**Oefenopgaven VWO** [**massaspectrometrie**](https://www.youtube.com/watch?v=idEUlE_SRDA)

**Opgave 1**

Sjakie heeft een potje met daarin 2-broomhex-1-een of broomcyclohexaan.

Hij wil met massaspectrometrie uitzoeken welke van deze twee stoffen hij heeft. Hij detecteert alleen deeltjes met een lading van 1+.

1. Welke piek heeft de grootste m/z-waarde in de spectra van deze beide stoffen?
2. Wat is de verhouding tussen de hoogte van de twee pieken in het spectrum met de hoogste twee m/z-waarden?
3. Noem drie m/z-waarden waarbij wel een piek te zien is bij 2-broomhex-1-een en niet bij broomcyclohexaan.
4. Noem een veel eenvoudigere proef waarmee hij kan uitzoeken welke van deze twee stoffen hij heeft.

**Opgave 2**

Stel je wilt mbv massaspectrometrie onderscheid maken tussen butanal en butanon.

1. Leg uit waarom de piek met m/z=29 geen informatie geeft over met welke van deze twee stoffen je te maken hebt.
2. Leg uit waarom de piek met m/z=43 geen informatie geeft over met welke van deze twee stoffen je te maken hebt.

**Opgave 3** (vwo examen 2008)

Het water van de Dode Zee bevat vele opgeloste zouten waaronder bromiden.

Door dit water onder invloed van de zon gedeeltelijk te laten verdampen wordt

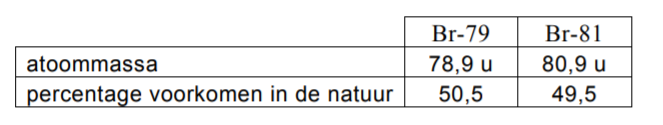
de bromide-concentratie groter en uiteindelijk hoog genoeg om broom te gaan

produceren. Dit gebeurt door chloor toe te voegen aan de oplossing die is

overgebleven nadat een deel van het water is verdampt.

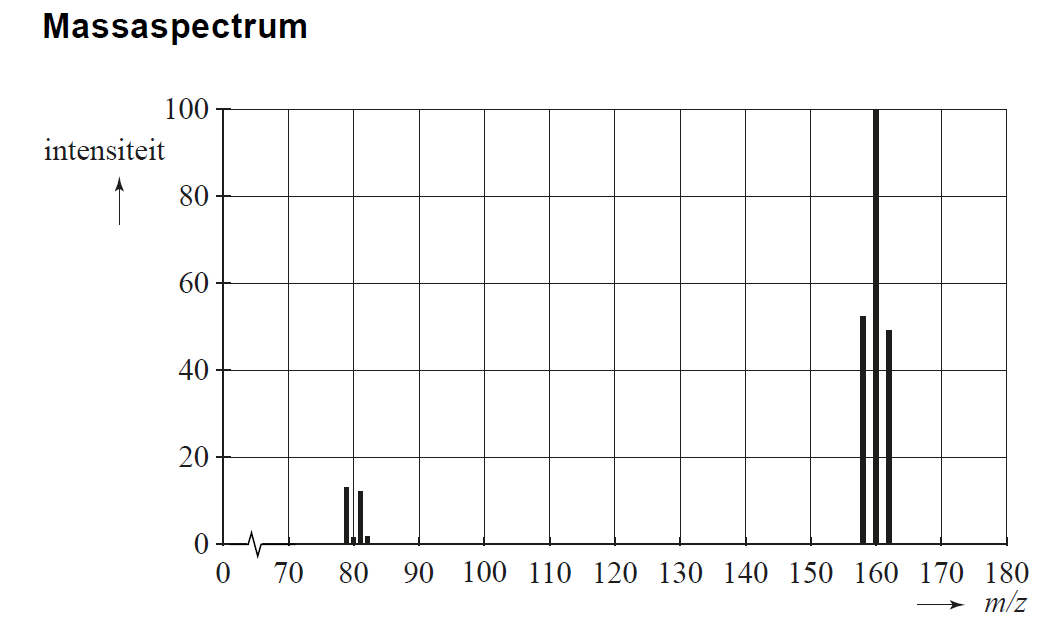
Het gevormde broom bestaat uit de isotopen Br-79 en Br-81. Het wordt wel

‘natuurlijk’ broom genoemd.



