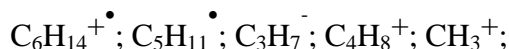
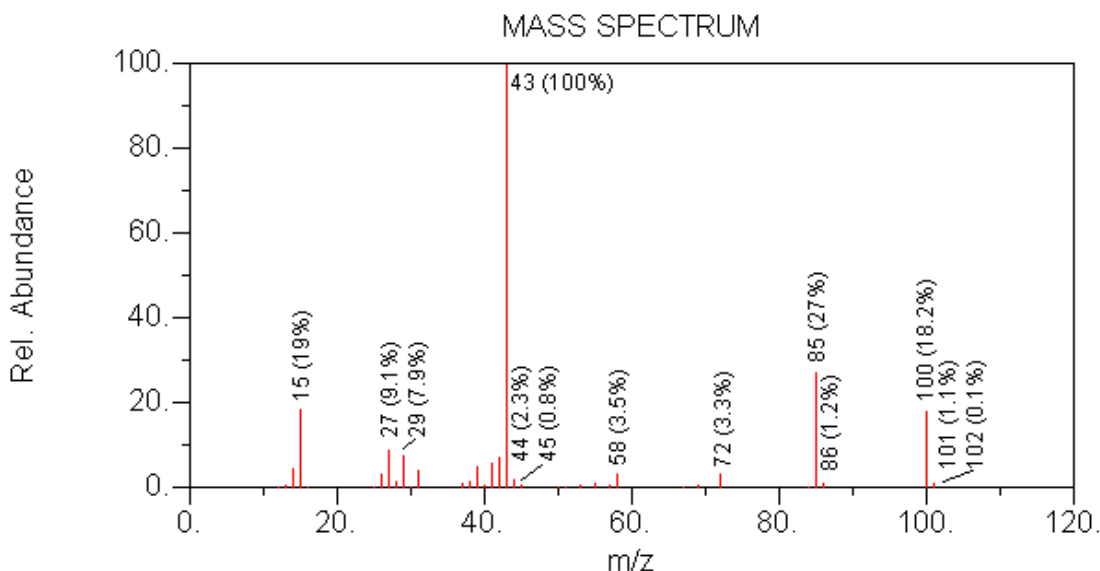


## LISTA DE EXERCÍCIOS DE ESPECTROMETRIA DE MASSAS

- 1) 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?



- 2) Quantos oxigênios estão presentes no pico correspondente ao íon molecular no espectro abaixo? Qual seria o composto que originou o espectro?

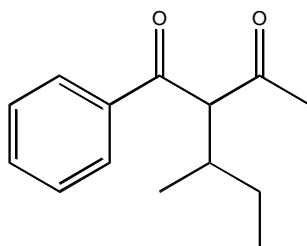


- 3) Para o metil-ciclo-hexano, escreva uma equação que mostre a fragmentação a partir do íon radical que conduz ao íon de  $m/z$  83. Assegure-se de que tenha especificado os íons de número par ou ímpar de elétrons e identificando as espécies neutras.
- 4) Como os dados de um espectro de massas de baixa resolução podem ser utilizados para distinguir entre  $C_6H_{13}Cl$  e  $C_3H_5Br$ ?
- 5) 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  $\text{kJ mol}^{-1}$ .

6) O espectro de massas do 3-butil-2-ol apresenta o pico em  $m/z=55$ . Explique porque o fragmento que dá origem a este pico deve ser estável.

7) 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  $^{18}\text{O}$ . Qual destes mecanismos está operante?

8) O espectro de massas, obtido através de ionização por impacto eletrônico, da  $\alpha$ -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.



9) Os espectros de massas por impacto eletrônico a 70 eV do *o*-metilbenzoato de metila e do *m*-metilbenzoato de metila 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.