa ontstaan. Een massaspectrometer kan deze ionen scheiden door gebruik te maken van de verschillen in de waarde van m/z (massa/lading) van deze ionen. Meestal zijn de ionen eenwaardig positief geladen, dus $z = 1$. Dan is $m/z = m$. In de rest van deze opdracht gebruiken we de term 'massa' voor de waarde van m/z .

- 36 Is er sprake van een molecuulair ion?
- 37 Er is een grote piek te zien bij massa 73. Leg uit hoe een brokstuk met deze massa kan ontstaan.
- 38 Verder zijn er pieken te zien bij massa 57, 43, 41, 29 en 15. De piek bij massa 57 is ontstaan doordat het MTBE-molecuul een brokstuk met massa 31 heeft verloren. Leg uit welk brokstuk dat geweest kan zijn.

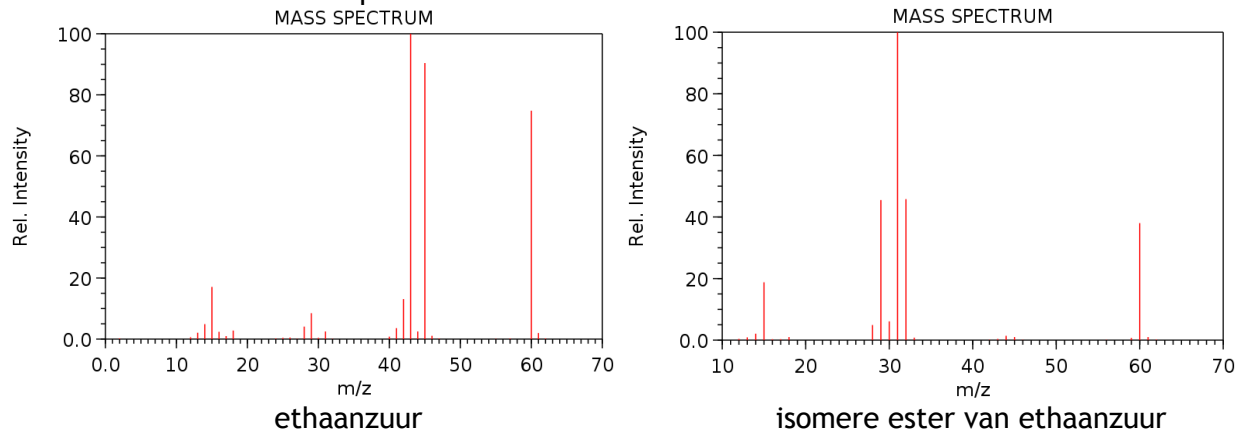
MTBE heeft de molecuulformule $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$. Dus is pentaan-1-ol een isomeer van MTBE. Er zijn nog meer isomeren. Bij een onderzoek blijkt dat een stof de molecuulformule $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$ heeft.

- 39 Geef de structuurformules en namen van alle isomere ethers en alcoholen met formule $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$. Laat hierbij spiegelbeeldisomeren achterwege.
- 40 Leg uit of je met behulp van spectra gemakkelijk kunt uitmaken om welk isomeer van $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$ het gaat.

Er zijn meer voorbeelden van isomerie. Zo zijn alkylalkanoaten (esters) isomeer met alkaanzuren.

- 41 Geef de structuurformule van ethaanzuur en van de isomere ester.
- 42 Geef van naam van deze ester.

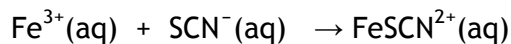
Hieronder staan de massaspectra van ethaanzuur en van de isomere ester van ethaanzuur.



- 43 Verklaar de pieken bij $m/z = 15$, 43 en 45 bij het spectrum van ethaanzuur.
 44 Verklaar de pieken bij $m/z = 29$ en 31 bij het spectrum van de isomere ester van ethaanzuur.

