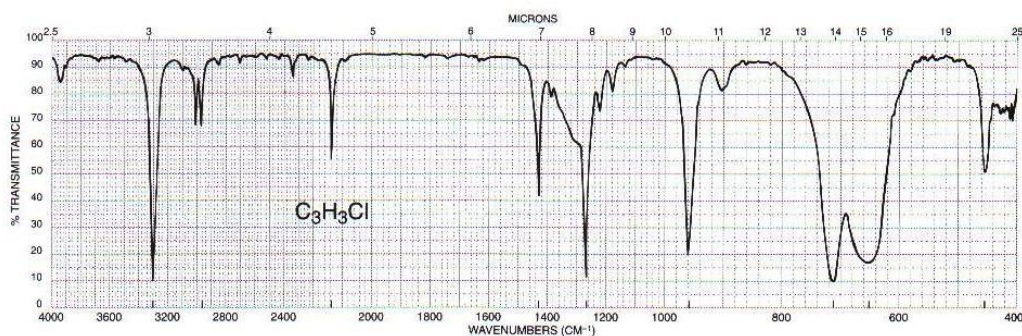


4ª Lista de exercícios

- 1) Proponha estrutura para o composto abaixo tendo como base seu espectro na região do IV. O cálculo do índice de deficiência de hidrogênios constitui-se num ponto de partida.



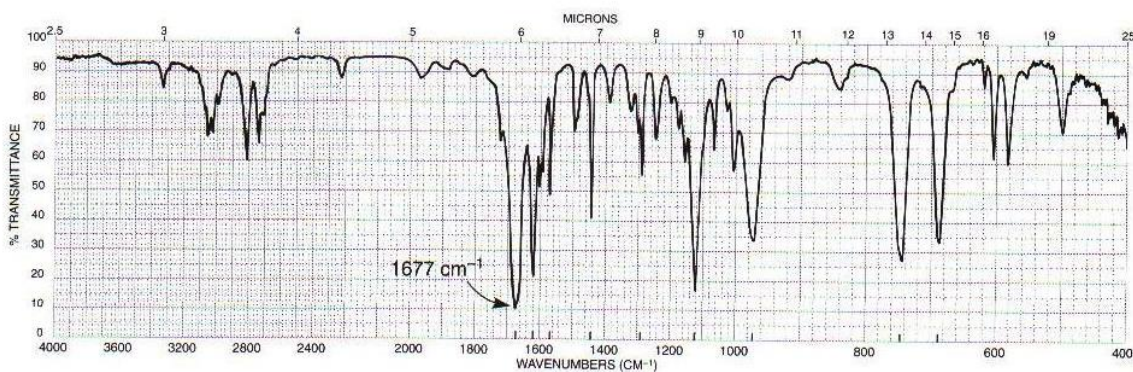
$$IDH (nC+1 - H+Cl/2) = 4-2 = IDH 2$$

$\sim 2150 \text{ cm}^{-1}$ = tripla ligação do acetileno; 3-cloropropino (ou cloreto de propargila)

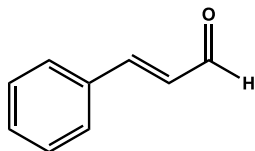
3299 cm^{-1} = C-H terminal do acetileno

Bandas em 2900 = estiramentos simétrico e assimétrico do CH_2 ; 700 cm^{-1} = C-Cl

