

Examen Final Modelo Nro 2- Análisis Espectroscópico – Año 2015

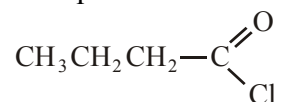
Apellido y nombre:	Fecha:
Nro. Legajo:	Año de Cursado

Puntaje

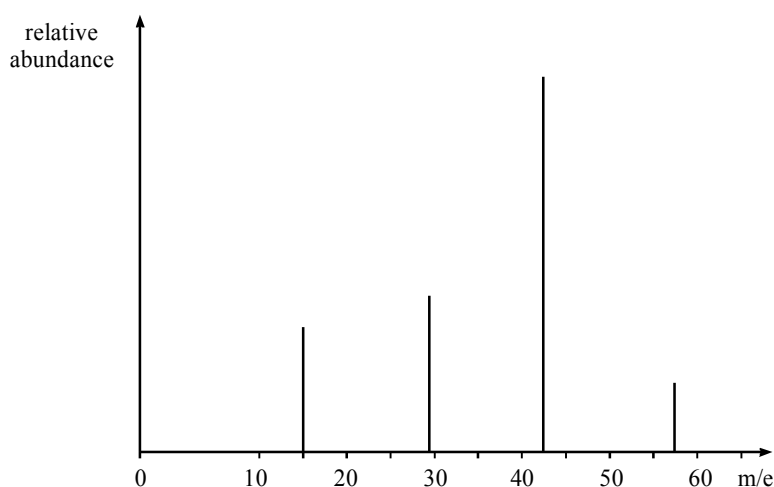
Preguntas				Integrados			Total
Masa 1,2,3	UV-Vis 4	IR 5,6,7,8	RMN 9	1	2	3	

Primera Parte. Cuestionario

1- Indique para el compuesto cuya fórmula molecular se muestra abajo, los picos que espera encontrar en la zona del ión molecular. Indique el valor de m/z para cada uno.



2- El gráfico mostrado corresponde al espectro de masa de un compuesto orgánico **A**, cuya fórmula molecular es C_4H_{10} . Escriba los isómeros estructurales correspondientes a esta fórmula molecular.



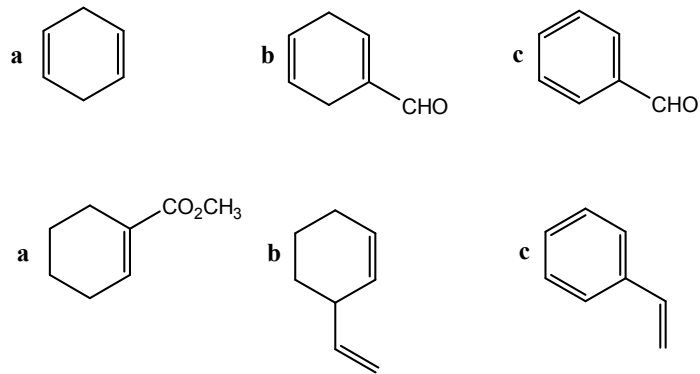
Deduzca la estructura más probable para **A** (pregunta 3), considerando las fragmentaciones que justifiquen los picos a $m/z = 43, 29$ y 15 . Indique claramente las estructuras de los fragmentos mencionados.

3-a) Dadas los siguientes tipos de compuestos, indique aproximadamente cuantos picos esperara en su espectro de masa si se ioniza por IE, ESI y MALDI:

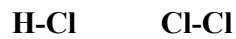
- i) Proteína de masa $>$ a 30000 uma
- ii) Disacárido (sin derivatizar, no posee grupos amino)
- iii) Terpeno

b) ¿Cuáles son las principales diferencias entre un espectro de masa usando IE y ESI?

4 - Para cada uno de los siguientes grupos de compuestos sugiera un orden de mayor a menor en base a su λ_{\max} de absorción en el espectro UV-VIS