OPGAVE 13

Grondwater bevat zowel ionen Fe^{2+} als ionen Fe^{3+} . Bij de colorimetrische bepaling van het ijzergehalte in grondwater wordt gebruik gemaakt van het feit dat ijzer(III)ionen (ijzer(3+)-ionen) met thiocynaationen een rood gekleurd complex vormen:



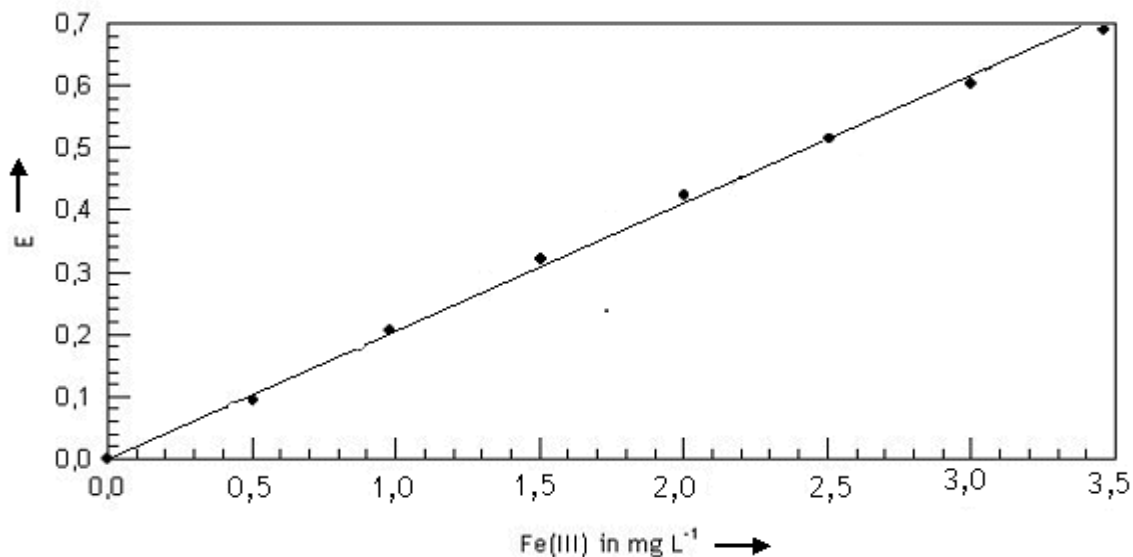
Om het totale ijzergehalte te kunnen bepalen, moet eerst het aanwezige Fe^{2+} worden omgezet in Fe^{3+} . Dit gebeurt door middel van een reactie met een aangezuurde H_2O_2 oplossing.

- 45 Geef hiervan de reactievergelijking.

Voor het verloop van de ijklijn wordt een standaardoplossing gebruikt die 5,0 mg Fe^{3+} per liter bevat. Er worden acht oplossingen bereid met achtereenvolgens 0, 1, ..., 7 mL van de standaardoplossing. Aan iedere oplossing wordt 1 mL 2 M KSCN-oplossing toegevoegd en vervolgens wordt met water aangevuld tot 10 mL.

- 46 Waarom wordt er ook een oplossing gemaakt met 0 mL van de standaardoplossing?

Dan worden de extincties gemeten en wordt de volgende ijklijn verkregen:



Van het te onderzoeken grondwater neemt men 25 mL. Hieraan wordt achtereenvolgens toegevoegd: 1 druppel 3% H_2O_2 -oplossing, 5 mL 2 M KSCN-oplossing en 10 mL 1 M HCl-oplossing. Tenslotte wordt met water aangevuld tot 50 mL oplossing. Van deze oplossing wordt de extinctie bepaald: $E = 0,14$.

- 47 Bij de metingen werd gebruik gemaakt van een blauw filter. Leg uit waarom men juist een blauw filter gebruikt en niet een rood filter.
- 48 Bereken de molaire extinctiecoëfficiënt, ϵ , als gegeven is dat de cuvetlengte 1,0 cm bedraagt.
- 49 Bereken het ijzergehalte in het grondwater in mol per liter op twee manieren:
I. met behulp van de wet van Lambert-Beer;
II. met behulp van de grafiek.

OPGAVE 14

De gaschromatografie kan behalve als scheidingsmethode ook gebruikt worden als analyse-methode. Hiertoe detecteert men de stoffen die achtereenvolgend uit de gaschromatograaf komen.

- 50 Noem een methode waarmee men de stoffen kan detecteren.
- 51 Op welke wijze kan men de stoffen identificeren?
- 52 Leg uit of men de gaschromatografie ook als kwantitatieve analysemethode zou kunnen gebruiken.

Als men nog geen zekerheid heeft omtrent de identiteit van een bepaalde stof, kan men een massaspectrometer koppelen aan de gaschromatograaf.

In een massaspectrometer worden de moleculen geïoniseerd en omgezet in brokstukken van verschillende massa. De brokstukken worden versneld en vervolgens in een magnetisch veld afgebogen en dan gedetecteerd.

