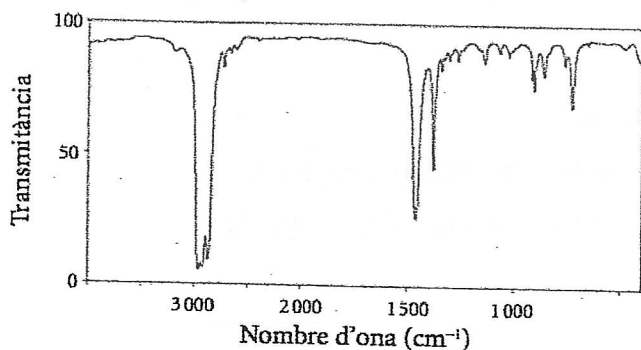


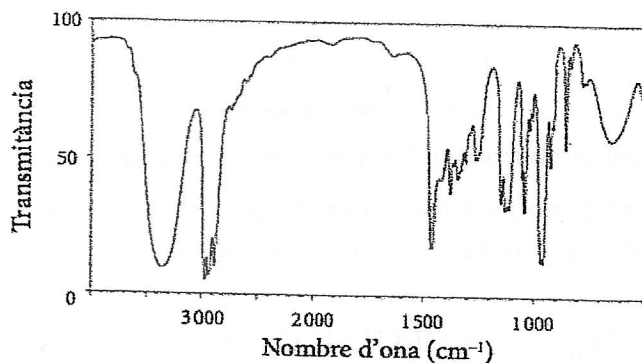
SOLUCIONS IR

5. Tenim dues ampolles, A i B, que contenen un líquid pur i transparent que pot correspondre a les substàncies orgàniques següents: 3-pentanona ($C_5H_{10}O$), 3-pentanol ($C_5H_{12}O$) o pentà (C_5H_{12}). En no saber quina substància hi ha en cadascuna de les ampolles, hem sotmès les mostres a una espectroscòpia infraroja. Els espectres obtinguts per a cada ampolla són els següents:

Ampolla A



Ampolla B



- Identifiqueu quina substància orgànica conté cada ampolla. Expliqueu raonadament la resposta. [1 punt]
- Calculeu la temperatura d'ebullició del pentà si, en condicions estàndard i a 298 K, té una entalpia de vaporització de $26,7 \text{ kJ mol}^{-1}$ i té una entropia de vaporització de $84,4 \text{ J K mol}^{-1}$. Suposeu que les variacions d'entalpia (ΔH°) i entropia (ΔS°) no es modifiquen amb la temperatura. [1 punt]

DADES: Absorcions de diversos grups funcionals a l'infraroig (IR)

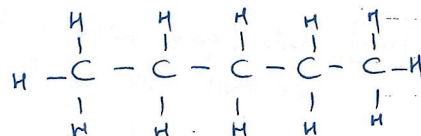
Enllaç	Nombre d'ona (cm^{-1})
C=O	1 000-1 300
CO	1 650-1 760
C-H	2 850-3 000
O-H	3 230-3 550

SOLUCIÓ

a) Ampolla A

Apareix en el gràfic un senyal entre $2800-3000 \text{ cm}^{-1}$ indicent presència de la vibració de l'enllaç C-H.

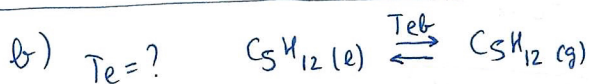
És el pentà



Ampolla B

És el 3-pentanol perquè tenim un senyal de $3230-3550$ que ens indica que femme part de l'enllaç O-H del grup funcional alcohol.

La 3-pentanona no està present ja que el grup carbonil (CO) es detecta a $1650-1760 \text{ cm}^{-1}$ i en aquesta nombre d'ona no hi ha present cap senyal en cap gràfic.



