

SOLUCIONS

1. (Vegeu la figura del text.)

Processos bàsics en espectrometria de masses:

- La mostra s'ha de volatilitzar i portar a pressions molt baixes.
- A la càmera d'ionització i per acció d'un feix d'electrons d'alta energia, el compost (M) es trenca en diferents fragments que tenen càrrega, normalment positiva i de valor unitat. Pot quedar compost sense trencar-se i carregat positivament (M^+ , ió molecular).
- Els ions són accelerats en presència d'un camp elèctric.
- Els diferents fragments carregats són separats segons el valor de la relació massa/càrrega que tenen, per acció d'un camp magnètic.
- Es detecta la quantitat de cadascun dels diferents fragments en un col·lector i per un multiplicador electrònic. Els senyals són processats per un ordinador.

2. L'àtom brom (Br) s'identifica a l'espectre de masses per la presència dels pics M^+ i $(M^{+2})^+$ amb la mateixa alçada, mentre que l'àtom de clor (Cl) un és un terç respecte a l'altre. La presència d'un grup hidroxil és perquè es detecta un pic $M-18$ corresponent a la pèrdua d'una aigua. La presència d'un grup metil (ramificat) provoca que el pic corresponent a $M-15$ sigui rellevant.

3. Compost A: hexà; compost B: 3-metil-pentà; compost C: 2-metil-pentà

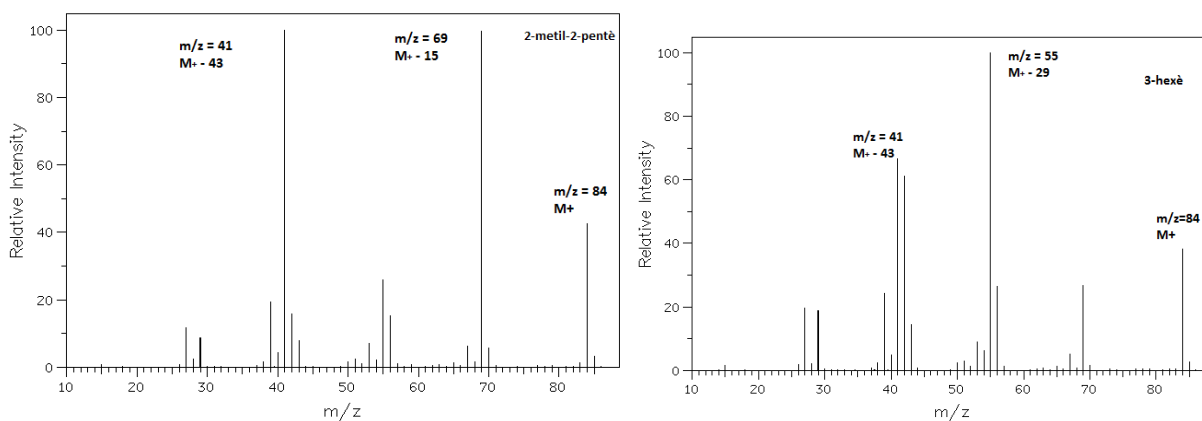
4. $m/z = 78, 80$ corresponent a l'ió molecular M^+ i $(M^{+2})^+$, (no es veu que l'un és un terç de l'altre; sí que hi ha diferència d'alçada); $m/z = 49, 51$ és $(M-29)^+$ s'ha dividit la molècula per la meitat; $m/z = 42$ és $(M-X)^+$ i formació de carbocatió al·lílic; $m/z = 29$ és $(M-X-14)^+$

5. Isòmer A: 2-metil-2-propanol (tert-butanol); Isòmer B: 2-butanol; Isòmer C: 1-butanol; Isòmer D: 2-metil-1-propanol (iso-butanol)

6. Butanal ($CH_3-CH_2-CH_2-HC=O$)

7. Àcid acètic (CH_3-COOH)

8. Al 2-metil-2-pentè: $M^+ = 84$ (ió molecular); $M-15 = 69$ (la molècula s'ha fragmentat en la ramificació); $M-43 = 41$ (s'ha format un carbocatió al·lílic per trencament de l'enllaç contigu al doble enllaç). Al 3-hexè: $M^+ = 84$ (ió molecular); $M-29 = 55$ (la molècula es fragmenta a l'enllaç contigu al doble enllaç); $M-43 = 41$ (s'ha format un carbocatió al·lílic). Vegeu els espectres adjunts.



9. Dibromometà (CH_2Br_2)

10. La massa molecular de la butanona és 72. L'ió de quocient massa/càrrega 72 pot correspondre a la butanona ionitzada: $(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COCH}_3)^+$ (ió molecular). El pic de quocient massa/càrrega 43 pot correspondre al fragment CH_3CO^+ , ja que el seu pes (dos carbonis, tres hidrògens i un oxigen) és de 43. Si en lloc de la butanona tinguéssim la propanona, CH_3COCH_3 , no es veuria el pic de 72, perquè la propanona té menys massa molecular. Sí que es podria veure el pic de 43, ja que la propanona també pot fragmentar-se i donar l'ió CH_3CO^+ , tal com feia la butanona.