- 53 Noem twee manieren om er voor te zorgen dat alle brokstukken gedetecteerd kunnen worden.

Van sommige brokstukken liggen de massa's dicht bij elkaar. Het hangt dan van het scheidend vermogen, R , van de massaspectrometer af of de brokstukken van elkaar kunnen worden onderscheiden. Het scheidend vermogen of resolutie is gedefinieerd als de nominale massa gedeeld door het verschil in massa. De nominale massa is de massa in u afgerond op een geheel getal.

In tabel 39D van BINAS staan voorbeelden van brokstukken met hun massa's. Bij de nominale massa 43 staan twee mogelijkheden vermeld: CH_3CO en C_3H_7 . De exacte massa's zijn te berekenen uit de volgende atoommassa's:

$\text{H} = 1,00813 \text{ u}$; $\text{C} = 12,00984 \text{ u}$; $\text{O} = 15,99899 \text{ u}$.

- 54 Bereken van het minimale scheidend vermogen, R , van een massaspectrometer moet zijn om de twee brokstukken CH_3CO en C_3H_7 van elkaar te kunnen onderscheiden.

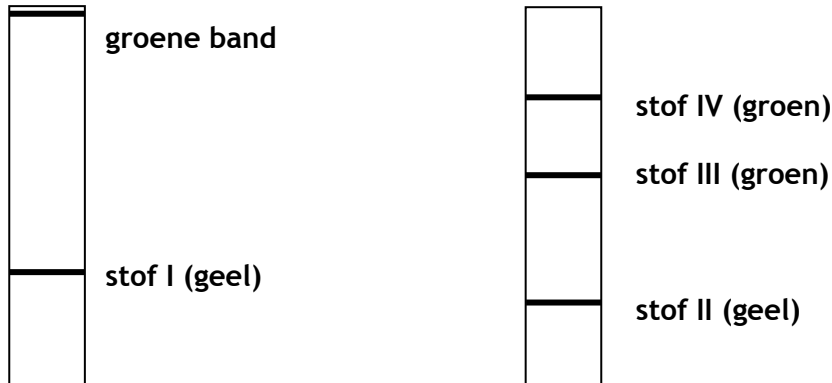
OPGAVE 15

De oudste toepassing van kolomchromatografie is de scheiding van kleurstoffen uit groene bladeren van planten. Hieronder volgt een beschrijving van zo'n scheiding:

- Van brandnetels wordt een extract gemaakt door gedroogde brandnetelbladeren in een mortier fijn te wrijven met aceton (CH_3COCH_3). Na filtreren laat men de aceton verdampen en blijft een groene vaste stof over. De groene vaste stof wordt vermengd met een klein beetje hexaan boven in de kolom gebracht.
- Als kolom wordt een suspensie van cellulose in hexaan gebruikt. Cellulose is een sterk polair adsorptiemiddel.

- De kolom wordt nu doorgespoeld met een mengsel van hexaan en aceton in de verhouding 12:1. Hexaan is apolair. Aceton is polair. Boven in de kolom blijft een groene band achter, een gele band (stof I) verplaatst zich naar beneden.
- Als stof I uit de kolom is gekomen, wordt verder gespoeld met een mengsel van hexaan en aceton in de verhouding 6:1. De groene band splitst zich in drie banden met verschillende loopsnelheid: eerst een gele band (stof II) en vervolgens twee groene banden (stoffen III en IV).

Hieronder is de kolom getekend tijdens het gebruik van de eerste spoelvloeistof en tijdens het gebruik van de tweede spoelvloeistof.



Brandnetels blijken de volgende vier kleurstoffen te bevatten:

- caroteen, een apolaire koolwaterstof met formule $C_{40}H_{56}$;
- chlorofyl-A en chlorofyl-B, twee sterk polaire stoffen. Het verschil in polariteit tussen chlorofyl-A en chlorofyl-B kun je afleiden met behulp van BINAS tabel 67 I;
- xanthogeen, een zwak polaire stof met formule $C_{40}H_{56}O_2$.

55 Geef aan welke stof bij elk van de nummers hoort. Doe dat als volgt:

Caroteen is stof
 Chlorofyl-A is stof
 Chlorofyl-B is stof
 Xanthogeen is stof

Licht je antwoord toe aan de hand van de polariteit van de stoffen die bij de scheiding een rol spelen.