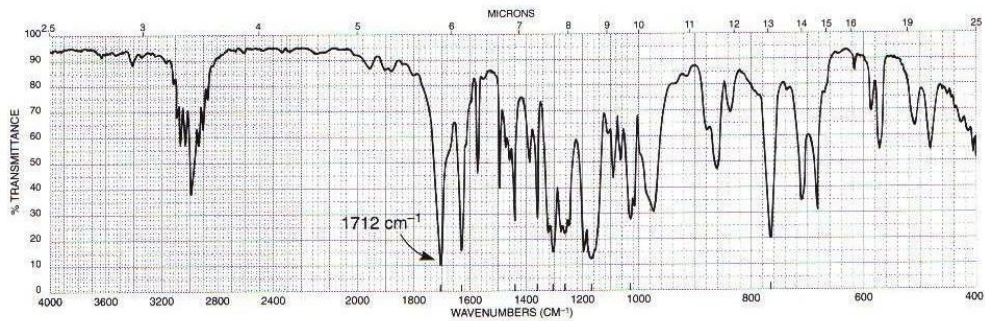
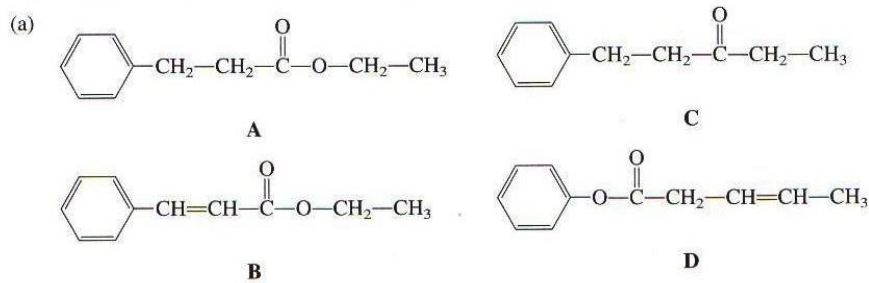
- 2) O principal constituinte do óleo de canela possui a fórmula molecular $\text{C}_9\text{H}_8\text{O}$. Deduza sua estrutura.



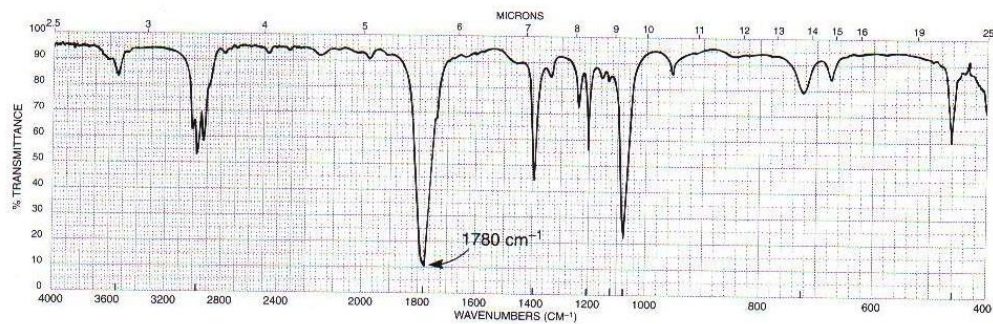
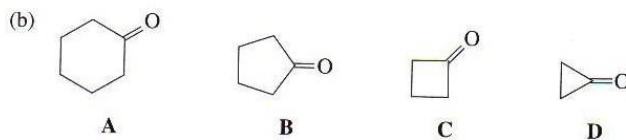
$IDH = 10 - 4 = 6$; 4 de anel aromático + uma insaturação de dupla ligação + carbonila conjugada em 1677 cm^{-1} ; cinamaldeído (aldeído cinâmico)



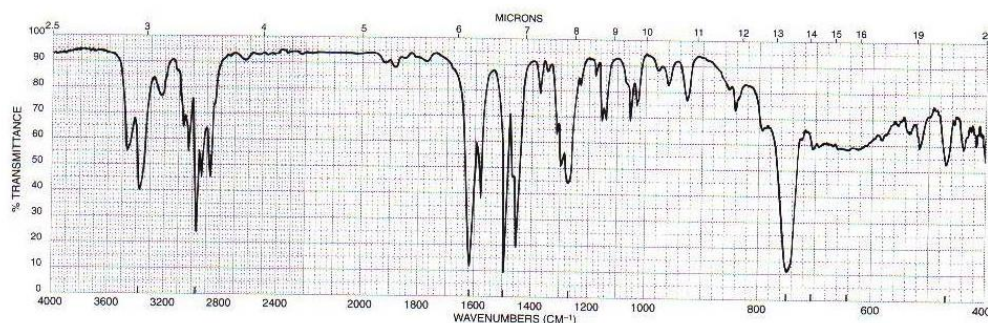
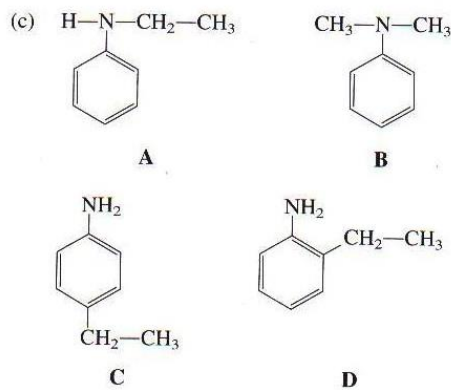
3) Quais dos compostos são compatíveis com os correspondentes espectros no Infravermelho?



