Química

Tècniques espectroscòpiques

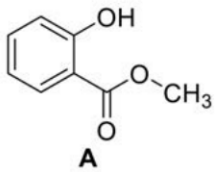
Exercicis · 15 exercicis

Proves d'accés a la universitat (PAU) de Catalunya. Ordenats del més recent al més antic.
Retalls dels exàmens i pautes oficials (selecat.cat / universitats.gencat.cat).

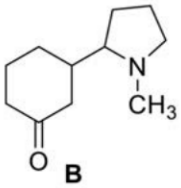
7. L'infraroig és la part de l'espectre electromagnètic compresa entre les regions visible i de microones. És una radiació poc energètica que només provoca canvis en els nivells d'energia vibracional dels enllaços de les molècules. És a dir, l'energia d'aquesta radiació és capaç de provocar un salt des del nivell fonamental d'energia vibracional fins a un nivell excitat. L'infraroig és la tècnica espectroscòpica ideal per a identificar ràpidament els tipus de grups funcionals presents en un determinat compost orgànic o material.

a) Encercleu i anomeneu tots els grups funcionals de les molècules A, B i C que s'indiquen a continuació. Dibuixeu les tres molècules A, B i C afegint els parells d'electrons no compartits en els heteroàtoms (àtoms que no són C ni H).

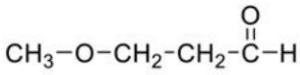
[1,25 punts]