Natuurlijk broom dat op bovenstaande wijze is bereid, is altijd verontreinigd met wat waterstofbromide.

**a** Leg uit hoe uit het onderstaande massaspectrum blijkt dat natuurlijk broom is verontreinigd met waterstofbromide.



In een laboratorium wil men 50 mg 81Br2 bereiden. 81Br2 is broom waarvan de

moleculen uitsluitend de isotoop Br-81 bevatten. Men gaat daarbij uit van K81Br,

kaliumbromide met uitsluitend de isotoop Br-81.

**b** Bereken hoeveel mg K81Br minimaal nodig is om 50 mg 81Br2 te verkrijgen.

De leverancier van het K81Br beweert dat van al het bromide dat in het

kaliumbromide aanwezig is, minstens 99,0% Br-81 is en dus dat Br-79 voor

1,0% of minder aanwezig is. Om dit te controleren wordt met een zeer kleine

hoeveelheid van het gevormde broom een massaspectrum opgenomen. De

hoogte van de piek bij *m/z* = 162 wordt vergeleken met de hoogte van de piek bij

*m/z* = 160. De verhouding tussen deze piekhoogten blijkt 100,0 **:** 4,1 te zijn. De

hoogte van de piek die bij *m/z* = 158 ligt, is zo gering dat hij door de

massaspectrometer niet meer wordt gemeten.

Bij massaspectrometrie is de piekhoogte recht evenredig met de hoeveelheid

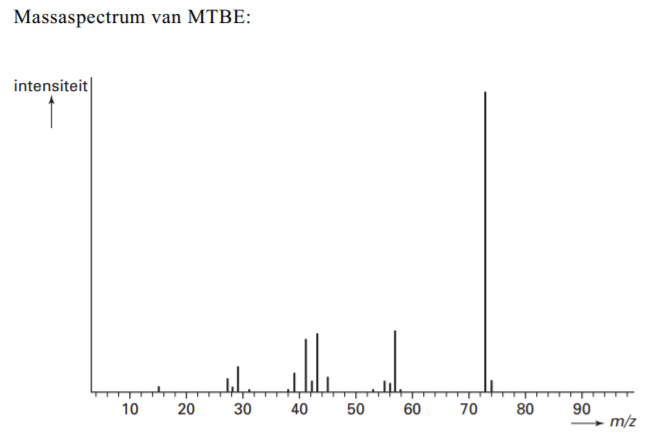
van het betreffende deeltje.

**c** Ga na of de bewering van de leverancier klopt dat het gehalte Br-81 in het

geleverde kaliumbromide minstens 99,0% is.

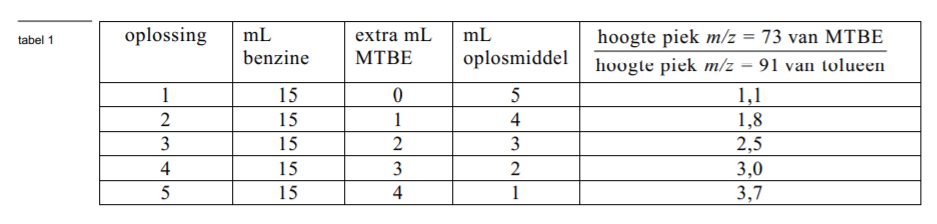
**Opgave 4 (vwo examen 2006)**

MTBE is de triviale naam van 2-methoxy-2-methylpropaan.

