

# QFL314-QUÍMICA ORGÂNICA EXPERIMENTAL

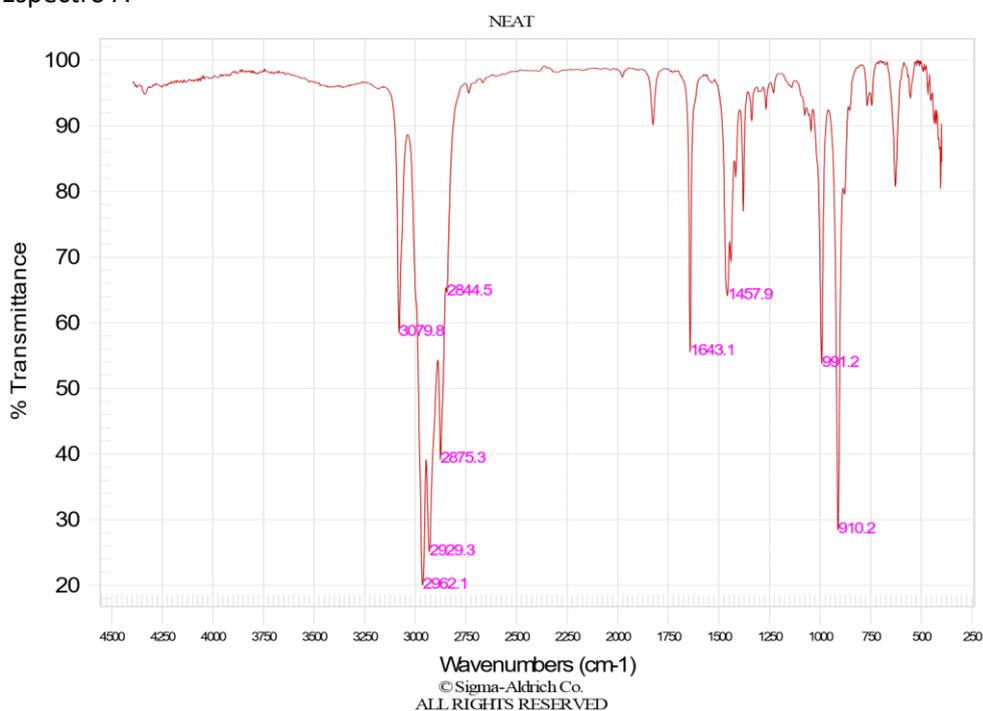
## FARMÁCIA (NOTURNO) - Estudo Dirigido 3 -2017

- 1) Os espectros de IV (marcados A, B, C e D), para quatro isômeros ( $C_5H_{10}$ ), encontram-se listados abaixo. Estes compostos são 1-penteno, *cis*-2-penteno, *trans*-2-penteno e 2-metil-1-buteno. Complete a tabela abaixo - combine cada composto com o espectro apropriado e liste os picos que foram úteis para as atribuições.