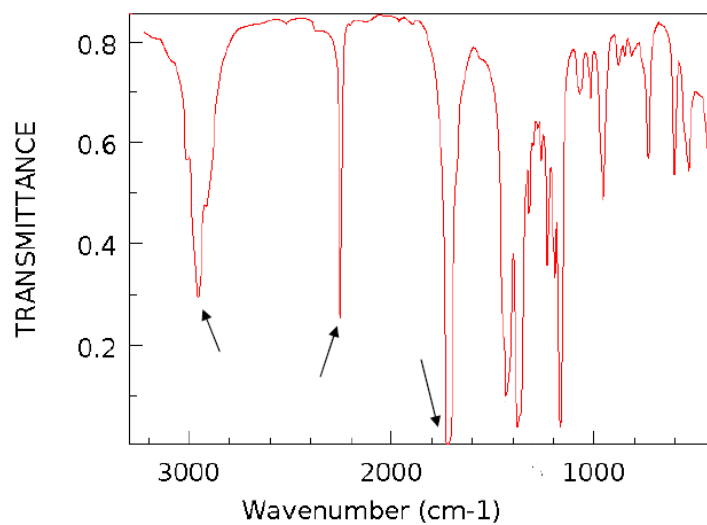
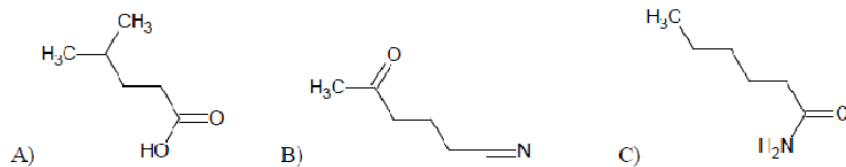


5- Indique cual de las siguientes moléculas es IR activa.

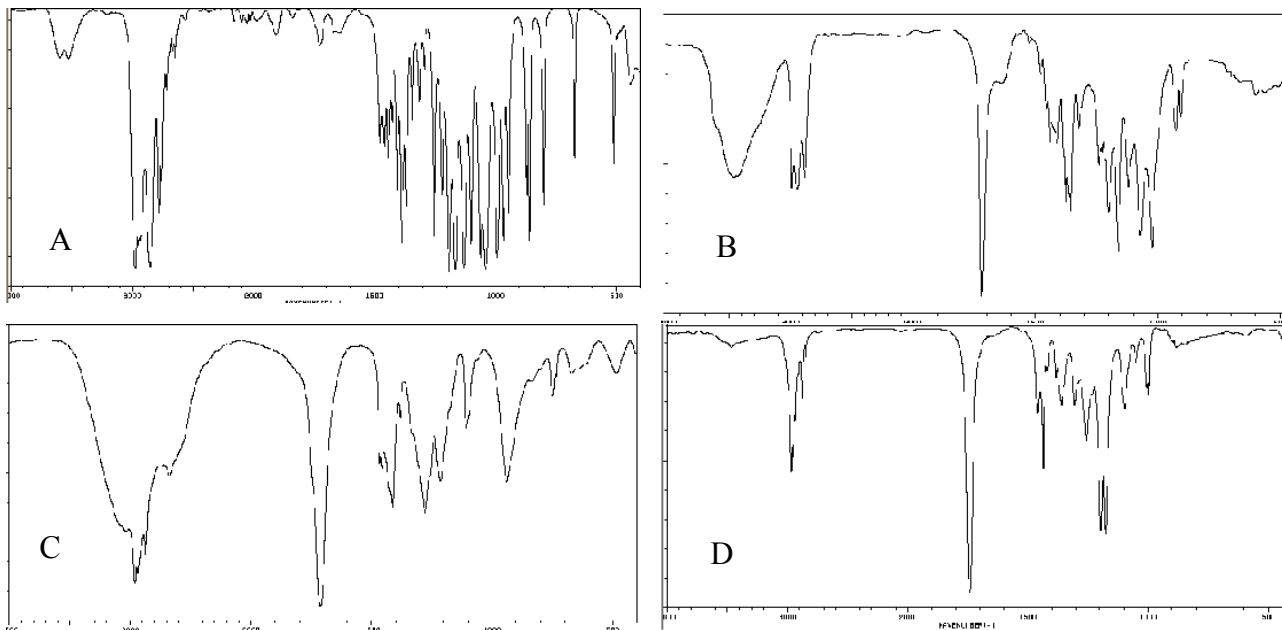
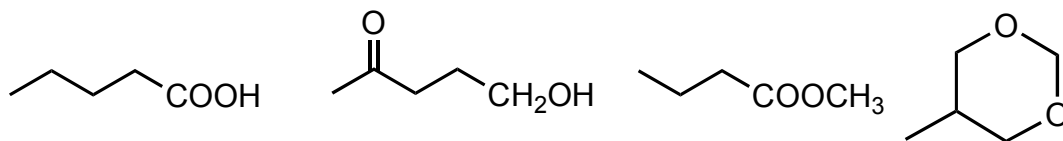


6- Tres compuestos **X**, **Y** y **Z**, de fórmula molecular $C_4H_8O_2$, presentan espectros de Infrarrojo muy diferentes. Todos contienen un pico fuerte a 1700 cm^{-1} , sin embargo **X** contiene una señal ancha entre $2500 - 3000\text{ cm}^{-1}$. En el espectro correspondiente a **Y** no se observa ninguna señal ancha, mientras que para **Z** se observa una señal ancha a $3000 - 3300\text{ cm}^{-1}$. Sugiera estructuras probables para **X**, **Y** y **Z**.