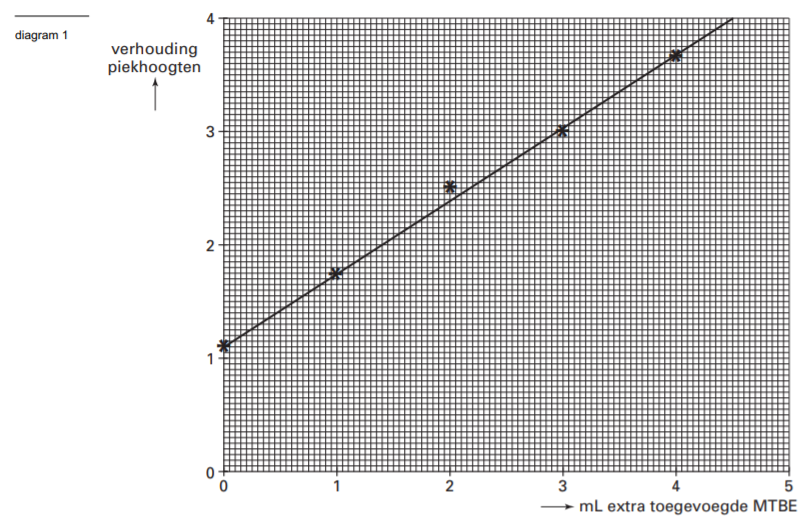


1. Geef de structuurformule van een ionsoort die de piek bij m/z = 73 kan veroorzaken.

Een methode die wordt toegepast om het MTBE-gehalte van benzine te bepalen, maakt gebruik van gaschromatografie gevolgd door massaspectrometrie. Er wordt een ijkreeks van vijf oplossingen van benzine in een oplosmiddel gemaakt. Aan vier van de vijf oplossingen is een nauwkeurig afgemeten extra hoeveelheid MTBE toegevoegd (zie tabel 1).



Elke oplossing wordt in een gaschromatograaf gescheiden. Van de MTBE-fractie en de tolueenfractie uit een oplossing worden de massaspectra opgenomen en met elkaar vergeleken. Bij massaspectrometrie geldt dat de hoogte van de gemeten pieken in een massaspectrum recht evenredig is met de hoeveelheid stof die aanwezig is. De piekhoogte van de hoogste piek in het massaspectrum van MTBE (die bij m/z = 73) wordt gedeeld door de piekhoogte van de hoogste piek in het massaspectrum van tolueen (die bij m/z = 91). Dit wordt voor alle vijf de oplossingen gedaan. De uitkomsten van deze berekeningen staan in de laatste kolom van tabel 1. De gegevens uit tabel 1 zijn verwerkt in een diagram 1:



Op de verticale as van diagram 1 zijn de verhoudingen tussen de genoemde piekhoogten uitgezet, op de horizontale as de hoeveelheid extra toegevoegde MTBE. Met behulp van het diagram kan de hoeveelheid MTBE in de onderzochte benzine worden bepaald.

1. Bereken met behulp van diagram 1 het volumepercentage MTBE in de onderzochte benzine.

De betere verbranding van benzine waaraan MTBE is toegevoegd, wordt veroorzaakt door de gebonden O atomen die in MTBE aanwezig zijn. Deze O atomen worden tijdens de verbranding gebruikt, samen met zuurstof uit de lucht. Daardoor ontstaat tijdens de verbranding minder koolstofmonooxide. In delen van de VS moet in de wintermaanden minstens 2,7 massaprocent gebonden zuurstof in benzine aanwezig zijn. Door lekkages van benzinetanks, verkeersongelukken en gewoon morsen bij het tanken, komt benzine in de bodem terecht en uiteindelijk in het grondwater. Omdat MTBE een kankerverwekkende stof is, wil men in de VS daarom MTBE vervangen door ethanol. De motoren van nagenoeg alle auto’s lopen probleemloos op benzine met 10 volumeprocent ethanol.

1. Laat door berekening zien dat het massapercentage O in benzine waarin 10 volumeprocent ethanol aanwezig is, groter is dan 2,7. Neem bij de berekening aan dat de dichtheid van het benzine-ethanol mengsel 0,73●103 kg m–3 is en dat ethanol de enige zuurstofhoudende verbinding in het benzine-ethanol mengsel is. Er is onder meer een gegeven uit Binas-tabel 11 nodig.

