

Ampliación de una práctica de laboratorio de Química Experimental II:
MODELIZACIÓN DE VIBRACIONES MOLECULARES Y TRANSICIONES INFRAROJAS Y SU APLICACIÓN

Resolución de un caso de asesinato

Son las 09:00 de la mañana. Recibes una llamada al teléfono móvil y se te informa que has de ir rápidamente al trabajo, a tu laboratorio. Una vez allí, te encuentras con dos agentes de policía, quienes te informan de que ayer hubo un asesinato. Habías escuchado las noticias el día anterior: Jon, dueño de una pequeña cafetería y de 55 de años de edad, fue asesinado en su establecimiento. Alguien le había clavado un cuchillo en el estómago. La policía te entrega un informe con todos los datos que han podido reunir hasta el momento. Mientras coges el informe que te entrega la agente, el otro agente saca unas bolsas de plástico con unos tubos de cuarzo en su interior. Mientras los agarras, observas que hay líquido en su interior. Los agentes te informan de que son cuatro muestras que recogieron de la escena del crimen:

- La primera muestra, etiquetada como muestra "X", la han sacado del suelo de la cafetería.
- La segunda muestra, etiquetada como muestra "Y", estaba en el mango del arma homicida.
- La tercera muestra, etiquetada como muestra "Z", la han recogido de la manga de la camisa de la víctima.
- La cuarta muestra, etiquetada como muestra "A", la han recogido del estómago de Jon.

Los agentes de policía te piden que, como expert@ en analista, espectroscopía y procesamiento de muestras, identifiques qué compuestos forman cada muestra para poder resolver el asesinato. Los informes que te han entregado podrían ayudarte en la identificación.

Anotas los detalles más relevantes de los informes sobre el caso:

- 9:30 de la mañana. Amanda, una mujer de 35 años, llama a la policía. Dice que ha encontrado muerto al camarero de un bar.
- La policía acude al lugar de los hechos y acordona la zona. Los agentes encuentran el cuerpo muerto de Jon encima de un charco de sangre, en el servicio. Tiene una herida causada por un arma punzante.

- La única persona dentro de la cafetería al llegar la policía es Amanda.
- La cafetería tiene una cámara apuntando a la entrada. Se confirma que, entre la hora de apertura y asesinato, han entrado dos clientes más. La policía usa un programa de reconocimiento facial e identifica a los clientes como Raúl Cito y Manuel Illo.
- A la par, se inspecciona el lugar del homicidio. Se encuentran dos rastros sospechosos dentro de la cafetería: un poco de líquido en el suelo y una mancha en la manga de la camisa del camarero.
- 12:00. Se encuentra un cuchillo lleno de sangre en una papelera cerca del lugar. Se confirma que la sangre es de Jon. No hay huellas dactilares en el arma, pero hay algo húmedo en el mango del cuchillo.
- Durante la autopsia se encuentran ciertos rastros alrededor de la herida en el estómago de Jon.

Los sospechosos que captaron las cámaras, junto con testigos y clientes habituales del bar, fueron llevados a comisaría y fueron interrogados a lo largo del día anterior. Estos son los detalles de las personas y aspectos más importantes de las interrogaciones:

- Amanda: fue la persona que descubrió el cuerpo del camarero y llamó a la policía. Trabaja en un laboratorio de cromatografía y RMN. Dice que fue a por un café como todas las mañanas. Entre lágrimas, admite que pudo haber rozado al camarero, ya que se conocían bien y solían bromear.
- Raúl: trabaja en un taller como experto en reparación de motores y cambio de aceites y lubricantes. Declara que, cuando se fue, Jon seguía vivo.
- Manuel: trabaja en un museo. En una primera interrogación dijo que le tocaba día libre en el trabajo y que fue a tomarse un café. “Jon seguía vivo cuando salí de la cafetería”, declara.
- Las interrogaciones a otros clientes confirman que Amanda y Jon eran buenos amigos.
- Dos clientes, cada uno por separado, dicen que conocen de vista a Manuel y que tiene fama de ser alcohólico. Una tercera persona, fue personalmente a la comisaría a decir que había visto a un hombre salir de la cafetería cerca de las horas del asesinato, y que se chocó con el hombre cuando este salía de la cafetería. Describe su aspecto que coinciden con los de Manuel. Dice que desprendía un olor entre alcohol y algo parecido a paja.
- Se volvió a interrogar a Manuel y reconoció que no tomó un café sino unos chupitos. Sin embargo, mantiene que Jon seguía vivo al dejar el bar.

Procedes a analizar las muestras y obtienes los datos del laboratorio. Lo primero que observas es que las muestras "Y" y "A" contienen lo mismo, por lo que las catalogas en el mismo espectro. Con todos estos detalles, ¿podrías identificar las muestras y, posiblemente, al asesino?

