

---

### Opgave 1

---

Welke fragmenten in afbeelding 13.11 zijn van de pieken bij 26 u, 96 u en 98 u?

26 u:  $C_2H_2$

96 u:  $C_2H_2Cl_2$   $C_2H_2$  + 2 × het chloor-35 isotoop

98 u:  $C_2H_2Cl_2$   $C_2H_2$  + 2 × het chloor-37 isotoop

---

### Opgave 2

---

Wat is het verschil tussen de betekenis van  $z$  en  $e$ ?

$z$  = "ladinggetal", zeg maar: de valentie als ion

$e$  = elementairlading, de echte elektrische lading in "Coulomb"

---

### Opgave 3

---

Welk verschil zal er zijn tussen spectra afkomstig van elektron impact en van chemische ionisatie?

*Chemische ionisatie is zogenaamde "zachte ionisatie", de moleculen blijven heel.*

*Bij elektron impact worden de moleculen met elektronen beschoten en ontstaan er meer brokstukken.*

---

### Opgave 4

---

Hoe groot moet het oplossend vermogen tenminste zijn voor het onderscheid van de onderstaande fragmenten?

- a  $C_2H_4^+$  en  $CO^+$
- b  $C_3H_6^+$  en  $CH_2CO^+$
- c  $NO_2^+$  en  $C_2H_5OH^+$
- d  $C_2H_5NH_2^+$  en  $CO_2^+$
- e  $OCH_2^+$  en  $C_2H_6^+$

*We gebruiken de atoommassa's van de meest voorkomende isotopen (Wikipedia):*

Atoom	atoommassa (u)	%(mol/mol)
C	12,0000	98,9
H	1,0078	99,99
O	15,9949	99,76
N	14,0031	99,6

$m$ C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> <sup>+</sup>	28,031 u			
$m$ CO <sup>+</sup>	27,995 u	$\Delta m = 0,036$ u	$R = m / \Delta m$	▶ $28 / 0,036 = 776 \approx 800$
$m$ C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> <sup>+</sup>	42,047 u			
$m$ CH <sub>2</sub> CO <sup>+</sup>	42,0105 u	$\Delta m = 0,036$ u	$R = m / \Delta m$	▶ $42 / 0,036 = 1150 \approx 1200$
$m$ NO <sub>2</sub> <sup>+</sup>	45,993 u			
$m$ C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH <sup>+</sup>	46,0417 u	$\Delta m = 0,0487$ u	$R = m / \Delta m$	▶ $46 / 0,0487 = 944 \approx 1000$
$m$ C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> NH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	45,0777 u			
$m$ CO <sub>2</sub> <sup>+</sup>	43,9898 u	$\Delta m = 1,09$ u	$R = m / \Delta m$	▶ $45 / 1,09 = 41 \approx 50$
$m$ OCH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	30,0105 u			
$m$ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> <sup>+</sup>	30,0468 u	$\Delta m = 0,036$ u	$R = m / \Delta m$	▶ $30 / 0,036 = 826 \approx 900$

