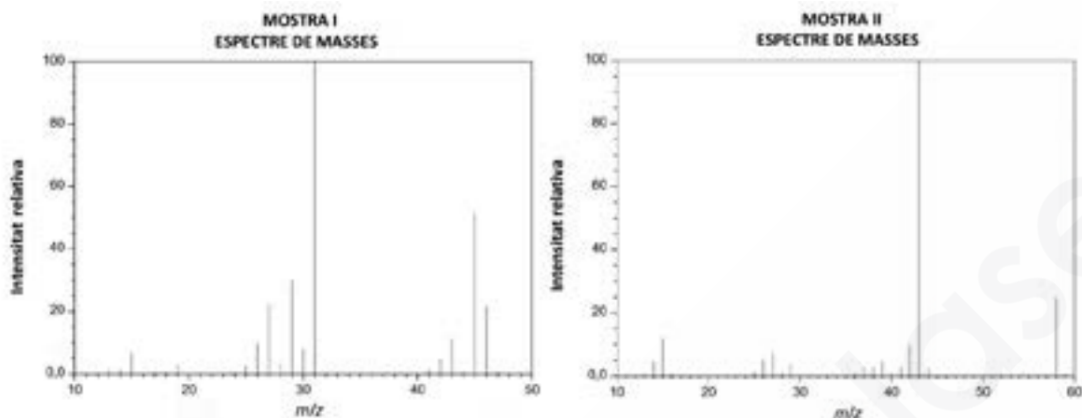


2. En una empresa química que produeix dissolvents tenen un problema d'identificació de dos lots elaborats, un d'etanol i un altre d'acetona, també anomenada *propanona*. Per poder identificar quin dissolvent hi ha en cada lot, realitzen un espectre de masses d'una mostra de cada un dels lots.



- a) Formuleu l'etanol i l'acetona. Indiqueu quin és el pic base i el pic de l'ió molecular dels espectres de cada mostra. Quina informació ens donen aquests pics? Quin espectre correspon a cada dissolvent? Justifiqueu les respostes.

[1,25 punts]

- b) El pic característic per a identificar una cetona en un espectre d'absorció infraroig (IR) correspon a un nombre d'ona de  $1700\text{ cm}^{-1}$ . Calculeu la longitud d'ona, la freqüència i l'energia corresponents a aquest pic.

[1,25 punts]

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

Velocitat de la llum en el buit:  $c = 3,0 \times 10^8\text{ m s}^{-1}$ .

Constant de Planck:  $h = 6,63 \times 10^{-34}\text{ J s}$ .

## Solució:

### Pregunta 2a

#### Formulació

Etanol:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$

Acetona o propanona:  $\text{CH}_3\text{COCH}_3$

(-0,5 p. si no formulen bé qualsevol dels compostos.)

Identificació del pic base i el pic de l'ió molecular

#### Mostra I

Pic base:  $m/z = 31$

Pic de l'ió molecular:  $m/z = 46$

[0,25 p.]

#### Mostra II

Pic base:  $m/z = 43$

Pic de l'ió molecular:  $m/z = 58$

[0,25 p.]

#### Informació que donen els pics

- El *pic base* és el fragment més estable i s'hi assigna sempre una intensitat relativa del 100%, ja que és el més abundant en la mescla d'ions que es produeix.
- El *pic d'ió molecular* (o ió pare) apareix com el pic de massa més gran i correspon a la massa molar del compost. La molècula s'ha ionitzat, però no s'ha trencat.

[0,25 p.]

#### Identificació justificada dels espectres

Càlcul de la massa molar

- Massa molar del  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ :  $6 \times 1 + 2 \times 12 + 1 \times 16 = 46 \text{ g mol}^{-1}$
- Massa molar del  $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ :  $6 \times 1 + 3 \times 12 + 1 \times 16 = 58 \text{ g mol}^{-1}$

[0,10 p.]

Identificació i justificació

- La **mostra I és l'etanol**, perquè el pic del seu ió molecular coincideix amb la massa molar de l'etanol  $46 \text{ g mol}^{-1}$ .
- La **mostra II és l'acetona**, perquè el pic del seu ió molecular coincideix amb la massa molar de l'acetona o propanona  $58 \text{ g mol}^{-1}$ .

[0,40 p.]

## Pregunta 2b

### Càlcul de la longitud d'ona

Nombre d'ona =  $1.700 \text{ cm}^{-1}$

- El nombre d'ona és l'invers de la longitud d'ona:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$

[0,10 p.]

$$\lambda = \frac{1}{\bar{\nu}} \Rightarrow \lambda = \frac{1}{1.700 \text{ cm}^{-1}} = 5,882 \times 10^{-4} \text{ cm}$$

$$\lambda = 5,882 \times 10^{-4} \text{ cm}$$

[0,35 p.]

### Càlcul de la freqüència

$$\lambda = c / \nu$$

[0,10 p.]

- És necessari canviar les unitats de la longitud d'ona de cm a m:

$$5,882 \times 10^{-4} \text{ cm} = 5,882 \times 10^{-6} \text{ m}$$

$$\nu = c / \lambda \Rightarrow \nu = 3,0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1} / 5,882 \times 10^{-6} \text{ m}$$

$$\nu = 5,10 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} \quad (\text{o } 5,10 \times 10^{13} \text{ Hz})$$

[0,30 p.]

### Càlcul de l'energia

- L'equació de Planck relaciona l'energia de la radiació amb la freqüència:

$$E = h \nu$$

[0,10 p.]

$$E = h \nu \Rightarrow E = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 5,10 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$$

$$E = 3,38 \times 10^{-20} \text{ J}$$

[0,30 p.]