EXERCÍCIOS

# EXERCÍCIOS

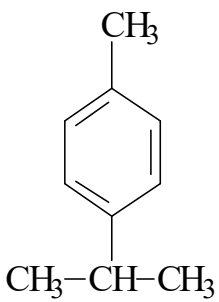
# AE / FT-IR

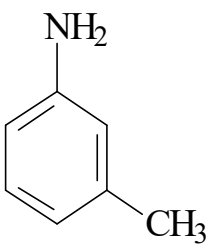
# (1ª PARTE)

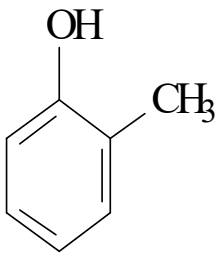
Prof. Dr. Antonio Aarão Serra

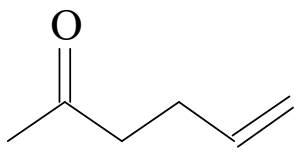
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 1:** Relacione cada uma das 4 estrutura química apresentada com um dos espectros de infravermelho a seguir e explique as principais bandas.



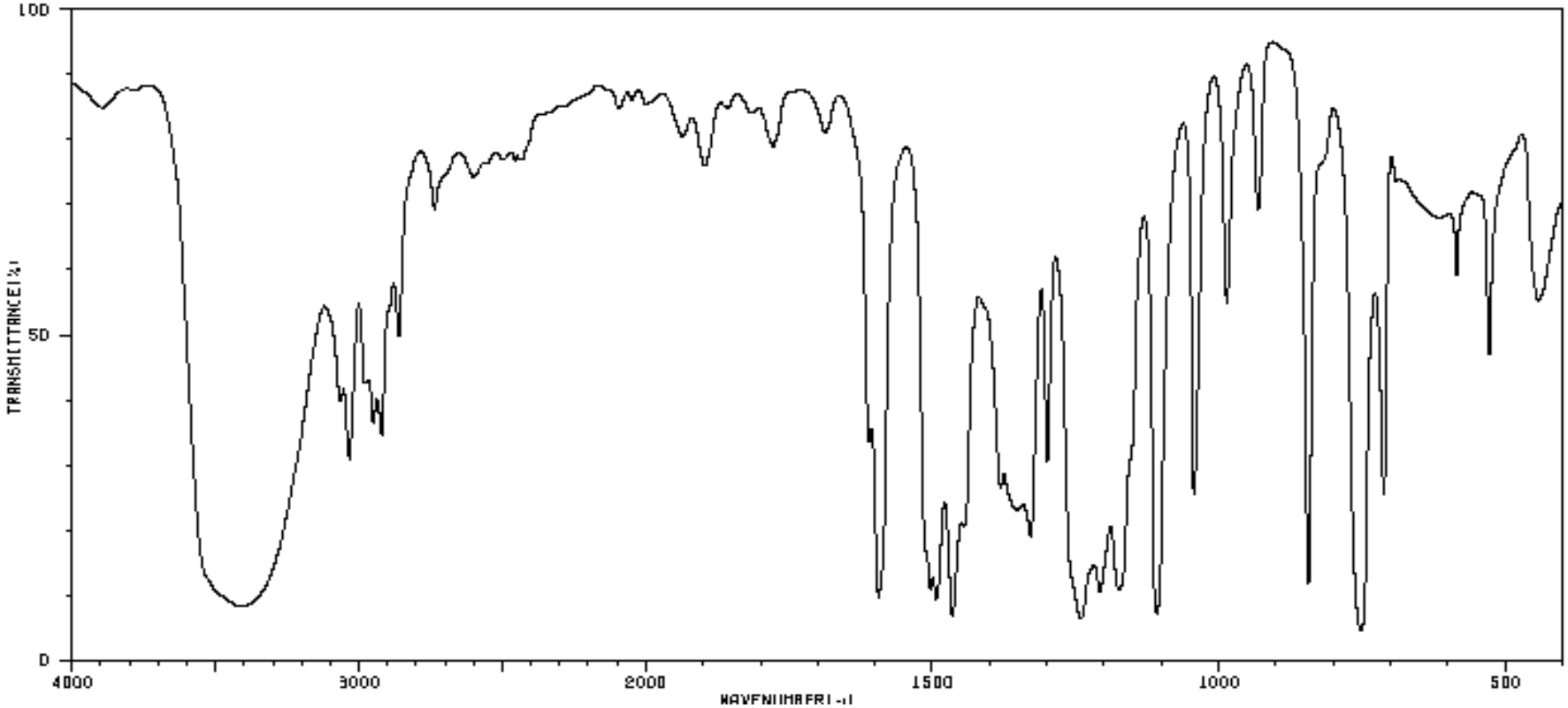




**Obs.:** Confirmar as bandas de estiramento com as bandas complementares de deformação

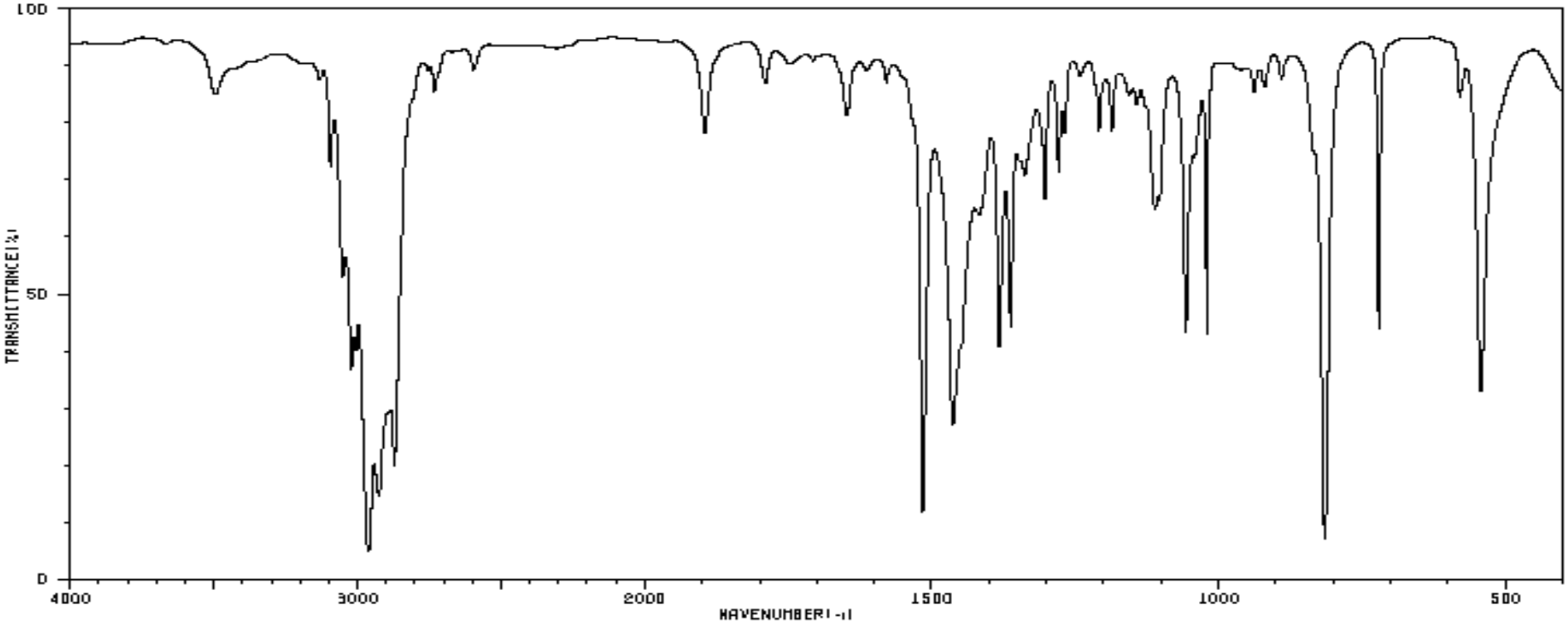
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 1: Espectro 1A**



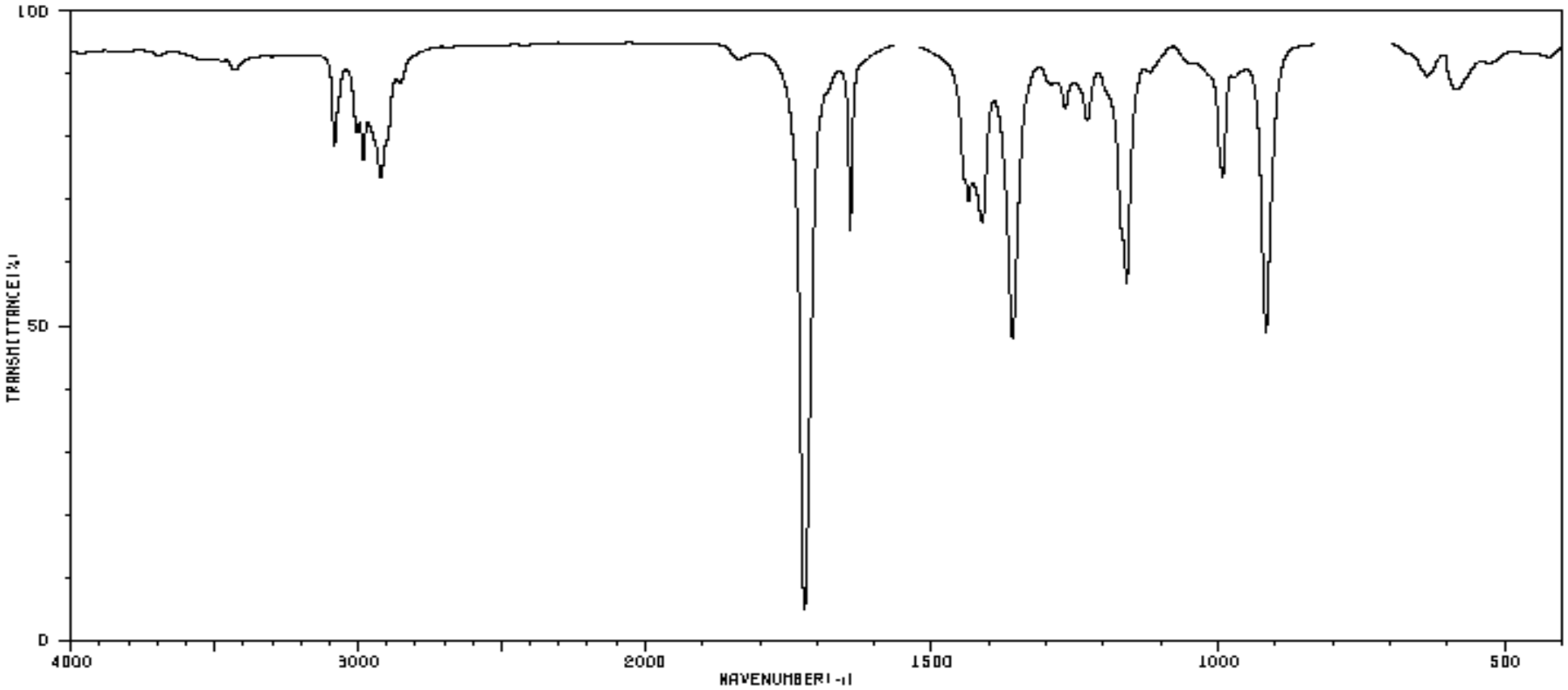
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 1: Espectro 1B**