Recuerda que cada grupo funcional, tiene una absorción en el IR completamente distinta. En las siguientes páginas, tienes las frecuencias características de varios grupos funcionales. Además, para facilitar el trabajo, dispones de los espectros IR de algunas moléculas.

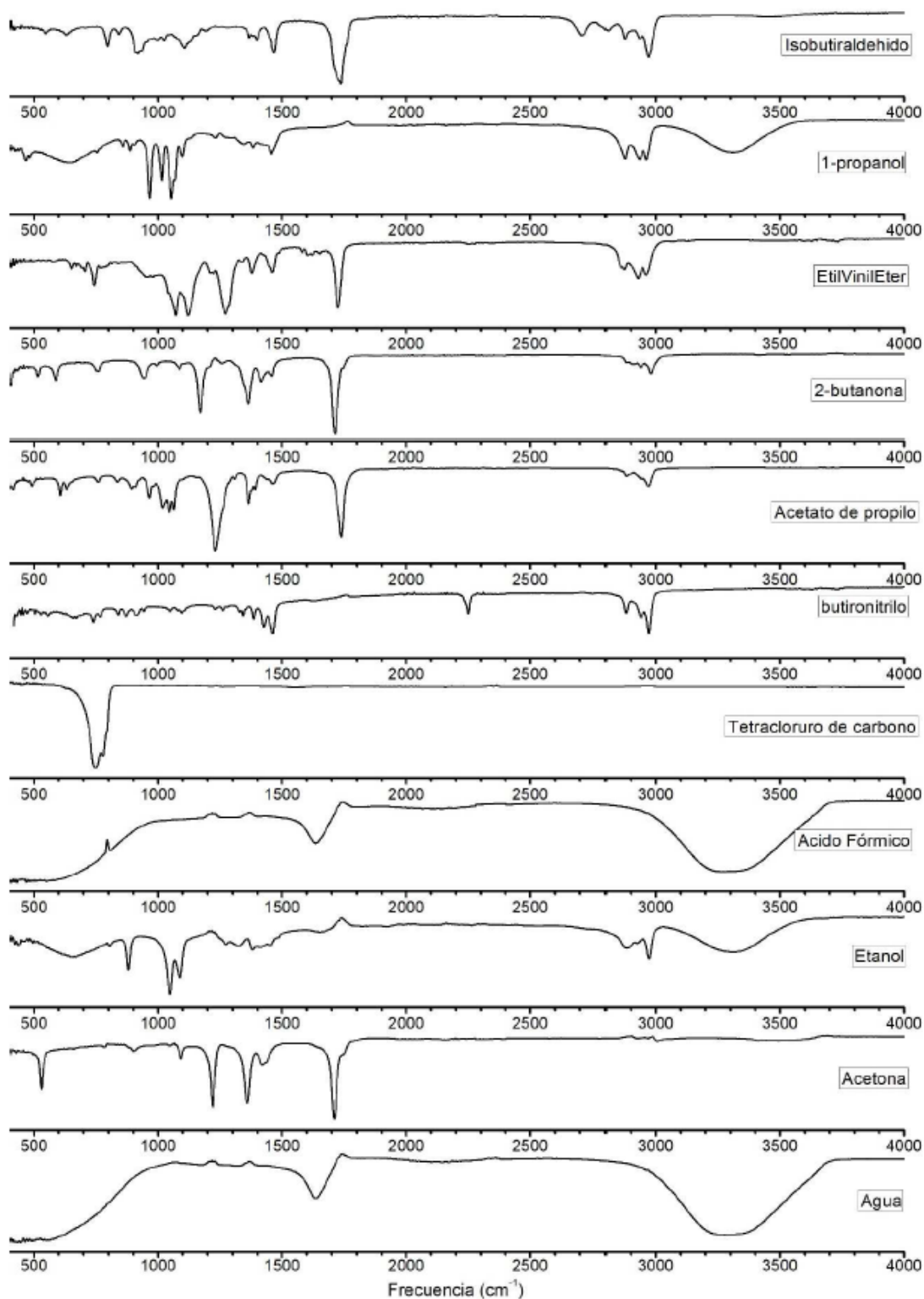


Figura 1. Espectros de transmitancia (%) de varias muestras obtenidas con el espectrómetro de infrarrojo con transformación de Fourier (FT-IR), dotado de un dispositivo de reflectancia total atenuada (ATR).

DATOS ADICIONALES

Etil Vinil éter

El etil vinil éter (etoxietileno) es un éter que se presenta en forma de líquido incoloro. Este compuesto químico tiene un gran peligro de incendio y explosión ya que reacciona violentamente con ácidos y oxidantes. Se usa como bloque para otras síntesis como, por ejemplo, polímeros de vinilo.