Voor de verdeling van een stof X over stationaire en mobiele fase geldt de evenwichts-

voorwaarde $\frac{[X]_s}{[X]_m} = K_v$

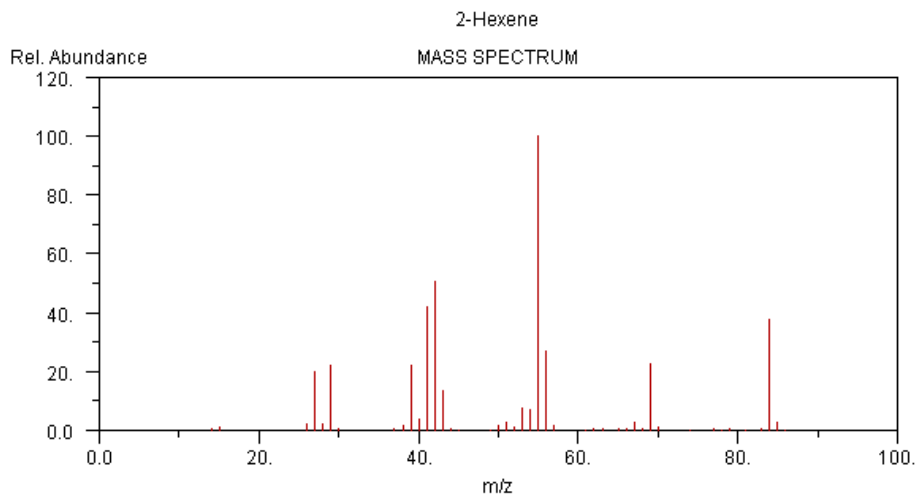
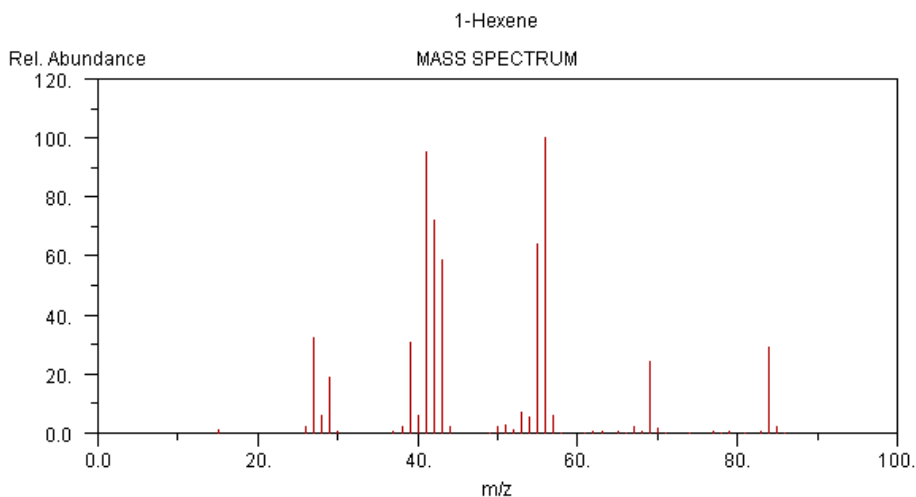
56 Leg uit welke van de vier stoffen uit het brandnetelextract de grootste K_v heeft.

57 Leg uit waarom de loopvloeistoffen in de aangegeven volgorde worden gebruikt.

UITWERKINGEN

OPGAVE 1

- 01 Broom of broomwater. Het zal ontkleuren bij hex-1-een.
- 02 Additiereactie.
- 03 Beide stoffen zullen op dezelfde wijze met broom reageren.
Dus is geen onderscheid mogelijk.
- 04 Er zullen verschillende brokstukken ontstaan, dus is wel onderscheid mogelijk.
Ter vergelijking staan hieronder beide massaspectra.



- 05 Beide stoffen zullen op dezelfde wijze met broom reageren.
Dus is geen onderscheid mogelijk.
- 06 Beide stoffen zullen brokstukken met dezelfde massa geven.
Dus is geen onderscheid mogelijk.

OPGAVE 2

- 07 Hieronder staan de structuurformules van ethoxyethaan en propaanzuur.



Een brokstuk met $m/z = 15$ ontstaat als CH_3^+ wordt afgesplitst. Dit kan bij beide moleculen.

Een brokstuk met $m/z = 29$ ontstaat als $\text{CH}_3\text{—CH}_2^+$ wordt afgesplitst. Dit kan bij beide moleculen.