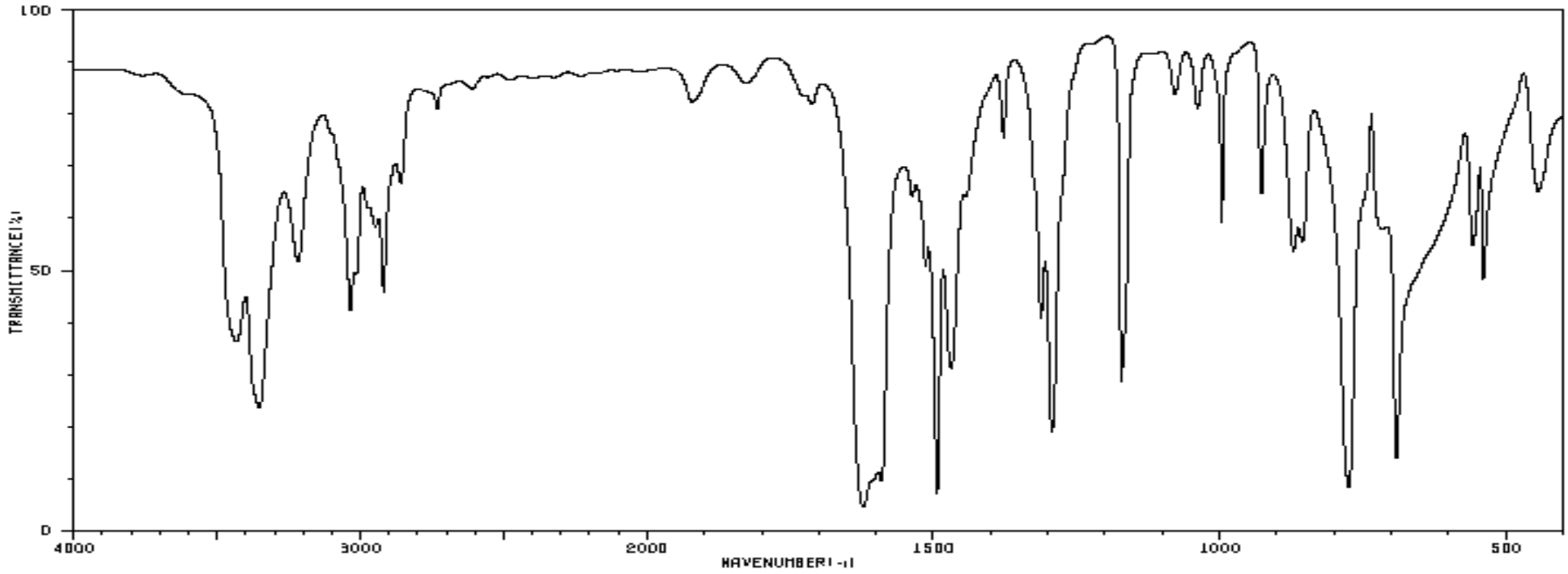
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 1: Espectro 1C**



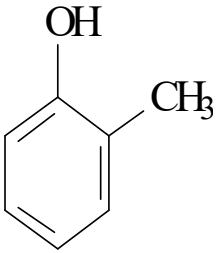
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 1: Espectro 1D**



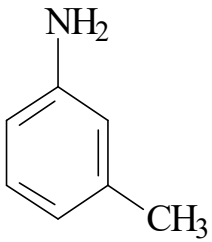
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta Exercício 1:**




**Espectro 1A**: É um álcool. Banda de estiramento (O-H) larga em **3500cm$^{-1}$**. Confirmadas pelas bandas de deformação (O-H). Banda de absorção em **1100cm-1** indica ligação C-O .

Bandas de absorção com forma características de anel aromático orto subastituido entre **2000cm$^{-1}$ a 1667cm$^{-1}$.**

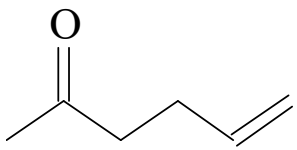



**Espectro 1D**: É a amina livre. Duas bandas de estiramento (N-H) em **3350 e3450cm$^{-1}$**. Confirmadas pelas bandas de deformação (N-H). Banda de absorção em 1200cm$^{-1}$ indica ligação C-N.

