

## QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

### Instruções sobre a prova:

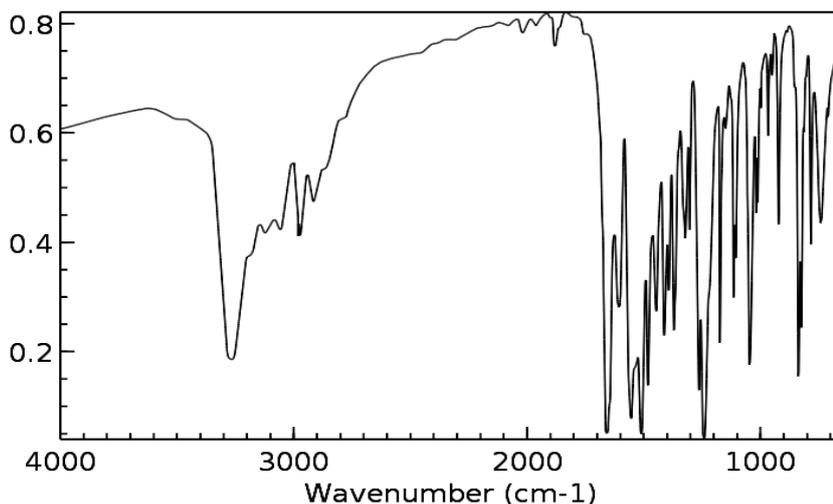
- Coloque nome em todas as folhas – folhas sem nome serão desconsideradas!
- A duração da prova é de 3 horas, impreterivelmente.
- Descreva nos espaços reservados a resposta para cada item. Anotações nos espectros só serão consideradas se acompanhadas das respostas requisitadas em cada campo!
- A primeira página de cada questão mostra os espectros de infravermelho e massas e campos para as perguntas específicas dessas técnicas.
- A segunda página mostra os espectros de RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  além de campos para as respostas específicas.
- As demais páginas da questão trazem as expansões do espectro de RMN de  $^1\text{H}$  quando necessário.
- Identifique a molécula apresentada em cada questão no espaço reservado de forma clara e quimicamente correta.
- As fórmulas estruturais propostas devem ser escritas tanto na folha de análises de IR e MS quanto na de análises de RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ . Estruturas diferentes nas duas folhas farão que ambas sejam desconsideradas.
- No item c) dos exercícios, atribua o grupo que dá origem a banda identificada (p. ex. O-H ou C=N).
- No item d) dos exercícios, atribua os íons utilizando a fórmula molecular ou indicando a perda de fragmentos como  $[\text{M}-\text{N}]^+$  (p. ex.  $[\text{M}-\text{H}_2\text{O}]^+$ ).
- No item f) dos exercícios, atribua os sinais de  $^1\text{H}$  RMN indicando o deslocamento químico, multiplicidade e constante de acoplamento.
- As tabelas necessárias se encontram no final dessa prova e são o único material que pode ser utilizado para consulta.
- Use o verso para rascunhos, caso necessário.

**QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados**

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

**Questão 1) – C<sub>10</sub>H<sub>13</sub>NO<sub>2</sub>**

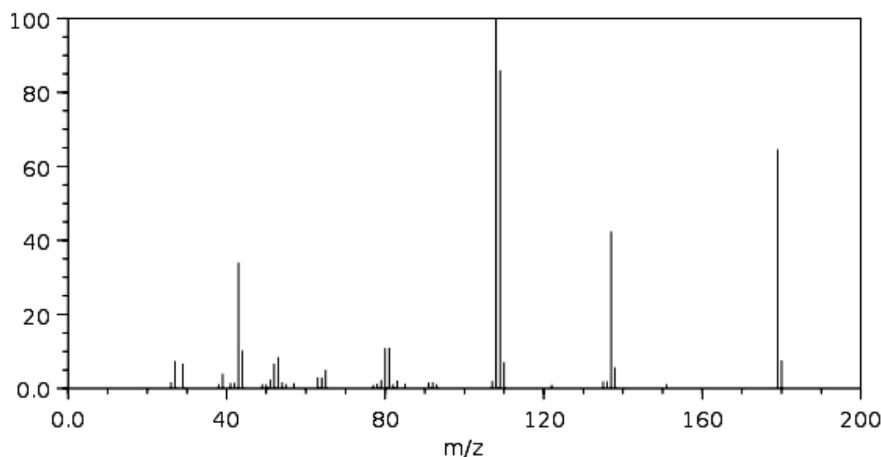
a) Número de insaturação =



b) Fórmula Estrutural

c) Bandas relevantes no IR

cm <sup>-1</sup>	3550	3290	1780	1510	1220
Atribuição					



d) Íons relevantes no MS

m/z	Atribuição
179	
151	
43	
29	
27	

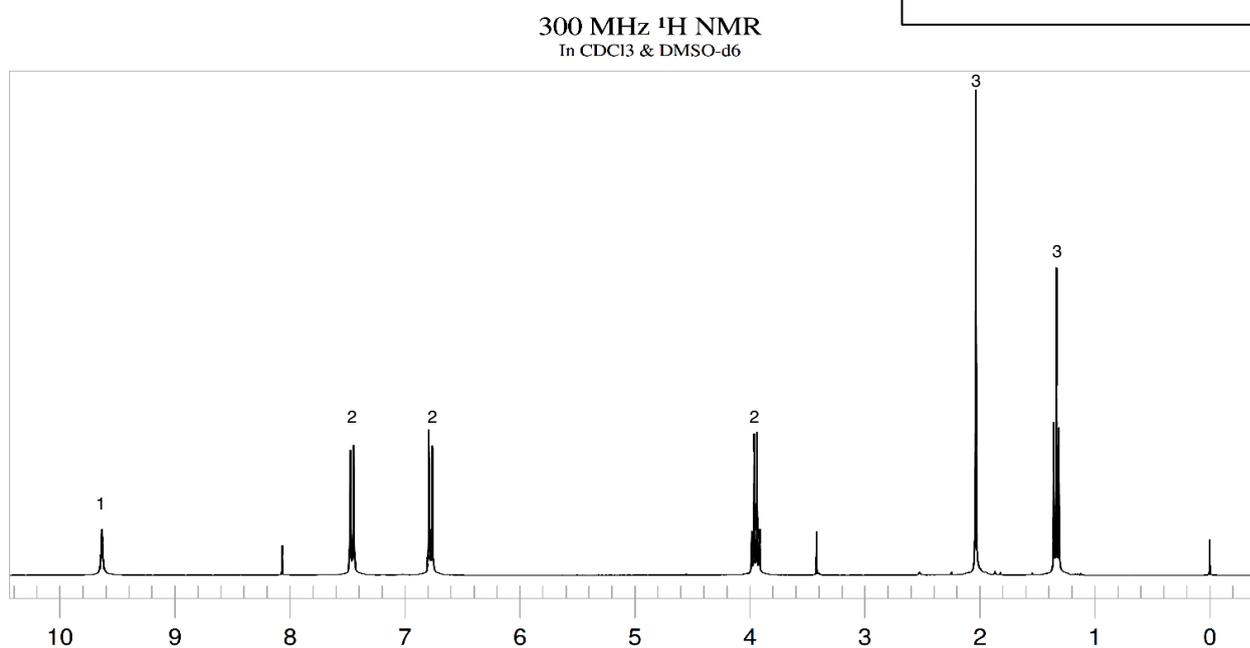
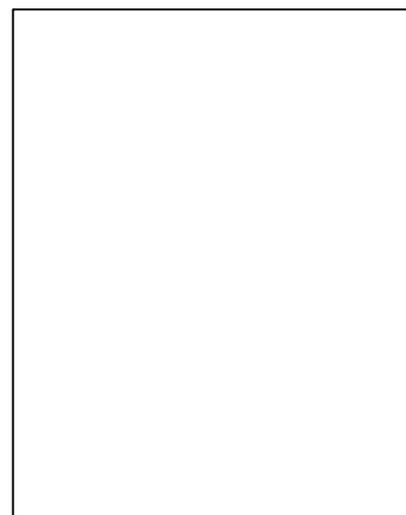
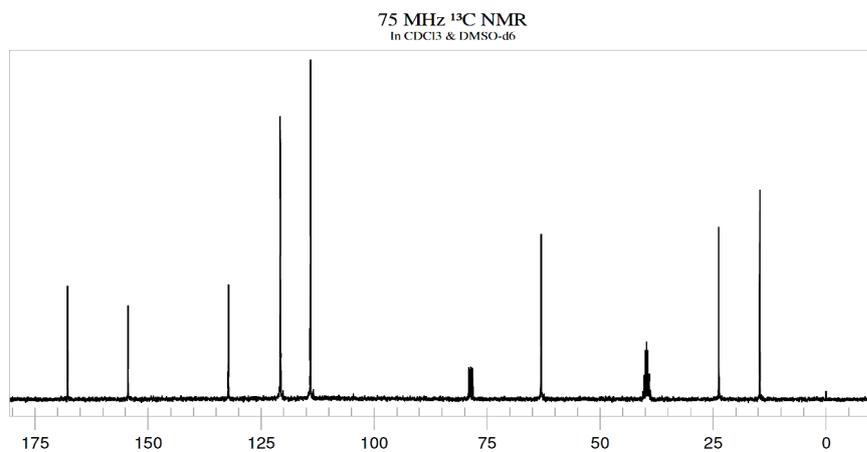
e) Escreva o mecanismo de formação do íon de *m/z* 43 a partir do íon molecular.

QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

Questão 1) – C<sub>10</sub>H<sub>13</sub>NO<sub>2</sub>

b) Fórmula Estrutural



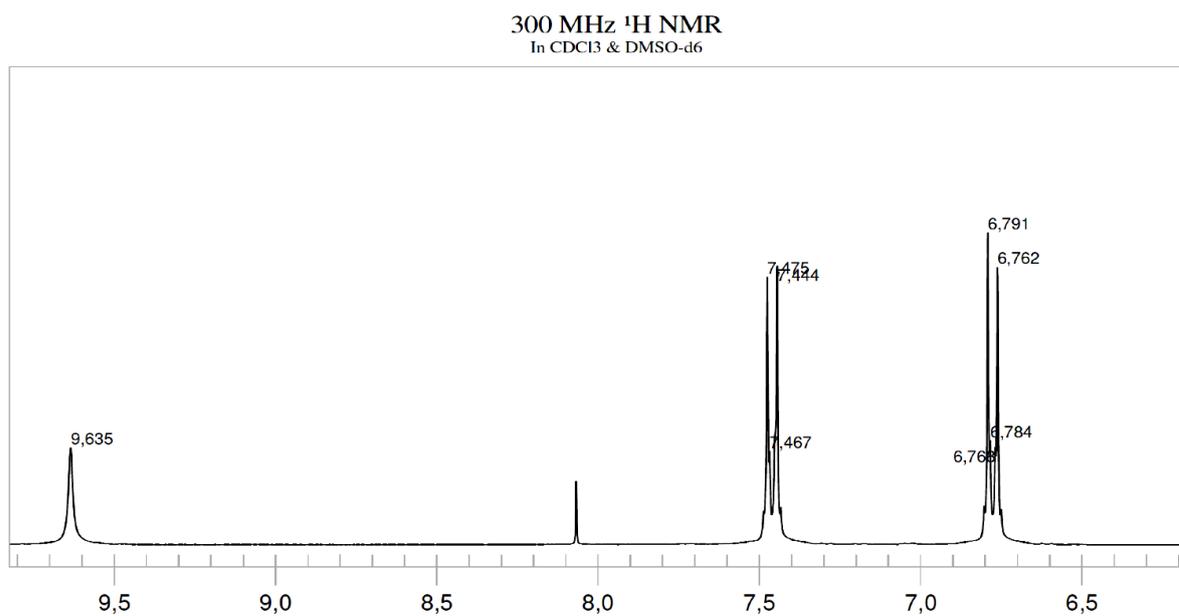
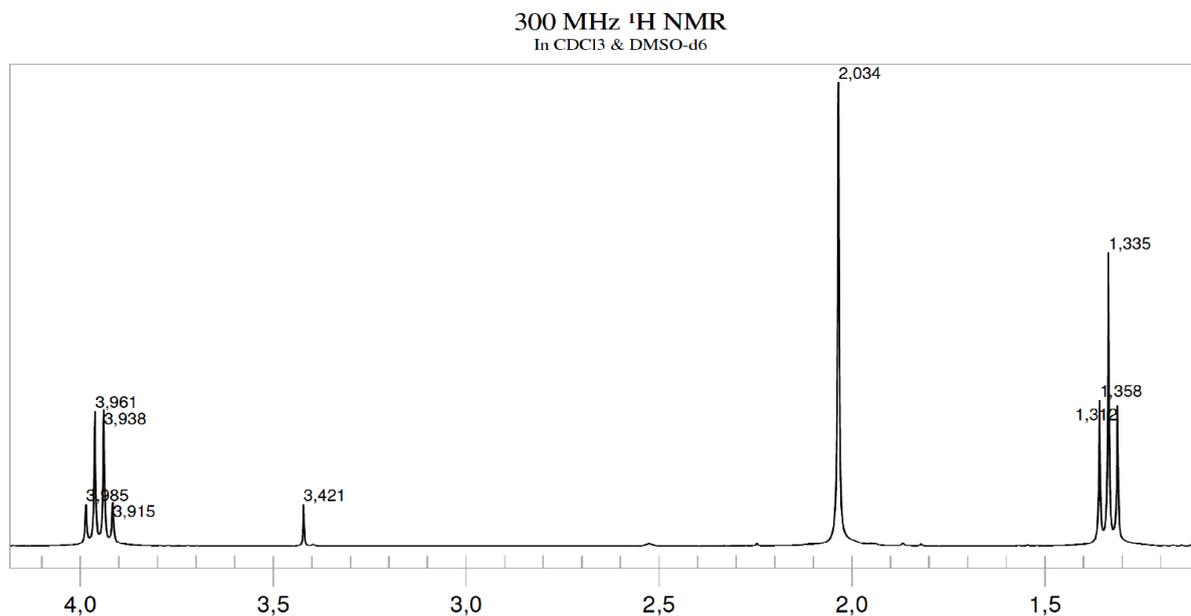
f) Atribuição dos sinais de <sup>1</sup>H RMN (deslocamento químico, multiplicidade, J<sub>3</sub>)



QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

Questão 1) – C<sub>10</sub>H<sub>13</sub>NO<sub>2</sub>



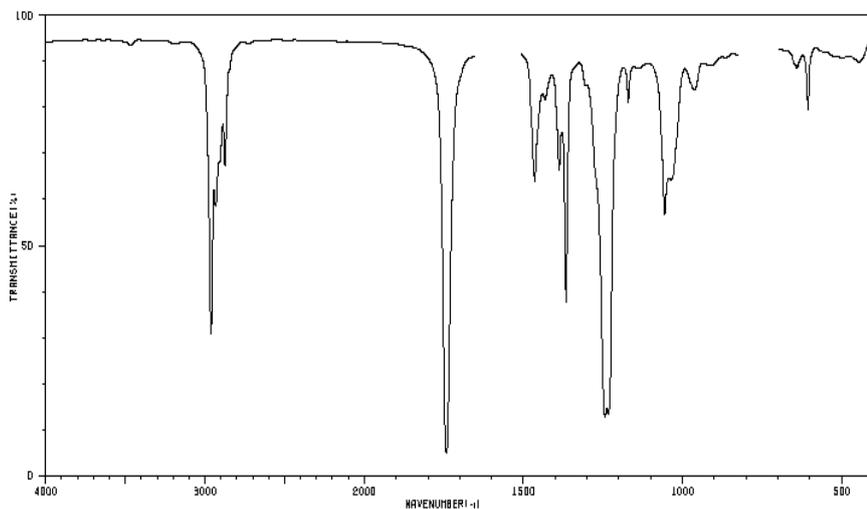
**QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados**