Een brokstuk met $m/z = 45$ kan $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—O}^+$ zijn of HOOC^+ . Een brokstuk met $m/z = 45$ kan dus bij beide moleculen gevormd zijn.

- 08 Er zijn meer pieken te zien in de spectra. Daar moet de informatie vandaan komen. In het spectrum van propaanzuur zal bijvoorbeeld een piek bij $m/z = 57$ te zien zijn van het brokstuk dat ontstaat na afsplitsen van de OH-groep. Deze piek zal niet aanwezig zijn in het spectrum van ethoxyethaan.

- 09 Pieken met een kleine massa geven de meeste informatie over de *brokstukken*, want hierbij heb je het minste aantal mogelijkheden. Bijvoorbeeld: $m/z = 15$ betekent vrijwel altijd CH_3^+ , maar voor $m/z = 43$ heb je een keuze uit CH_3CO^+ en $\text{CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3^+$.

Pieken met een grote massa geven meer informatie over de *stof*, want hoe groter de massa, des te meer van de stof er in verwerkt zit.

Hier wordt het laatste bedoeld.

OPGAVE 3

- 10 Structuurformule: $\text{CH}_3\text{—}\overset{\text{O—CH}_2\text{—CH}_3}{\underset{|}{\text{CH}}}\text{—CH}_2\text{—CH}_3$ met molecuulmassa $M = 102$ u.

$m/z = 15 \rightarrow \text{CH}_3^+$

$m/z = 29 \rightarrow \text{CH}_2\text{—CH}_3^+$

$m/z = 45 \rightarrow \text{CH}_2\text{—CH}_3\text{—O}^+$

$m/z = 57 \rightarrow$ molecuulion zonder $\text{CH}_2\text{—CH}_3\text{—O}$ (dus $\text{CH}_3\text{—}^+\text{CH—CH}_2\text{—CH}_3$)

$m/z = 73 \rightarrow$ molecuulion zonder $\text{CH}_2\text{—CH}_3$ -groep (2 mogelijkheden)

$m/z = 87 \rightarrow$ molecuulion zonder CH_3 -groep (3 mogelijkheden)

OPGAVE 4

- 11 Kenmerkende pieken voor *b*: 43 ($= \text{CH}_3\text{CO}^+$) en 15 ($= \text{CH}_3^+$), dus propanon.

Kenmerkende piek voor *c*: 29 ($= \text{C}_2\text{H}_5^+$ en CHO^+), dus propanal.

Blijft voor *a* over: prop-2-een-1-ol. Dit wordt bevestigd door de piek van 57: het brokstuk dat overblijft als de H van de OH-groep er af is gegaan.

OPGAVE 5

- 12 Bedenk aan de hand van de structuurformule zelf de brokstukken en controleer of de massa hiervan overeenkomt met de gegeven m/z -waarden uit de opgave.

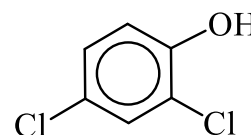
LET OP: in deze opgave wordt uitgegaan van de meest voorkomende isotoop van chloor, namelijk ^{35}Cl . Dit is van belang voor het bepalen van de *M*-piek.

Afgeronde molecuulmassa = 220 u ($\text{C}_8\text{H}_6\text{O}_3\text{Cl}_2$, dus $8 \times 12 + 6 \times 1 + 3 \times 16 + 2 \times 35$).

$m/z = 220$: *M*-piek

$m/z = 175$: Brokstuk dat overblijft als de COOH-groep ($m/z = 45$) er af gaat.

$m/z = 162$: Deze is lastiger te identificeren. Het verschil met $m/z = 175$ is 13. Kennelijk wordt er vanaf het brokstuk met $m/z = 175$ en CH_2 -groep ($m/z = 14$) afgesplitst en verhuist er nog een H naar het overgebleven brokstuk. Dus een gechloreerde benzeenring met een OH-groep:



OPGAVE 6

- 13 De *M*-piek is te zien bij $m/z = 86$. Beide alkanen hebben de molecuulformule C_6H_{14} .
- 14 $m/z = 29$ hoort bij $CH_3-CH_2^+$.
 $m/z = 43$ hoort bij $CH_3-CH_2-CH_2^+$.
 $m/z = 57$ hoort bij $CH_3-CH_2-CH_2-CH_2^+$ of bij $CH_3-\overset{\overset{CH_3}{|}}{CH}-CH_2^+$
 $m/z = 71$ hoort bij $CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2^+$ of bij $CH_3-\overset{\overset{CH_3}{|}}{CH}-CH_2-CH_2^+$ of bij $CH_3-CH_2-\overset{\overset{CH_3}{|}}{CH}-CH_2^+$
- 15 Uit de informatie aan het begin van de opgave is al bekend om welke isomeren het gaat. Namelijk hexaan en 2,3-dimethylbutaan.
Een hogere intensiteit betekent dat het betreffende brokstof vaker voorkomt. Dus dat hetzelfde brokstuk op verschillende manier uit het molecuul kan ontstaan. Bij hexaan kan het lineaire brokstuk met $m/z = 57$ op meer manieren ontstaan dan het vertakte brokstuk uit 2,3-dimethylbutaan. (Dus het rechter spectrum is van hexaan)

OPGAVE 7

- 16 $CH_3-CH_2-CH_2-\overset{\overset{O}{||}}{C}-H$ $CH_3-CH_2-\overset{\overset{O}{||}}{C}-CH_3$ $CH_3-\underset{\underset{CH_3}{|}}{CH}-\overset{\overset{O}{||}}{C}-H$
butanal butanon methylpropanal
- 17 $C_4H_8O + e^- \rightarrow C_4H_8O^+ + 2 e^-$
- 18 Brokstukken met daarin de $C=O$ -groep zal bij butanal en methylpropanal vooral $H-C=O^+$ zijn, dus $m/z = 29$ u. Voor butanon zijn dat de brokstukken:
 $C_2H_5-C=O^+$ met $m/z = 57$ u en $CH_3-C=O^+$ met $m/z = 43$ u.
- 19 De isotoop ^{13}C komt voor ongeveer 1% voor in de natuur (tabel 25). Er zullen dus nog meer van dit soort isotooppieken voorkomen in het massaspectrum, maar de intensiteit neemt af naarmate het brokstuk minder C-atomen bevat.
- 20 Pieken bij $m/z = 43$ u en 57 u zijn kenmerkend voor butanon. Zie bij onderdeel 18.

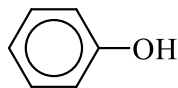
OPGAVE 8

- 21 $\begin{array}{c} H & H & Br \\ | & | & | \\ H-C & -C & -C-H \\ | & | & | \\ H & H & H \end{array}$ $\begin{array}{c} H & Br & H \\ | & | & | \\ H-C & -C & -C-H \\ | & | & | \\ H & H & H \end{array}$
1-broompropaan 2-broompropaan
- 22 $C_3H_7Br + e^- \rightarrow C_3H_7Br^+ + 2 e^-$
- 23 Het gaat om de twee isotopen van Br, die in ongeveer gelijke hoeveelheden voorkomen.
- 24 $H^{79}Br$ en $H^{81}Br$
- 25 Als van een isomeer (ongeacht welke) een Br wordt afgestoten, blijft het brokstuk $C_3H_7^+$ over en hiervoor geldt $m/z = 43$ u.
- 26 Het piekje bij $m/z = 29$ wijst op $C_2H_5^+$. Dit komt alleen voor bij 1-broompropaan.

OPGAVE 9

- 27 Volgens tabel 39D van BINAS zijn aromaten herkenbaar aan onder andere pieken bij $m/z = 39$, 51 en 65. Dit klopt met het gegeven massaspectrum.
Een carbonzuur moet een piek geven bij $m/z = 45$ (COOH^+). Dat is hier niet het geval.

Het gaat hier dus om het spectrum van fenol:



OPGAVE 10

- 28 Molecuulformule = $\text{C}_9\text{H}_{11}\text{Cl}_2\text{O}_3\text{PS}$.
Gemiddelde molecuulmassa = 301 en in dat gebied zijn geen pieken te zien.
LET OP: Houd rekening met de isotopen van chloor. De m/z -waarde van de M -piek wordt berekend met de isotoop ^{35}Cl : $m/z = 300$. Dan is er nog de $M+2$ en de $M+4$ piek. De intensiteit van de pieken (als ze aanwezig zouden zijn) verhouden zich als 9 : 6 : 1. Dit volgt uit de verhouding tussen beide chloorisotopen $^{35}\text{Cl} : ^{37}\text{Cl} = 3 : 1$.
- 29 $300 - 265 = 35$ en dat is de massa van ^{35}Cl .
- 30 $265 - 250 = 15$ en dit hoort bij CH_3^+ .
Het is dus een fragment waarbij, uitgaande van het gehele molecuul, één Cl-atoom en één CH_3 -groep ontbreekt. Er is dan netto CH_3Cl afgesplitst.
- 31 Verbreek de binding tussen (de linker) O en P.
Het linker gedeelte (benzeenring inclusief methylgroep, beide Cl-atomen en O-atoom) heeft een massa van 175 u.