7- Identifique a cual de los siguientes compuestos orgánicos correspondería el espectro infrarrojo mostrado. Justifique su respuesta y asigne los picos señalados con flechas.

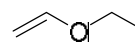
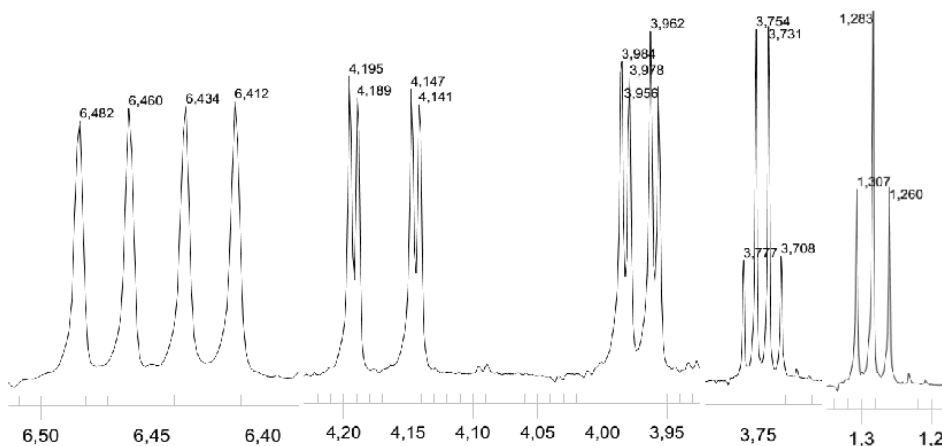


8- Los espectros IR que figuran a continuación corresponden a los compuestos indicados de fórmula $C_5H_{10}O_2$. Identifique que espectro corresponde a cada compuesto. Justifique su respuesta.



