

“Controle la presencia de “Dienos” en sus combustibles con VUV”

Parte 3.5- Instantánea de una Reacción Celda de Flujo

Published by Alex Hodgson, VUV Analytics on February 18, 2019.

Todos ustedes/amantes de la investigación, pueden haber notado algo peculiar en uno de los espectros CDO-PTAD en la Parte 3, concretamente, 1,3-ciclohexadieno-PTAD. Su espectro tiene varios "dedos" espectrales que los otros espectros no tienen. ¿Por qué es eso? Pongámonos nuestros sombreros de estudiantes de química orgánica y extraigamos esas notas sobre los mecanismos de reacción. (RENUNCIA DE RESPONSABILIDAD: No nos hacemos responsables por flashbacks traumáticos de aquellos días de universidad. Todos podemos tener esa clase de señales en la vida).

Haciendo una rápida lectura a través de la librería de espectros VUV, encontramos que los "dedos" de nuestro espectro de aductos se alinean perfectamente con los "dedos" del espectro de monóxido de carbono (Figura 1). Esto significa que a menos que de alguna manera el aducto de 1,3-ciclohexadieno-PTAD intacto tenga esta misma característica, estamos viendo una "coelución" del aducto (de alguna forma) con monóxido de carbono.

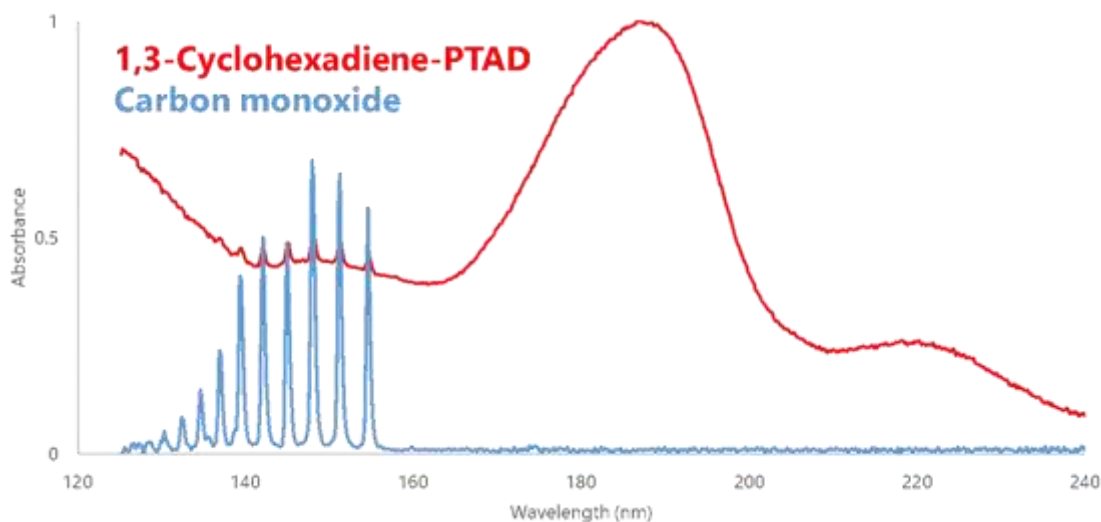


Figura 1. Superposición de los espectros VUV para 1,3-ciclohexadieno-PTAD y monóxido de carbono, parece ser una combinación perfecta para los "dedos" espectrales de cada compuesto.

Entonces, ¿de dónde viene ese CO? Si observamos la estructura del aducto CDO-PTAD en la Figura 2, podemos imaginar un mecanismo de reacción mediante el cual eliminamos una molécula de CO; Es difícil decir cuál sería la estructura resultante. Al ejecutar la misma muestra en un GC-MS, el espectro de masas que obtenemos para el 1,3-ciclohexadieno-PTAD muestra un ión molecular a 255 Da y un intenso ión fragmentado a 227 que representa la pérdida de CO (Figura 3).