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

**Questão 2) – C<sub>7</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub>**

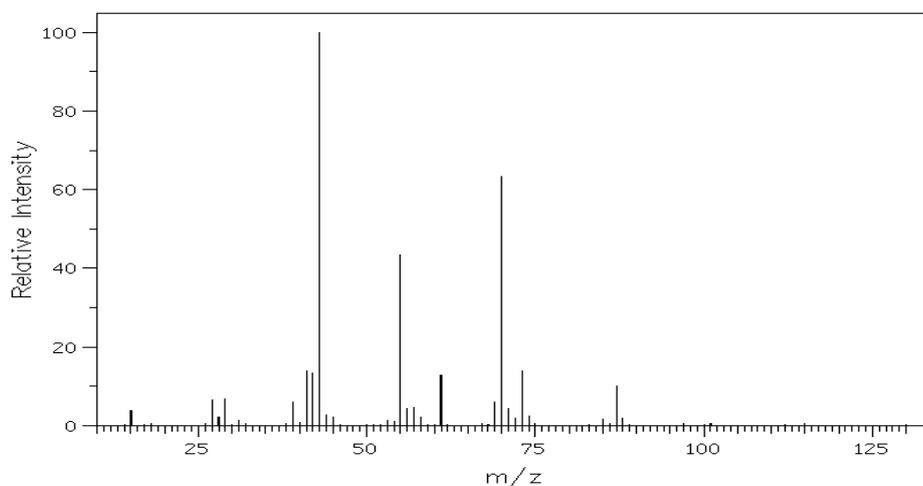
a) Número de insaturação =

b) Fórmula Estrutural



c) Bandas relevantes no IR

cm <sup>-1</sup>	2962	1742	1233		
Atribuição					



d) Íons relevantes no MS

m/z	Atribuição
130	
87	
73	
29	
27	

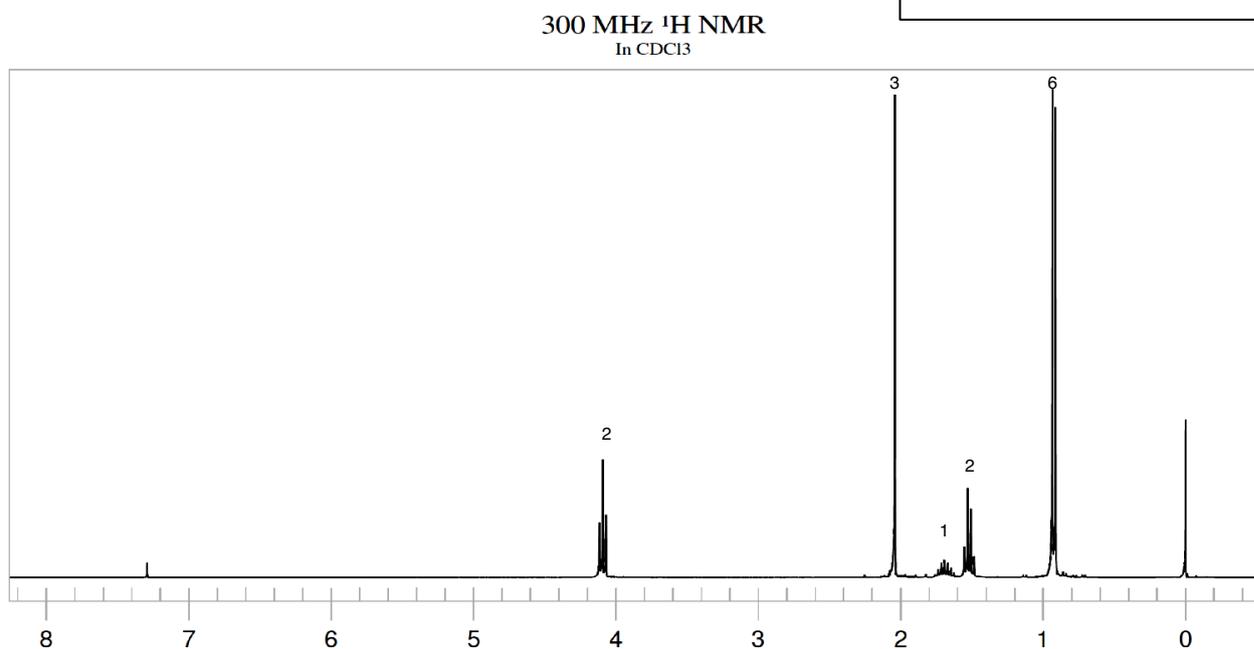
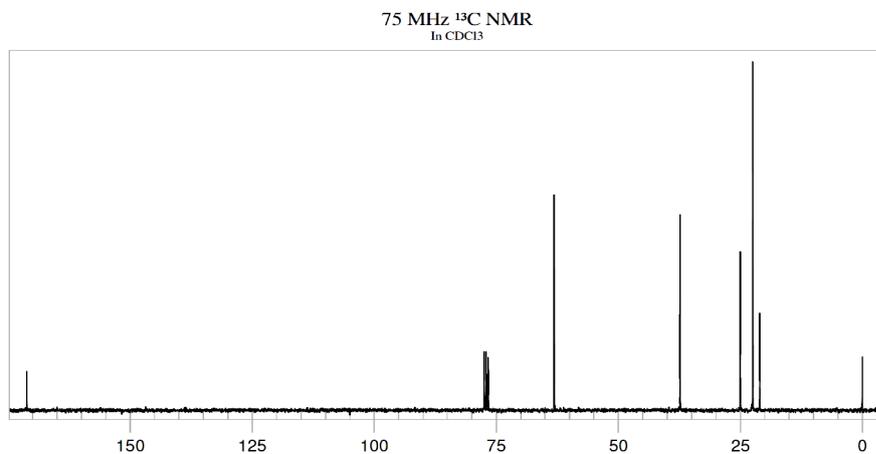
e) Escreva o mecanismo de formação do íon de *m/z* 27 a partir do íon de *m/z* 29.

QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

Questão 2) – C<sub>7</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub>

b) Fórmula Estrutural



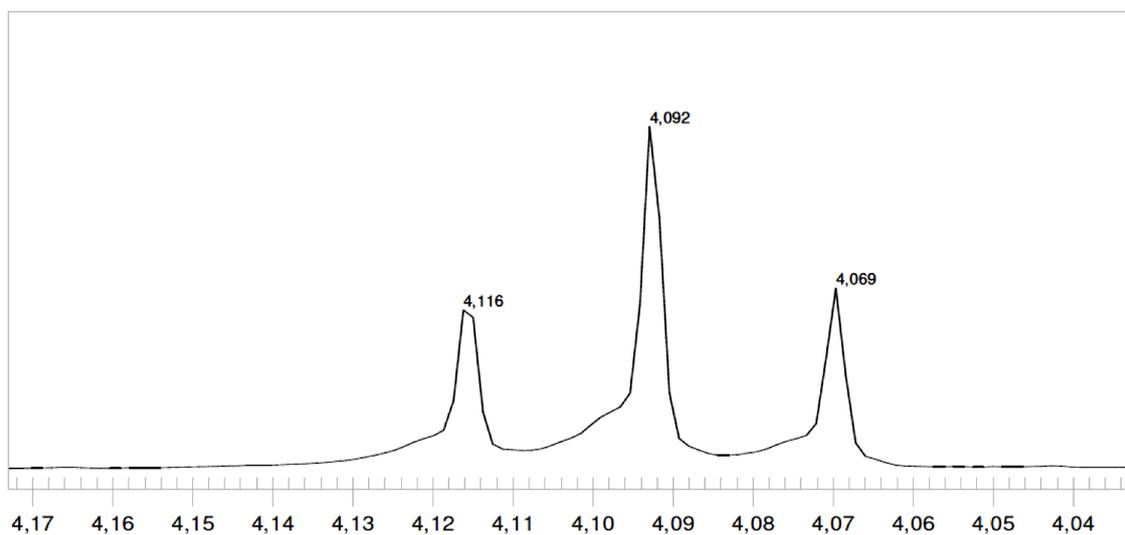
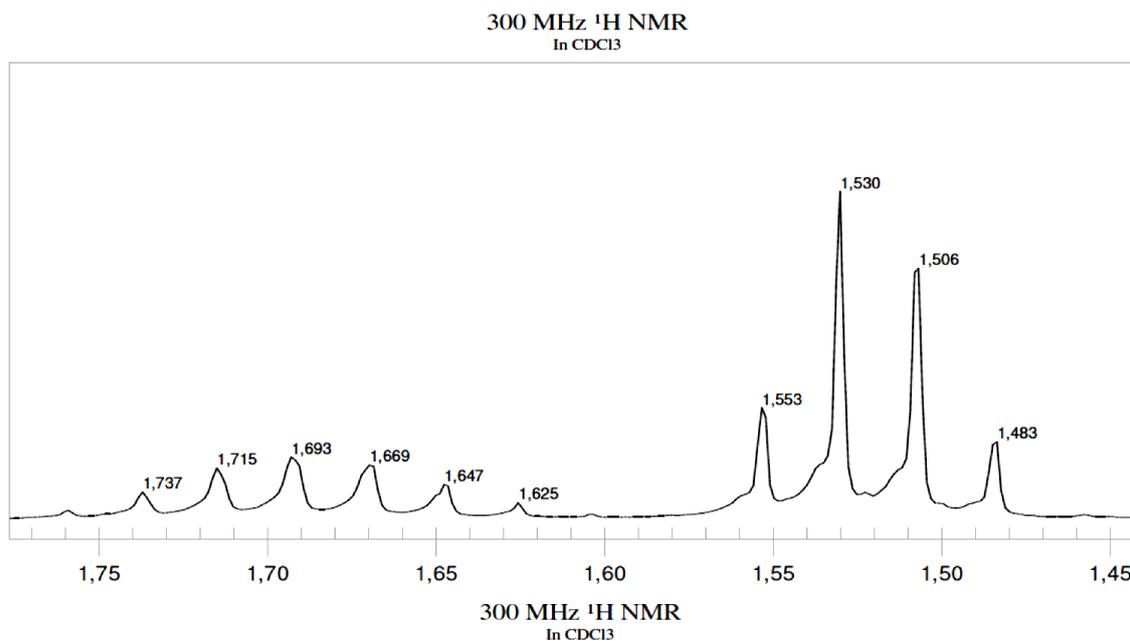
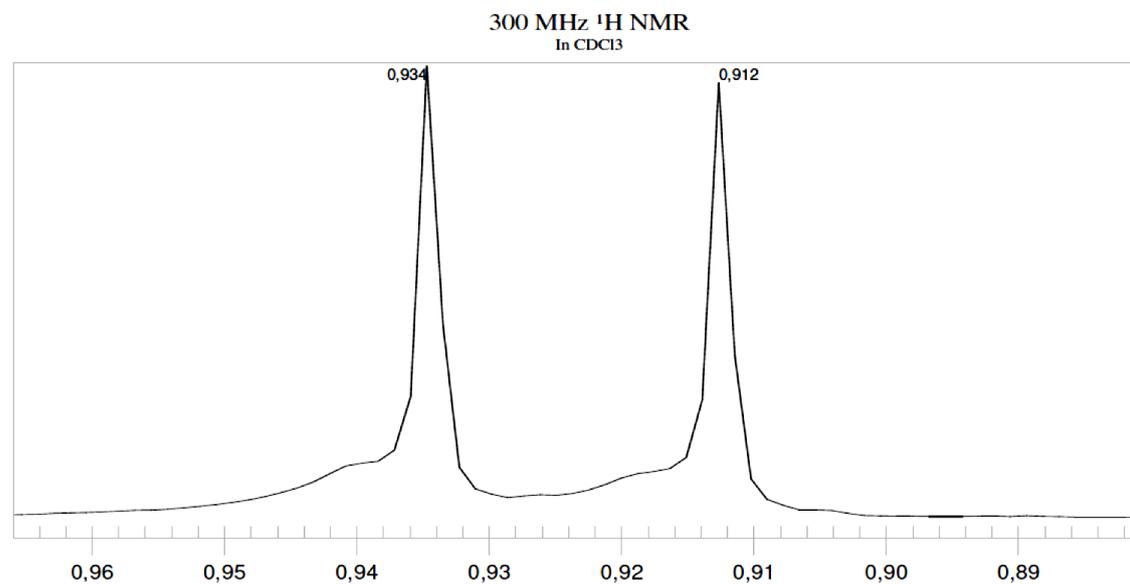
f) Atribuição dos sinais de <sup>1</sup>H RMN (deslocamento químico, multiplicidade, J<sub>3</sub>)



QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

Questão 2) –  $C_7H_{14}O_2$



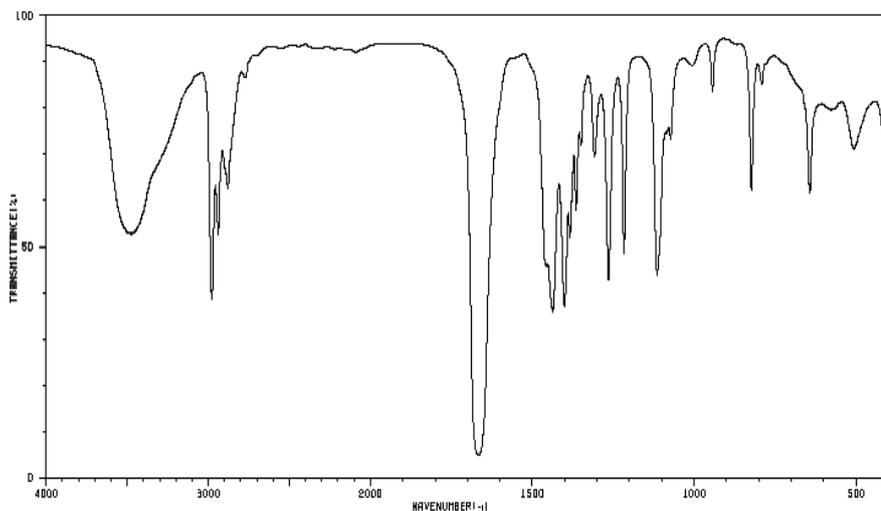
**QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados**