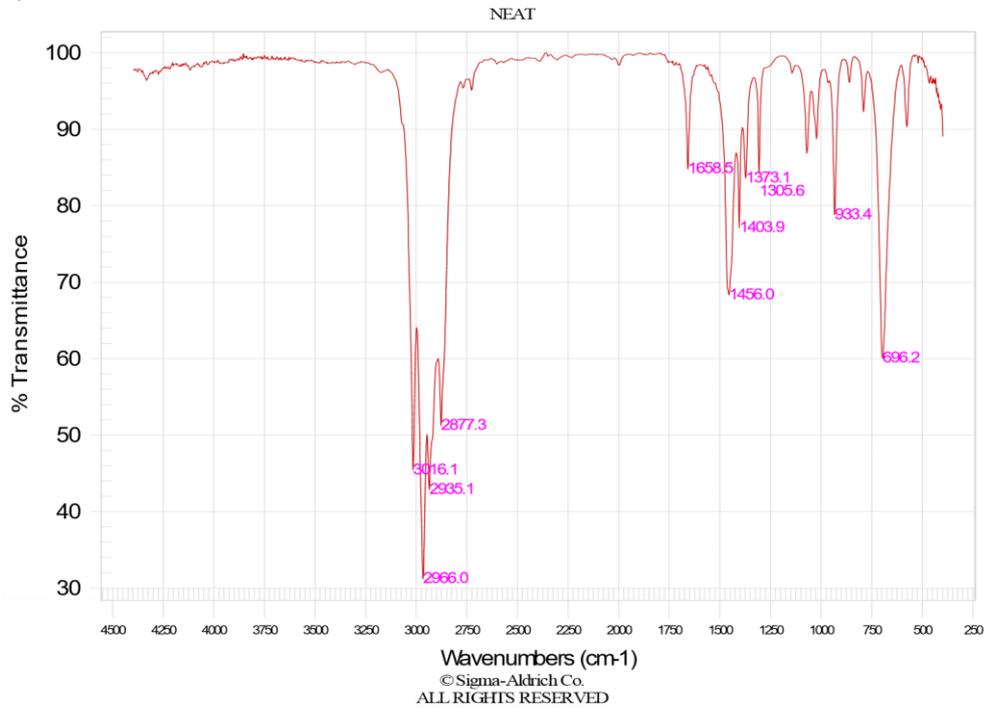
Tabela 1- Identificação dos Isômeros  $C_5H_{10}$

Espectro	Composto	Bandas características para o diagnóstico ( $cm^{-1}$ )
A		
B		
C		
D		

