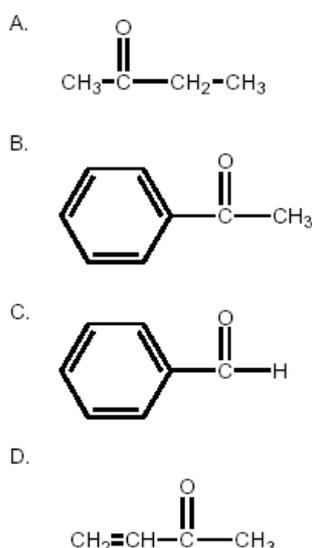


INFRA-VERMELHO: 01

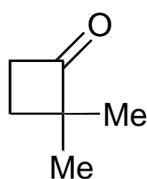
Selecione o item correto das questões 1, 2 e 3, a seguir. Como treino, procure justificar claramente sua resposta, utilizando as tabelas de correlação que julgue mais adequadas. Para cada questão, explique, também, os motivos porque considerou que itens não estivessem corretos.

1. O etino (ou acetileno) não exibe absorção na região de 2000 a 2500 cm^{-1} do infra-vermelho, porque:
 - a. o estiramento C-H ocorre a energias mais baixas do que a desta região
 - b. o estiramento $\text{C}\equiv\text{C}$ ocorre a cerca de 1640 cm^{-1}
 - c. não há variação no momento de dipolo quando ocorre o estiramento da ligação $\text{C}\equiv\text{C}$
 - d. há variação do momento dipolar quando a ligação $\text{C}\equiv\text{C}$ sofre estiramento

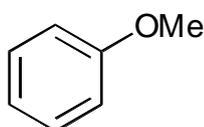
2. Qual dos compostos abaixo deveria apresentar absorção no infra-vermelho a 2710 e 1705 cm^{-1} ?



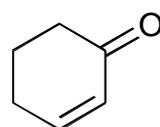
3. Qual dos compostos apresentados a seguir deveria absorver intensamente a 1680 cm^{-1} ? Explique sua resposta.



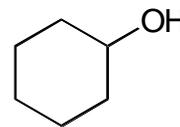
A



B



C



D

4. Os modos vibracionais de estiramento do íon carboxilato e do grupo nitro absorvem nas seguintes frequências:

	$\nu_{\text{ass}} / \text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{s}} / \text{cm}^{-1}$
Carboxilato	1550	1385
NO_2	1523	1347

⇒ descreva adequadamente estes modos vibracionais, através de vetores.

⇒ por que os modos vibracionais ν_{ass} e ν_s destes dois osciladores têm frequências bastante próximas?

⇒ o oscilador triatômico não-linear SO_2 de uma dialquil-sulfona apresenta as frequências 1340 cm^{-1} e 1100 cm^{-1} para os modos de estiramento assimétrico e simétrico, respectivamente. O valor dessas frequências é cerca de 200 cm^{-1} menor do que aqueles observados para os modos correspondentes dos osciladores NO_2 e CO_2 . Justifique esse fato.

5. Dados de IV e de RMN de ^1H indicam que os compostos **A** e **B** são isômeros. Analise o conjunto das informações que se seguem e estabeleça o padrão de substituição do anel aromático, para **A** e **B**. Indique claramente a qual modo vibracional correspondem todas as frequências fornecidas.

⇒ **A** e **B** apresentam:

• um anel benzênico dissubstituído

• o grupo funcional OH



⇒ o espectro de IV para o líquido puro **A** apresenta uma banda ν_{OH} larga e intensa, com o máximo de absorção em 3300 cm^{-1} . Quando o espectro foi obtido de uma solução $10^{-2} \text{ mol L}^{-1}$ de **A** em CCl_4 , observou-se uma banda fina, com máximo a 3600 cm^{-1} .

⇒ a banda devida ao estiramento ν_{OH} do sólido **B**, registrada tanto em Nujol, como em solução em CCl_4 ($10^{-3} \text{ mol l}^{-1}$), é larga e intensa e apresenta um máximo a 3000 cm^{-1} .

⇒ o composto **B** apresenta uma única banda intensa em 760 cm^{-1} , enquanto observam-se, no espectro de **A**, uma banda de intensidade média em 890 cm^{-1} e, outra, intensa, a 798 cm^{-1} .

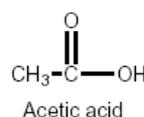
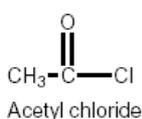
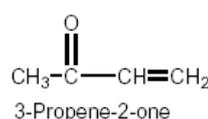
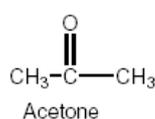
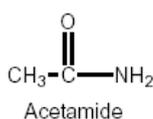
6. Organize as frequências de estiramento dos compostos apresentados abaixo em ordem crescente (*i.e.* frequências mais baixas primeiro; frequências mais altas por último):

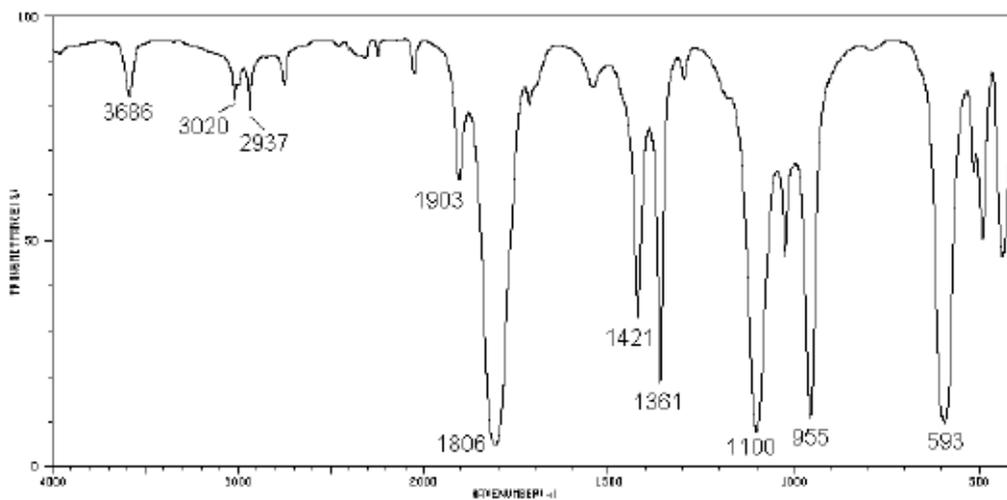


7. Em que frequência (e a quantos cm^{-1}) deve se situar o máximo da banda de absorção observada no espectro de infra-vermelho do composto resultante da adição de água e ácido sulfúrico a estireno?

a. 1740; b. 3300; c. 1695; d. 2750.

8. Qual dos compostos listados a seguir é o mais compatível com o espectro no infra-vermelho apresentado? Explique claramente como foi seu raciocínio para chegar à atribuição.





9. Que características estruturais das moléculas determinam a intensidade das absorções observadas no espectro de IV? E as frequências das absorções estão associadas a quais fatores?

10. Quando se registra um espectro de IV no laboratório, usualmente não são adotadas precauções especiais com relação à presença de oxigênio, nitrogênio e argônio no ar. Quais são as conseqüências desse procedimento?