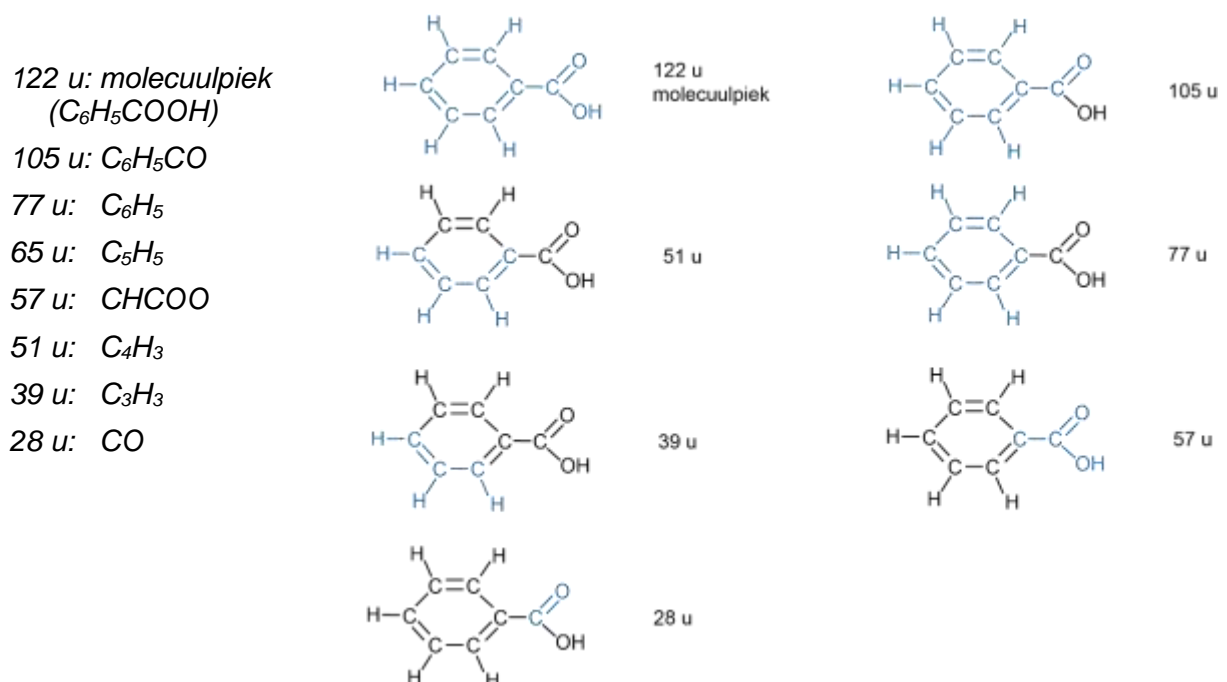
### Opgave 5

Bij afbeelding 13.12 a (benzoëzuur):

Identificeer zoveel mogelijk molecuulfragmenten.

*Een puzzel.*

*Echt een karweitje voor een computerprogramma. Maar met een beetje gezond verstand kom je ook een heel eind:*



---

Opgave 6

---

Bij afbeelding 13.12 b (onbekende component).

a Vergelijk de spectra a en b, wat zijn de belangrijkste verschillen?

*De molecuulpiek heeft nu een waarde van 136 u.  $m/z = 122$  u ontbreekt, er is een piekje bijgekomen: 15 u ( $\text{CH}_3$ ).*

b Wat zijn de overeenkomsten?

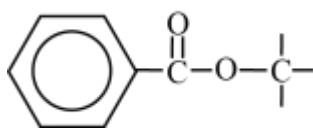
*Overige molecuulfragmenten zijn bijna gelijk.*

c Welke is de 'parent peak'?

*De nieuwe molecuulpiek: 136 u*

d Welke is vermoedelijk de onbekende component?

*Piekje van 15 u duidt op een methyl-fragment. Het verschil tussen de oude molecuulpiek en de nieuwe is 14 u. Bijna een methylgroep. We missen nog 1 H. Maar als je een H vervangt door een methylgroep... dan klopt het. Het gaat om de methylester van benzoëzuur: methylbenzoaat.*



---

Opgave 7

---

Bij afbeelding 13.13.

Een molecuul van de stof van dit spectrum bevat een zuurstofatoom.

Identificeer zoveel mogelijk pieken.

*De hoogste waarde is 46 u. Trekken we er een zuurstofatoom vanaf dan houden we over: 30 u. Hierin passen 2 C-atomen: 24 u. Over: 6 H's.*

*Dus molecuulpiek hoort bij:  $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ . Mogelijk:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$  of  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$*

*Verder vinden we:*

*45 u      1 H minder dan de molecuulpiek:  $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$*

*31 u      mogelijk:  $\text{CH}_2\text{O}$*

*29 u      mogelijk:  $\text{C}_2\text{H}_5$*

*27 u      mogelijk:  $\text{C}_2\text{H}_4$*

Welke verbinding is dit?

*De mogelijke brokstokken passen goed bij  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ . Dus het spectrum hoort meest waarschijnlijk bij ethanol.*

---

Opgave 8

---

Bij afbeelding 13.14.

Een molecuul van de stof van dit spectrum bevat een zuurstofatoom.

Identificeer zoveel mogelijk pieken.

*De hoogste waarde is 60 u. Trekken we er een zuurstofatoom vanaf dan houden we over: 44 u. Hierin passen 3 C-atomen: 36 u. Over: 8 H's.*

*Dus molecuulpiek hoort bij: C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>O. Mogelijk: CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH of CH<sub>3</sub>OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>*

*Verder vinden we:*

*45 u halen we hier een O-atoom weg, dan houden we over: 29 u: C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>*

*Dus 45 u hoort dan bij: C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>O*

*31 u mogelijk: CH<sub>3</sub>O*

*29 u mogelijk: C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>*

*15 u vrijwel zeker: CH<sub>3</sub>*

Welke verbinding is dit?

*Van de twee opties: CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH of CH<sub>3</sub>OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub> is de ether het meest logisch. Voor propanol zou je ook pieken verwachten bij 44 u (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O) en 43 u (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>) maar deze zijn er niet.*

*Dus: CH<sub>3</sub>OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub> (ethylmethylether)*