B (cinamato de etila)= éster conjugado
 Acetato de fenila (D)= $\sim 1760\text{ cm}^{-1}$
 Acetato de etila (A e C): 1740 cm^{-1}



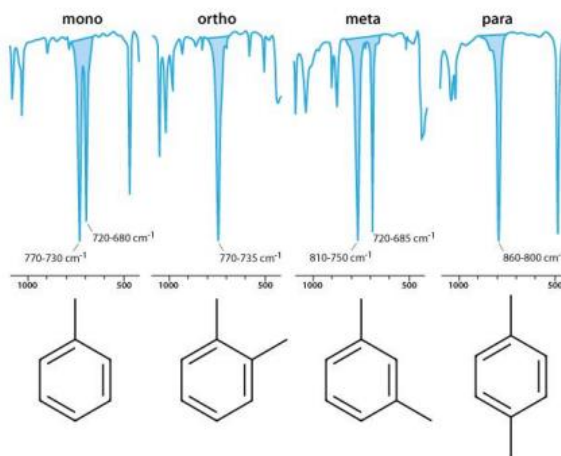
A= 1715 cm^{-1}
 B= 1745 cm^{-1}
C= 1780 cm^{-1}
 D: 1815 cm^{-1}

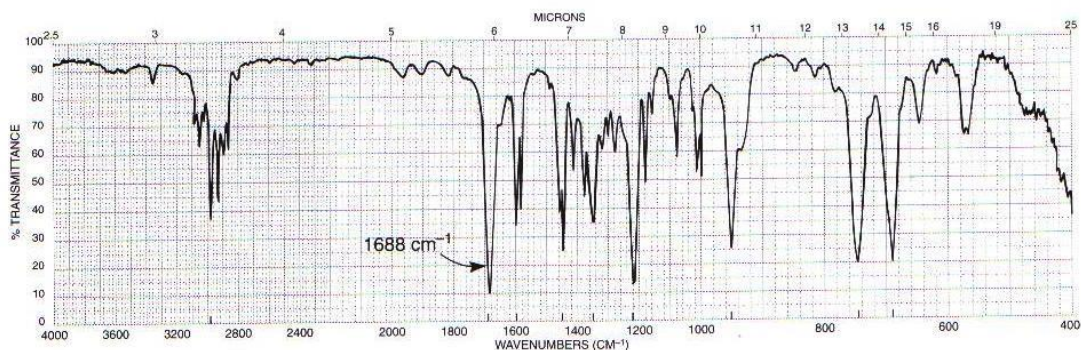
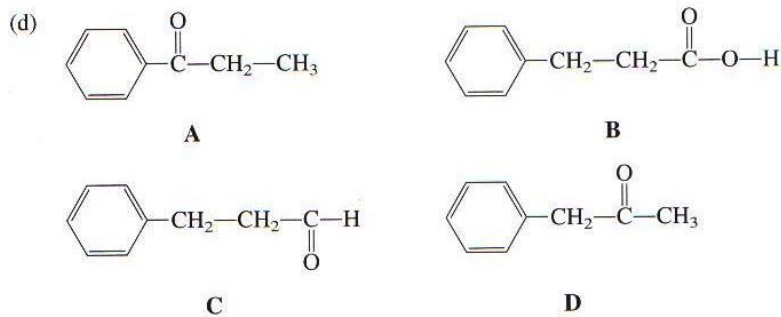


D etilanilina = duas bandas (que, a princípio, poderiam se C ou D), mas o padrão de substituição é compatível com anel aromático dissubstituído em orto (775 cm^{-1}), se fosse para, teria uma banca em 860-800 cm^{-1} .
 Amina primária = uma única banda $\sim 3300 \text{ cm}^{-1}$;
 Aminas terciárias = não apresentam bandas.