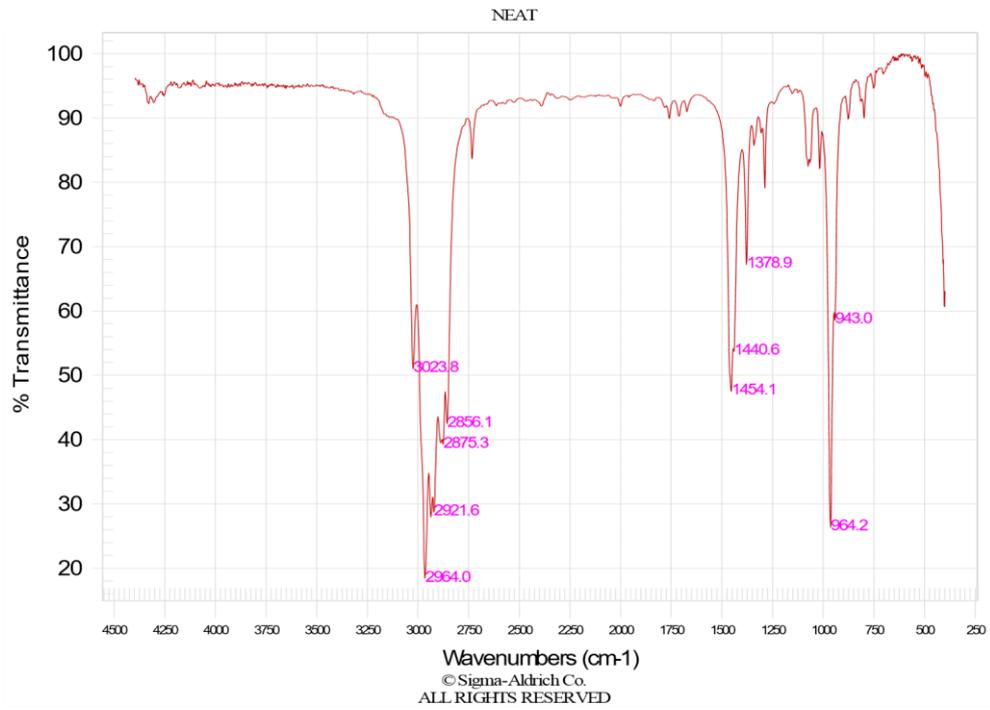
Espectro A



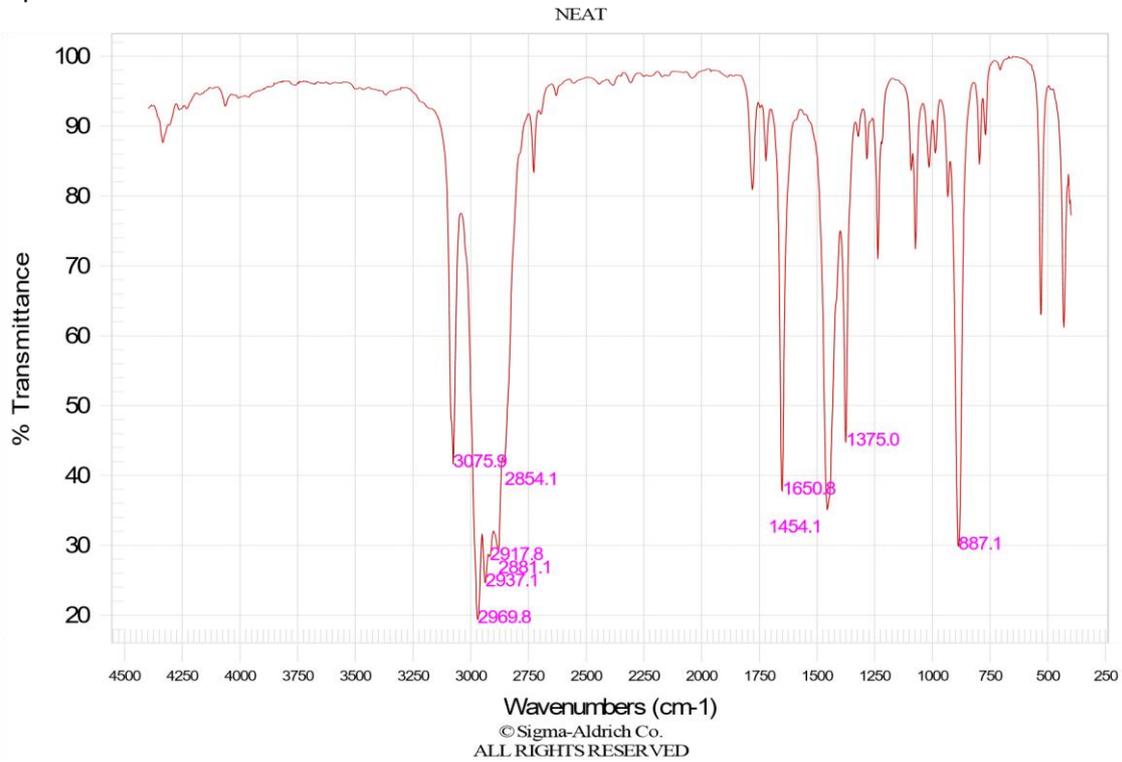
Spectrum B



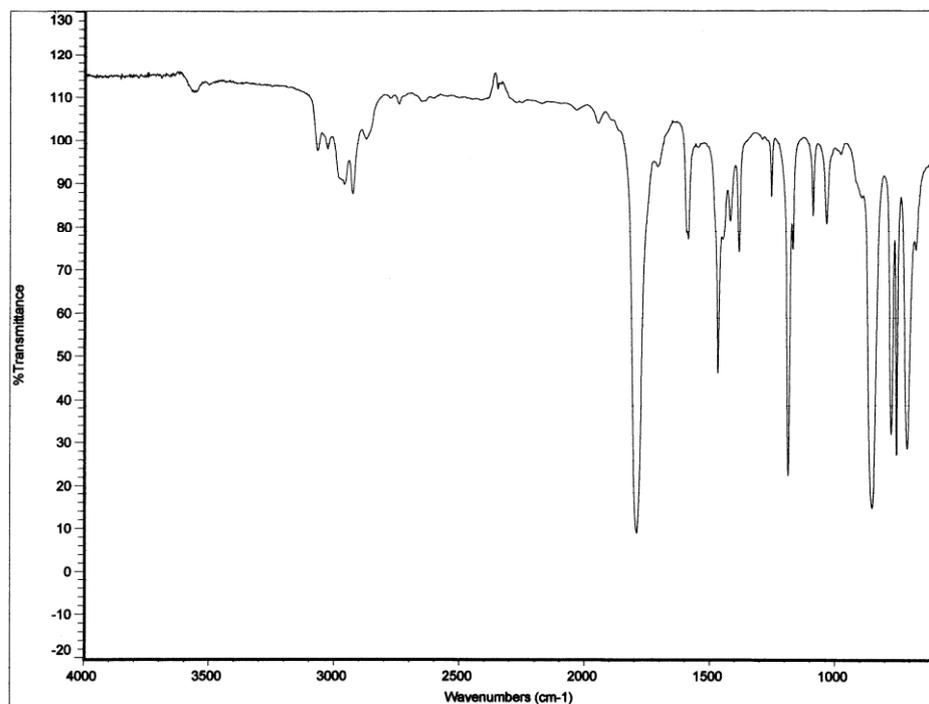
Spectrum C



## Spectrum D



- 2) Os espectros de infravermelho (IV) e de massas de um derivado de ácido benzoico, preparado como um intermediário numa síntese química de múltiplas etapas, são mostrados abaixo. Apresente as respostas para as quatro perguntas a seguir com as devidas justificativas.
- Sugerir uma estrutura consistente com estes dados.
  - Atribuir a absorção a 1791 cm<sup>-1</sup> no espectro de IV
  - O que indicam os picos em  $m/z$  170/168?
  - Atribuir uma estrutura aos picos em  $m/z$  133 e 105.
