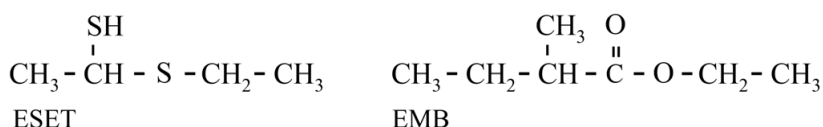


Doerian, een delicatessen?

Doerian is een vrucht met een kenmerkende geur. De een houdt ervan terwijl de ander de geur weerzinwekkend vindt. Uit onderzoek is gebleken dat in doerians vooral twee verbindingen geurbepalend zijn: ESET en EMB. Als een van beide verbindingen ontbreekt, is de kenmerkende doerian-geur er niet. De structuurformules van deze verbindingen zijn weergegeven in figuur 1.

figuur 1



Gebleken is dat van ESET twee stereo-isomeren voorkomen in doerians.

- 1p **20** Teken op de uitwerkbijlage de twee stereo-isomeren van ESET.

Uit eerder onderzoek was de aanwezigheid van een groot aantal stoffen in doerians al bekend. Om de gehalten van deze stoffen te kunnen bepalen, zijn van deze stoffen analoga gemaakt.

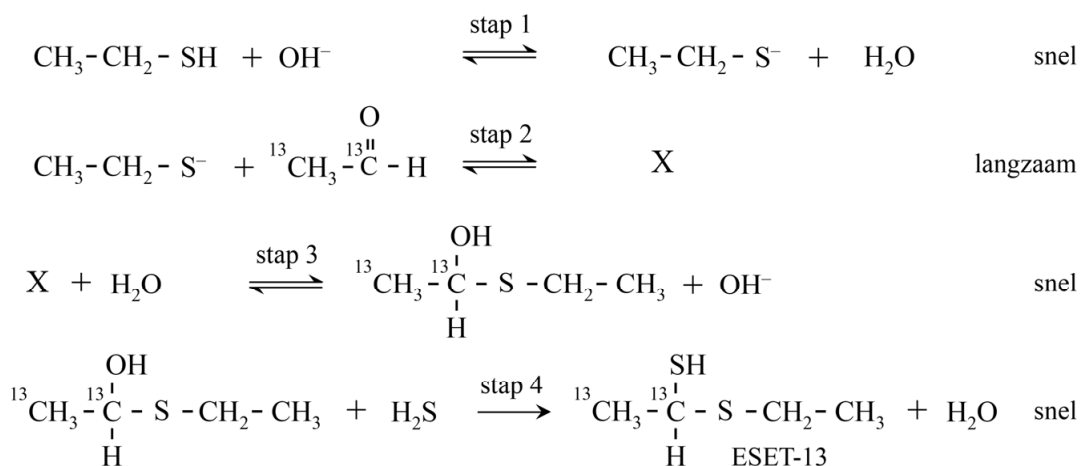
Dit zijn stoffen waarbij in de moleculen een of meer atomen zijn vervangen door bijvoorbeeld ^2H en ^{13}C .

In ESET werden twee ^{12}C -atomen vervangen door ^{13}C -atomen.

De gevormde stof wordt in het vervolg aangeduid met ESET-13.

ESET-13 werd gemaakt door gebruik te maken van ethanal, waarin twee ^{13}C -atomen aanwezig zijn. In figuur 2 zijn de hierbij verlopende reacties weergegeven.

