

# ESPECTROSCOPIA

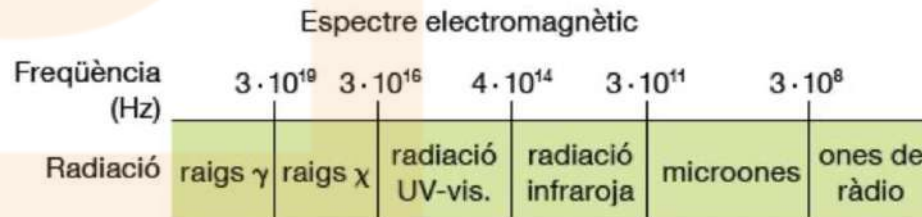
---

- La descomposició de l'ozó a l'estratosfera s'esdevé mitjançant una cadena de reaccions. La primera consisteix en el trencament d'una molècula d'oxigen en dos àtoms d'oxigen:



Calculeu l'energia de la radiació electromagnètica capaç de produir aquesta reacció. Expliqueu raonadament si la radiació infraroja podria provocar el trencament de la molècula d'oxigen. *Dades:* Nombre atòmic (*Z*): *Z*(O) = 8. Nombre d'Avogadro:  $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ . Constant de Planck:  $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$

$$\begin{array}{l} 495 \text{ kJ} \quad 1000 \text{ J} \quad 1 \text{ mol.} \\ \text{mol} \quad 1 \text{ kJ} \quad 6'02 \cdot 10^{23} \text{ mol} \end{array} = 8,22 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$



$E = h \cdot f \rightarrow 8,22 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \cdot f \rightarrow f = 1,24 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ . Aquesta freqüència està fora de l'interval que presenta la radiació infraroja, per tant aquesta radiació no podria trencar la molècula en qüestió.

2> La producció de la propanona,  $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ , anomenada habitualment *acetona*, és un indicador de creixement econòmic pel gran ús que se'n fa en plàstics, fibres, medicaments, etc. Per comprovar la puresa de l'acetona produïda es poden emprar tècniques com l'espectrometria de masses o l'espectrofotometria d'infraroig. L'espectre de masses de l'acetona és aquest:

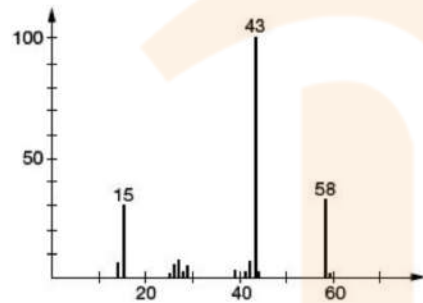


Fig. 11.32.

- a) Indiqueu quina magnitud es representa en l'eix d'abscisses de l'espectre de masses. Interpreteu la informació de l'espectre indicant a què poden ser deguts els pics que s'obtenen en els valors 15, 43 i 58.
- b) Quines magnituds es representen en els dos eixos d'un espectre infraroig? Quina informació útil ens proporcionaria l'espectre infraroig d'una mostra d'acetona per comprovar si està o no impurificada amb 2-propanol?

Dades: Masses atòmiques relatives: H = 1,0; C = 12,0; O = 16,0

Espectre infraroig tenim:

- Abscisses: Longitud d'ona (o freqüència, o nombre d'ona)
- Ordenades: Absorbància (o transmissió)

En un espectre IR d'una substància observem una sèrie de pics que estan relacionats amb els diferents tipus d'enllaç que hi ha entre els àtoms de la molècula (vibració). Ens dona, per tant, informació dels grups funcionals de la substància.

**[0,2 p]**

Si féssim un espectre IR d'una mostra d'**acetona pura**, ens hauria d'aparèixer un pic en una zona de longitud d'ona característica del grup carbonil (enllaç doble carboni i oxigen, C=O).

Si la **mostra d'acetona està impurificada** amb algun alcohol, per exemple el 2-propanol, en l'espectre IR observariem, a més del pic del grup carbonil (C=O), un altre pic a la zona de longitud d'ona característica d'un grup hidroxil (enllaç senzill oxigen i hidrogen, O-H).

## Exercici 2:

A-

Eix de les abscises (x) → relació massa / càrrega

B-

Els pics d'un espectre de masses s'interpreten en base a la formació de fragments de la molècula, normalment amb càrrega positiva unitària (+1).