Group	Frequency (cm^{-1})	Explanation
$\text{R}-\text{C}_6\text{H}_5$	770-730(s) and 720-680(s)	Monosubstituted
$\text{R}_2-\text{C}_6\text{H}_4$	770-735(s) 810-750(s), 720-685(m) 860-800(s)	Disubstituted <i>Ortho</i> <i>Meta</i> <i>Para</i>
$\text{R}_3-\text{C}_6\text{H}_3$	810-750(s), 720-685(m) 900-820(m), 860-800(s) 900-820(s), 720-685(m)	Trisubstituted 1,2,3- 1,2,4- 1,3,5-
$\text{R}_4-\text{C}_6\text{H}_2$	840-800(s) 880-840(s) 880-840(s)	Tetrasubstituted 1,2,3,4- 1,2,3,5- 1,2,4,5-
$\text{R}_5-\text{C}_6\text{H}$	900-860(m-s)	Pentasubstituted
R_6-C_6	415-385(m-s)	Hexasubstituted

Table 12: Benzene ring substitution patterns.



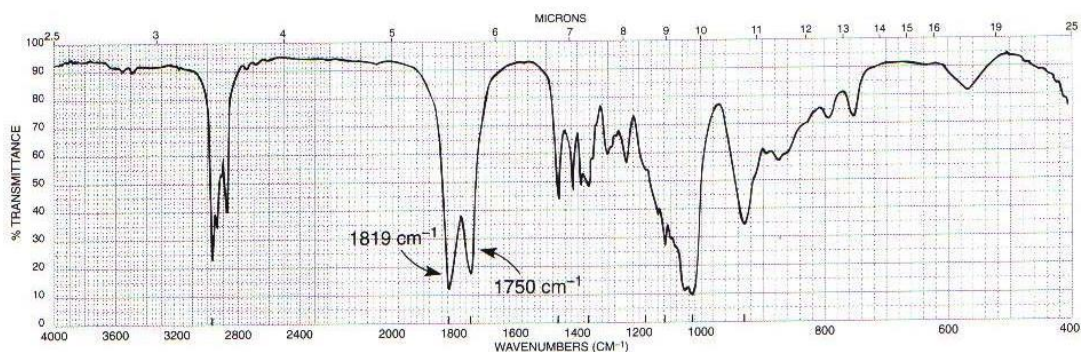
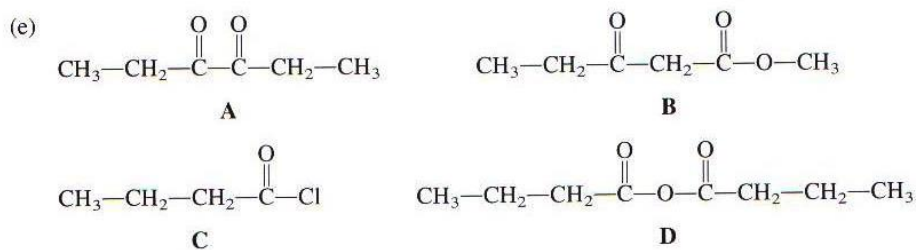


A: propiofenona (carbonila conjugada em 1688 cm^{-1})

B: banda larga de O-H centrada em 3100 cm^{-1} ; e carbonila entre $\sim 1720\text{ cm}^{-1}$

C: carbonila de aldeído entre $1740\text{--}1725\text{ cm}^{-1}$; estiramento C-H de aldeído $\sim 2800\text{ cm}^{-1}$

D: carbonila de cetonas $\sim 1710\text{ cm}^{-1}$



A: 1716 cm^{-1} ;

B: duas bandas, uma de cetona em 1715 e uma de éster em $\sim 1740\text{ cm}^{-1}$

C: carbonila de cloretos de acila, uma banda em $\sim 1800\text{ cm}^{-1}$

(D) Anidrido butanoico: duas bandas de carbonila (simétrica e assimétrica)