

RESOLUCION DE MEZCLAS MEDIANTE ESPECTROSCOPIA ULTRAVIOLETA

Introducción

La espectroscopia es el estudio de la interacción entre la radiación electromagnética y la materia, pudiendo ser de absorción o de emisión. Los espectros de absorción pueden ser clasificados en tres tipos rotación, rotación-vibración y electrónicos. El tercer tipo incluye interacciones rotacionales y vibracionales.

El espectro de rotación de una molécula está asociado con cambios que ocurren en los estados rotacionales de la molécula, sin cambios simultáneos en los estados vibracional y electrónico.

Los espectros de rotación-vibración tienen que ver con transiciones en las cuales los estados vibracionales de la molécula son alterados y pueden ser acompañados por cambios en los estados rotacionales.

Los espectros electrónicos surgen de transiciones entre estados electrónicos y son acompañados, simultáneamente, por cambios en los estados vibracional y rotacional. Involucran diferencias relativamente grandes de energía y así, la absorción se produce a grandes frecuencias o relativamente baja longitudes de onda. Las transiciones electrónicas ocurren en las regiones ultravioleta y visible. Resulta de fundamental importancia poder evaluar la energía asociada a alguna región específica del espectro. La ecuación fundamentales la relación de Planck:

$$\Delta E = h \cdot \nu \quad (1)$$

donde ΔE es la energía de un cuanto, ν es la frecuencia del movimiento ondulatorio y h es la constante de Planck, observándose que la frecuencia es directamente proporcional a la energía.

La mayoría de los estudios son realizados en solución, frecuentemente en soluciones diluidas, por lo que se puede utilizar la ley de Lambert-Beer que relaciona la absorbancia con la concentración de las especies absorbentes:

$$A = \varepsilon \cdot l \cdot c \quad (2)$$

siendo A la absorbancia de la muestra; l es el camino óptico, expresado en cm; c , la concentración en mol L^{-1} y ε es la absortividad molar. Los datos espectrales son usualmente presentados en gráficas de absorbancia versus concentración.

Análisis cuantitativo de mezclas

El análisis cuantitativo de las mezclas está basado en la ley de Beer. Así si una mezcla contiene dos sustancias las cuales absorben en la misma región del UV, no puede seleccionarse una longitud de onda donde sólo absorba uno de los compuestos y no el otro, o viceversa. En este caso, se trabaja a una longitud de onda λ_1 cuya absorbancia, si $l = 1$ cm, será:

$$A_1 = \varepsilon_{1B} \cdot c_B + \varepsilon_{1T} \cdot c_T \quad (3)$$

donde el subíndice 1 se refiere a la absorbancia de la mezcla y a las absorptividades a λ_1 , y los subíndices B y T a Benceno y Tolueno, respectivamente,

A una segunda longitud de onda (λ_2), la absorbancia será:

$$A_2 = \epsilon_{2B} \cdot c_B + \epsilon_{2T} \cdot c_T \quad (4)$$

Si las cuatro absorptividades son conocidas, midiendo las absorbancias a las dos longitudes de onda seleccionadas, se puede determinar la concentración de cada uno de los componentes en la mezcla.

Para el sistema benceno-tolueno bajo estudio, combinando las ecuaciones 3 y 4, se tiene:

$$c_B = \frac{A_1 \epsilon_{2T} - A_2 \epsilon_{1T}}{\epsilon_{1B} \epsilon_{2T} - \epsilon_{2B} \epsilon_{1T}} \quad (5)$$

y

$$c_T = \frac{A_1 \epsilon_{2B} - A_2 \epsilon_{1B}}{\epsilon_{2B} \epsilon_{1T} - \epsilon_{1B} \epsilon_{2T}} \quad (6)$$

TRABAJO PRÁCTICO DE LABORATORIO Nº 2

OBJETIVO

Analizar mezclas binarias de benceno-tolueno utilizando espectroscopia ultravioleta. Determinar las absorptividades molares de los componentes individuales y de la mezcla.

MATERIALES NECESARIOS

1. Reactivos: Benceno, Tolueno, Alcohol Etílico.
2. Vidrio: 2 matraces de 50 mL, 2 tubos de ensayo con tapa a rosca, 10 tubos con tapa a rosca de 10 mL, 2 pipetas de 0,1 mL, 3 pipetas de 5 mL, 1 vaso de precipitación, 1propipeta, gradilla.
3. Instrumental: Espectrofotómetro UV-vis, celdas de cuarzo de 1 cm de camino óptico.

PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

1. Soluciones: preparar:

- A) 50 mL de benceno 1×10^{-2} M en etanol;
- B) 50 mL de tolueno 7×10^{-3} M etanol;
- C) una mezcla de 5 mL de solución "madre" de benceno y 5 mL de solución "madre" de tolueno
- D) una mezcla de 7 mL de solución "madre" de benceno y 3 mL de solución "madre" de tolueno

2. Ley de Beer de Benceno: Desde la "solución madre" de benceno preparar cinco diluciones considerando un volumen final de 5 mL:

C_B/M	V_{madre}/mL
9×10^{-3}	
8×10^{-3}	
7×10^{-3}	
6×10^{-3}	
5×10^{-3}	

3. Ley de Beer de Tolueno: A partir de la "solución madre" de tolueno preparar 5 diluciones considerando un volumen final de 5 mL:

C_B/M	V_{madre}/mL
	4,5
	4,0
	3,5
	3,0
	2,5

4. Encender el equipo, dejar estabilizar, ajustar la línea base y registrar el espectro entre 200 y 350 nm. Elegir dos longitudes de onda para realizar las respectivas lecturas de absorbancias de las diluciones de benceno y tolueno (ley de Beer).

5. Efectuar la lectura de absorbancia de las mezclas a las dos longitudes de onda de trabajo.

CÁLCULOS Y GRAFICOS

1. Graficar Absorbancia versus Concentración para λ_1 y de la pendiente de la recta resultante, calcular la absortividad molar.
2. Graficar Absorbancia versus Concentración para λ_2 y obtener la absortividad molar de la pendiente de la recta resultante.
3. De igual modo que en 1 y 2, evaluar para tolueno ϵ_{1T} y ϵ_{2T} .

Una vez conocidos los cuatro valores de ϵ , con las absorbancias de las mezclas incógnitas, y haciendo uso de las ecuaciones 5 y 6, calcular las concentraciones de Benceno y Tolueno en cada