A



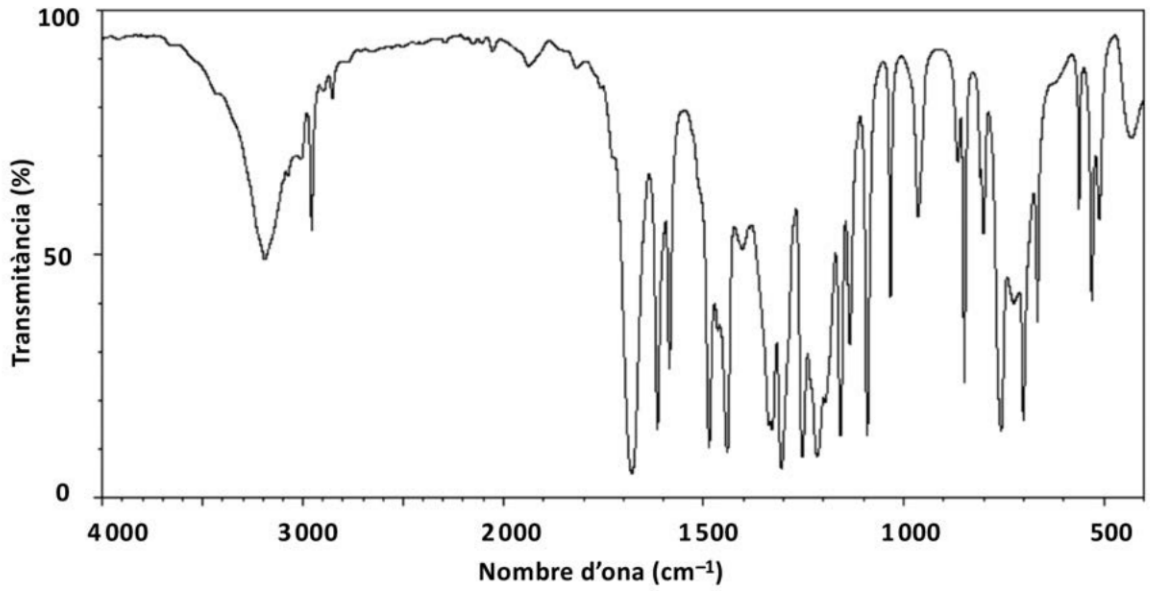
B



C

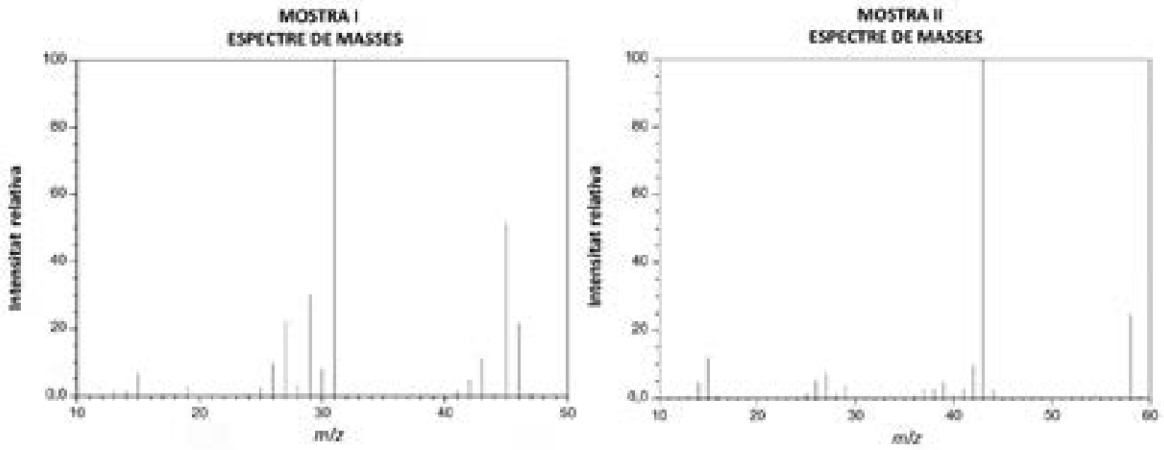
b) A continuació es mostra l'espectre d'infraroig d'una de les molècules (A, B o C) de l'apartat anterior. Raoneu a quina de les tres molècules pertany l'espectre. Indiqueu quin o quins senyals de l'espectre us permeten identificar la molècula i quins senyals serien comuns en les tres molècules.

[1,25 punts]



Dades espectroscòpiques a la regió de l'infraroig	
Enllaç	*Interval del nombre d'ona (cm^{-1})*
C—H	2 850-3 000
O—H	3 550-3 200
C=C	1 500-1 650
C=O	1 650-1 750
C—O	1 000-1 300
C—N	1 100-1 250

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 1 700 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: $c = 3{,}0 \times 10^8$ m s^{-1}.
Constant de Planck: $h = 6{,}63 \times 10^{-34}$ J s.

3. PAU 2021 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 1

1. Els gavarrons o grataculs són els fruits del roser boscà. El color vermell del fruit madur és degut a la presència d'antocianines, que absorbeixen la radiació verda de la llum blanca que li arriba i transmeten el color vermell complementari.

a) D'acord amb la taula de l'espectre electromagnètic visible següent, calculeu el rang de freqüència i el rang d'energia en què observem l'absorció de les antocianines.

Color de la llum absorbida	*Rang de longituds d'ona*
vermell	618-780 nm
taronja	581-618 nm
groc	570-581 nm
verd	497-570 nm
cian	476-497 nm
blau	427-476 nm
violat	380-427 nm

[1,25 punts]

b) Expliqueu quin és el fenomen espectroscòpic en què es diferencien les tècniques d'IR i UV-Vis.

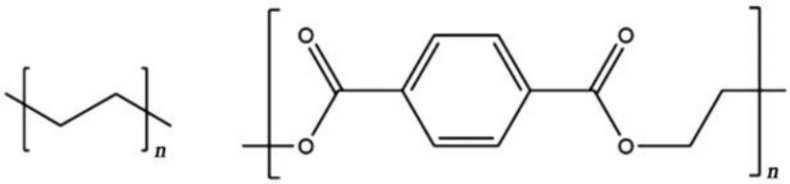
L'espectre visible es troba entre l'infraroig i l'ultraviolat. Ordeneu els tres rangs espectrals per ordre creixent d'energia.

[1,25 punts]

DADES: Constant de Planck: $h = 6{,}63 \times 10^{-34}$ J s.
Velocitat de la llum en el buit: $c = 3{,}0 \times 10^{8}$ m s^{-1}.