Isobutiraldehido

El isobutiraldehido es un compuesto químico con la fórmula $(\text{CH}_3)_2\text{CHCHO}$. Se produce generalmente como un producto paralelo en la hidroformilación del propeno. Su olor se suele describir como el de un cereal húmedo o el de la paja.

1-Propanol

El compuesto químico propan-1-ol es un alcohol incoloro, muy miscible con el agua. Es comúnmente llamado propanol, n-propanol o alcohol propílico. Su fórmula química desarrollada es $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{OH}$.

Aplicación

- En compuestos anticongelantes, solvente para gomas.
- En los compuestos de lacas, hule, aceites esenciales, creosota.
- Componente en aceites.
- Componente en tintas de secado rápido.
- En productos cosméticos como son lociones y productos refrescantes.
- En la limpieza de aparatos electrónicos.
- En la fabricación de acetona, glicerina, acetato de isopropilo.
- En medicina como antiséptico.

Butanona

La butanona o también, metiletilcetona o mec es un compuesto químico orgánico de la familia de las cetonas. En condiciones ambiente, se presenta en forma de líquido incoloro inflamable, de olor dulzón y penetrante. En la naturaleza, se encuentra como sustancia en el reino vegetal, producido por algunos árboles y presente en pequeñas cantidades en frutos y vegetales. Es un producto industrial, utilizado como base disolvente en diversas aplicaciones y como intermediario de síntesis del peróxido de metiletil cetona, usado en la catálisis de algunas reacciones de polimerización. En el medioambiente, se encuentra como producto derivado de la combustión de

carburantes de los motores de medios de locomoción.

Acetato de propilo

El acetato de propilo es un compuesto químico empleado como disolvente. Es un líquido claro e incoloro con un olor característico y similar al de las peras. De hecho, se usa comúnmente en fragancias y como aditivos de sabores. Se forma mediante la esterificación del ácido acético y el 1-propanol mediante la esterificación Fischer-Speier, usando el ácido sulfúrico como catalizador.

Butironitrilo

El butironitrilo, también llamado butanonitrilo, propilcianuro y 1-cianopropano, es un compuesto orgánico de fórmula molecular C_4H_7N . Es un nitrilo lineal de cuatro átomos de carbono con un grupo funcional $C\equiv N$ en su extremo.

El butironitrilo es profusamente empleado en cromatografía normal y de fase inversa. También se ha usado en investigaciones de actividad genotóxica, sirviendo para comparar el análisis de cometas frente al test de Ames. Otro uso de este nitrilo es como disolvente dentro de composiciones electrolíticas utilizadas en células solares sensibilizadas con colorantes.

Tetracloruro de carbono

El tetracloruro de carbono, CCl_4 , es un compuesto químico sintético, organoclorado, no inflamable, antiguamente utilizado como extintor y en la producción de refrigerantes, pero actualmente abandonado debido a su toxicidad. Es un líquido incoloro de olor ligeramente dulce. Se obtiene haciendo pasar dicloro (Cl_2) por sulfuro de carbono (CS_2), en presencia de pentasulfuro de antimonio, y separando el tetracloruro de carbono del monocloruro de azufre formado (p. eb. $135.6\text{ }^\circ C$) por destilación fraccionada. Puede encontrarse en pequeñas cantidades en el aire. Debido a que no tiene hidrógenos, se ha usado históricamente en espectroscopia RMN, aunque, debido a su toxicidad, se está reemplazando por otros disolventes. El tetracloruro de carbono se usó en la industria como un buen líquido refrigerante, un potente plaguicida y fungicida, un potente producto desengrasante -elimina con suma facilidad ceras, aceites y grasas, tanto las saponificables como las que no lo son-, desinfectante genérico, como disolvente en pinturas de aeromodelismo y de uso doméstico, y como agente extintor por la liberación de fosgeno. Cuando se degrada, forma sustancias químicas que pueden ser perjudiciales para la capa de ozono.

Etanol

El compuesto químico etanol, conocido como alcohol etílico, es un alcohol que en condiciones normales de presión y temperatura se presenta como un líquido incoloro e inflamable con una temperatura de ebullición de 78,4 °C. Es una sustancia psicoactiva y es el principal tipo de alcohol presente en las bebidas alcohólicas, como el vino (alrededor de un 13 %), la cerveza (5%), los licores (hasta un 50 %) o los aguardientes (hasta un 70 %). Miscible en agua en cualquier proporción; a la concentración de 96 % en peso se forma una mezcla azeotrópica.

Acido fórmico

El ácido metanoico, también llamado ácido fórmico, es un ácido orgánico de un solo átomo de carbono, y por lo tanto el más simple de los ácidos orgánicos. Su fórmula es H-COOH (CH₂O₂). Es un intermediario en la síntesis química y se encuentra de forma natural, sobre todo, en algunas hormigas.