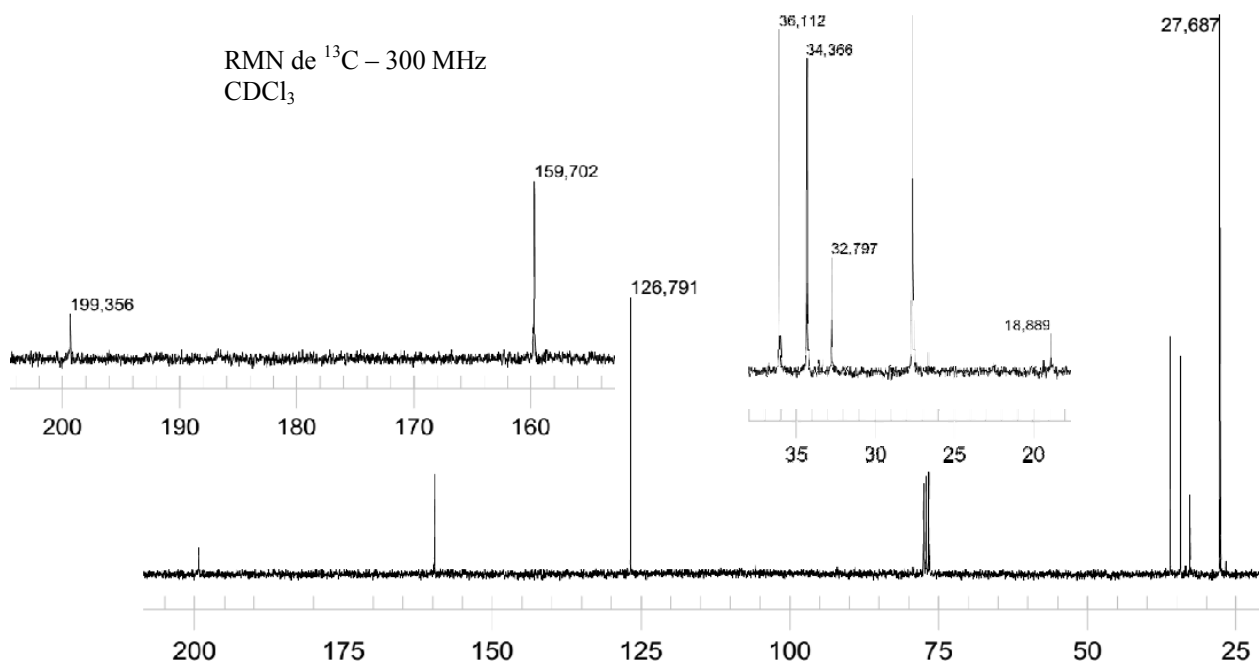
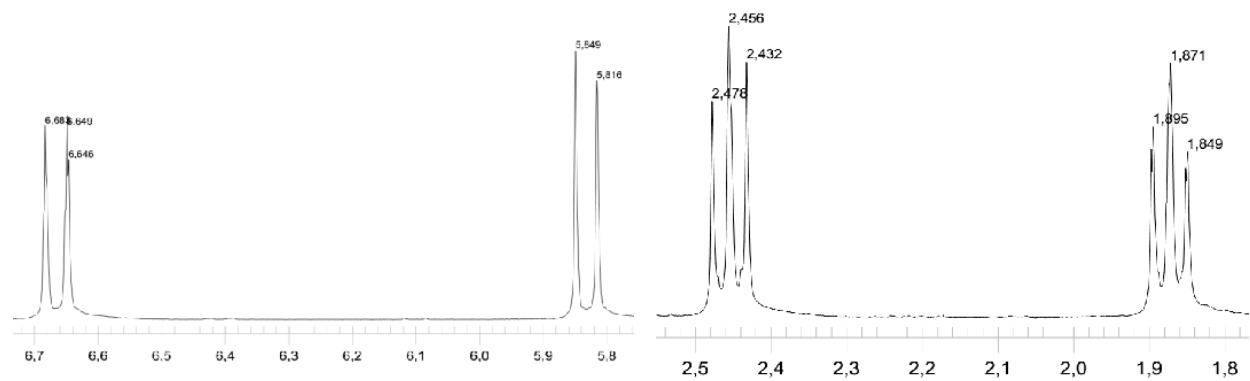