4. PAU 2020 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 2

2. La policia ha trobat una màrfega d'acampada que podria resoldre una investigació. Per això cal identificar el seu tipus de polímer entre el polietilè i el polièster. Disposem d'un espectrofotòmetre d'infraroig per a esbrinar-ne la identificació. Les estructures dels dos polímers són:

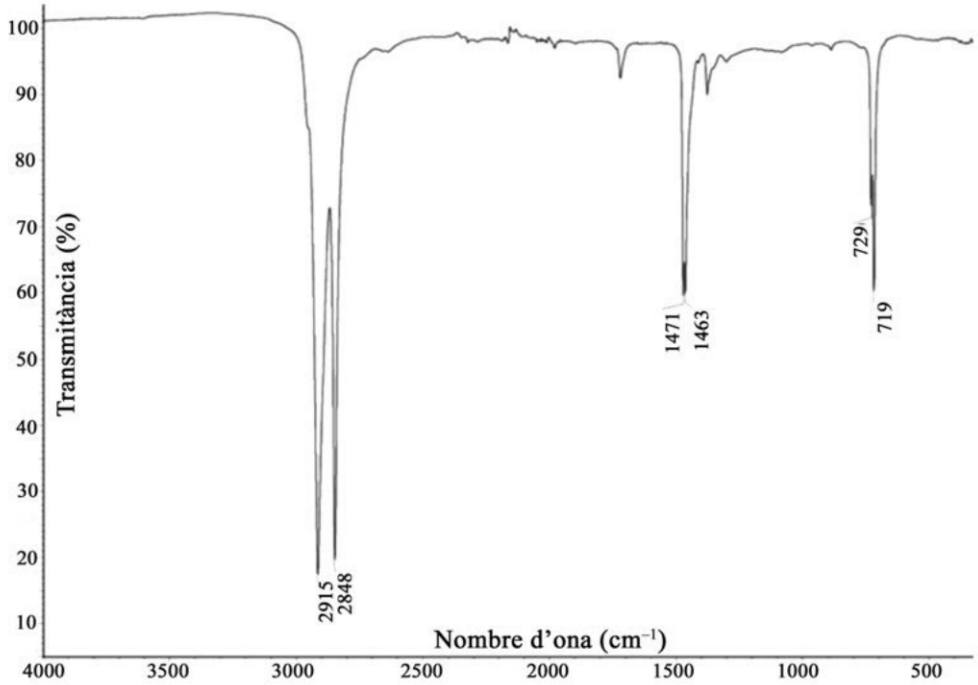


polietilè

polièster

***a*)** Descriviu els fonaments de la tècnica espectroscòpica d'infraroig. Justifiqueu quin és el polímer d'acord amb el seu espectre d'infraroig:

[1,25 punts]



***b*)** Identifiqueu el pic de més energia de l'espectre anterior. Calculeu-ne la freqüència, la longitud d'ona i l'energia corresponents.

[1,25 punts]

DADES: Velocitat de la llum: $c = 3 \times 10^8\ \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.
Constant de Planck: $h = 6{,}63 \times 10^{-34}\ \text{J} \cdot \text{s}$.

Dades espectroscòpiques a la regió de l'infraroig

Enllaç	*Tipus de compost*	*Interval de nombre d'ona (cm^{-1})*
C—H	alcans (C—C—H)	2 970-2 850
	alquens (C=C—H)	3 095-3 010
C—O	alcohols, èters, àcids carboxílics, èsters	1 300-1 050
C=O	aldehids, cetones, àcids carboxílics, èsters	1 760-1 690