- IR summary: 1791, 1467, 1186, 851, 774, 754, 711 cm<sup>-1</sup>.

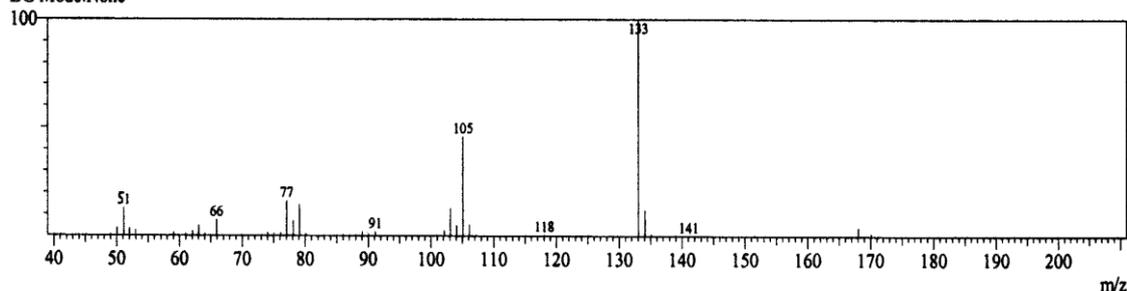


MS summary [m/z (relative intensity)]:

170 (1.13)  
168 (3.91)  
133 (100)  
105 (60)

GCMS Spectrum

Line#:1 R.Time:10.1(Scan#:1300)  
MassPeaks:98 BasePeak:133(14976680)  
RawMode:Single 10.1(1300)  
BG Mode:None



- 3) A Tabela 2 abaixo apresenta os dados selecionados dos espectros de massas de três álcoois isoméricos com fórmula  $C_5H_{12}O$ . Com base na posição dos picos e sua intensidade relativa, sugira uma estrutura para cada um dos três isômeros. Um traço indica que o pico é muito fraco ou completamente ausente.