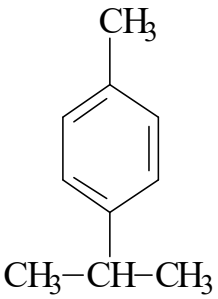
Bandas de absorção com forma características de anel aromático meta subastituidos entre **2000cm$^{-1}$ a 1667cm$^{-1}$.**

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta Exercício 1 (Continua)**



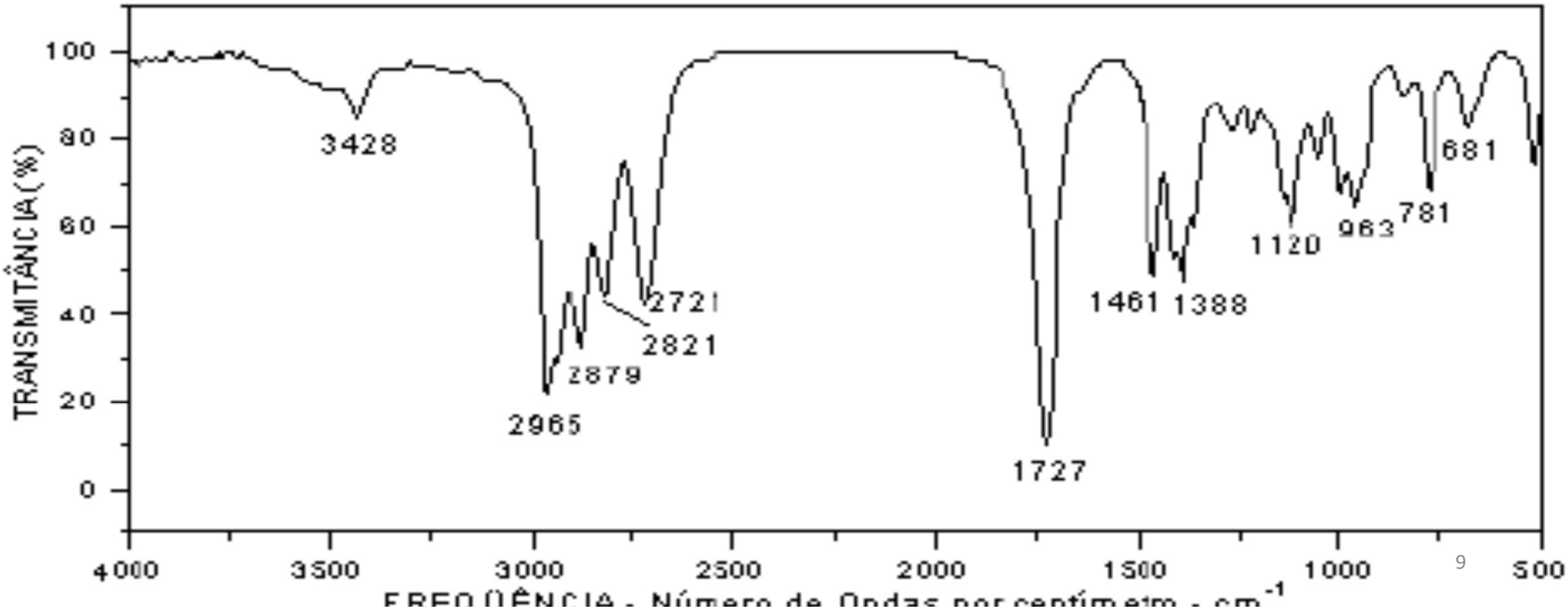

**Espectro 1C:** É uma acetona, com uma banda característica na região de carbonila não conjugada em **1725cm$^{-1}$**.
Bandas de C-H acima de **3000cm$^{-1}$** indicando dupla ligação e bandas de C-H abaixo de **3000cm$^{-1}$** indicando parte alifática da molécula.




**Espectro 1B:** Com bandas C-H abaixo e acima **3000cm$^{-1}$** é aromático com partes alifáticas.
Bandas de absorção com forma características de anel aromático para subastituidos entre **2000cm$^{-1}$ a 1667cm$^{-1}$.**
Bandas de absorção característica de grupo isopropil [$(CH_3)_2CH$-] em **1400cm-1 e 1390cm-1** (forma de um dupleto).

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 2:** Um composto de fórmula molecular $C_4H_8O$ apresentou o seguinte **espectro** quando analisado por espectrometria na região do infravermelho. Quais grupos funcionais você consegue identificar? Qual a estrutura consistente com estes dados? Explique?