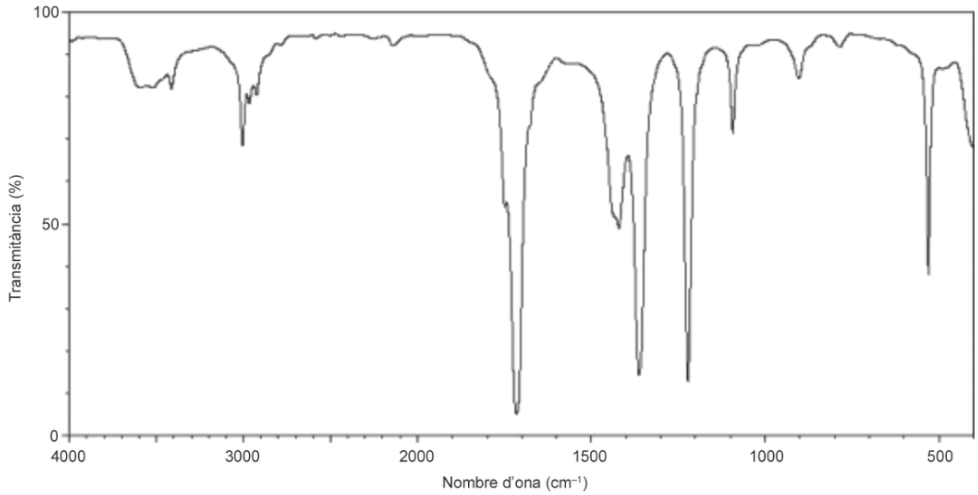
7. L'acetona, també coneguda com a *propanona*, és una substància de baix punt d'ebullició (56 °C) i miscible en aigua. Es pot obtenir industrialment mitjançant la reacció de deshidrogenació del propan-2-ol, també anomenat *2-propanol*, segons la reacció química següent en fase gasosa:

$$CH_3CHOHCH_3(g) \rightleftarrows CH_3COCH_3(g) + H_2(g) \quad \Delta H° > 0$$

a) Per a fabricar la màxima quantitat d'acetona, convé treballar a temperatures altes o baixes? A pressions altes o baixes? Justifiqueu les respostes.

[1 punt]

b) Al laboratori, a una temperatura de 25 °C, tenim una mostra líquida que volem etiquetar, però no sabem si es tracta de l'acetona o del propan-2-ol. Mitjançant un espectrofotòmetre d'infraroig obtenim el gràfic següent per a la mostra líquida:



Expliqueu en què es basa l'espectroscòpia infraroja i què representen els pics que s'obtenen amb aquesta tècnica. A partir del gràfic anterior i de les dades de la taula següent, indiqueu a quina substància correspon la mostra líquida i justifiqueu la resposta.

[1 punt]

Dades espectroscòpiques a la regió de l'infraroig

Enllaç	*Tipus de compost*	*Interval de nombre d'ona (cm^{-1})*
C—H	alcans (C—C—H)	2 850-2 970; 1 340-1 470
	alquens (C=C—H)	3 010-3 095; 675-995
O—H	alcohols	3 200-3 600
	àcids carboxílics	2 500-2 700
C—O	alcohols, èters, àcids carboxílics, èsters	1 050-1 300
C=O	aldehids, cetones, àcids carboxílics, èsters	1 690-1 760

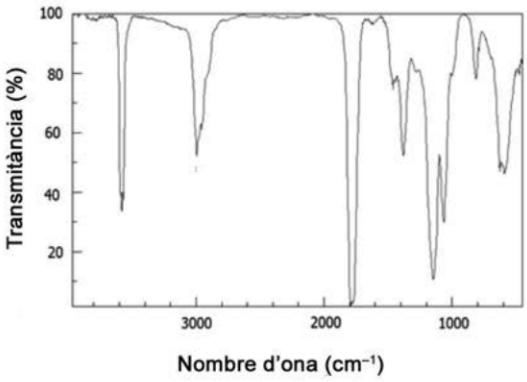
Proves d'accés a la universitat 2019

Química

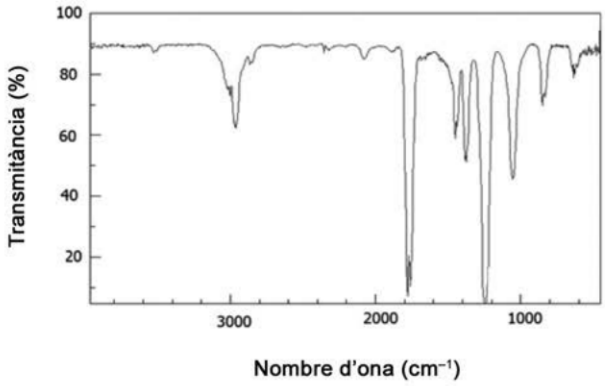
6. PAU 2017 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 5