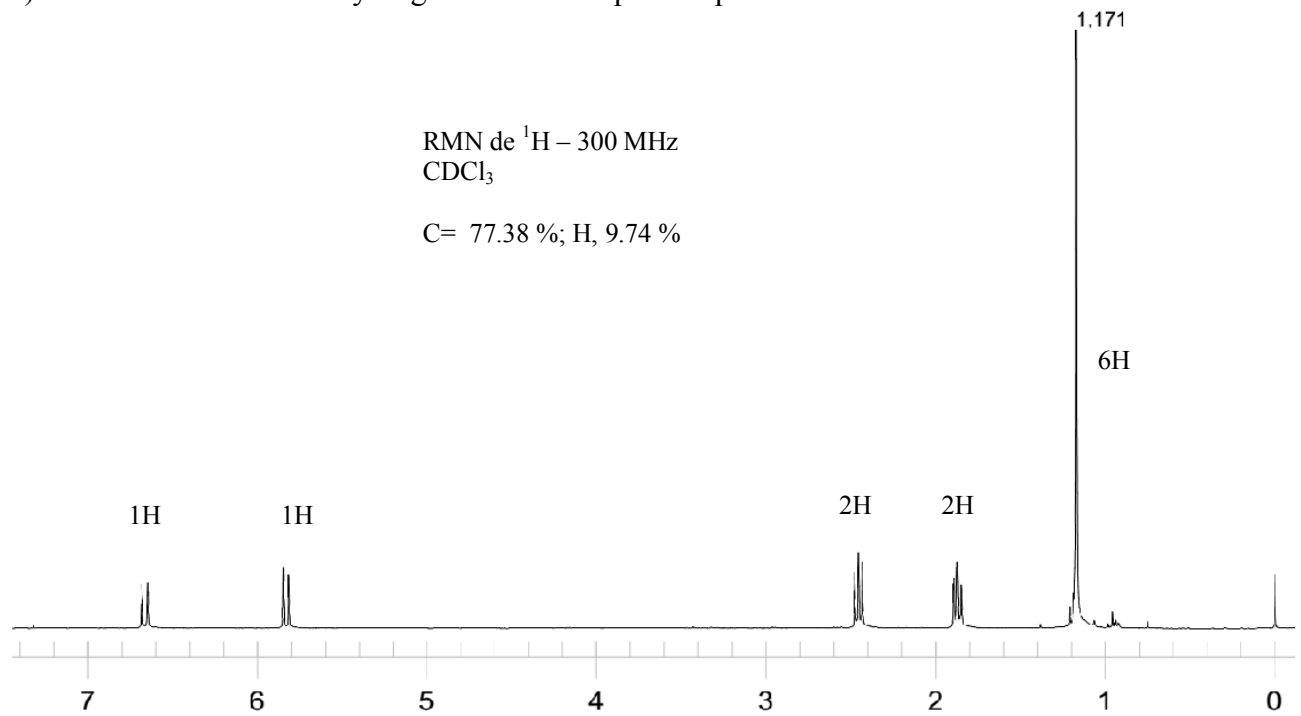
9- Los siguientes espectros corresponden a la siguiente molécula