$\Delta H_r^\circ = 26700 \text{ J/mol}$

$\Delta S_r^\circ = 84,4 \text{ J/K mol}$

En equilibri

$\Delta G^\circ = 0 \Rightarrow$

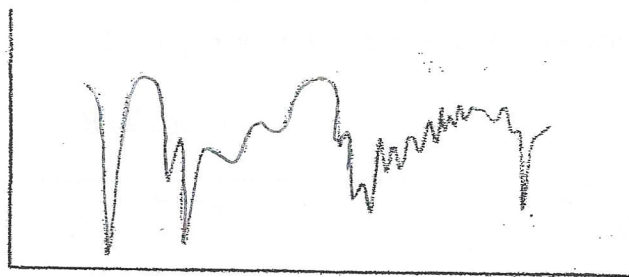
$\Delta G_r^\circ = \Delta H_r^\circ - T\Delta S_r^\circ$

$0 = \Delta H_r^\circ - T\Delta S_r^\circ \Rightarrow$

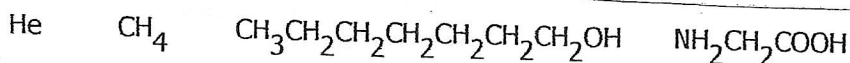
$T_e = \frac{+\Delta H_r^\circ}{+\Delta S_r^\circ} = \frac{26700}{84,4} = 316,35$

6. Per a determinar l'estructura de les molècules, la química utilitza diferents tècniques, com ara l'espectroscòpia infraroja, la ressonància magnètica nuclear o l'espectrometria de masses. En la figura següent, es mostra l'espectre infraroig (IR) d'una molècula:

Espectre infraroig d'una molècula



- a. Indiqueu quina magnitud es representa en cadascun dels eixos d'un espectre infraroig. Expliqueu breument el procés que experimenta un compost químic quan és irradiat amb radiació infraroja. [1]
- b. Considereu les substàncies químiques següents:



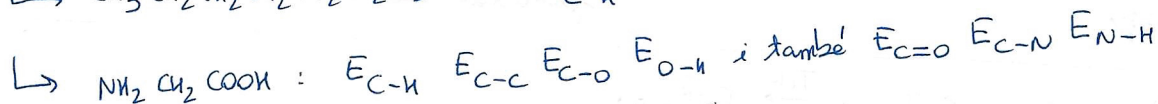
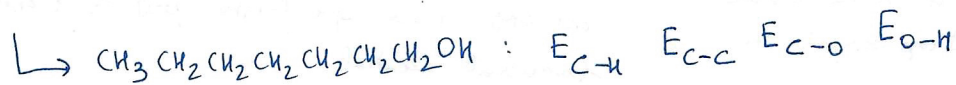
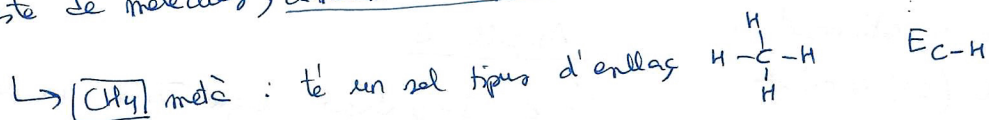
Indiqueu quin o quins compostos no produeix cap pic en un espectre infraroig i quin en produeix més. Justifiqueu les respostes. [1 punt]

- a) • Em l'eix d'ordenades es representa la transmissió (T) o (A) l'absorbència en %.
Em l'eix d'abscisses es representa el nombre d'ona ($\bar{\nu}$) o la longitud d'ona (λ) o la freqüència (ν) o l'energia (E).

• Procés que experimenta un compost al ser irradiat amb IR: Quan una molècula absorbeix radiació infraroja es produeixen canvis d'energia vibracional degut a les deformacions dels enllacs per tensió, flexió, etc. L'energia d'aquest tipus de radiació és capaç de provocar un salt des del nivell d'energia fonamental vibracional a un nivell excitat. L'espectre de transmissió obtingut per una molècula es caracteritza per una sèrie de pics invertits, de diferents altesres que corresponen a les diferents transicions vibracionals dels enllacs de la molècula.

- b) [He] heli (gas noble). No donarà cap pic perquè té àtoms aïllats, no té cap enllaç per tant no té la possibilitat de cap vibració.

De la resta de molècules, donarem més pics les que tinguin major nombre d'enllacs diferents



Per tant, hi haurà més pics en la molècula [NH₂CH₂COOH]