5. Tenim dues ampolles, A i B, que contenen un líquid pur i transparent que pot correspondre a les substàncies orgàniques següents: etanoat d'etil ($CH_3COOCH_2CH_3$) o àcid propanoic. Hem sotmès les mostres a l'espectroscòpia infraroja per a determinar quina substància hi ha a cada ampolla. Els espectres obtinguts són els següents:

Ampolla A



Ampolla B



a) Expliqueu què li succeeix a una molècula quan absorbeix radiació infraroja. Quina informació proporciona l'espectroscòpia infraroja? Identifiqueu la substància orgànica que conté cada ampolla i justifiqueu la resposta.

[1 punt]

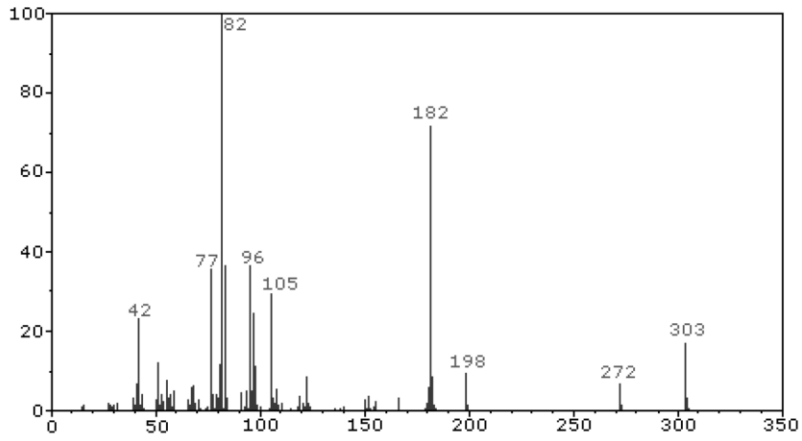
b) Una altra tècnica que s'utilitza per a identificar l'estructura química d'una molècula és l'espectrometria de masses. Expliqueu què li succeeix a una molècula quan la sotmetem a una espectrometria de masses. Què detectem en un espectre de masses? Quina informació proporciona?

[1 punt]

DADES: Absorcions en l'infraroig (IR) de diferents grups funcionals:

Enllaç	*Interval de nombres d'ona (cm^{-1})*
C—O	1 000-1 300
C=O	1 650-1 750
C—H	2 850-3 000
O—H	3 230-3 550

4. El consum de substàncies estupefaents comporta un greu problema de salut pública. Aquestes substàncies romanen acumulades en diferents parts del cos durant un cert temps, que varia des de dies fins a mesos. Per exemple, 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.



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

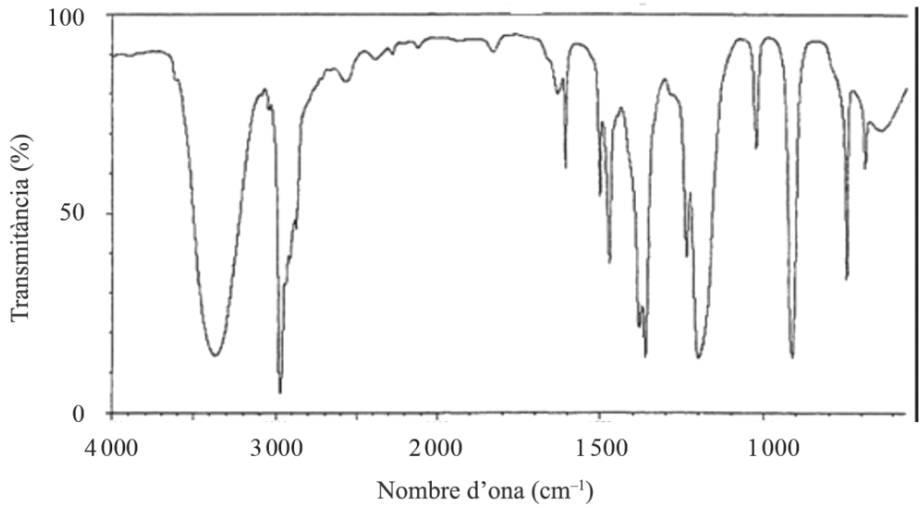
[1 punt]

