



Universidade de São Paulo
Instituto de Química

Ressonância Magnética Nuclear - RMN

Lista de Exercícios 1

Lucas Colucci Ducati

25 de maio de 2020

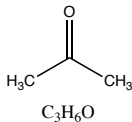
ducati@iq.usp.br - Sala 321 - Bloco 3

Instruções

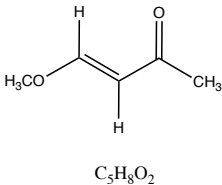
Assinalamento e Interpretação dos Espectros de RMN

- O que precisamos saber para fazer os exercícios a seguir:
 - **regiões características de δ** dos vários tipos de ^1H e ^{13}C
 - Escala de deslocamento químico de ^1H - Slide 3
 - Escala de deslocamento químico de ^{13}C - Slide 4
 - **integração** dos sinais e suas **intensidades** para ^1H
 - conceitos de **blindagem** e **desblindagem** (σ) e deslocamento químico (δ)
 - como eletronegatividade afeta o deslocamento químico
 - como anisotropia diamagnética afeta o deslocamento químico
- **Número de insaturação N_i**
 - $N_i = 1 + 1/2 \sum_i A_i (V_i - 2)$
 - A é a atomicidade
 - V é a valência

Exemplos de como calcular do número de insaturação (Ni)

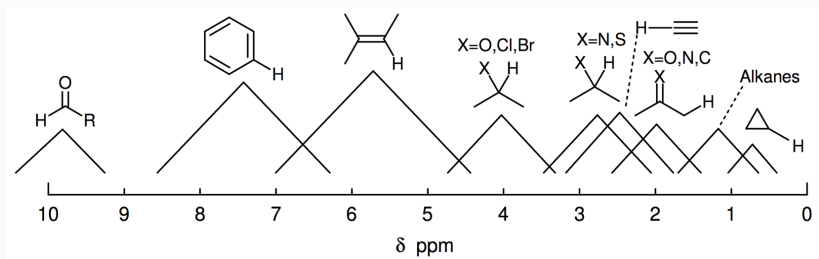


$$\begin{aligned} \text{Ni} &= 1 + 1/2 \sum [A_i(V_i - 2)] \\ \text{Ni} &= 1 + 1/2 [3(4 - 2) + 6(1 - 2) + 1(2 - 2)] \\ \text{Ni} &= [3(2) + 6(-1) + 1(0)] \\ \text{Ni} &= 1 + 1/2 [6 - 6 + 0] \\ \text{Ni} &= 1 \end{aligned}$$

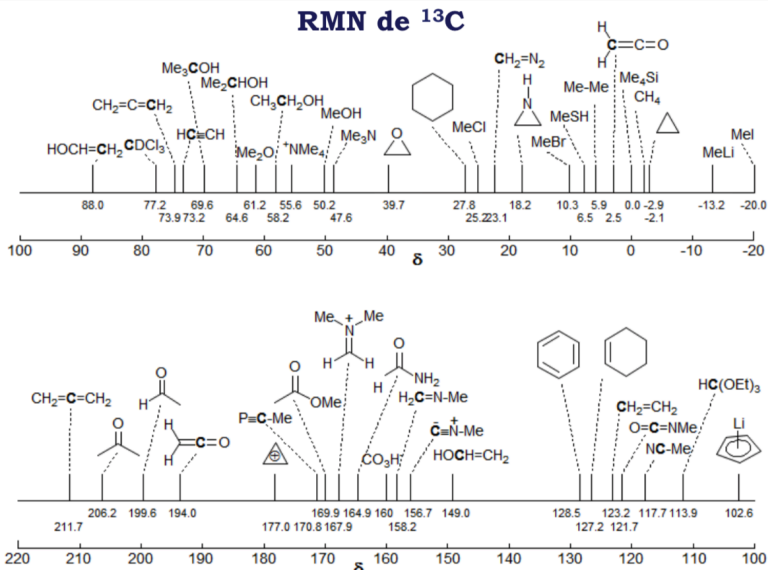


$$\begin{aligned} \text{Ni} &= 1 + 1/2 \sum [A_i(V_i - 2)] \\ \text{Ni} &= 1 + 1/2 [5(4 - 2) + 8(1 - 2) + 2(2 - 2)] \\ \text{Ni} &= [5(2) + 8(-1) + 2(0)] \\ \text{Ni} &= 1 + 1/2 [10 - 8 + 0] \\ \text{Ni} &= 2 \end{aligned}$$