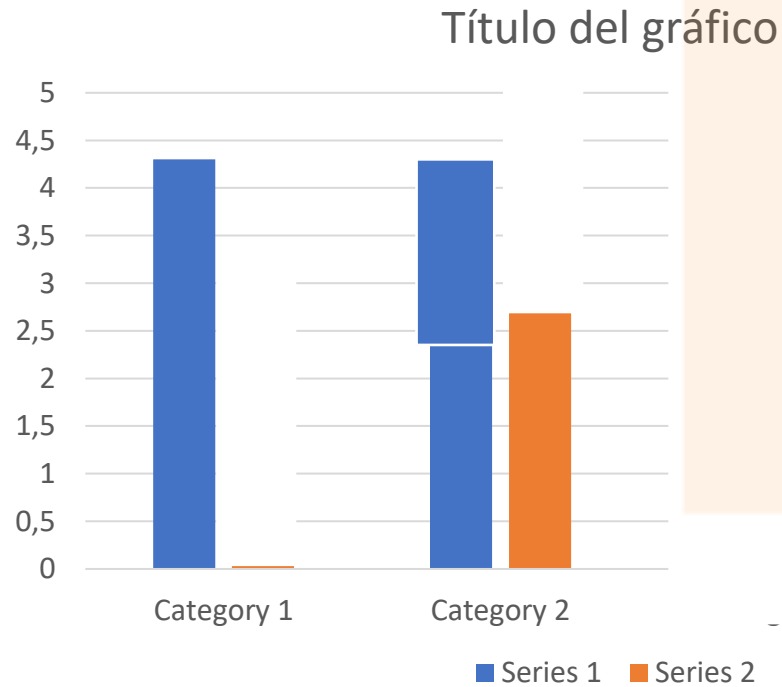
Si tenim en compte la fórmula de la molècula,  $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ , i les masses de cada àtom, la massa dels següents fragments es correspon als pics observats a l'espectre de masses:

**Pic m/z = 58 ⇒  $\text{CH}_3\text{COCH}_3^+$**

**Pic m/z = 43 ⇒  $\text{CH}_3\text{CO}^+$**

**Pic m/z = 15 ⇒  $\text{CH}_3^+$**

# Aclariment dels pics de l'infraroig



Categoria 1: cetona

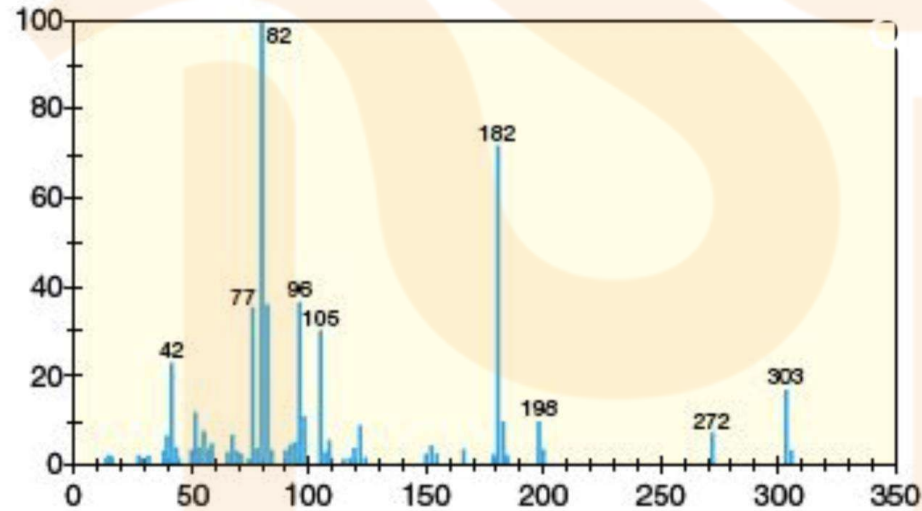
En cas només hauries d'observar un pic important que seria el de l'enllaç C=O. (Només hauriem de veure el color blau)

Categoria 2: cetona alterada

En aquest cas a més d'observar el pic de l'enllaç C=O observem un enllaç extra que correspondria a l'alteració del grup -OH (hauriem de veure els dos colors)