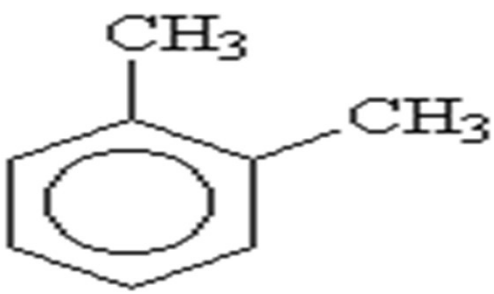


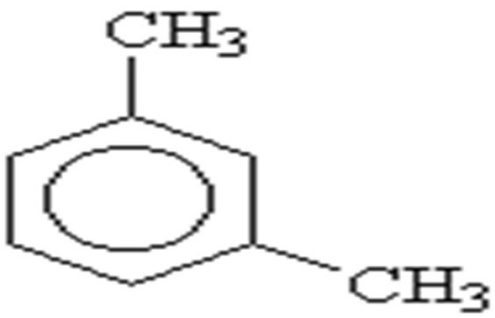
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

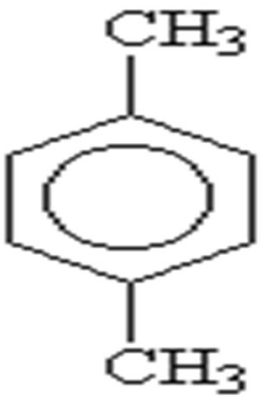
- **Resposta Exercício 2:**
- **Fórmula:** $C_4H_8O$
- **IDH = C – (H/2) + (N/2) –(X/2) + 1**
- **IDH = 1**
- **Uma (1) insaturação provavelmente uma carbonila de aldeído, banda de absorção característica em 1727cm$^{-1}$.**
- **2721cm$^{-1}$, 2821cm$^{-1}$, indicam deformação axial C-H de aldeído.**
- **Bandas abaixo de 3000cm$^{-1}$ indicam C-H alifáticos.**
- **Provavelmente o composto do espectro é do butanal.**

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 3:** Abaixo encontram-se espectros do xileno. Explique as principais bandas de absorção no infravermelho e justifique se é derivado *o*, *m*, ou *p*. xileno (Não esqueça de colocar a estrutura correta).