Escala de Deslocamento Químico de ^1H

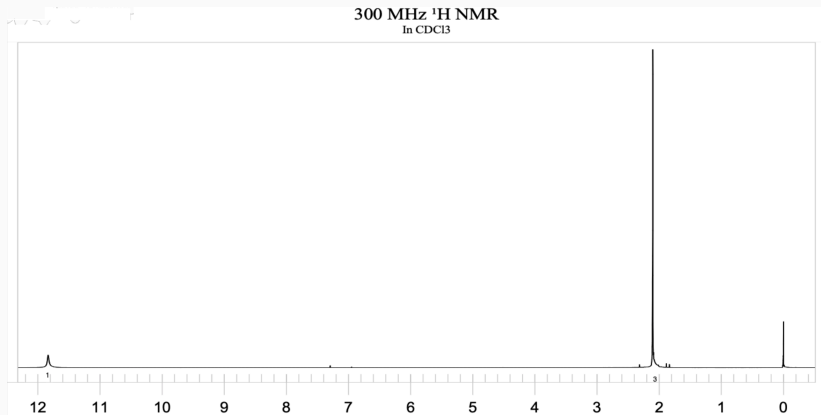


Escala de Deslocamento Químico de ^{13}C

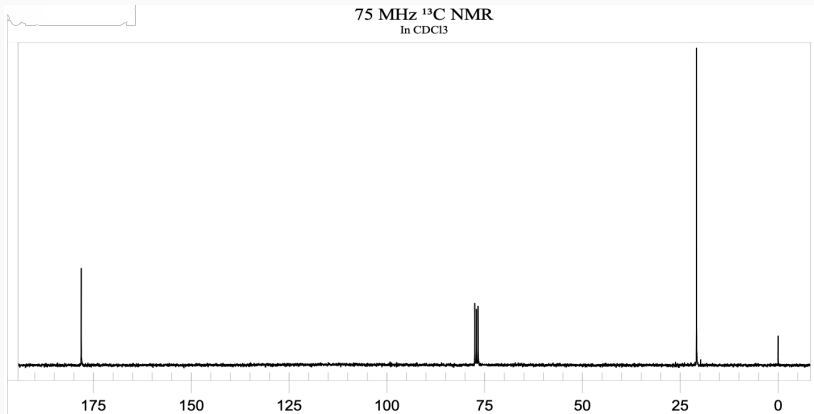


Espectros com singletos

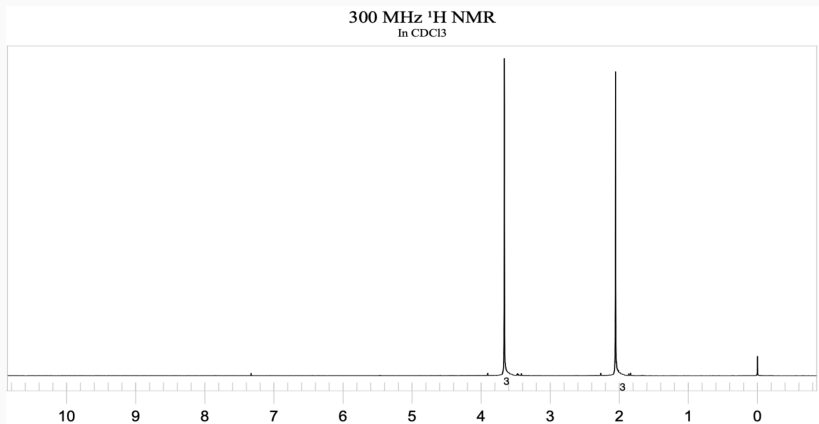
Ex1: Dê a fórmula estrutural e atribua o espectro de ^1H do $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$