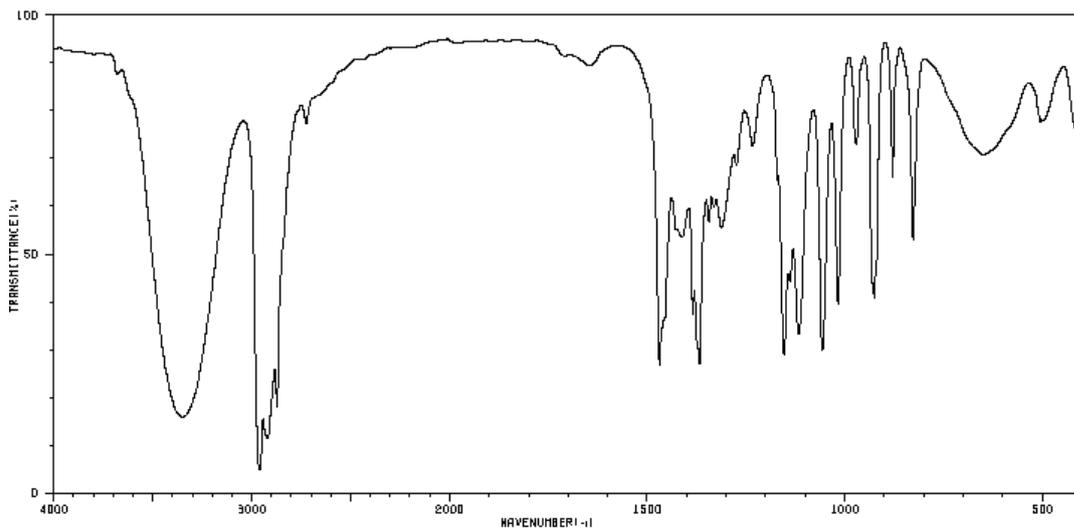
Tabela 2

Relação massa/carga (m/z)	Intensidade Relativa (%)		
	Isômero A	Isômero B	Isômero C
88 $M^+$	-	-	-
87 (M-1) <sup>+</sup>	2	2	-
73 (M-15) <sup>+</sup>	-	7	55
70 (M-18) <sup>+</sup>	38	3	3
59 (M-29) <sup>+</sup>	-	-	100
55 (M-15-18) <sup>+</sup>	60	17	33
45 (M-43) <sup>+</sup>	5	100	10
42 (M-18-28) <sup>+</sup>	100	4	6

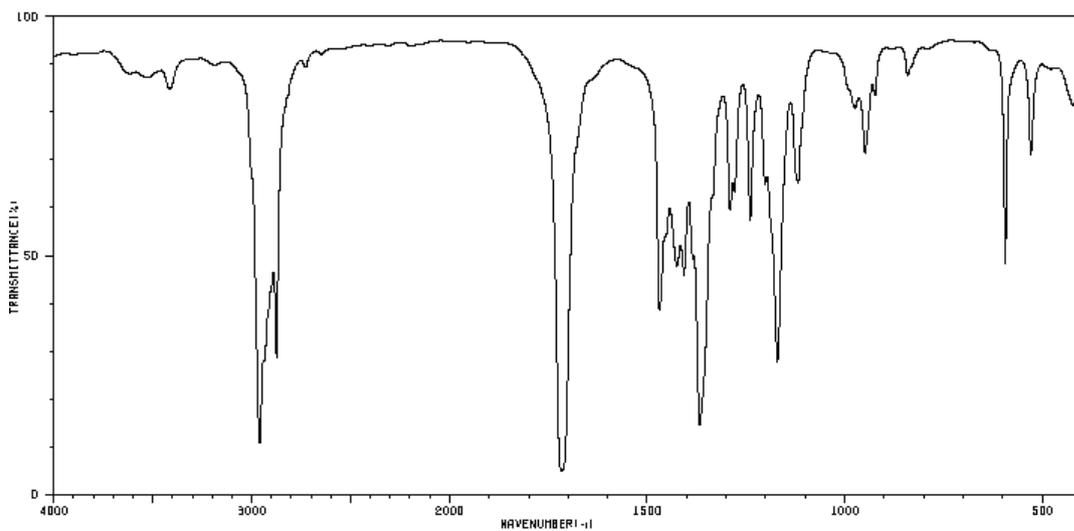
- 4) Abaixo são apresentados sete espectros de absorção na região do infravermelho. Usando as informações obtidas nesses espectros sobre os grupos funcionais presentes em cada molécula, responda as questões a seguir (um composto pode ser usado mais de uma vez ou não estar presente nas respostas, algumas questões podem ter mais de uma resposta correta):
- Qual composto contém um anel aromático?
  - Qual composto pode ser reduzido com  $NaBH_4$  (em Etanol/ $NaOH$ )?
  - Qual composto poderia ser o produto de uma redução com  $NaBH_4$ ?
  - Qual desses compostos é a 2-metil-propanonitrila?
  - Qual desses compostos é uma amina primária?