figuur 2

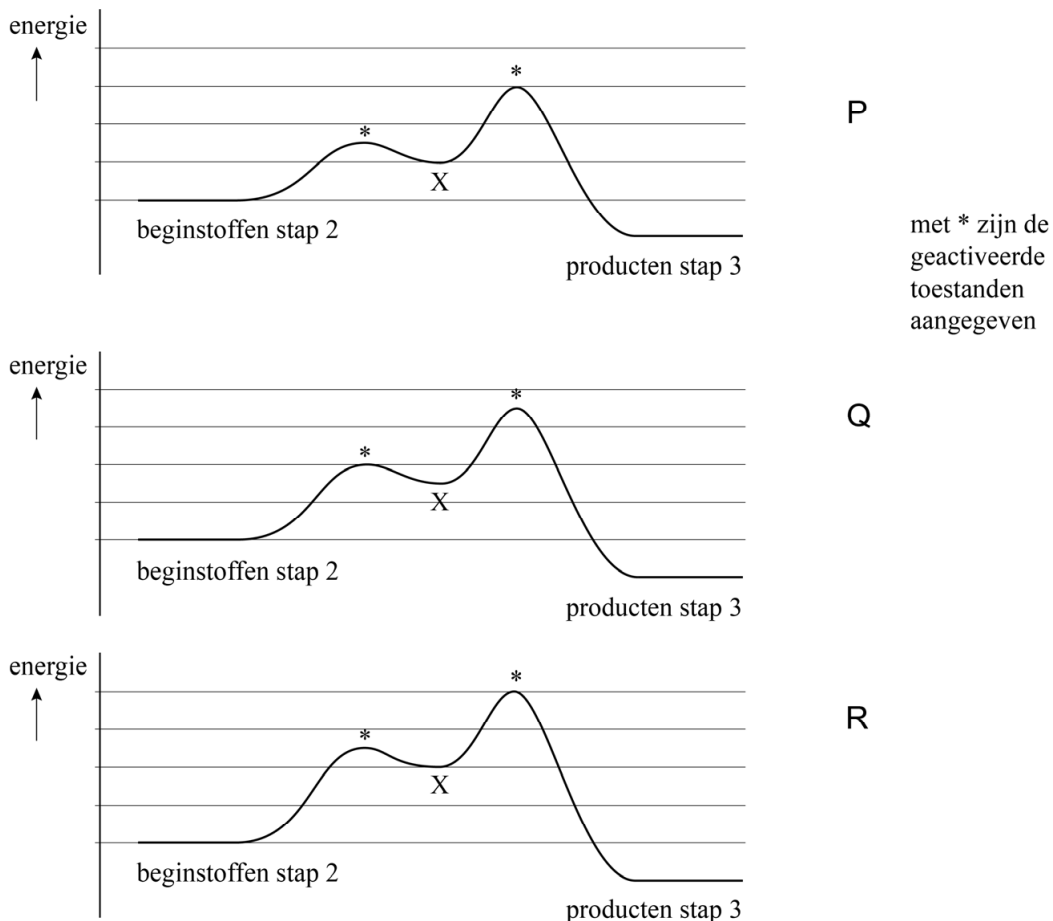


In stap 2 wordt uitsluitend deeltje X gevormd. Het mechanisme van de reactie in stap 2 is op de uitwerkbijlage onvolledig weergegeven.

- 3p **21** Maak op de uitwerkbijlage het mechanisme van de reactie in stap 2 compleet.
- Geef rechts van de pijl de structuurformule van deeltje X.
 - Geef in alle deeltjes de niet-bindende elektronenparen aan.
 - Geef met pijlen weer hoe elektronenparen worden verplaatst tijdens deze reactie.
 - Geef formele ladingen weer wanneer die voorkomen.

Van de weergegeven omzettingen in figuur 2 is stap 2 de snelheidsbepalende stap. Van stap 2 en 3 zijn drie mogelijke energiediagrammen weergegeven in figuur 3.