OPGAVE 11

- 32 $\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}:$ $\text{H}-\overset{\oplus}{\text{N}}\equiv\overset{\ominus}{\text{C}}:$
- 33 $m/z = 12 \rightarrow \text{C}^+$
 $m/z = 13 \rightarrow \text{HC}^+$ of $^{13}\text{C}^+$
 $m/z = 14 \rightarrow \text{N}^+$ of H^{13}C^+
 $m/z = 26 \rightarrow \text{CN}^+$
 $m/z = 27 \rightarrow \text{HCN}^+$ of HNC^+ of $^{13}\text{CN}^+$
 $m/z = 28 \rightarrow \text{H}^{13}\text{CN}^+$ of HN^{13}C^+
- 34 Als er geen sprake is van verplaatsing van atomen, is bij HNC ook het brokstuk HN^+ mogelijk met $m/z = 15$. Over de hoogte van de pieken kan niets gezegd worden.

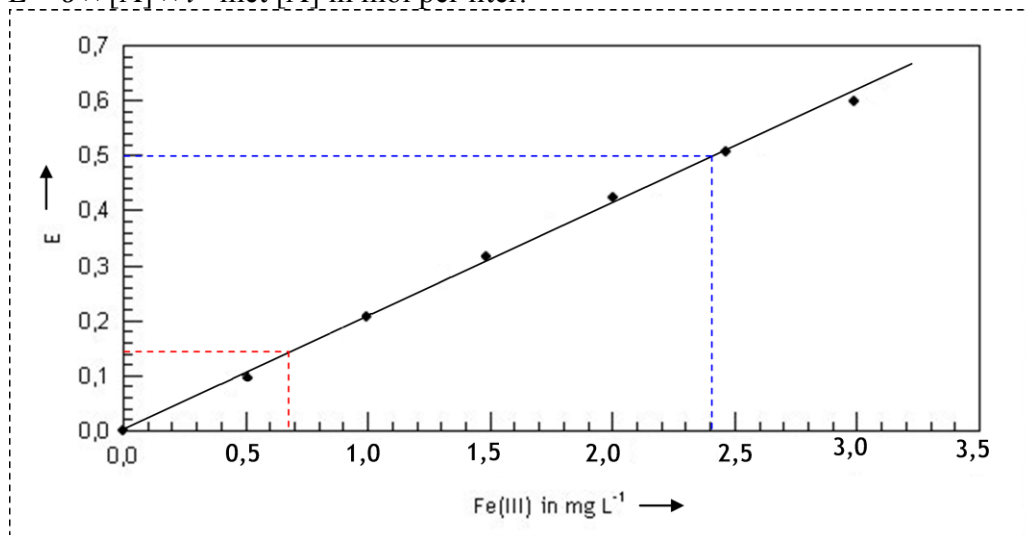
OPGAVE 12

- 35 2-methoxy-2-methylpropaan
- 36 De molecuulmassa van MTBE is 88,15 u. Deze piek is niet terug te vinden in het massaspectrum, dus is er geen sprake van een moleculair ion.
- 37 Het verschil tussen 88 en 73 is 15. Dit hoort bij een methylgroep (CH_3). Voor het brokstuk bij massa 73 zijn dus twee mogelijkheden:
 $\text{C}_4\text{H}_9\text{-O}^\oplus$ en $\text{CH}_3\text{-O-C}_3\text{H}_6^\oplus$.
- 38 De oneven massa duidt in ieder geval op een brokstuk met een CH_3 -groep van 15.
Aangevuld met O (16) kom je op 31. Het gaat dus om het brokstuk $^+\text{O-CH}_3$.

