

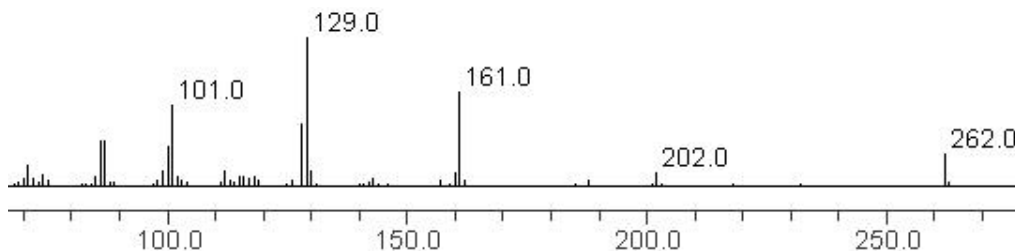


# Tentamen för KE3690 2003-04-28

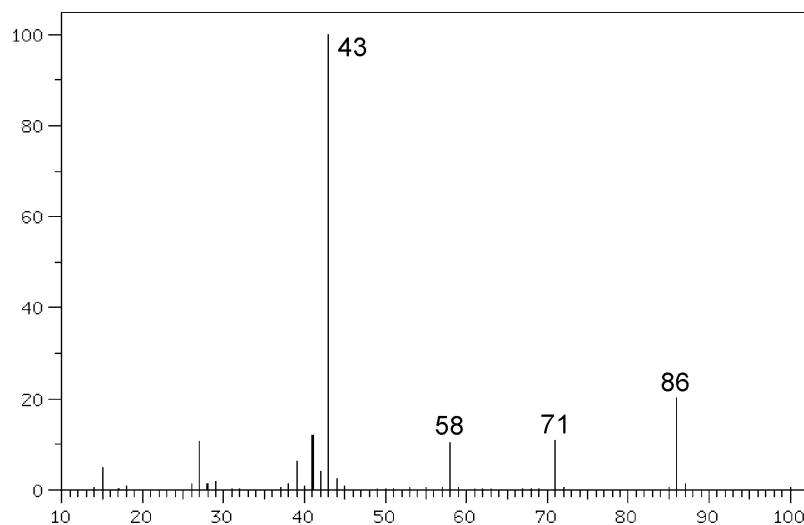
## del 1 – Masspektrometri & molekylmodellering

### Masspektrometri

- Visa med en schematisk bild hur en dubbel fokuserande MS, respektive en TOF masspektrometer med reflektor är uppbyggd.
  - Hur skiljer sig detektionen av joner i en TOF från den i de flesta andra MS arkitekturer?
- Tolka masspektret för det metylerade alditolacetatet (PMAA) nedan.  
*Observera, det kommer från en NaBD<sub>4</sub> reducerad hexos!*



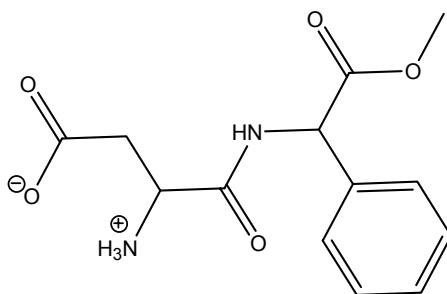
- Förklara hur  $m/z$  talen (markerade i bilden och  $m/z=45$ ) uppkommer. Detaljerade mekanismer behöver inte ges. Bastoppen är  $m/z=45$  (syns ej i bilden ovan).
  - Ge ett förslag på hur sockerenheten som gav upphov till PMAA:n har varit substituerad.
- Tolka EI-MS spektrat nedan och förklara viktiga fragment. Föreningen innehåller 69,8% C och 11,6% H.



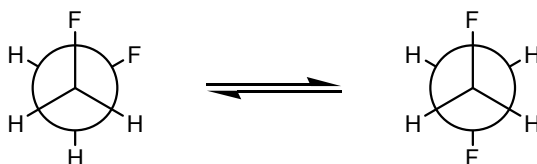
- 4 Föreslå en jonkälla och analysator som lämpar sig för att...
- ...identifiera komponenterna bensin.
  - ...sekvens bestämma proteiner.
- Motivera valet utifrån provernas olika egenskaper.

### Molekylmodellering

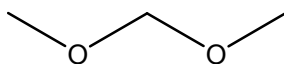
- 5 Visa de viktigaste frihetsgraderna i aspartam (se nedan).



- 6 a) *Gauche*-rotamererna av 1,2-difluoretan beräknas vara 0,6 kcal/mol (2,5 kJ/mol) stabilare än *trans*-rotamererna. Hur många procent av de två *gauche*-rotamererna finns det totalt vid 300 K? ( $R=8.314 \text{ J/K mol}=1.987 \text{ cal/K mol}$ )



- b) Ge en förklaring till att *gauche*-konformationen av 1,2-difluoretan stabilare än *trans*-konformationen trots att de elektrostatiska interaktionerna är starkare i *gauche*.
- 7 Dimetoximetan är en mycket stelare molekyl än pentan. Förklara hur rörligheten begränsas av stereoelektroniska effekter.



- 8 I vatten vid 20°C (293K) föreligger gulos som 3%  $\beta$ -furanos, 16%  $\alpha$ -pyranos och 81%  $\beta$ -pyranos.
- Vad är skillnaden i  $\Delta G$  mellan  $\alpha$ - och  $\beta$ -pyranosen?
  - Hur kommer jämvikten att påverkas om temperaturen sänks? (Antag att  $\Delta G$  inte ändras med temperaturen.)
- 9 Redogör för de olika energitermerna i ett MM kraftfält. Dela in dem i "bonded" och "non-bonded".

LYCKA TILL!