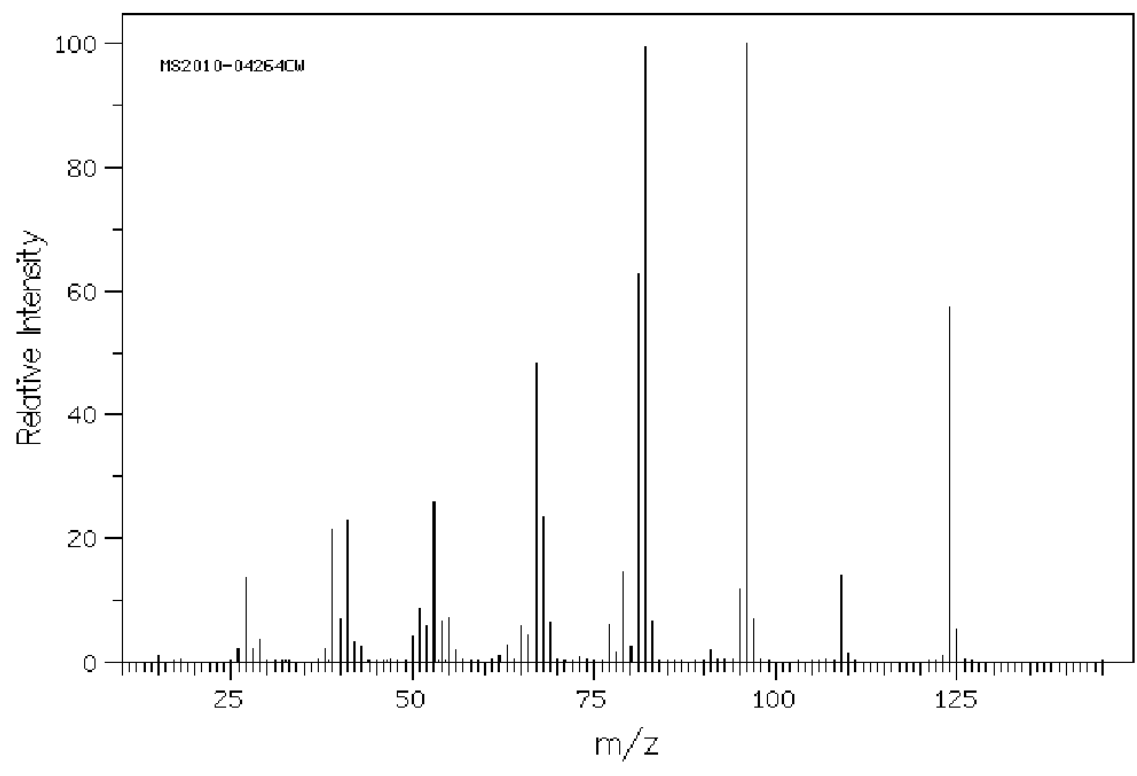
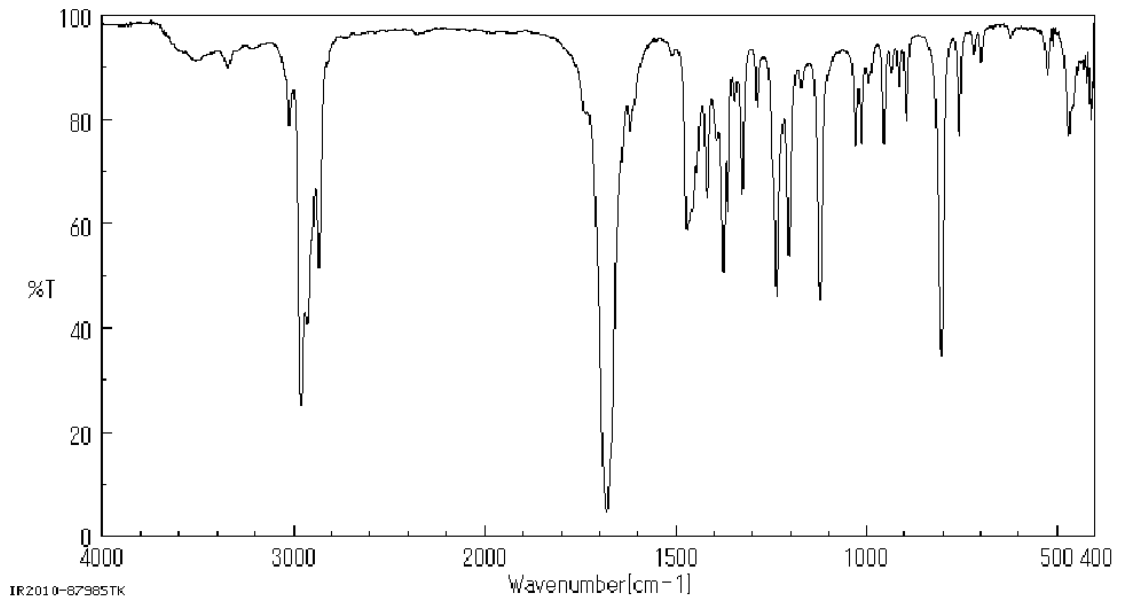
- Asigne todas las señales
- Determine las constantes de acoplamiento e identifique sistemas de espín.