- 39 De namen van de alcoholen zijn: pentaan-1-ol, pentaan-2-ol, pentaan-3-ol, 2-methylbutaan-1-ol, 2-methylbutaan-2-ol, 3-methylbutaan-1-ol, 3-methylbutaan-2-ol, dimethylpropaan-1-ol.
De namen van de ethers zijn: 1-methoxybutaan, 2-methoxybutaan, 1-ethoxypropaan, 2-ethoxypropaan, 1-methoxymethylpropaan, 2-methoxymethylpropaan.
- 40 Een onderscheid tussen een alcohol en een ether is snel gemaakt met de spectra. De alcoholen en ethers onderling zijn wel te onderscheiden met de spectra, maar niet gemakkelijk. Er zijn te veel pieken die op elkaar lijken.
- 41 $\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH}$ en $\text{H}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_3$
- 42 Methylmethanoaat.
- 43 15: CH_3
43: $\text{CH}_3-\text{C}=\text{O}$
45: COOH
- 44 29: $\text{HC}=\text{O}$
31: $\text{O}-\text{CH}_3$

OPGAVE 13

- 45 $2 \text{Fe}^{2+}(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}_2(\text{aq}) + 2 \text{H}^+(\text{aq}) \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O}(\text{l}) + 2 \text{Fe}^{3+}(\text{aq})$
- 46 Dit is de blankobepaling van welke de extinctie op 0 wordt gesteld.
- 47 Het gaat erom dat de licht geabsorbeerd (uitgedoofd) wordt. Dit lukt het beste met blauw licht. Dit kan het minst goed doorgelaten worden door een roodgekleurde oplossing.
- 48 $E = \varepsilon \times [A] \times l$ met $[A]$ in mol per liter.



Bij een extinctie van 0,50 kun je een ijzergehalte van $2,41 \text{ mg L}^{-1}$ aflezen. Dit komt overeen met

$$\frac{2,41 \text{ mg L}^{-1}}{55,85 \cdot 10^3 \text{ mg mol}^{-1}} = 4,3 \cdot 10^{-5} \text{ mol L}^{-1} = [A].$$

$$\varepsilon = \frac{0,50}{4,3 \cdot 10^{-5} \text{ mol L}^{-1} \times 1 \text{ cm}} = 1,2 \cdot 10^4 \text{ L mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

- 49 I. $0,14 = 1,2 \cdot 10^4 \times [A] \times 1,00 \rightarrow [A] = 1,2 \cdot 10^{-5} \text{ M}$.
De oplossing werd verdund van 25 naar 50 mL, dus $[\text{Fe}^{3+}] = 2 \times 1,2 \cdot 10^{-5} = 2,4 \cdot 10^{-5} \text{ M}$.
- II. Aflezen bij $E = 0,14$: $\text{Fe(III)} = 0,68 \text{ mg L}^{-1}$,

$$\text{dus } [\text{Fe}^{3+}] = \frac{0,68 \text{ mg L}^{-1}}{55,85 \cdot 10^3 \text{ mg mol}^{-1}} \times 2 = 2,4 \cdot 10^{-5} \text{ M}.$$

OPGAVE 14

- 50 Vlamdetectie.
- 51 Op grond van hun retentietijd (want dit is een stofeigenschap).
- 52 Oppervlak onder de piek is een maat voor de hoeveelheid, dus ja.
- 53 Initiële snelheid veranderen;
Sterkte van magneetveld veranderen.
- 54 $\text{CH}_3\text{CO} = 43,04306 \quad \Delta m = 0,04337 \rightarrow R = \frac{43}{0,04337} = 991.$
 $\text{C}_3\text{H}_7 = 43,08643$

OPGAVE 15

- 55 Caroteen is stof I
Xanthogeen is stof II
Chlorofyl-A is stof III
Chlorofyl-B is stof IV
De eerste stof die door de kolom loopt is de meest apolaire, caroteen, want de loopvloeistof is minder polair dan de kolom. De volgende stof is het iets polaire xanthogeen. De twee groene banden zijn van de polaire chlorofyllen. Chlorofyl-B is het meest polair en komt het laatst.
- 56 $K_v = \frac{[X]_s}{[X]_m}$ is het grootst voor de stof die het sterkst aan de stationaire fase hecht en het minst in de mobiele fase oplost, dus chlorofyl-B.
- 57 Het eerste mengsel dat als loopvloeistof gebruikt wordt is nagenoeg apolair. Hierdoor wordt in eerste instantie het apolaire caroteen uit het mengsel geëxtraheerd. Door de andere verhouding tussen hexaan en aceton wordt de loopvloeistof meer polair, zodat het verschil met de stationaire fase steeds kleiner wordt. Polaire stoffen die eerst goed aan de stationaire fase hechten lossen dan langzamerhand op, zodat ook deze gescheiden kunnen worden.