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

**Questão 3) – C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>NO**

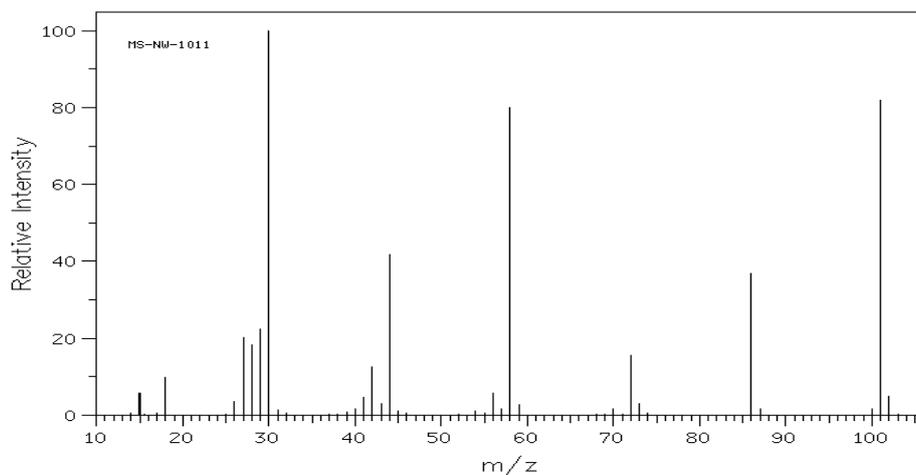
a) Número de insaturação =

b) Fórmula Estrutural



c) Bandas relevantes no IR

cm <sup>-1</sup>	3489	2978	1666		
Atribuição					



d) Íons relevantes no MS

m/z	Atribuição
101	
86	
72	
30	
18	

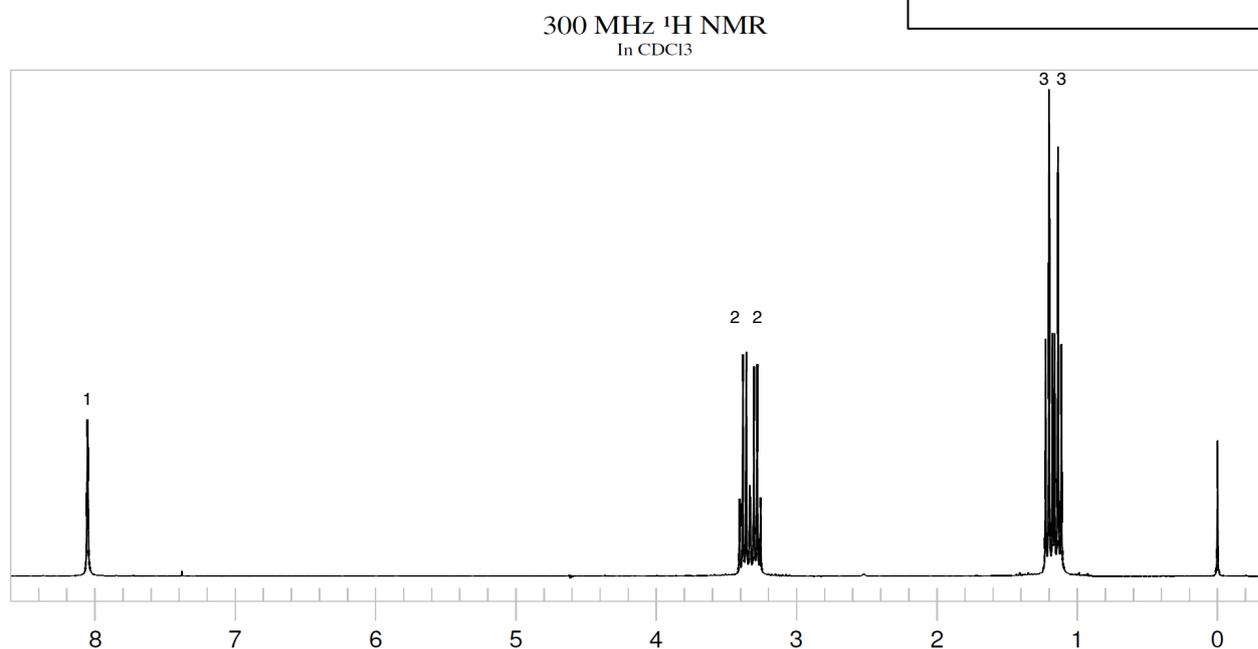
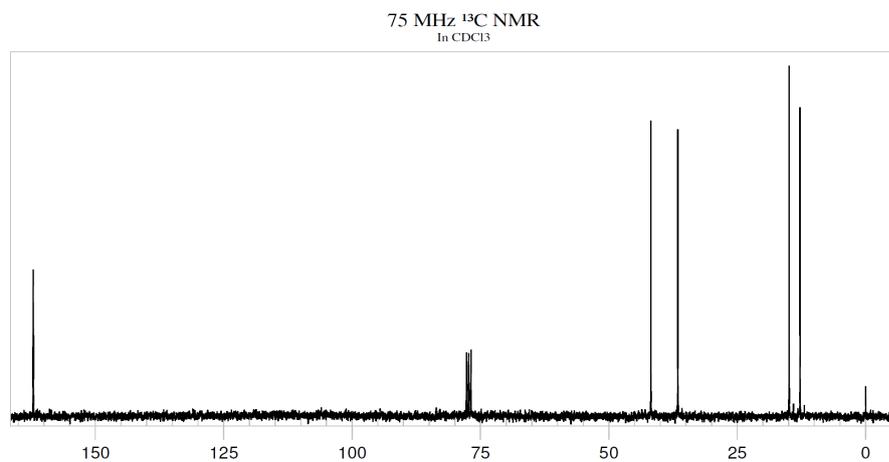
e) Escreva o mecanismo de formação do íon de m/z 58 a partir do íon de m/z 72.

QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

Questão 3) – C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>NO

b) Fórmula Estrutural



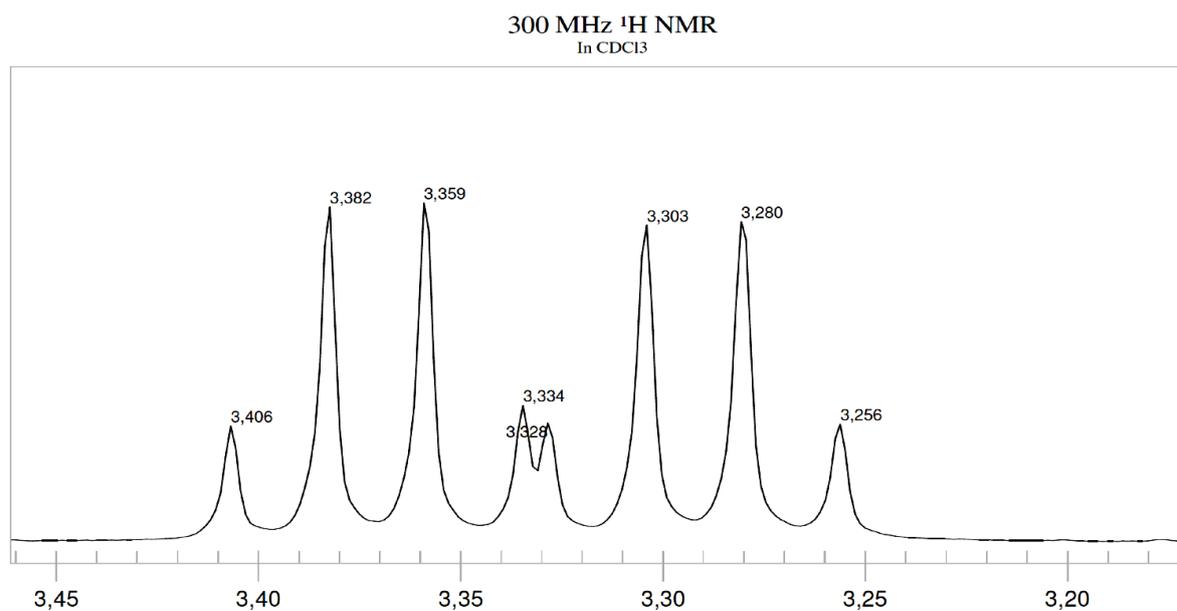
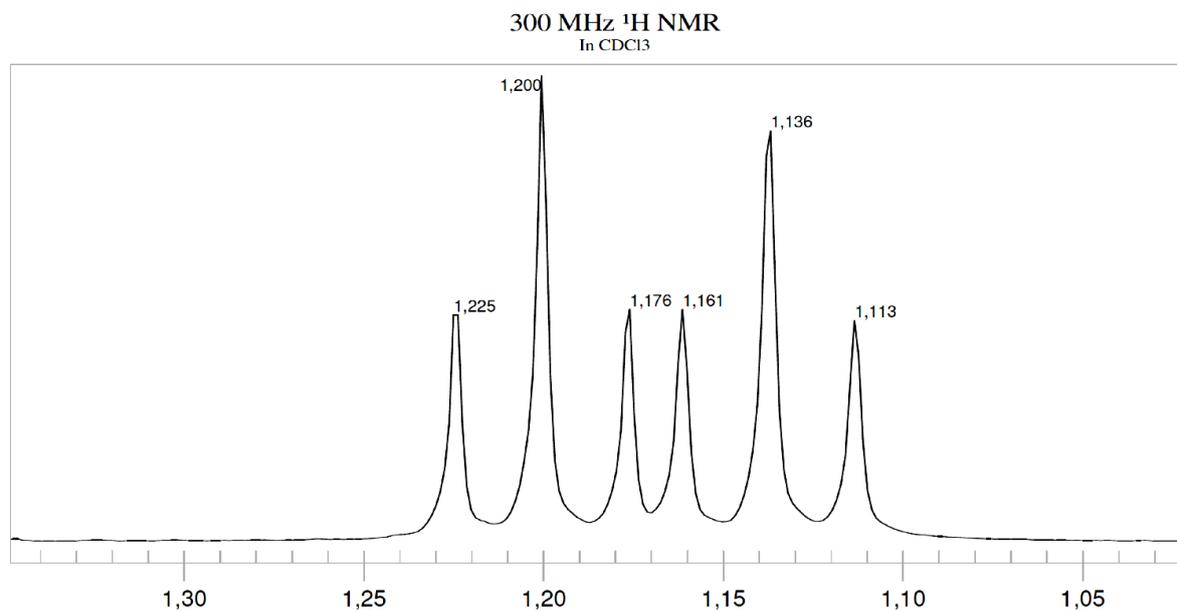
f) Atribuição dos sinais de <sup>1</sup>H RMN (deslocamento químico, multiplicidade, J<sub>3</sub>)



QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

Questão 3) – C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>NO



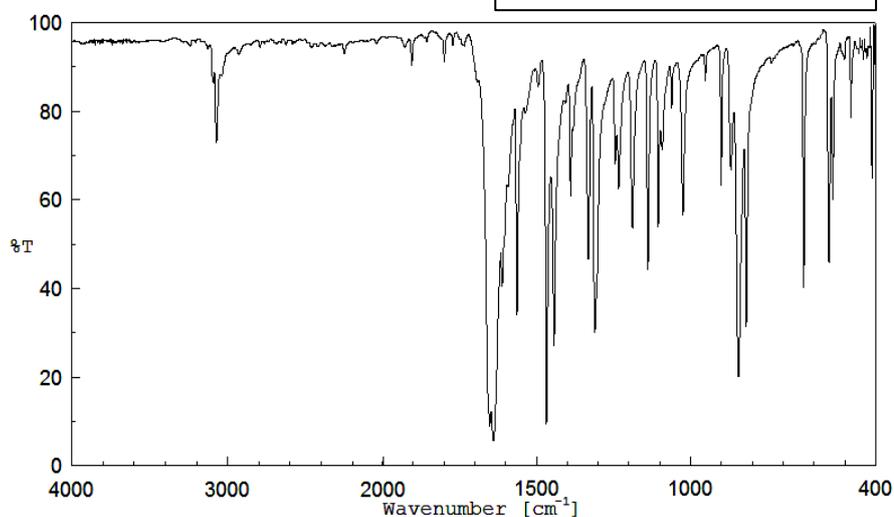
**QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados**