Justifique cada uma de suas respostas

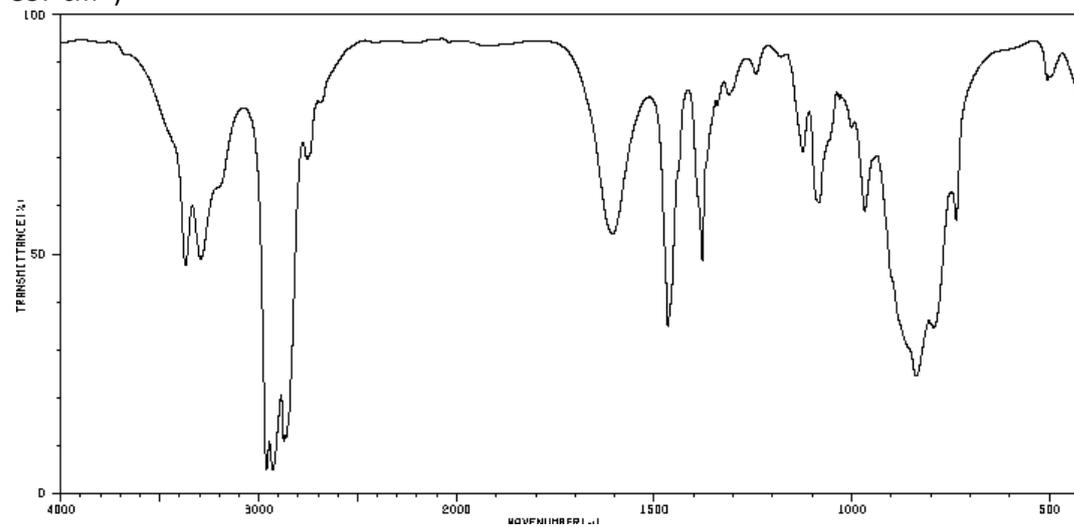
Composto 1 (IV resumo: 3348, 2960, 1426, 1368, 1164, 1139, 1116, 1067, 1017, 921, 827, 649  $\text{cm}^{-1}$ )



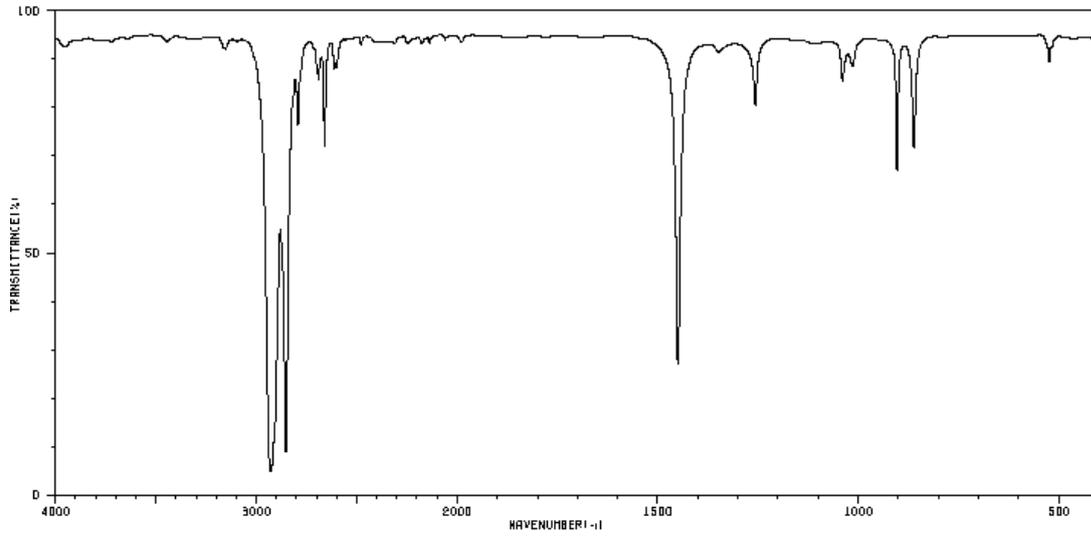
Composto 2 (algumas absorções importantes: 2960, 1716, 1426, 1407, 1367, 1171, 594  $\text{cm}^{-1}$ )