b) A 250 °C de temperatura i a 1 atm de pressió, la cocaïna es troba en estat gasós. Calculeu el volum molar de la cocaïna en aquestes condicions de temperatura i pressió, suposant que es tracta d'un gas ideal. Quines diferències hi ha entre un gas real i un gas ideal?

[1 punt]

DADES: Masses atòmiques relatives: C = 12; H = 1; N = 14; O =16.
Constant universal dels gasos ideals: $R = 0{,}082$ atm L mol^{-1} K^{-1}.

7. Una indústria química ha utilitzat l'espectroscòpia d'infraroig (IR) per a identificar un compost pur. Experimentalment s'ha obtingut l'espectre següent:



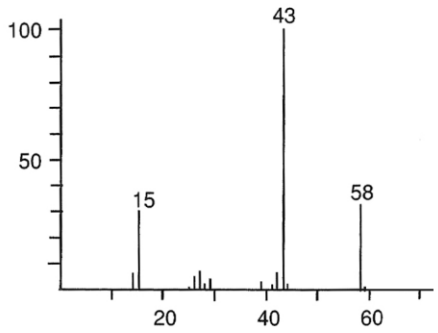
a) Què li passa a una molècula quan absorbeix radiació infraroja? Justifiqueu si el compost pur és el 2-propanol o l'àcid propanoic.
[1 punt]

b) La zona de 700 a 1 200 cm^{-1} d'un espectre IR s'anomena *empremta dactilar* i és característica de cada compost. En l'espectre obtingut observem un pic intens a 900 cm^{-1} en aquesta zona. Calculeu la longitud d'ona, la freqüència i l'energia d'aquest pic.
[1 punt]

DADES: Constant de Planck: $h = 6{,}63 \times 10^{-34}$ J s
Velocitat de la llum en el buit: $c = 3{,}00 \times 10^{8}$ m s^{-1}
Absorció de diferents tipus d'enllaç en la regió de l'infraroig:

Enllaç	*Tipus de compost*	*Interval de nombre d'ona (cm^{-1})*
C—H	alcans (C—C—H)	2 850-2 970 1 340-1 470
	alquens (C=C—H)	3 010-3 095 675-995
O—H	alcohols	3 200-3 600
	àcids carboxílics	2 500-2 700
C—O	alcohols, èters, àcids carboxílics, èsters	1 050-1 300
C=O	aldehids, cetones, àcids carboxílics, èsters	1 690-1 760

6. La producció de la propanona, CH_3COCH_3, anomenada habitualment *acetona*, és un indicador de creixement econòmic pel gran ús que se'n fa en la indústria de plàstics, fibres i medicaments, entre altres productes. Per a comprovar la puresa de l'acetona produïda es poden emprar tècniques com l'espectrometria de masses o l'espectrofotometria d'infraroig. En la figura es mostra l'espectre de masses de l'acetona:



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.