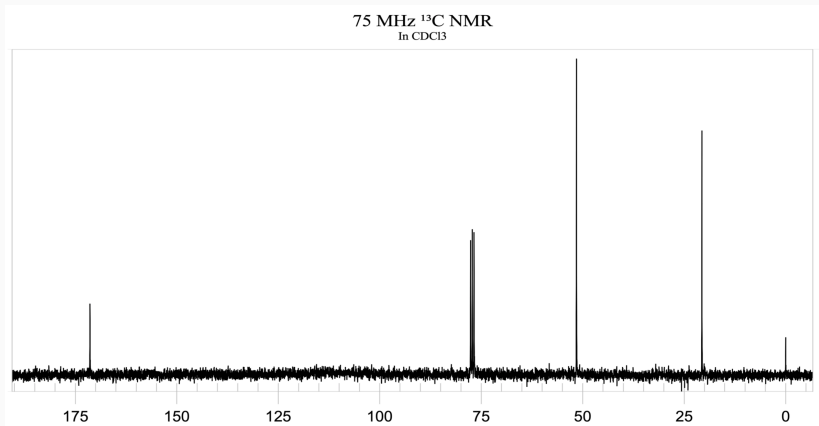
Ex1: Atribua o espectro de ^{13}C do $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$



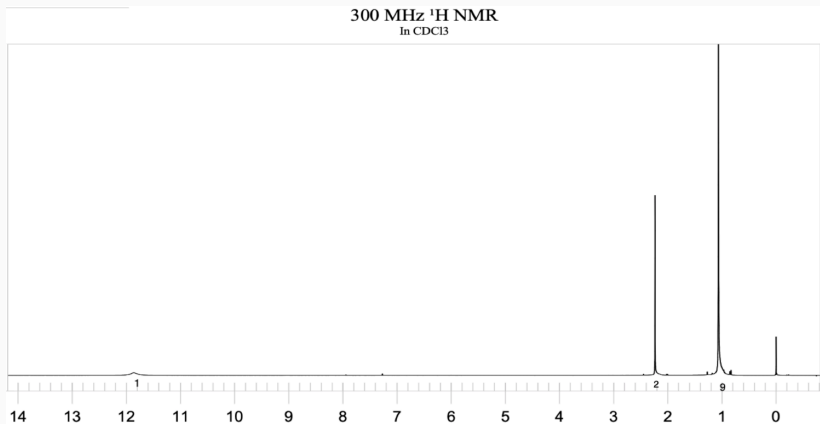
Ex2: Dê a fórmula estrutural e atribua o espectro de ^1H do $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$



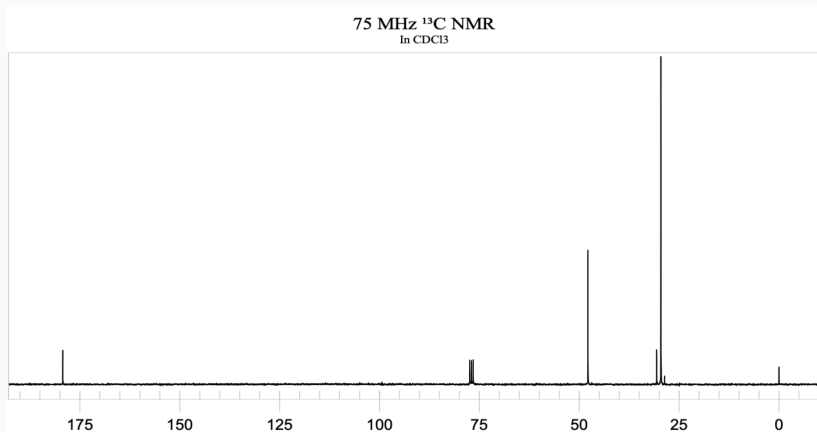
Ex2: Atribua o espectro de ^{13}C do $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$