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

**Questão 4) – C<sub>9</sub>H<sub>5</sub>ClO<sub>2</sub>**

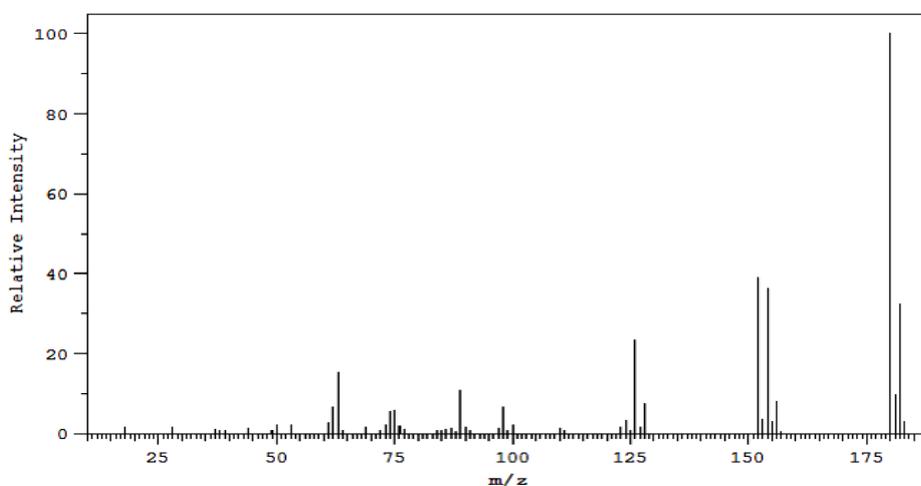
b) Fórmula Estrutural

a) Número de insaturação =



c) Bandas relevantes no IR

cm <sup>-1</sup>	3072	1611	1468	1311	
Atribuição					



d) Íons relevantes no MS

m/z	Atribuição
182	
180	
152	
75	
28	

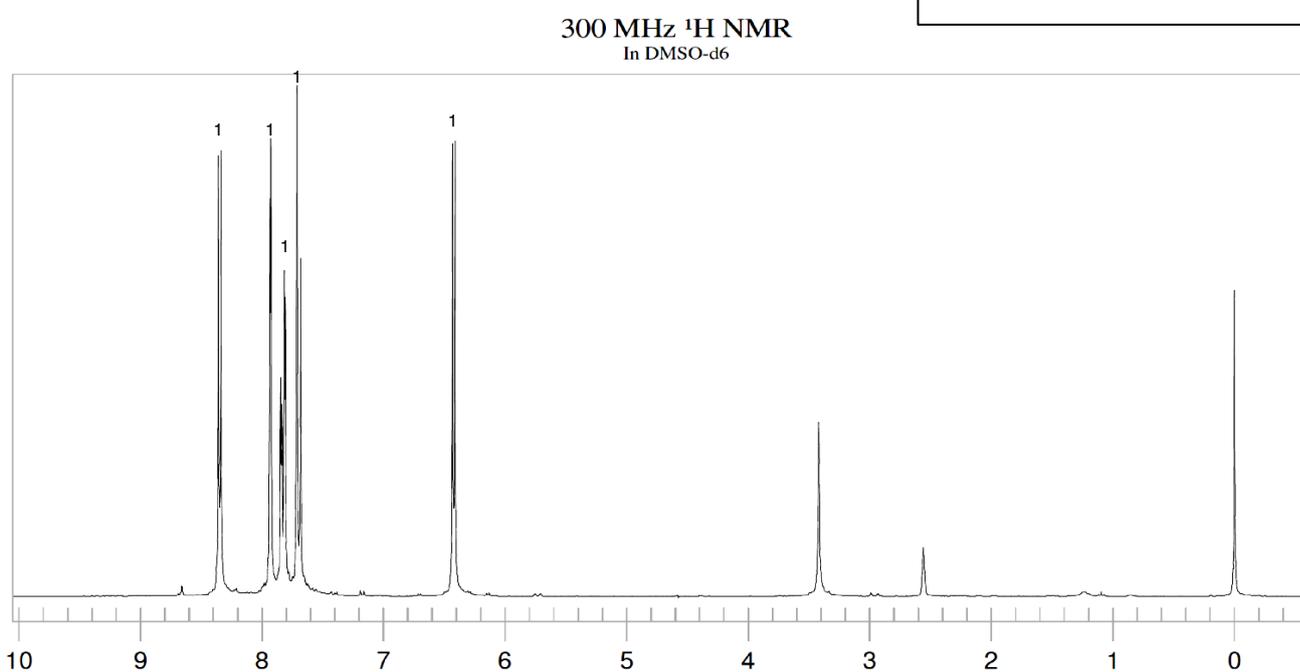
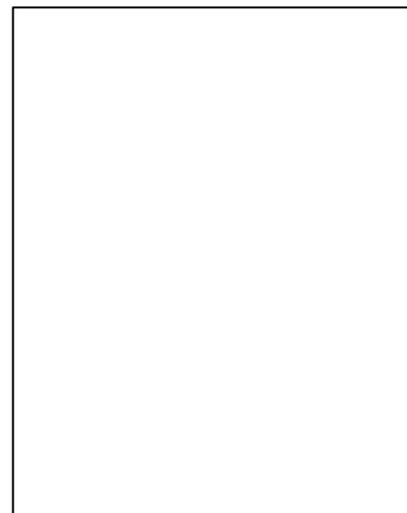
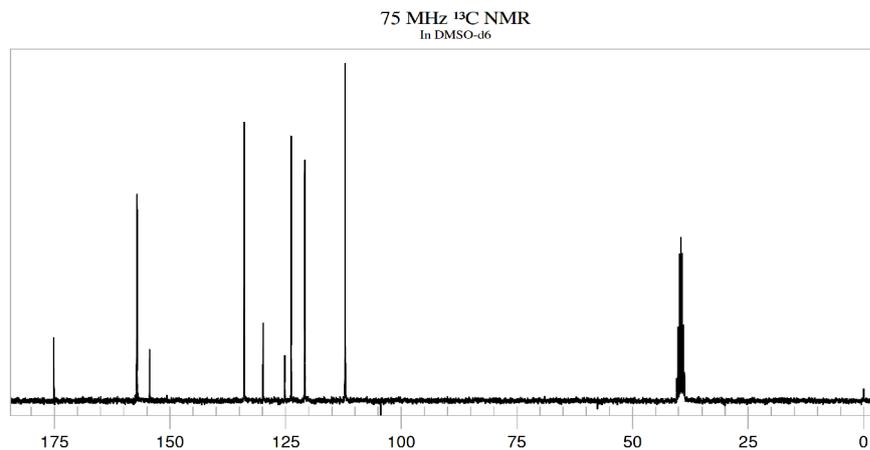
e) Escreva o mecanismo de formação do íon de *m/z* 152 a partir do íon de *m/z* 180.

QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

Questão 4) – C<sub>9</sub>H<sub>5</sub>ClO<sub>2</sub>

b) Fórmula Estrutural



f) Atribuição dos sinais de <sup>1</sup>H RMN (deslocamento químico, multiplicidade, J<sub>3</sub>)



QFL-1345 – Espectroscopia e Métodos Espectroscópicos – Exercícios Integrados

Nome: \_\_\_\_\_ #USP \_\_\_\_\_

Questão 4) – C<sub>9</sub>H<sub>5</sub>ClO<sub>2</sub>

300 MHz <sup>1</sup>H NMR  
In DMSO-d<sub>6</sub>

