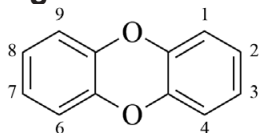


Tenzij anders vermeld, is er sprake van standaardomstandigheden:
 $T = 298 \text{ K}$ en $p = p_0$.

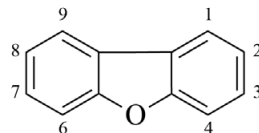
Dioxines en PCB's

Dioxines en PCB's zijn zeer giftige chloorbevattende stoffen die zich gemakkelijk ophopen in vetweefsel. Onder de term dioxines vallen twee groepen stoffen: PC-DD's en PC-DF's. In figuur 1 is de basisstructuur van de PC-DD's, PC-DF's en PCB's weergegeven.

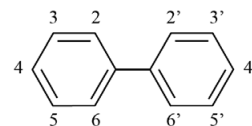
figuur 1



PC-DD



PC-DF



PCB

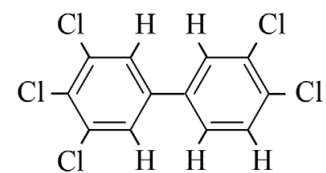
In elke weergegeven structuur kunnen een of meer waterstofatomen zijn vervangen door chlooratomen. In de afkortingen wordt daarom PC (polychloor) gebruikt.

- 3p 1 Geef het aantal mogelijke structuurisomeren voor elke groep stoffen in figuur 1, wanneer in de structuurformules één chlooratoom aanwezig is. Noteer je antwoord als volgt:
- PC-DD: ... isomeren
PC-DF: ... isomeren
PCB: ... isomeren

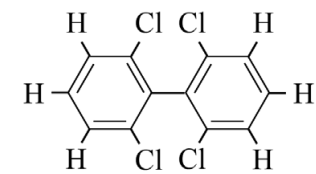
In 1976 kwam in Seveso in Italië door een fout in de productie van 2,4,5-trichloorfenol een grote hoeveelheid 2,3,7,8-tetrachloor-DD vrij. Deze stof is de giftigste dioxine. Men heeft ontdekt dat de toxische werking hiervan mede wordt veroorzaakt door de platte vorm van de moleculen.

In figuur 2 zijn de structuurformules van twee PCB's weergegeven. Een molecuul PCB-126 kan ook een platte vorm aannemen, wat mede verklaart waarom deze stof een vergelijkbare toxische werking heeft als 2,3,7,8-tetrachloor-DD. PCB-54 heeft deze toxische werking niet.

figuur 2



PCB-126

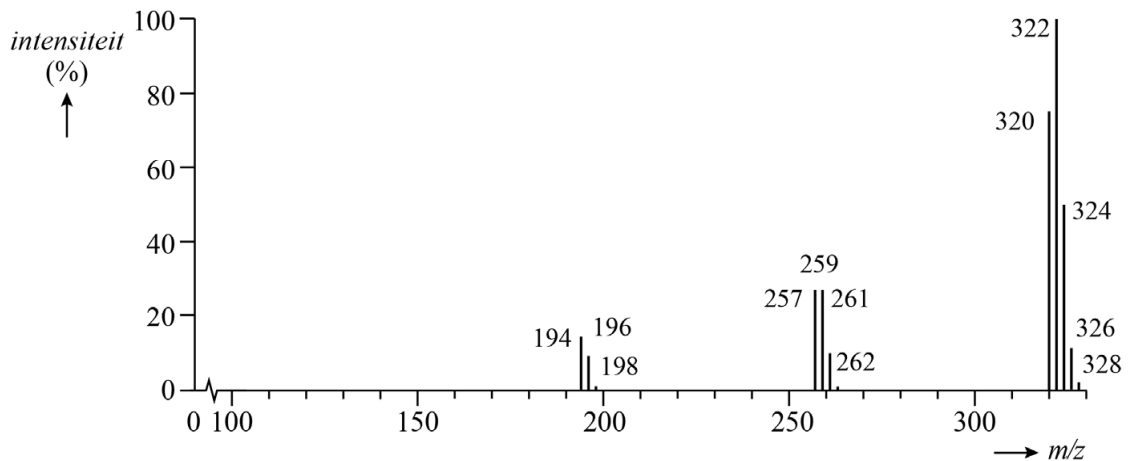


PCB-54

- 2p 2 Leg uit dat PCB-126 wel een platte vorm kan aannemen en PCB-54 niet. Gebruik hierbij begrippen op microniveau.

Dioxines ontstaan bij verbrandingsreacties, zowel in verbrandingsovens als bij natuurlijke branden. Eenmaal in het milieu terechtgekomen, hopen dioxines zich op in het vetweefsel van onder andere paling. Omdat paling wordt geconsumeerd, wordt regelmatig onderzocht of in paling dioxines aanwezig zijn. Hiertoe worden monsters van palingen genomen, waarna met massaspectrometrie wordt bepaald welke stoffen in de monsters aanwezig zijn. In figuur 3 is het massaspectrum van zuiver 2,3,7,8-tetrachloor-DD vereenvoudigd weergegeven.

figuur 3



De bundel van vijf pieken vanaf $m/z = 320$ is afkomstig van het molecuulion. De formule van het molecuulion is $C_{12}H_4O_2Cl_4^+$.

- 2p **3** Geef de isotopensamenstelling van het molecuulion met $m/z = 322$.
- Neem aan dat van alle isotopen van C, H en O alleen de meest voorkomende isotopen in het ion aanwezig zijn.
 - Noteer van elke atoomsoort de isotoop en het aantal atomen.
 - Gebruik hierbij Binas-tabel 25 of ScienceData-tabel 1.11.

In het massaspectrum zijn drie samenhangende piekenbundels te zien. Vanaf $m/z = 320$ zijn er vijf pieken van het molecuulion, vanaf $m/z = 257$ vier pieken van één fragmention en vanaf $m/z = 194$ drie pieken van één volgend fragmention. De piekenbundels ontstaan doordat telkens een fragment $COCl$ afsplitst.

- 2p **4** Leg uit dat de piekenbundel bij $m/z = 257$ vier pieken bevat. Neem aan dat van alle isotopen van C, H en O alleen de meest voorkomende isotopen in het ion aanwezig zijn.