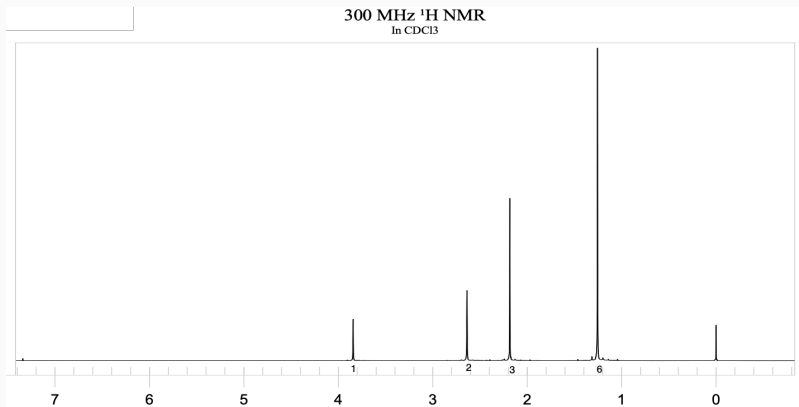
Ex3: Dê a fórmula estrutural e atribua o espectro de ^1H do $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$



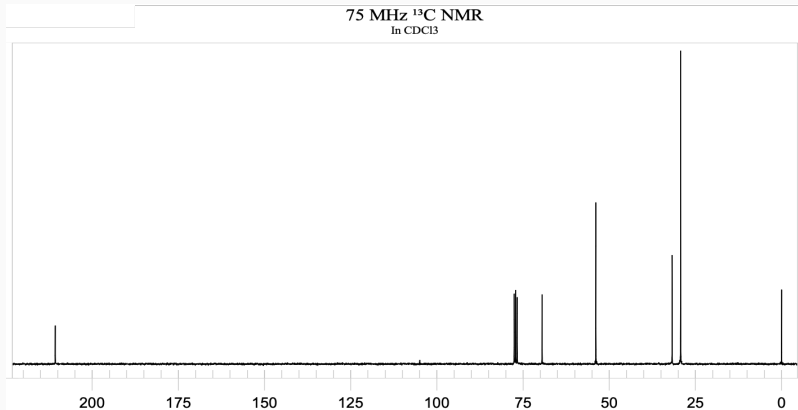
Ex3: Atribua o espectro de ^{13}C do $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$



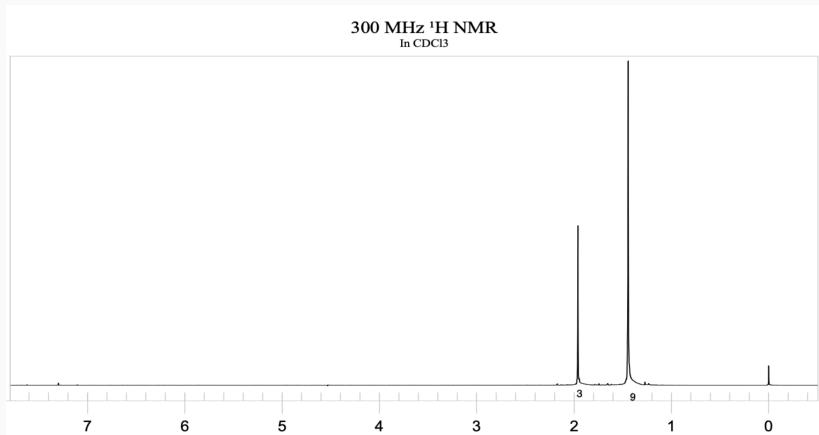
Ex4: Dê a fórmula estrutural e atribua o espectro de ^1H do $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$



Ex4: Atribua o espectro de ^{13}C do $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$



Ex5: Dê a fórmula estrutural e atribua o espectro de ^1H do $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$



Ex5: Atribua o espectro de ^{13}C do $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$

