

## GUIA DE ESTUDIO No. 1

**INSTRUCCIONES:** Resuelva esta guía en grupo (10 integrantes como máximo y 6 como mínimo) y entréguela al instructor de laboratorio a más tardar el 8 de febrero antes de las 17:00 h. Para resolver los siguientes ejercicios puede consultar cualquier libro de texto de Análisis Instrumental así como cualquier otra referencia que considere de utilidad, anotándolas al final de la guía. En los textos de Química Orgánica se incluyen capítulos para Espectroscopía, por ejemplo en Wade (7ª. Edición, 2012) encuentra información útil en los capítulos 12,13 y 15

Para el presente curso es necesario recordar algunos términos y conceptos que seguramente fueron vistos en los cursos de Física. La espectroscopía es el estudio de las formas en las cuales la luz (o la radiación electromagnética, en realidad) interacciona con las moléculas y los átomos. Algunos términos empleados en espectroscopía se relacionan con la naturaleza ondular de la radiación electromagnética y deben ser manejados adecuadamente.

Defina en forma clara y breve los siguientes términos e indique sus unidades y el símbolo empleado para identificarlos: longitud de onda, amplitud, período, frecuencia. ¿Cuál es la relación entre longitud de onda y frecuencia?

La radiación electromagnética también puede considerarse como una corriente de "paquetes" de energía denominados fotones, ¿cómo se relaciona la energía de los fotones con la frecuencia? ¿qué es el número de onda y cuál es su relación con la energía de un fotón?

En el caso de la espectroscopía UV-Vis, se tiene una fuente que emite energía dentro del rango del espectro electromagnético correspondiente a la luz UV y visible. Esta fuente emite luz continua, es decir, contiene todas las longitudes de onda dentro del rango, la cual se hace pasar por un prisma, por ejemplo, que dispersa sus componentes. Si esta luz se hace pasar a través de una celda que contiene una muestra de moléculas de un compuesto, la luz que emerge de la celda ya no estará "completa", es decir, algunas frecuencias resultarán siendo absorbidas por las moléculas, debido a que han interactuado con ellas. Esto puede ser detectado y registrado y el resultado es un *espectro de absorción*.

En el caso de la espectroscopía UV-Vis la energía absorbida por las moléculas se debe a interacciones con los electrones que se encuentran en la capa de valencia de las moléculas o átomos.

¿Cuáles son esas interacciones electrónicas? ¿Cuál es la notación utilizada para representar esas transiciones? ¿Cuáles son las que resultan observables en la región del ultravioleta cercano (200-400 nm)? ¿Cuál es el término utilizado para definir al conjunto de átomos dentro de una molécula que da origen a una absorción en el espectro UV-Vis? ¿Cómo explica la teoría de formación de enlaces moleculares pi, HOMO-LUMO (¿qué significan estas siglas?) el hecho de que a mayor conjugación de enlaces pi las moléculas absorban luz UV a longitudes de onda más larga?

De las siguientes estructuras, ¿cuáles presentarán absorción en el espectro UV y por qué?



a



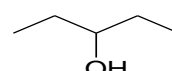
b



c



d



e



f



g



h

De acuerdo a su respuesta anterior, ¿cuáles son las transiciones electrónicas que darán origen a la absorción en el espectro UV para cada estructura seleccionada por usted? ¿Cuáles son las transiciones que dan origen a las absorciones más intensas?

Defina los siguientes términos: transmitancia, absorbancia, coeficiente de extinción molar, ley de Beer.

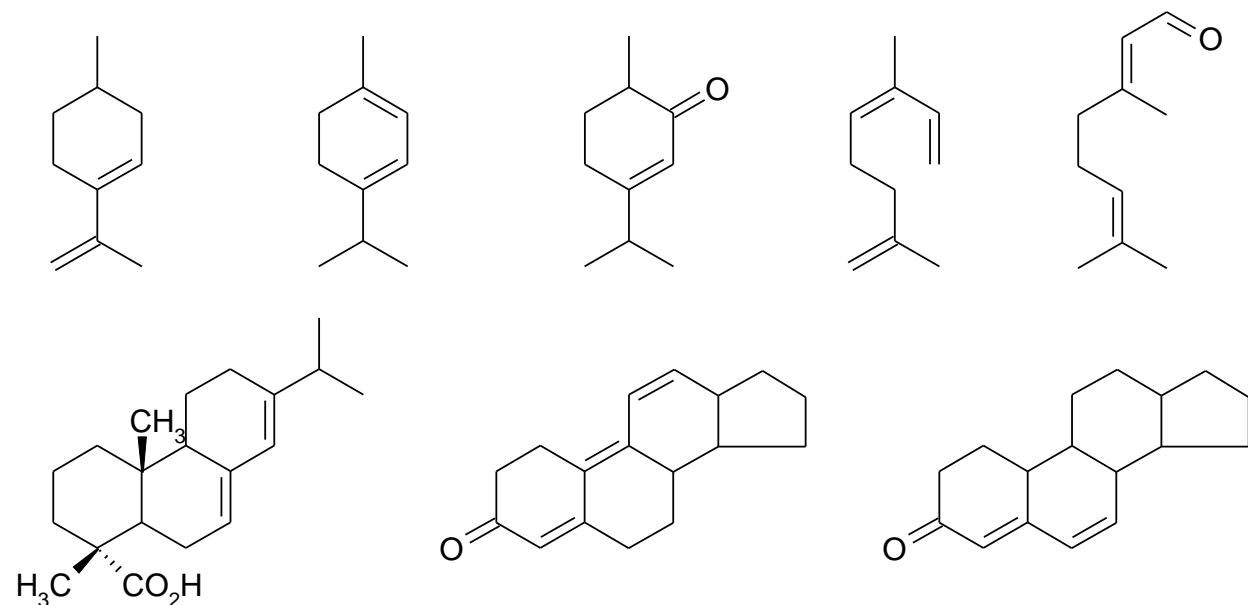
Si un compuesto presenta un máximo de absorción a 235 nm, y una disolución 0.0002 M de ese compuesto en una celda de 1.0 cm presenta una transmitancia de 20% ¿cuál es el coeficiente de extinción molar del compuesto?

Se sabe que  $\epsilon$  para la anilina ( $\lambda_{\max}$  280 nm) es de 1430. ¿Qué concentración deberá tener una disolución de anilina para que la transmitancia sea de 30% usando una celda de 1.0 cm? ¿Cuál será la absorbancia de esa disolución?

¿Podría ser de utilidad la espectroscopía UV para diferenciar entre los siguientes pares de compuestos? Explique brevemente su respuesta.

- 4-metilhepta-2,4-dieno y 4 metilhepta-2,4,6-trieno
- 1-fenilpropan-2-ona y propiofenona
- Fenol y anisol
- Hexa-1,3,5-trieno y hexa-3,4-dien-2-ona
- e.

Utilizando las reglas de Woodward-Fieser, calcule  $\lambda_{\max}$  para cada uno de los siguientes compuestos; dejando constancia de todos sus cálculos



Resuelva los siguientes problemas de fin de capítulo 15 del texto de Wade: 24, 28 37.