INFORMACIÓN PUBLICADA EN WWW.VUVANALYTICS.COM
 TRADUCIDA POR GALLPE-AC / DISTRIBUIDOR VUV ANALYTICS EN ESPAÑA

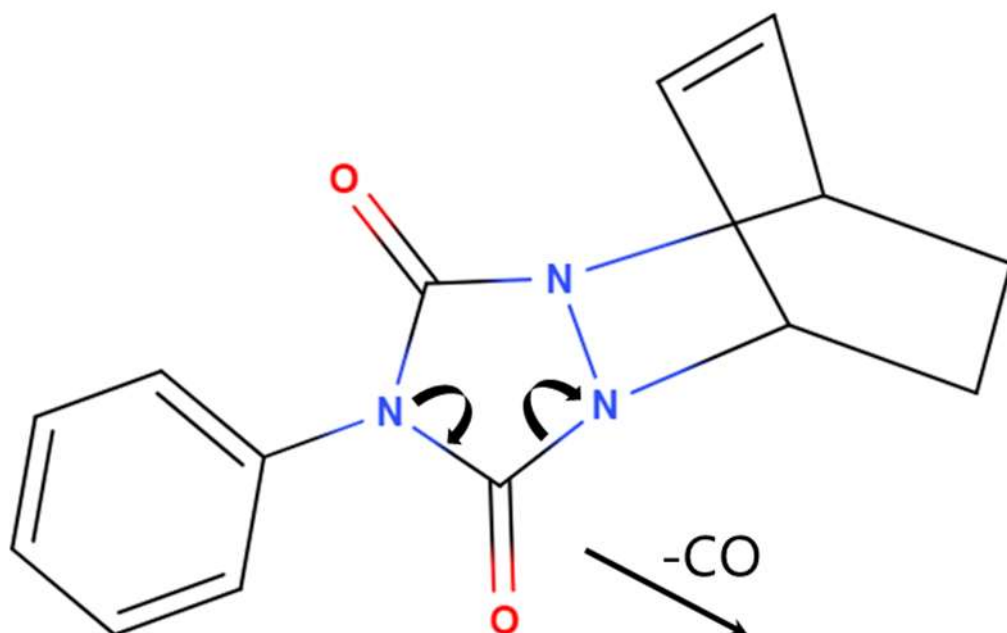


Figura 2. Un mecanismo potencial para una reacción celda de flujo / fuente de iones que explicaría la pérdida de CO tanto en el VUV como en el espectro de masas.

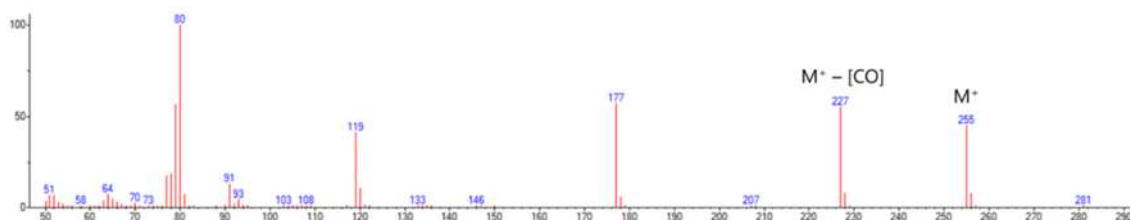


Figura 3. El espectro de masas del mismo pico de 1,3-ciclohexadieno-PTAD confirma una pérdida de CO en el propio detector, ya que vemos la respuesta para los iones M^+ y $M^+ - [CO]$.

También podemos afirmar con confianza que esta reacción está ocurriendo en la celda de flujo VUV: los espectros de absorbancia son consistentes en todo el pico cromatográfico. Si esta reacción ocurriera en algún lugar más arriba, deberíamos ver al menos algo de asimetría en los espectros a través de ese pico (frente o cola), si no es un pico de CO por completo.

¿Encontró alguna característica misteriosamente interesante en sus espectros VUV? ¡Háganoslo saber con sus comentarios!

PARA MÁS INFORMACIÓN, POR FAVOR CONTACTE CON NOSTROS

Teléfono: +34 91 849 90 18

e mail: info@gallpe.com

Soporte: <https://soportegallpe.zendesk.com>

web: www.gallpe.com

Redes Sociales