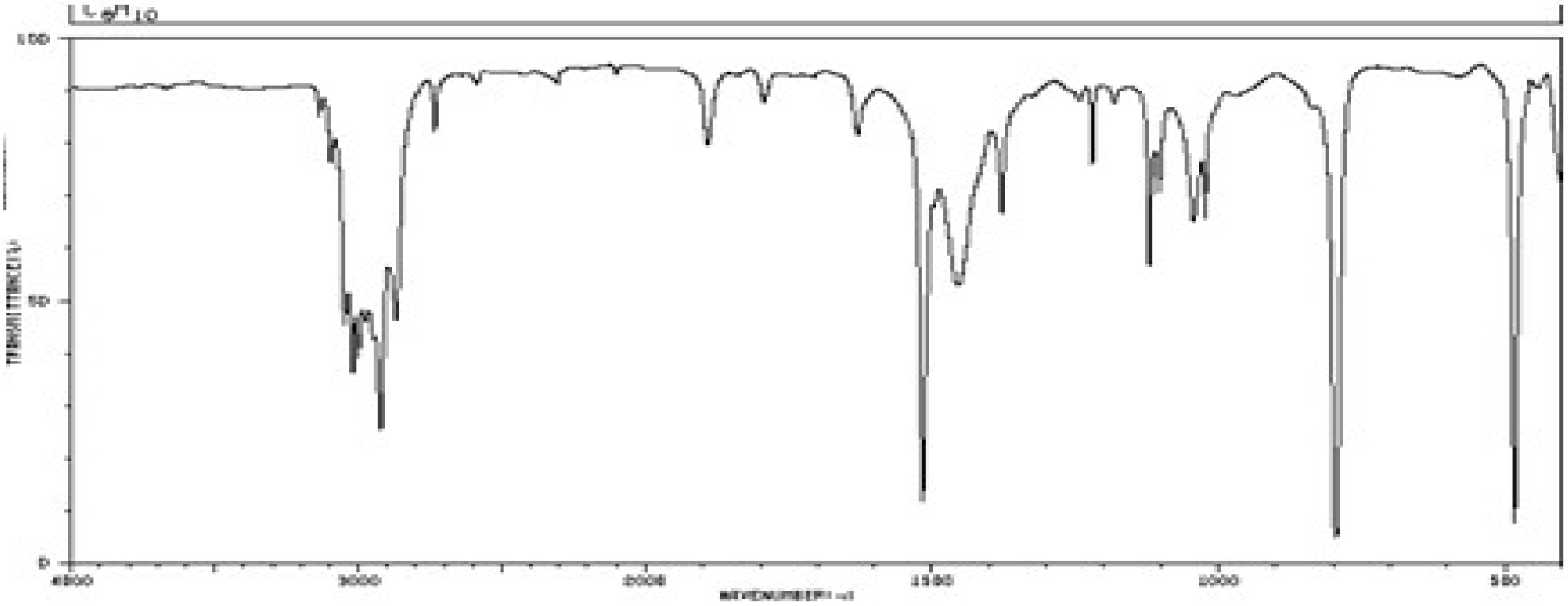


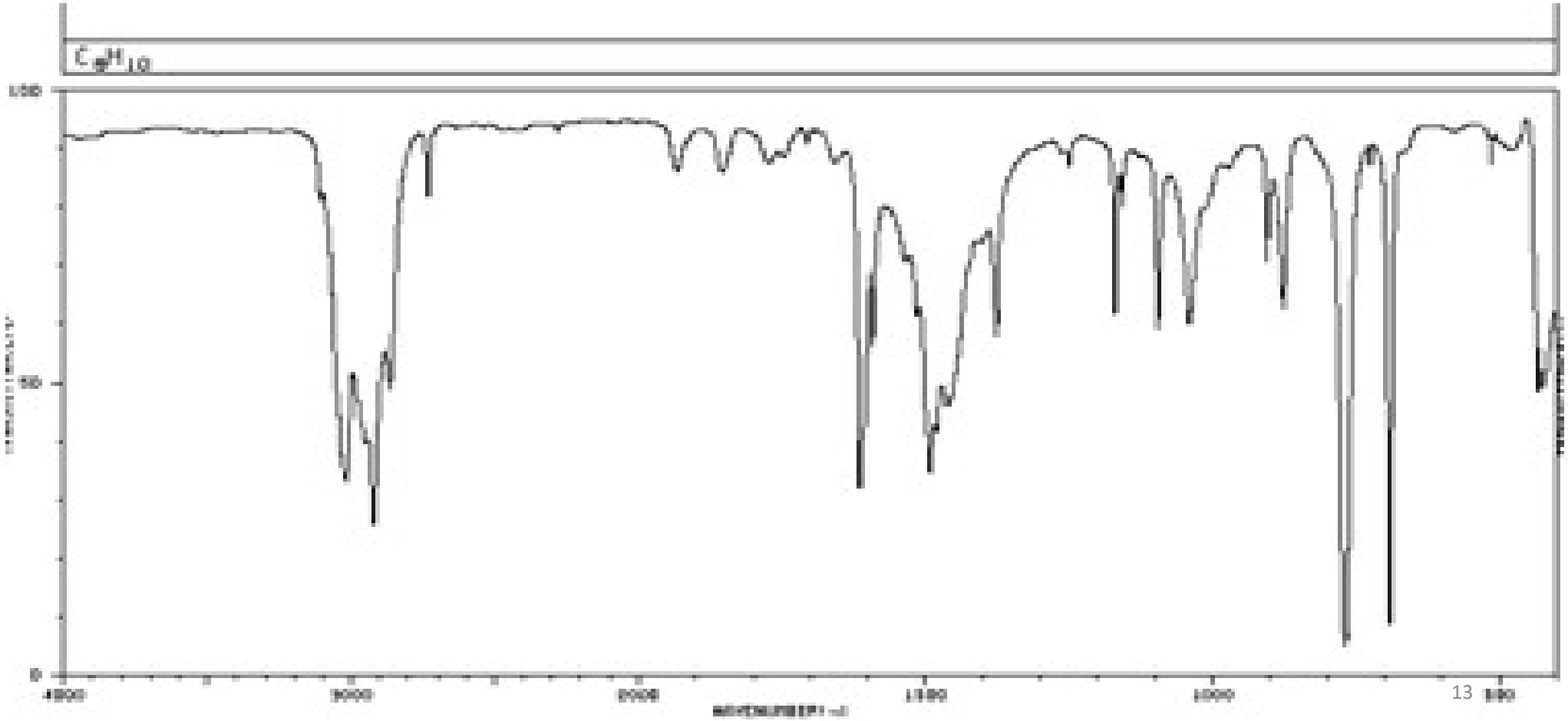
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Espectro 3A:**



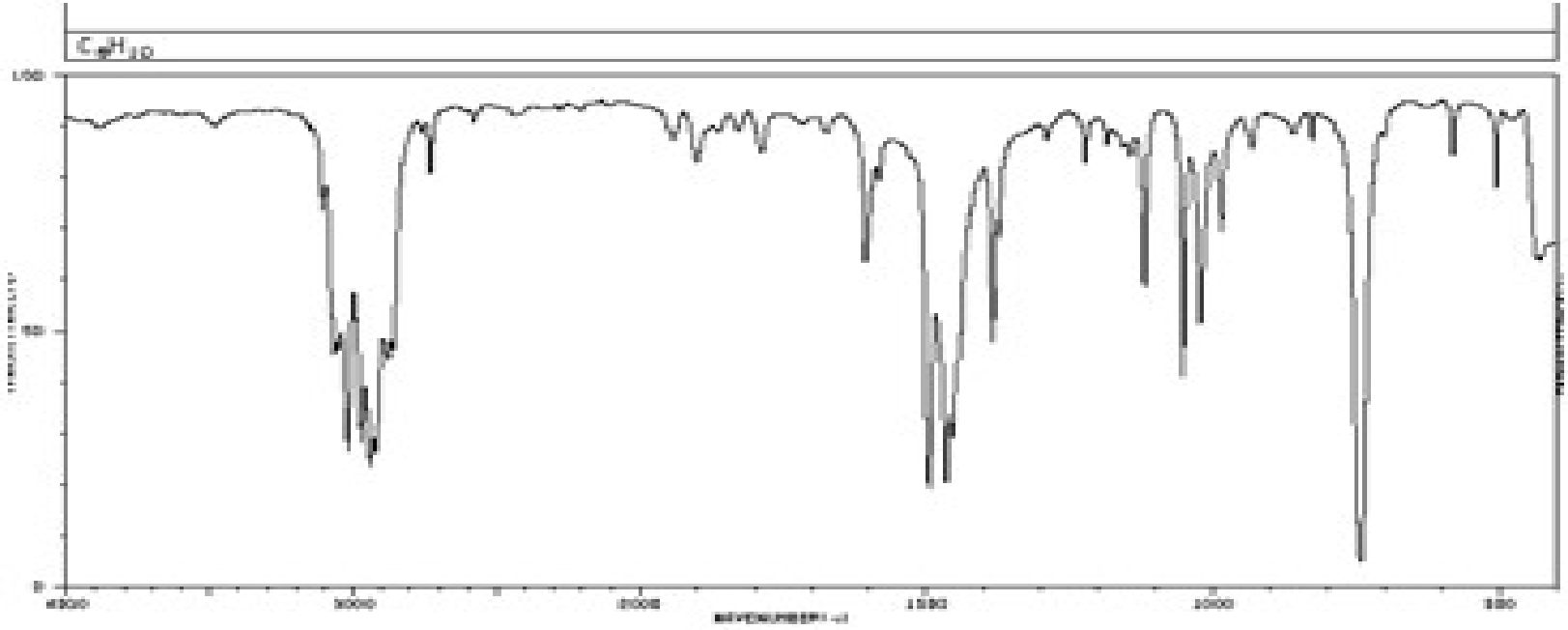
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Espectro 3B:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Espectro 3C:**