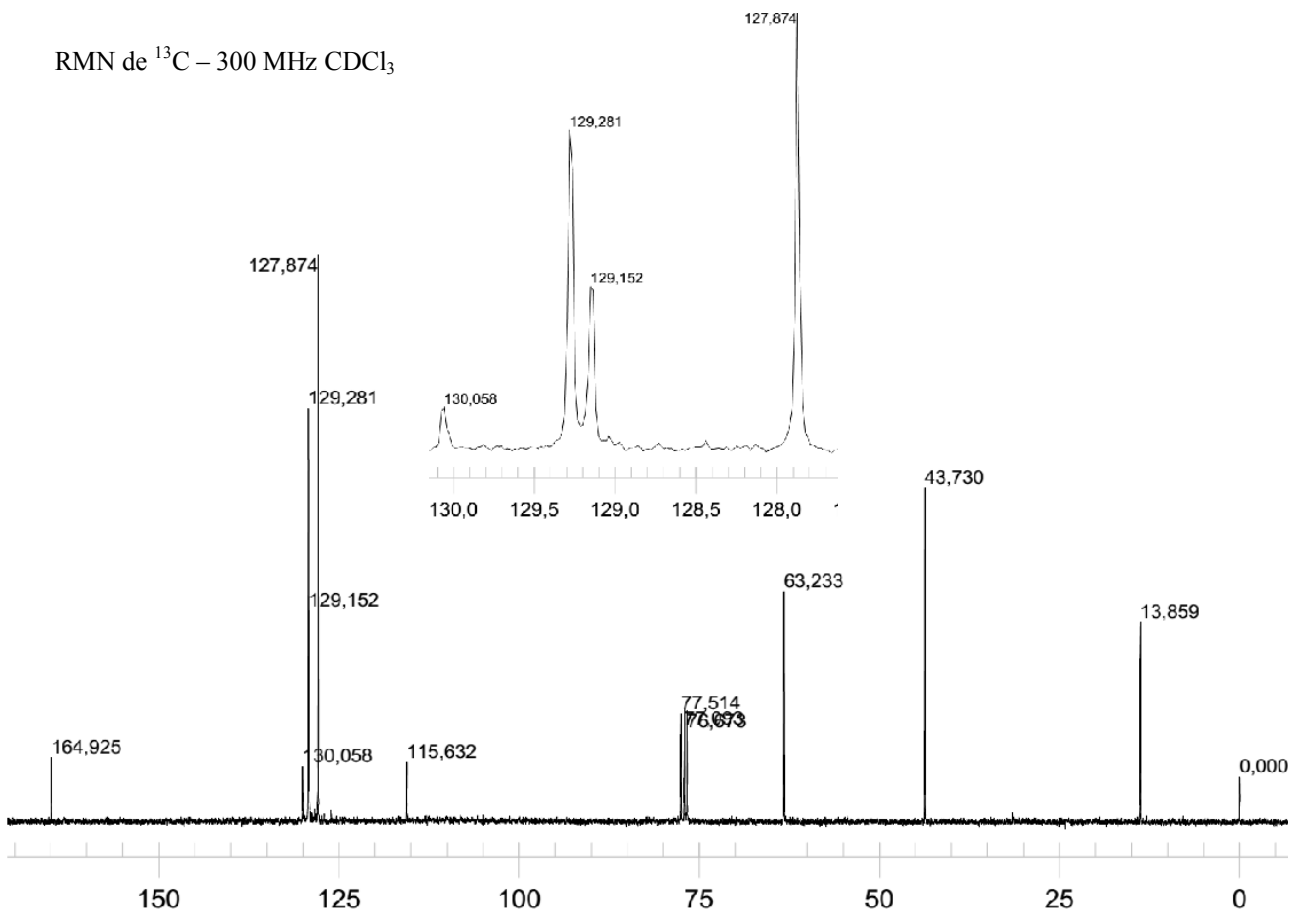
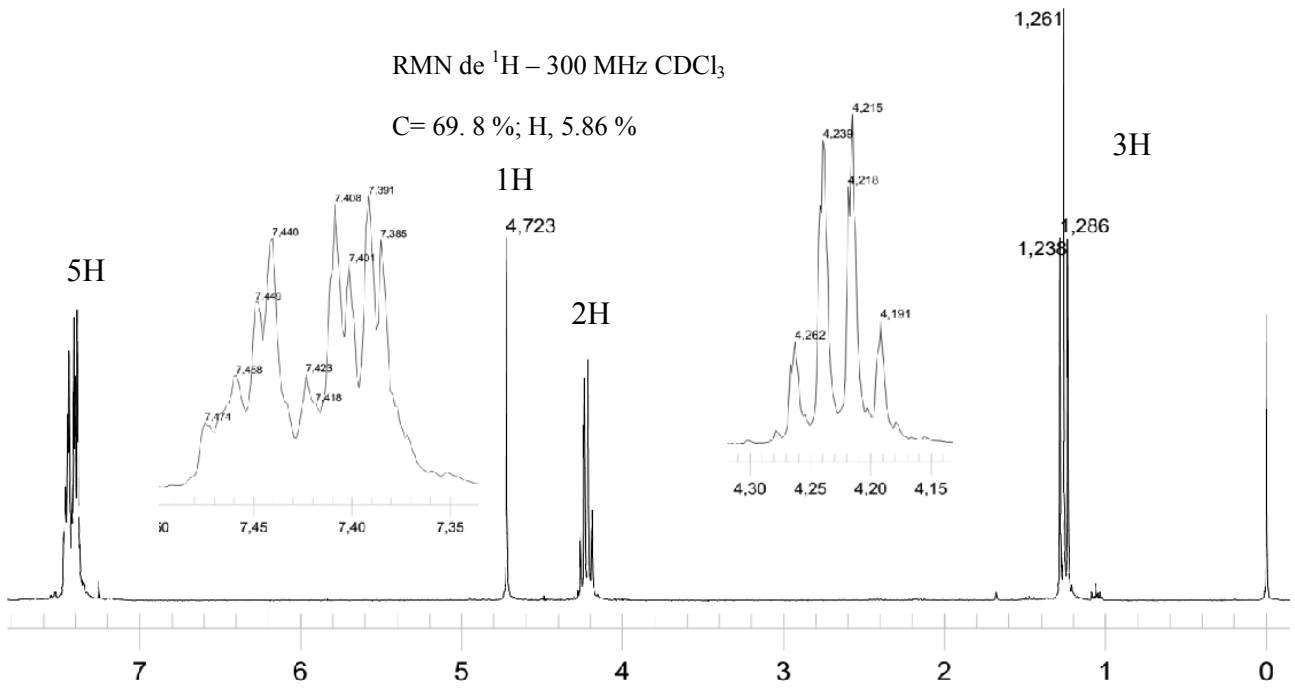
Segunda parte. Problemas de RMN e Integrados