figuur 3

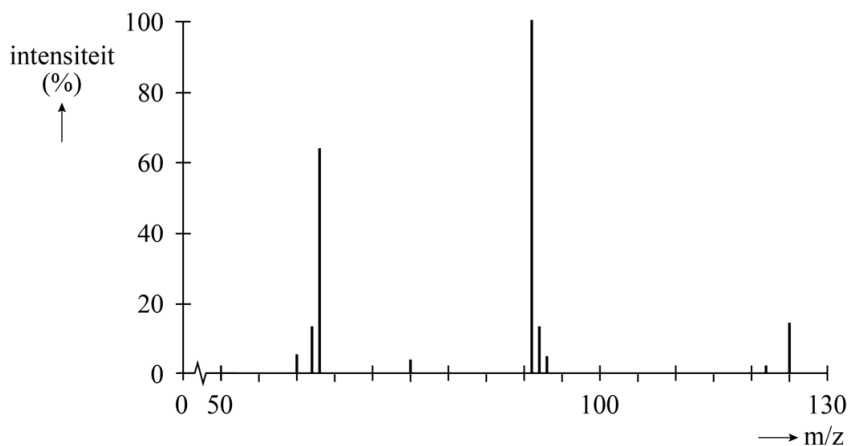


- 2p **22** Leg uit welk van de diagrammen (P, Q of R) in overeenstemming is met de gegevens over de relatieve snelheden van stap 2 en stap 3 in figuur 2.

Na de reacties die zijn weergegeven in figuur 2, is uit het reactiemengsel een stof geïsoleerd met hetzelfde kookpunt als dat van ESET. Om te onderzoeken of deze stof inderdaad ESET-13 is, is van de stof een massaspectrum genomen.

Bij de gebruikte techniek worden H^+ -ionen opgenomen, waarbij het molecuul-ion $[M-H]^+$ wordt gevormd. Uit het molecuul-ion worden vervolgens fragmenten gevormd. In figuur 4 is het massaspectrum van ESET-13 weergegeven.

figuur 4



De piek bij $m/z = 91$ kan worden verklaard uit het afsplitsen van een neutraal deeltje van het molecuul-ion.

2p **23** Leg uit welk neutraal deeltje is afgesplitst.

In het massaspectrum van ESET-13 komt een piek voor bij $m/z = 63$. Deze piek wordt veroorzaakt door een fragment dat is ontstaan na het verbreken van één atoombinding in ESET-13.

2p **24** Leg uit welke atoombinding dat is.

Om van alle aanwezige stoffen het gehalte te kunnen bepalen, wordt doerian-pulp enkele malen geëxtraheerd. Na de extracties wordt het verkregen mengsel met behulp van GC-MS geanalyseerd. Dat houdt in dat het mengsel met behulp van gaschromatografie (GC) wordt gescheiden, waarna elke afzonderlijke stof in een massaspectrometer (MS) wordt geleid.

Van twee doerians is het gehalte EMB bepaald met behulp van gaschromatografie. Ook is met proefpersonen onderzocht welke doerian een sterkere geur had. Een sterkere geur wordt vooral bepaald door een hoger gehalte van EMB.

Bij dit onderzoek is een interne standaard gebruikt. De signaalsterkte van de interne standaard is recht evenredig met het ingespoten volume.

Wanneer in het onderzoek verschillende volumes zijn ingespoten, kunnen zo de resultaten toch met elkaar worden vergeleken.

In de tabel zijn de meetgegevens van beide doerians weergegeven.

tabel

signaalsterkte	interne standaard	EMB
doerian 1	520	7250
doerian 2	320	5610

- 2p **25** Leg met behulp van de tabel uit welke doerian een sterkere geur heeft.

Als interne standaard is een oplossing van thiofeen bereid met een molariteit van $1,20 \cdot 10^{-2} \text{ mol L}^{-1}$. Vervolgens werd $10,0 \text{ }\mu\text{L}$ van deze oplossing toegevoegd aan $10,0 \text{ mL}$ pulp van een doerian.

Bij deze doerian bleek de molverhouding EMB : thiofeen = $1,0 : 0,18$.

De molaire massa van EMB is 130 g mol^{-1} .

Bij de gebruikte gaschromatograaf is de signaalsterkte recht evenredig aan de hoeveelheid stof.

- 2p **26** Bereken het gehalte EMB in de pulp in g L^{-1} .