**Antwoorden oefenopgaven massaspectrometrie**

**Opgave 1**

1. De piek met de grootste m/z waarde is altijd de massa van het hele molecuul. Let op: broom heeft twee isotopen (79 en 81) die in de natuur beiden evenveel voorkomen. In de piek met de grootste m/z-waarde komt dus Br-81 voor.

Als er niks genoemd wordt gaan we altijd uit van z=1 (de lading van de ionen is dan 1+).

Dus m/z=6x12+11x1+81=164.

b. De isotopen Br-79 en Br=81 komen volgens tabel 25 in een verhouding van (ongeveer) 1:1 voor. Dus m/z=162 (met Br-79) en m/z=164 (met Br-81).

c.Van 2-broom-1-hexeen kan bv een methyl (CH3+ m/z=15), ethyl (m/z=29) propyl (m/z=43) groep afsplitsen. Deze fragmenten kunnen niet ontstaan bij het verbreken van een binding in broomcyclohexaan.

1. Broomwater toevoegen, dat ontkleurt als er een C=C binding aanwezig is, dus als de stof 2-broom-1-hexeen is.

**Opgave 2**

1. m/z=29 kan horen bij CH3CH2+ (afgesplitst van butanol en butanon) of bij CHO+ (afgesplitst van butanal). Deze piek zal dus voorkomen in de massaspectra van beide stoffen. Zie ook binas tabel 39D.
2. m/z=43 kan komen door CH3CH2CH2+, afgesplitst van butanal, of bij CH2CO+ (afgesplitst van butanon). Dus ook de piek bij deze m/z-waarde komt in de massaspectra van beide stoffen voor.

**Opgave 3**

**a** In het massaspectrum komen piekjes voor bij m/z = 80 en bij m/z = 82 en die komen overeen met (de molecuulmassa’s van) H79Br en H81Br.

**b** De molaire massa van 81Br2 is 2x80,9 = 161,8 g/mol

De molaire van K81Br is 39,10+78,9= 120,0 g/mol

Er is 0,050 : 161, 8 = 3,09●10-4 mol81Br2 .

Er is 2 x 3,09●10-4 = 6,18●10-4 mol K81Br nodig.

3,09●10-4 mol x 120,0 g/mol = 0,074 g K81Br .

Dus is er 74 mg nodig.

1. de piek bij m/z = 162 komt van 81Br2

de piek bij m/z = 160 komt van 79Br81Br

de molverhouding 81Br2 : 79Br81Br = 100,0 : 4,1

in 100,0 mol 81Br2 zit 200,0 mol 81Br atomen

en in 4,1 mol 79Br81Br zit 4,1 mol 79Br atomen en 4,1 mol 81Br atomen

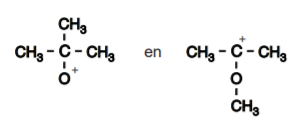
in 104,1 mol broom zit dus 204,1 mol 81Br atomen en 4,1 mol 79Br atomen

Het percentage 81Br atomen is dus gelijk aan 204,1/208,2 x 100 % = 98 %.

Dus klopt de bewering dat het minstens 99 % is niet.

**Opgave 4**

1. Dit zijn beide goede antwoorden:



**b**.

Met twee punten die op de getrokken lijn liggen kun je de helling van de lijn berekenen: bijvoorbeeld (3,7 - 1,1) /(4,0-0,0) = 0,65

Bij 0,0 mL is er 1,1/0,65= 1,69 mL MTBE aanwezig.

1,69 mL / 15 mL x 100 % = 11 volume % MTBE.

**c**.

In 1,0 m3 benzine-ethanol mengsel zit 0,10x1,0 m3=0,10 m3 ethanol.

0,80●103 kg/m3 x 0,10 m3 =80 kg ethanol.

80 kgram / 46,068 = 1,74 kmol ethanol

Daarin zit ook 1,74 kmol O.

1,74 kmol x 16,00 g/mol = 27,8 kg O.

De massa van 1,0 m3 benzine-ethanol mengsel is 1,0 m3 x 0,73●103 kg/m3= 730 kg.

27,8 / 730 x 100 % = 3,8 massa % O.

Het massapercentage zuurstof is dus groter dan 2,7 %.