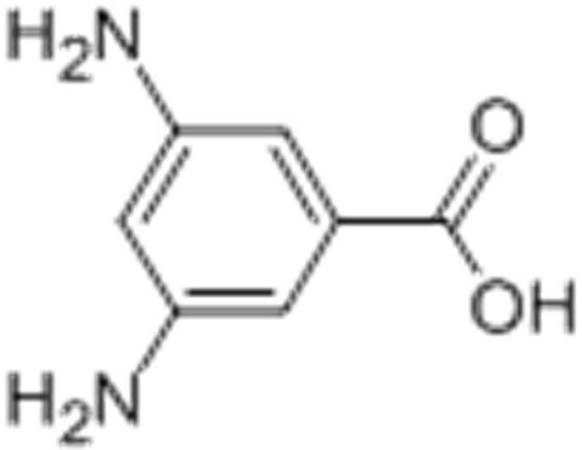


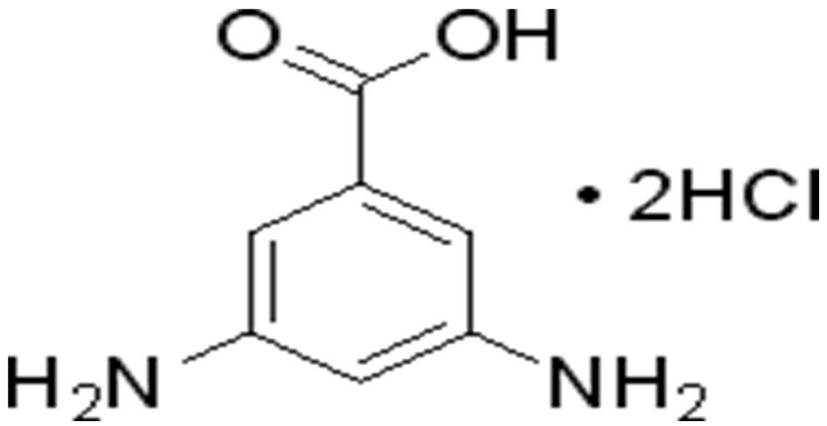
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta Exercício 3:**
- Olhar a forma dos picos na região de 1667cm$^{-1}$ a 2000cm$^{-1}$ e observa se é orto, meta ou para.
- Espectro 3A = Xileno **para** substituído (banda em 800cm$^{-1}$)
- Espectro 3B = Xileno **meta** substituído (banda em 1160cm$^{-1}$, 1080cm$^{-1}$ e 1000cm$^{-1}$)
- Espectro 3C = Xileno **orto** substituído (banda 780cm$^{-1}$)
- **-1**

