

SOLUCIONS EXEMPLES TÈCNIQUES ESPECTROSCÒPIQUES D'ANÀLISI

Solució IR:

Amb la mateixa fórmula molecular C_4H_8O tenim dos dels tres compostos isòmers pels que demana el problema:



Ja que el propanal té per fórmula C_3H_6O i no pot ser.

L'espectre IR té un marcat pic a 1050 cm^{-1} , un altre a 1650 cm^{-1} i una banda a $3200-3500\text{ cm}^{-1}$, que podríem correspondre als enllaços C-O dels alcohols, a C=C dels alquens i al O-H dels alcohols, respectivament, i no s'aprecia un pic significatiu entre $1650-1760\text{ cm}^{-1}$ corresponent a l'enllaç C=O de les cetones.

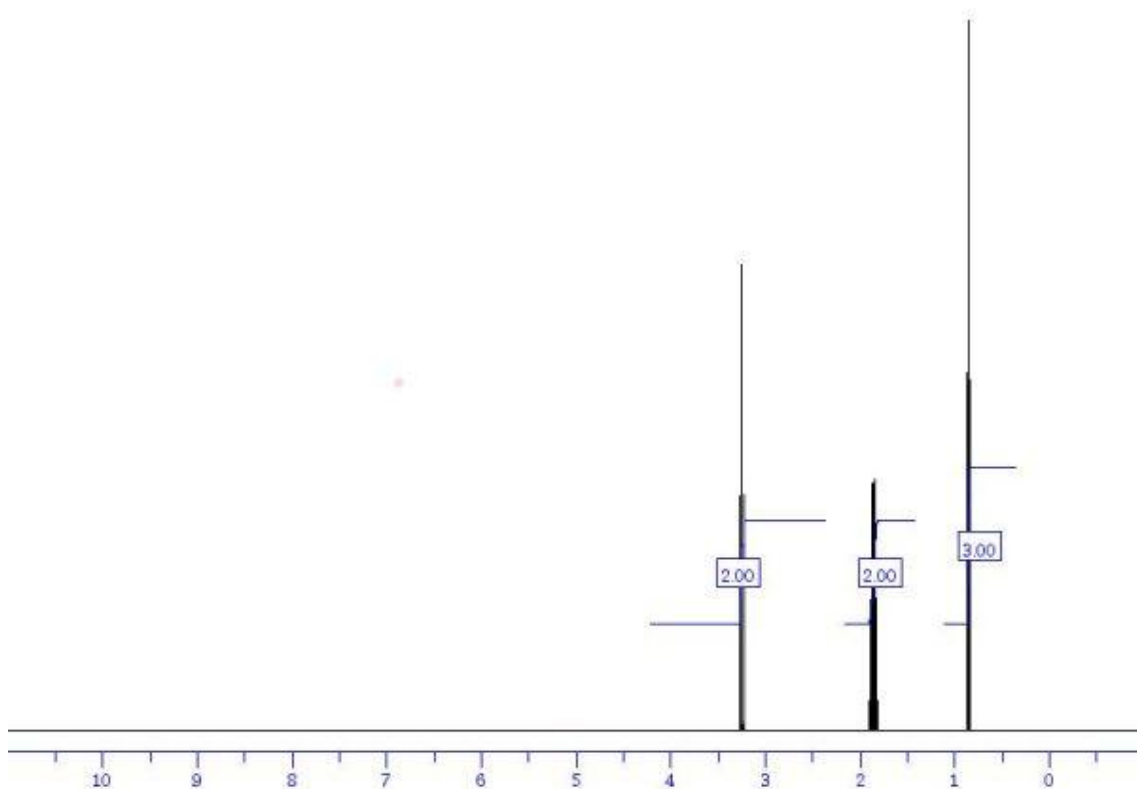
Podem concloure que estem davant el **3-buten-1-ol**.

Solució RMN:

Si l'alumnat ha estudiat alguna de les reaccions químiques d'obtenció de compostos orgànics, és possible que hagi vist aquesta reacció i ja sàpiga que l'halogen s'ancora en el carboni del doble enllaç amb menys hidrògens (regla de Markovnikov) i, per tant, que s'ha de tractar del 2-bromopropà ($CH_3-CHBr-CH_3$).

L'espectre RMN ho corrobora ja que per l'estructura simètrica de la molècula, que només té dos tipus d'hidrògens, només han de sortir dos pics en la proporció 1 a 6, i això és el que mostra l'espectre.

Si el compost fora l'1-bromopropà ($\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{Br}$) ens trobaríem tres grups d'hidrògens amb diferent apantallament, el que donaria un espectre amb tres pics en la proporció 3:2:2, com es veu en l'espectre RMN de sota:



Solució EM

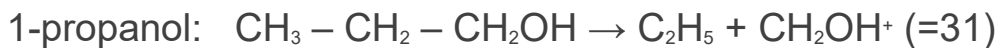
Si el compost té per fórmula empírica $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$, tindrà una massa:

$$M(\text{C}_3\text{H}_8\text{O}) = 3 \times 12 + 8 \times 1 + 1 \times 16 = 60$$

o múltiple. Com 60 coincideix amb la massa de l'ió molecular, M^+ , que dona l'espectre, es pot afirmar que la fórmula molecular és també: $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$.

Amb aquesta fórmula existeixen diferents isòmers: 1-propanol, 2-propanol i l'etil-metil eter.

En l'espectre de masses trobem el pic més abundant amb una massa 31, corresponent a CH_2OH^+ , que no trobaríem al 2-propanol i que no seria el més abundant a l'etil-metil eter, ja que els trencaments principals serien:



Pel que es pot concloure que la substància problema és l'**1-propanol**.