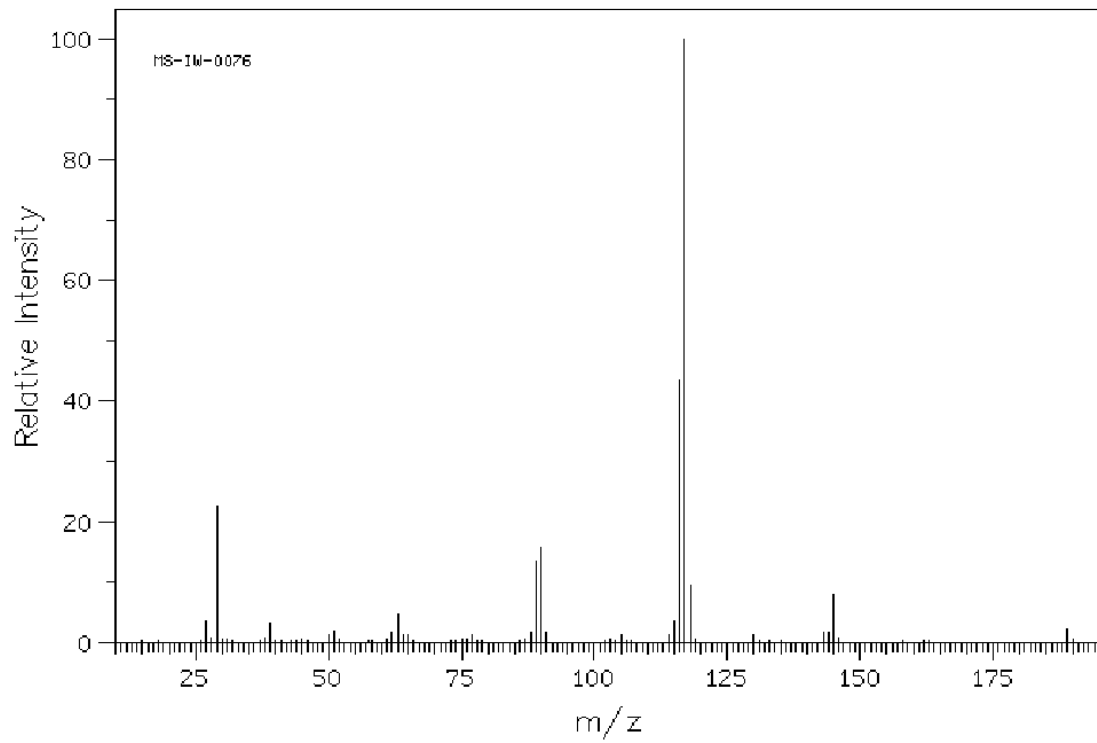
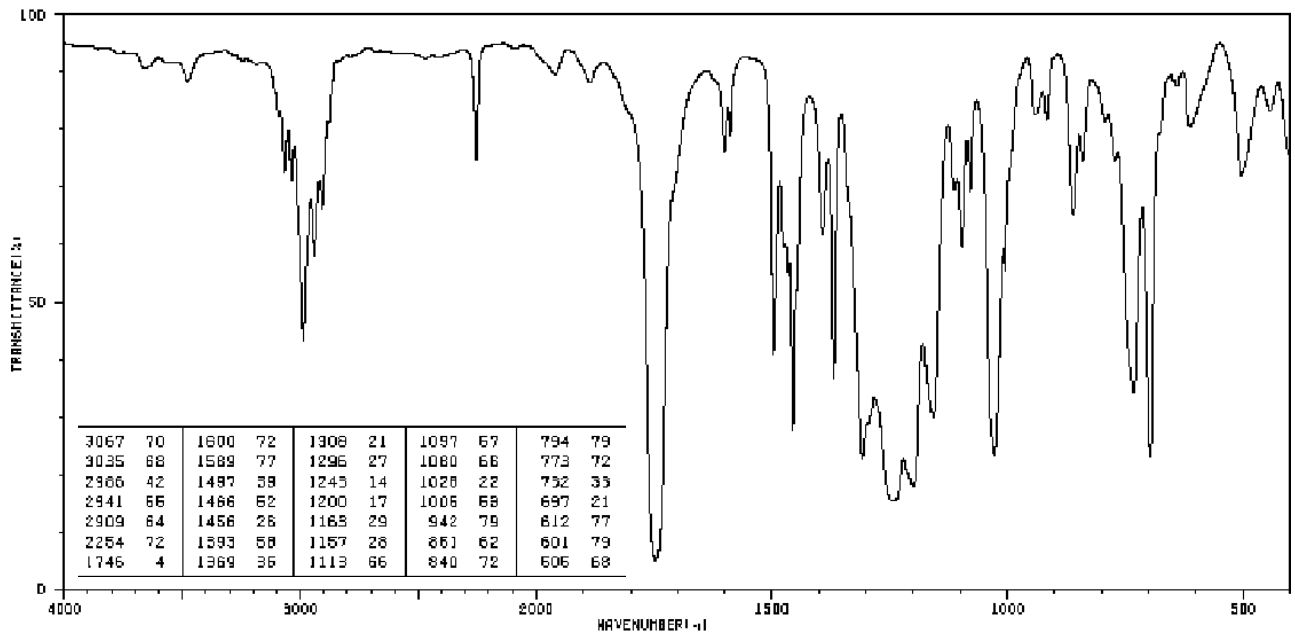
1) Determine la estructura y asigne todos los espectros presentados.





2) Determine la estructura en base a los espectros presentados y asigne todas las señales.





3) Determine la estructura y asigne todos los espectros de RMN presentados (CDCl_3 , 600 HMz) para el siguiente compuesto que posee $\text{C}=77.38\%$; $\text{H}=9.74\%$ en su análisis elemental y presenta un ión molecular en su espectro de masa de alta resolución (ESI-MS, $\text{M}+\text{Na}^+$) de 147,07862 umas.