Acetona

La acetona o propanona es un compuesto químico de fórmula CH₃(CO)CH₃ del grupo de las cetonas que se encuentra naturalmente en el medio ambiente. A temperatura ambiente se presenta como un líquido incoloro de olor característico. Se evapora fácilmente, es inflamable y es soluble en agua. La acetona sintetizada se usa en la fabricación de plásticos, fibras, medicamentos y otros productos químicos, así como disolvente de otras sustancias químicas.

Agua

El agua es una sustancia cuya molécula está compuesta por dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno (H₂O). El término agua generalmente se refiere a la sustancia en su estado líquido, aunque la misma puede hallarse en su forma sólida, llamada hielo, y en su forma gaseosa, denominada vapor. Es una sustancia bastante común en la tierra y el sistema solar, donde se encuentra principalmente en forma de vapor o de hielo. Es esencial e imprescindible para el origen y la supervivencia de la gran mayoría de todas las formas conocidas de vida.

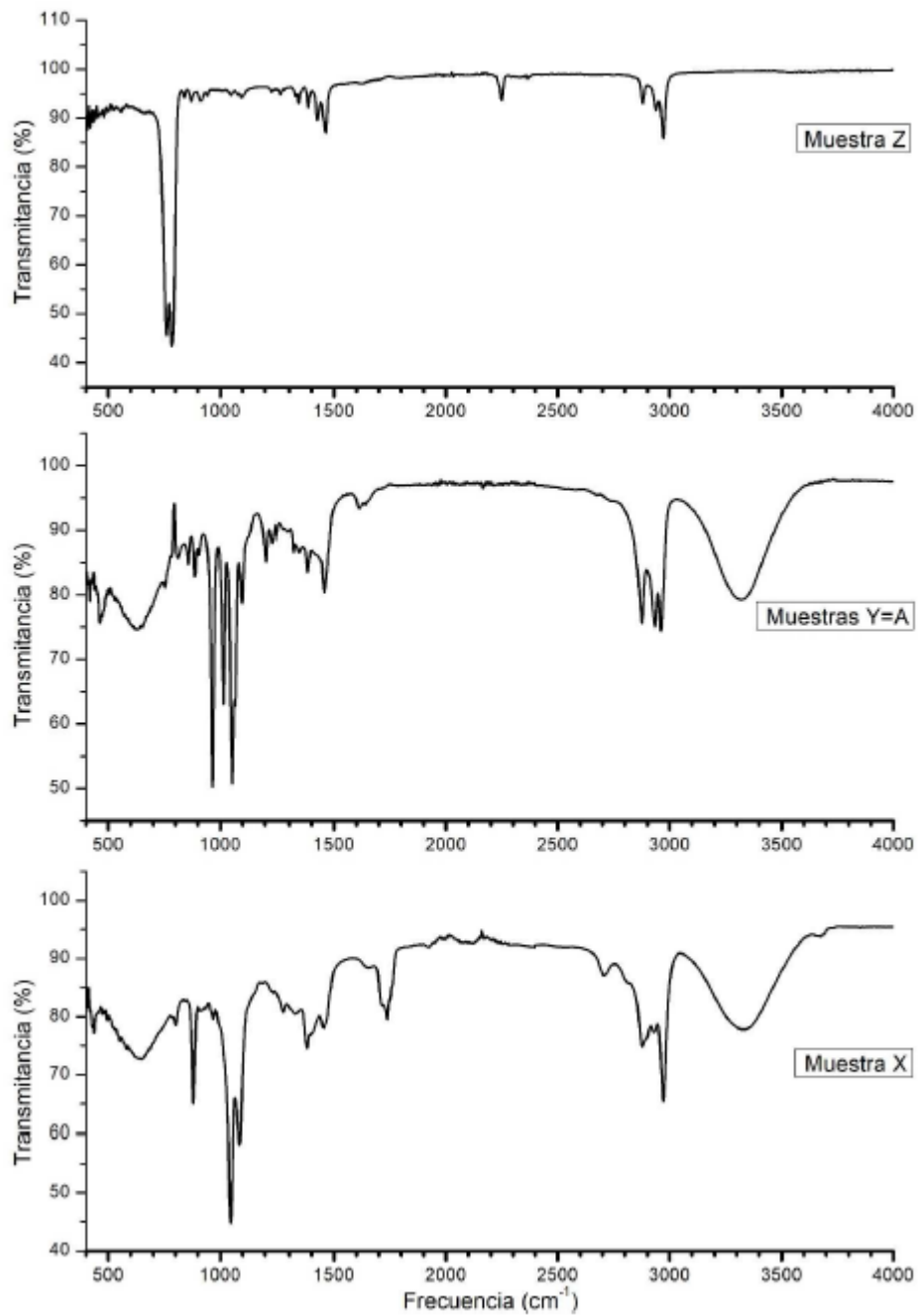


Figura 2. Muestras halladas en la escena del crimen.