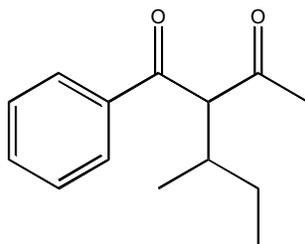


LISTA DE EXERCÍCIOS DE ESPECTROMETRIA DE MASSAS

- 1) Para o metil-ciclo-hexano, escreva uma equação que mostre a fragmentação a partir do íon radical que conduz ao íon de m/z 83. Assegure-se de que tenha especificado os íons de número par ou ímpar de elétrons e identificado as espécies neutras.
- 2) Quais dos fragmentos abaixo teriam maior probabilidade de serem observados em um espectro de massas positivas gerado por ionização química do 2-metil-pentano (C_6H_{14} ; $M = 86$)? Justifique sua resposta através do mecanismo de fragmentação. Quais dos fragmentos não seriam observáveis de forma alguma se utilizando desta detecção?



- 3) Como os dados de um espectro de massas de baixa resolução podem ser utilizados para distinguir entre $C_6H_{13}Cl$ e C_3H_5Br ?
- 4) Na fragmentação da 3-isopropil-penta-2,4-diona ($M=142$), são possíveis dois caminhos para o rearranjo de McLafferty. O fragmento de $m/z = 100$ resulta de um destes rearranjos. Este pico muda para $m/z = 102$ quando se analisa a cetona duplamente marcada com ^{18}O . Qual destes mecanismos está operante?
- 5) O espectro de massas do 3-buten-2-ol apresenta o pico em $m/z=55$. Explique porque o fragmento que dá origem a este pico deve ser estável.
- 6) O espectro de massas por ionização química com isobutano da 4-metilbenzofenona apresenta apenas o íon referente a molécula protonada e o pico isotópico devido à presença de ^{13}C . O espectro de massas da mesma substância, quando é empregado o metano como agente ionizante, apresenta íons em regiões de m/z mais elevadas e inferiores a da massa molecular esperada. Explique a origem e a utilidade desses fragmentos. As afinidades por próton do metano, isobutano, e 4-metil-benzofenona são respectivamente 554, 801, 886 kJ mol^{-1} .
- 7) O espectro de massas, obtido através de ionização por impacto eletrônico, da α -dicetona abaixo apresenta fragmentos importantes em m/z 176, 161 (15%), e 147 (65%). Apresente o mecanismo de fragmentação que levaria a formação desses íons.



- 8) Os espectros de massas por impacto eletrônico a 70 eV do *o*-metilbenzoato e do *m*-metilbenzoato são idênticos com a exceção da presença de um pico em m/z 118. Indique qual dos isômeros deu origem a esse pico através de seus mecanismos de fragmentação.