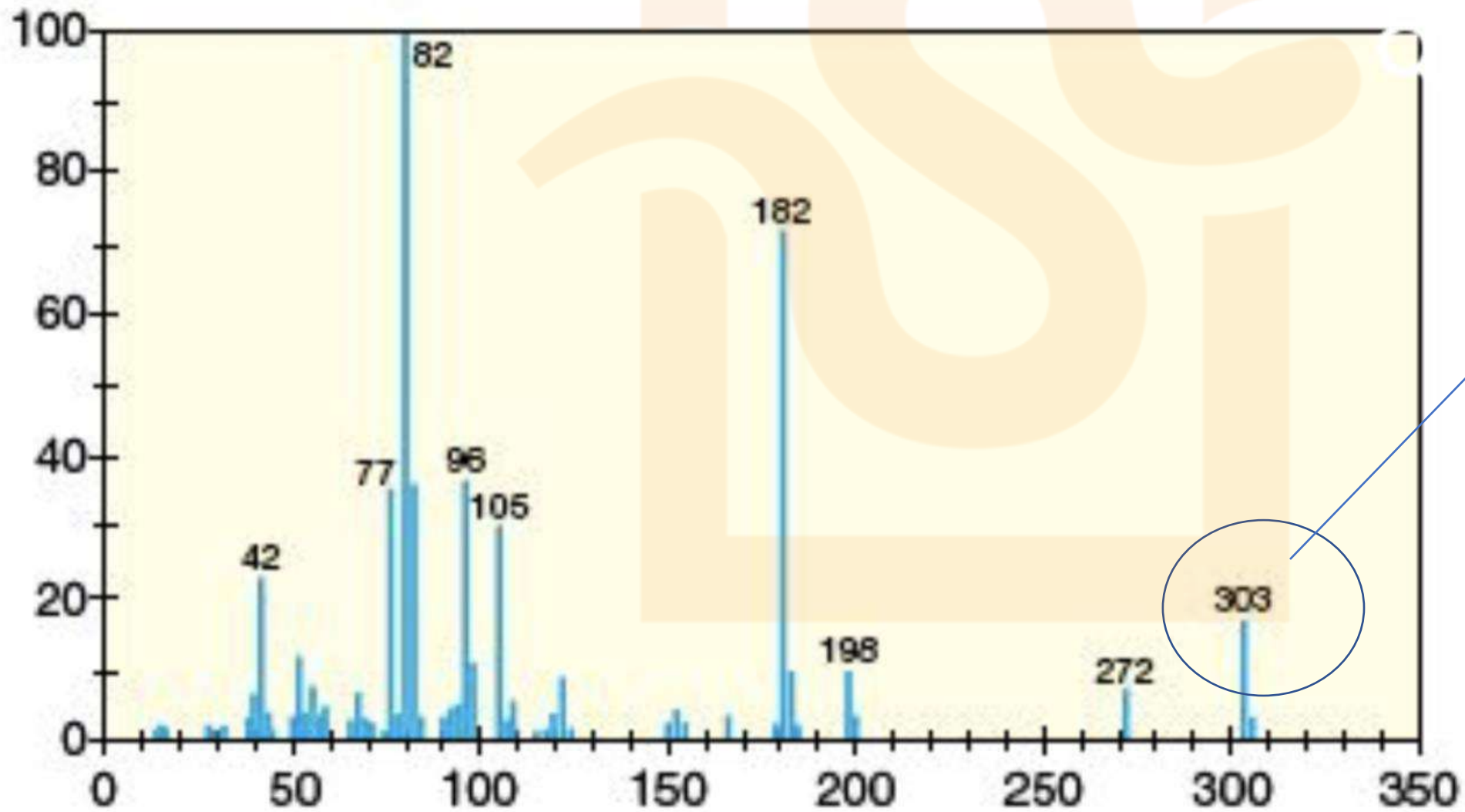
Podem detectar la cocaïna ( $C_{17}H_{21}NO_4$ ) i l'amfetamina ( $C_9H_{13}N$ ) al cabell d'una persona fins al cap de noranta dies d'haver-ne consumit mitjançant la tècnica d'espectrometria de masses. En la figura següent es pot veure l'espectre de masses obtingut a partir del cabell d'una persona de la qual sospitem que ha pres una d'aquestes drogues.

Quina magnitud s'ha representat en l'eix horitzontal del gràfic? A partir de les dades experimentals, dedueixi si la persona ha pres cocaïna o amfetamina.



Eix de les absiseses (x) → relació massa / càrrega

- Pm cocaïna= 303 g/mol      Pm (amfetamina) = 135 g/mol
- L'últim pic correspon al fragment més gran i és el pic molecular, que es forma quan la molècula perd 1 electró:  $M^+ = 303$ . Aquest valor correspon al pes molecular de la cocaïna. (0,7 punts)



Pic molecular, és a dir correspon a la molècula sencera - 1 e,. Pes més alt