[1 punt]

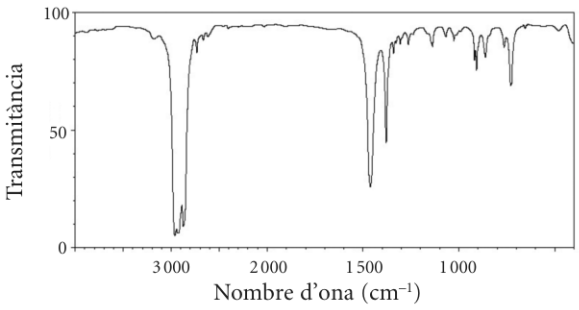
b) Quines magnituds es representen en els dos eixos d'un espectre infraroig? Quina informació útil ens proporcionaria l'espectre infraroig d'una mostra d'acetona per comprovar si està o no impurificada amb 2-propanol?

[1 punt]

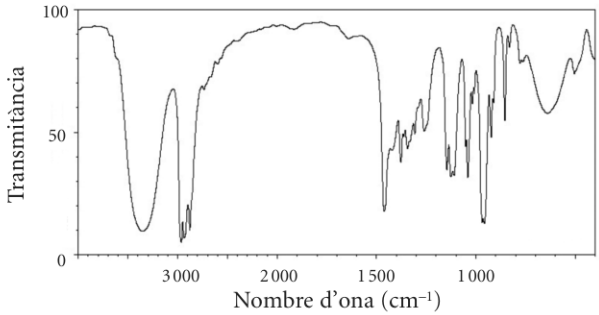
DADES: Masses atòmiques relatives: H = 1,0; C = 12,0; O = 16,0

7. 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



a) Identifiqueu quina substància orgànica conté cada ampolla. Expliqueu raonadament la resposta.

[1 punt]

b) Calculeu la temperatura d'ebullició del pentà si, en condicions estàndard i a 298 K, té una entalpia de vaporització de 26,7 kJ mol^{-1} i té una entropia de vaporització de 84,4 J K mol^{-1}. Suposeu que les variacions d'entalpia ($\Delta H°$) i entropia ($\Delta S°$) no es modifiquen amb la temperatura.

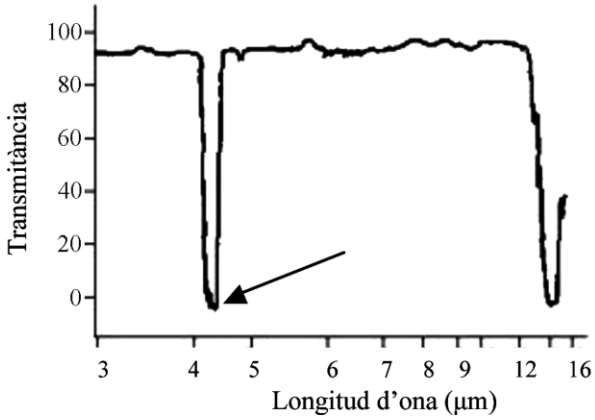
[1 punt]

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

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

4. El diòxid de carboni, CO_2, és un dels gasos d'efecte d'hivernacle més coneguts, ja que absorbeix part de la radiació infraroja emesa per la superfície de la Terra. L'espectre infraroig (IR) del diòxid de carboni mostra que aquest gas absorbeix intensament la radiació electromagnètica de 4,237 μm de longitud d'ona.

Espectre IR del CO_2



a) Calculeu la freqüència i l'energia d'aquesta radiació absorbida pel diòxid de carboni.

[1 punt]

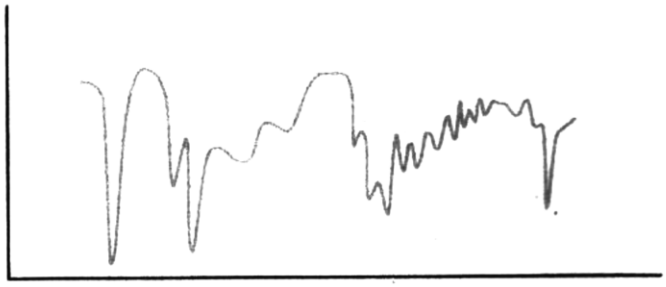
b) Expliqueu breument què produeix la radiació electromagnètica infraroja en una molècula de diòxid de carboni. Per què les molècules d'aquest gas absorbeixen només certes longituds d'ona de radiació infraroja?

