

Ademtest voor leverziekte

Een leverziekte kan soms lang onopgemerkt blijven. Een goed functionerende lever breekt afvalstoffen uit bloed af, zodat de afvalstoffen kunnen worden uitgescheiden. Wanneer een lever slecht functioneert, worden sommige afvalstoffen niet meer goed afgebroken. Hierdoor kan de concentratie van deze afvalstoffen in de uitgeademde lucht van leverpatiënten hoger worden.

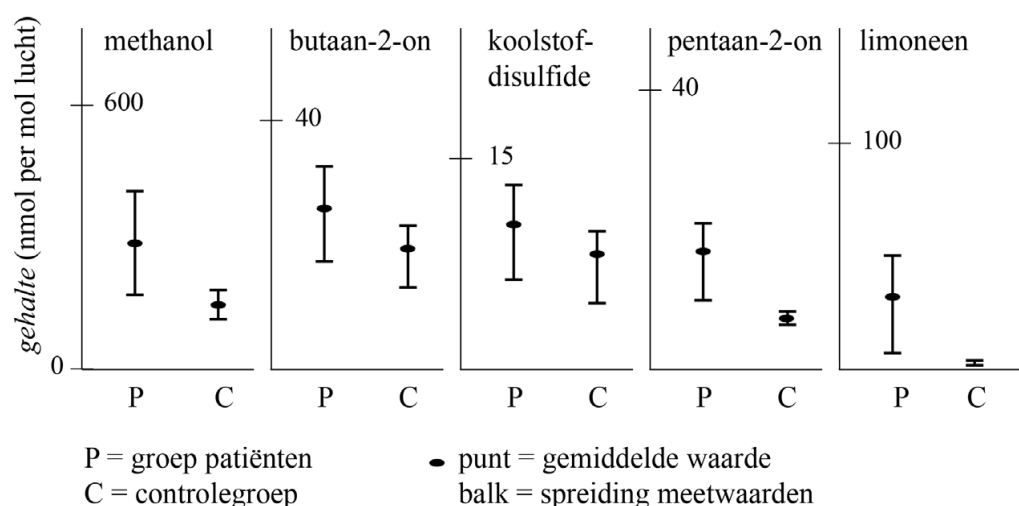
Een groep onderzoekers doet onderzoek naar een ademtest waarmee vroegtijdig een leverziekte kan worden opgespoord.

Van vijf stoffen is de concentratie gemeten in de uitgeademde lucht van twee groepen personen:

- een groep leverpatiënten die op de wachtlijst staan voor een levertransplantatie;
- een controlegroep van gezonde vrijwilligers.

De resultaten van de metingen zijn in de figuur weergegeven.

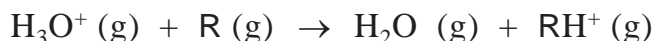
figuur



Op basis van deze gegevens concludeerden de onderzoekers dat een concentratiebepaling van limoneen kan worden gebruikt voor deze ademtest.

- 2p 20 Leg uit met behulp van de figuur welke twee onderzochte stoffen het **minst** geschikt zijn voor deze ademtest.

Bij de metingen werd onder andere gebruikgemaakt van 'proton transfer massaspectrometrie'. Bij deze techniek treedt de ionisatie in de gasfase op door botsingen van H_3O^+ -ionen met moleculen R van vluchtige organische verbindingen. De ionisatie kan als volgt worden voorgesteld:



Als in een molecuul R een zuurstofatoom voorkomt, bindt in deze reactie het waterstofion aan het zuurstofatoom.

Wanneer pentaan-2-on een waterstofion bindt, is mesomerie mogelijk in het gevormde molecuulion. Bij een van de grensstructuren van [pentaan-2-on-H]⁺ voldoet een atoom niet aan de octetregel.

- 3p **21** Voer de volgende opdrachten uit:
- Teken de twee grensstructuren van [pentaan-2-on-H]⁺.
 - Geef formele ladingen aan.

Bij geprotoneerd limoneen ($\text{C}_{10}\text{H}_{17}^+$, $m/z = 137$) treden fragmentaties op, waarbij telkens een neutraal deeltje en een geladen deeltje worden gevormd.

De geladen fragmenten die ontstaan, geven respectievelijk pieken bij $m/z = 67$ en $m/z = 81$ en $m/z = 95$.

De neutrale fragmenten die hierbij worden afgesplitst, behoren tot een klasse van koolwaterstoffen.

- 3p **22** Leg uit met behulp van een berekening tot welke klasse van koolwaterstoffen de neutrale fragmenten behoren.

Limoneen is aanwezig in vetweefsel, in bloed en in de adem. De onderzoekers wilden op basis van de gemeten concentratie limoneen in de adem een schatting maken van de hoeveelheid limoneen die is opgehoopt in het vet van een leverpatiënt. Hiertoe hebben ze experimenten uitgevoerd waarin de verdeling van limoneen tussen olijfolie en bloed en tussen bloed en lucht is bepaald. Ze namen hierbij aan dat olijfolie en vetweefsel vergelijkbare oplosmiddelen zijn voor limoneen. De verdeling van limoneen over deze drie fases is hieronder voorgesteld met twee evenwichten.



De concentratie limoneen wordt bij de berekening van K uitgedrukt in mol L^{-1} . Bij een patiënt bedroeg de concentratie limoneen in de uitgeademde lucht $0,10$ volume-ppm.

Aan de hand van bovenstaande gegevens en aannames kan worden berekend dat de concentratie limoneen in het vetweefsel van deze patiënt $2,1 \cdot 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$ bedraagt.

- 3p **23** Toon dit aan door middel van een berekening.
Het molair volume van een gas is $2,45 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$.

De patiënt had een massa van 85 kg en een vetpercentage van 35 massa\% .

De gemiddelde dichtheid van lichaamsvet is $0,90 \text{ kg L}^{-1}$.

- 4p **24** Bereken de massa in gram limoneen die in het vetweefsel van de patiënt is opgeslagen.
Geef de uitkomst in het juiste aantal significante cijfers.