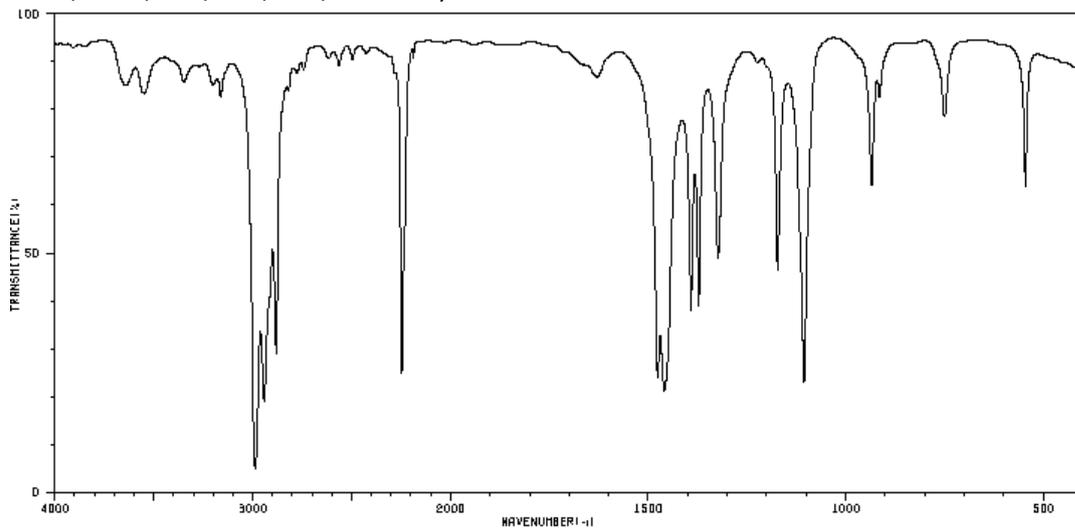
Composto 3 (algumas absorções importantes: 3369, 3293, 2960, 2928, 1606, 1465, 1379, 837  $\text{cm}^{-1}$ )



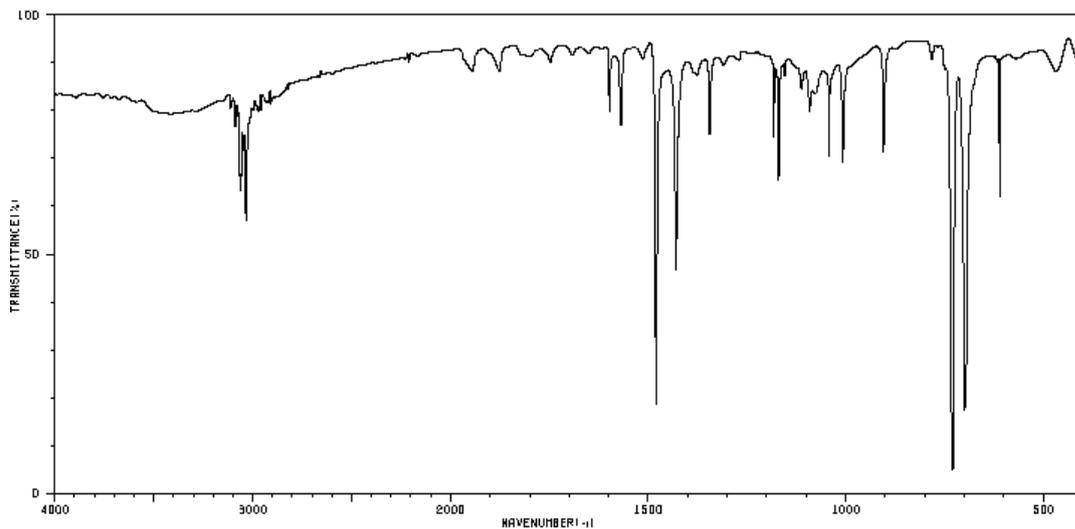
Composto 4 (algumas absorções importantes: 2928, 2853, 1460, 1257, 1039, 1016, 904, 852  $\text{cm}^{-1}$ )



