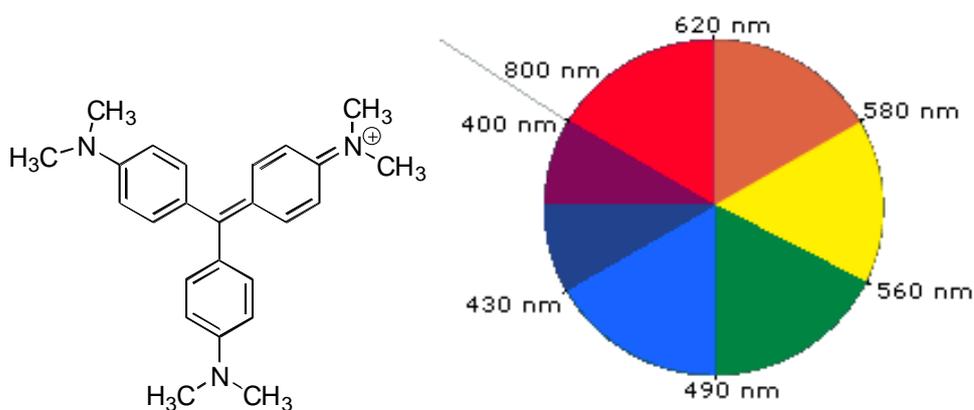


2015

QFL4030- MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS DE ANÁLISE
EXERCÍCIOS COMPLEMENTARES

1. Dependendo de sua localização (interna ou terminal), os valores observados nos espectros para as frequências de absorção devidas ao estiramento da ligação tripla de alcinos são diferentes. Explique *de forma clara* qual desses tipos de alcinos deveria apresentar o maior valor para a frequência de absorção **justificando** sua resposta.
2. O Cristal violeta em pH 7 apresenta um λ_{\max} =591 nm; que cor ele apresenta nesse pH? Em pH baixo (HCl diluído) possui λ_{\max} =625 nm; que cor possui nessa condição? Por quê? Quando se abaixa pH mais intensamente (HCl conc.) o λ_{\max} muda para 420 nm; Qual sua coloração nessas condições? Por quê?



3. Explique sucintamente (resumidamente) como você distinguiria os dois compostos diastereoméricos **A** e **B** mostrados abaixo (Figura 1) através da espectroscopia de RMN de ¹H. Seja específico sobre qual observação ou medida você iria usar e qual resultado seria esperado para cada uma das substâncias, cujas estruturas estão representadas na Figura 1.

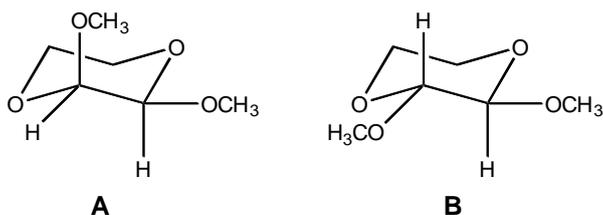


Figura 1

4. No norborneno (Figura 2), os hidrogênios *exo* e *endo* apresentam deslocamentos químicos diferentes. Os valores obtidos para os deslocamentos químicos foram δ 1,50 e 1,23 ppm. Preveja qual desses valores correspondem aos hidrogênios *endo* e qual pertence aos hidrogênios *exo*. Explique brevemente o seu raciocínio.

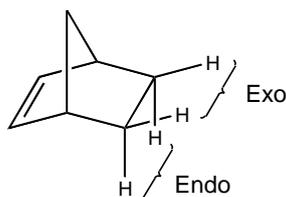


Figura 2

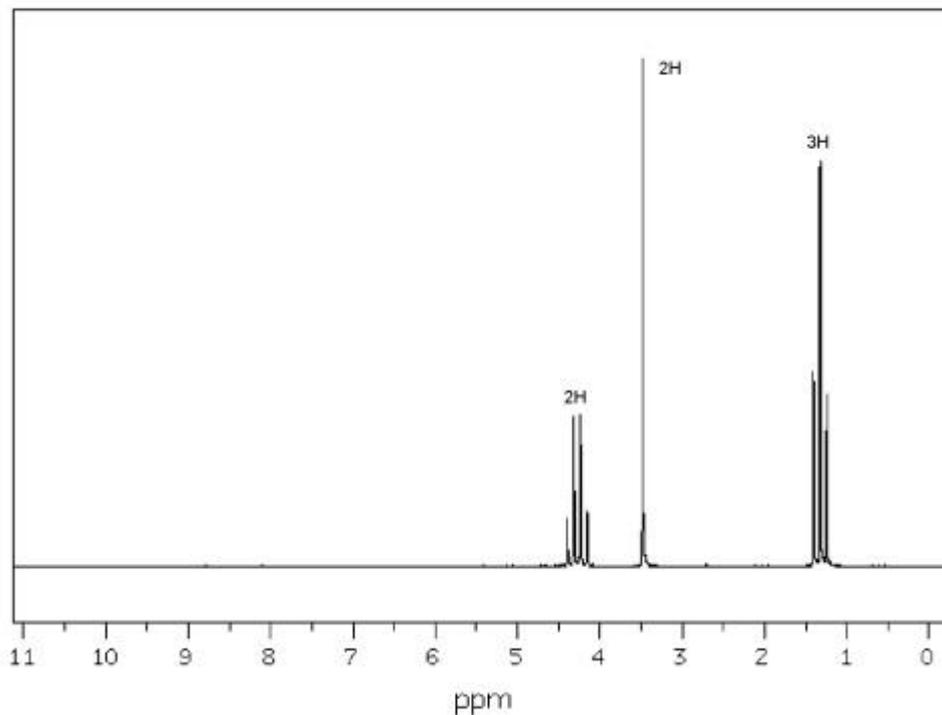
5. Proponha a estrutura para o Composto X, o qual possui $M^{+} = 120$ e $(M + 2) = 122$ com aproximadamente a mesma intensidade no seu espectro de massas e apresenta os seguintes dados espectrais de RMN de ^{13}C NMR:

Espectro de RMN de ^{13}C desacoplado: $\delta = 32,6; 118,8$ e $134,3$ ppm.

DEPT-90: $\delta 134,3$ ppm

DEPT-135: picos positivos em $\delta = 134,4$ ppm; picos negativos em $\delta = 32,6$ e $118,8$ ppm
(Justifique sua estrutura)

6. O espectro de massas do composto abaixo apresenta o íon molecular em $m/z = 113$, o espectro na região do IV apresenta absorções características em 2270 e 1735 cm^{-1} e seu espectro de RMN de ^{13}C apresenta cinco sinais. Proponha uma estrutura para o composto a partir dos dados espectrais indicando seu raciocínio. Neste caso qual a importância dos dados de RMN de ^{13}C ?



7. Determine a estrutura do composto orgânico, cujos espectros de IV, UV, EM e RMN (^1H e ^{13}C) são mostrados a seguir. Atribua os sinais relevantes observados nos espectros.