[1 punt]

DADES: Constant de Planck: $h = 6{,}63 \times 10^{-34}$ J s
Velocitat de la llum: $c = 3{,}00 \times 10^{8}$ m s^{-1}

7. 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 punt]

b) Considereu les substàncies químiques següents:

He CH_4 $CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2OH$ NH_2CH_2COOH

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

[1 punt]

Generalitat de Catalunya
Consell Interuniversitari de Catalunya
Organització de Proves d'Accés a la Universitat

Proves d'Accés a la Universitat. Curs 2010-2011

Química

13. PAU 2010 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 4

4. Per a passar un mol de molècules de HCl des del nivell més baix de vibració (estat fonamental) fins al nivell de vibració següent es requereix una energia de 32,7 kJ.

a) Calculeu l'energia, expressada en J, que es necessita per a passar una molècula de HCl des de l'estat fonamental fins al nivell de vibració següent. Quin tipus de radiació electromagnètica hauria d'absorbir una molècula de HCl per a realitzar aquest procés?

[1 punt]

b) Calculeu la freqüència i la longitud d'ona de la radiació electromagnètica que hauria d'absorbir una molècula de HCl per a passar de l'estat fonamental al nivell de vibració següent.

[1 punt]

DADES: Constant d'Avogadro = $N_A = 6{,}02 \cdot 10^{23}\ \text{mol}^{-1}$.
Constant de Planck = $h = 6{,}63 \cdot 10^{-34}\ \text{J} \cdot \text{s}$.
Velocitat de la llum = $c = 3{,}0 \cdot 10^{8}\ \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.

14. PAU 2010 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 6

6. El diòxid de carboni, un dels gasos de l'atmosfera, absorbeix part de la radiació infraroja emesa per la superfície de la Terra.

a) Expliqueu què li succeeix a la molècula de diòxid de carboni quan absorbeix un fotó de radiació infraroja. Per què les molècules de diòxid de carboni absorbeixen només certes freqüències de radiació infraroja?

[1 punt]

b) Calculeu la freqüència i la longitud d'ona d'un fotó de radiació infraroja que té una energia d'$1{,}33 \cdot 10^{-20}$ J.

[1 punt]

DADES: Constant de Planck = $h = 6{,}63 \cdot 10^{-34}\ \text{J} \cdot \text{s}$.
Velocitat de la llum = $c = 3 \cdot 10^{8}\ \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.

7. Una radiació electromagnètica es pot definir mitjançant qualsevol dels paràmetres següents: energia, longitud d'ona, freqüència o nombre d'ona.

a) Apliquem a una determinada molècula les radiacions electromagnètiques que s'indiquen a la taula següent. Ordeneu-les de més a menys energia i justifiqueu la resposta.

[1 punt]

Radiacions electromagnètiques

Radiació	*radiació 1*	*radiació 2*	*radiació 3*
Valor i unitat	$2{,}65 \cdot 10^{-17}$ J	$2{,}70 \cdot 10^{-7}$ m	$5{,}10 \cdot 10^{14}$ s^{-1}

b) Les molècules d'ozó (O_3) de l'estratosfera absorbeixen certes radiacions ultraviolades i ajuden a protegir els éssers humans de patir càncer de pell. D'altra banda, les molècules de diòxid de carboni (CO_2) de la troposfera absorbeixen certes radiacions infraroges emeses per la superfície de la Terra i provoquen l'escalfament de l'atmosfera per l'efecte d'hivernacle. Expliqueu quins tipus de canvis es produeixen en les molècules d'ozó i de diòxid de carboni en aquests processos d'absorció de radiació electromagnètica.

[1 punt]

DADES: Constant de Planck = $h = 6{,}63 \cdot 10^{-34}$ J · s.
Velocitat de la llum = $c = 3{,}0 \cdot 10^{8}$ m · s^{-1}.

L'Institut d'Estudis Catalans ha tingut cura de la correcció lingüística i de l'edició d'aquesta prova d'accés