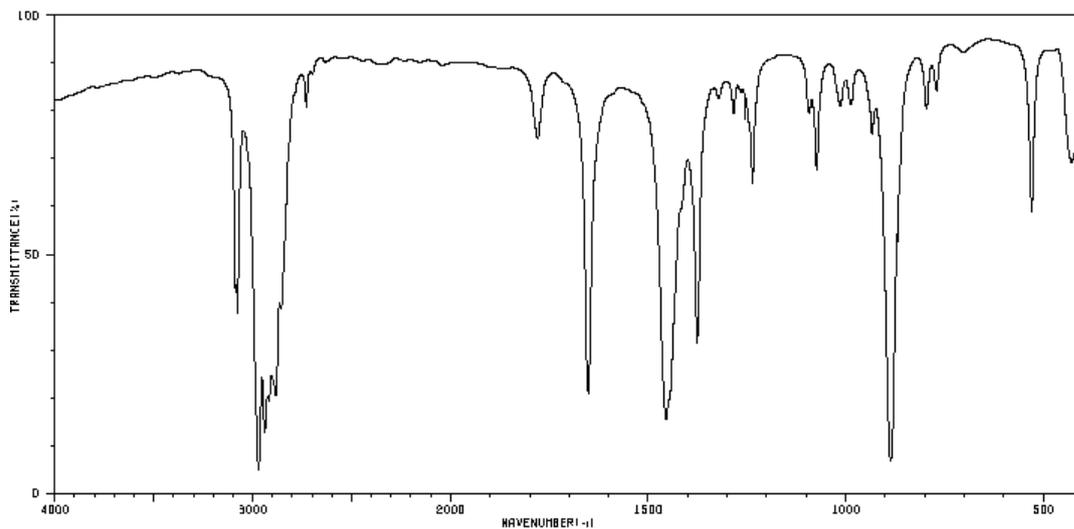
Composto 5 (algumas absorções importantes: 2986, 2246, 1476, 1460, 1392, 1372, 1323, 1173, 1106, 934, 916, 751, 545  $\text{cm}^{-1}$ )



Composto 6 (algumas absorções importantes: 3046, 3035, 1481, 1430, 730, 700  $\text{cm}^{-1}$ )

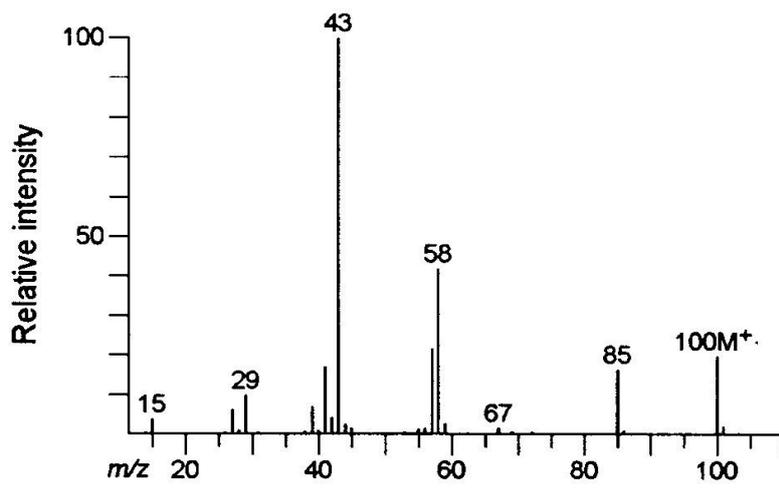


Composto 7 (Resumo IV: 3077, 2970, 1651, 1466, 887  $\text{cm}^{-1}$ )



- 5) Abaixo se encontram os espectros da 3- e 4-metil-2-pentanona. Indique a qual isômero cada um dos espectros espectro corresponde. Justifique sua resposta.

#### Unknown 4.16



#### Unknown 4.17