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

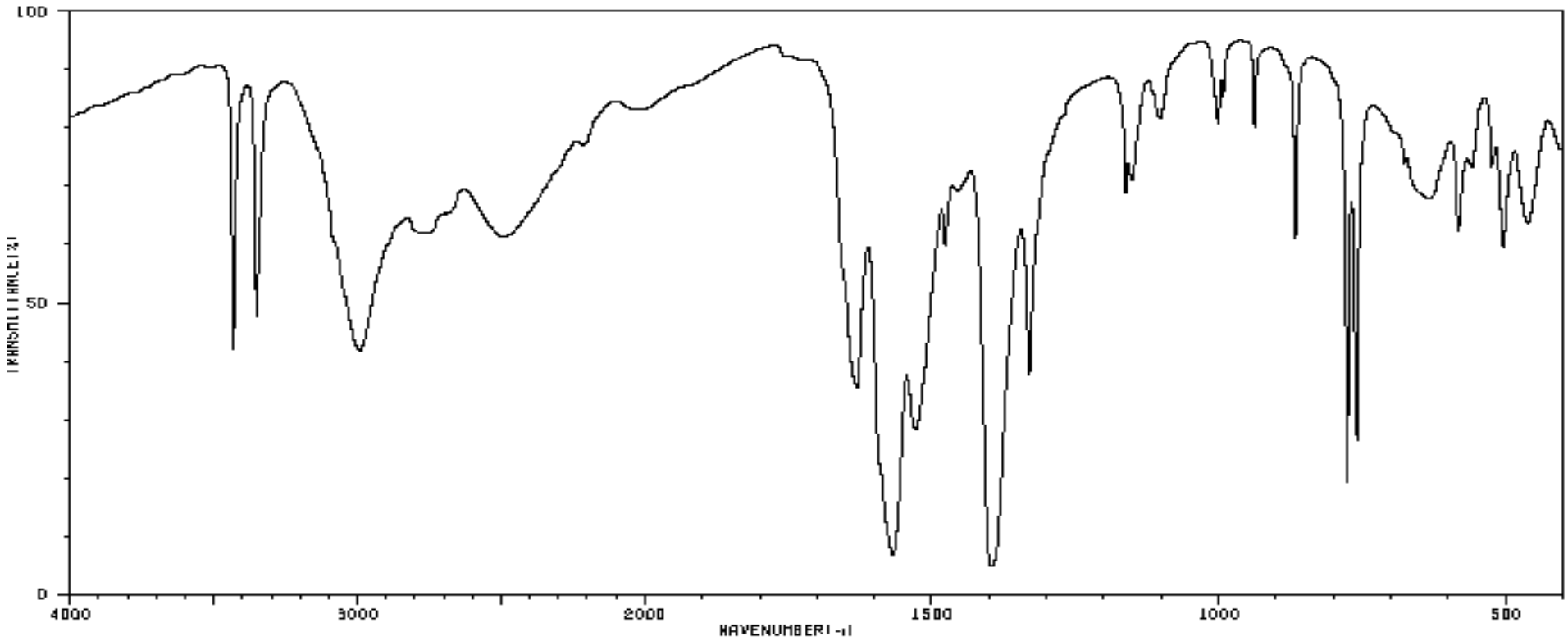
- **Exercício 4:** Qual dos espectros A ou B) de infravermelho a seguir mostra banda de absorção na forma de base livre e qual é um dicloridrato? Explique?



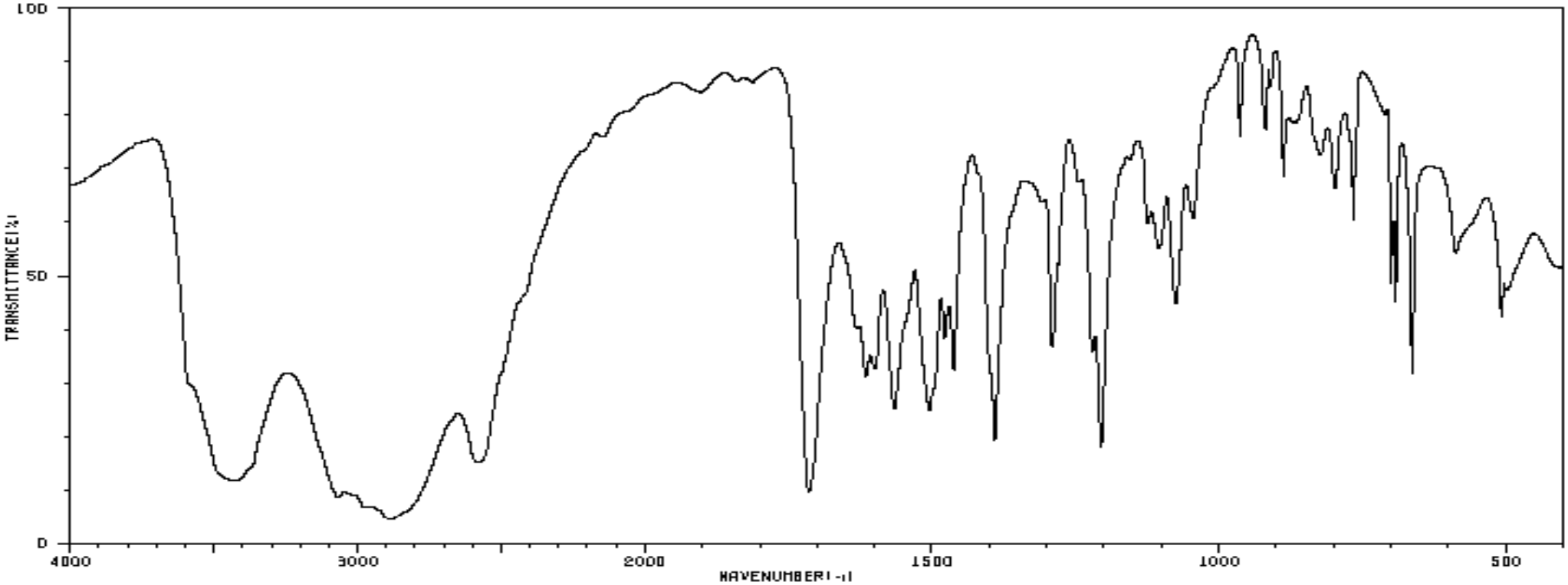
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Espectro 4A:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Espectro 4B:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

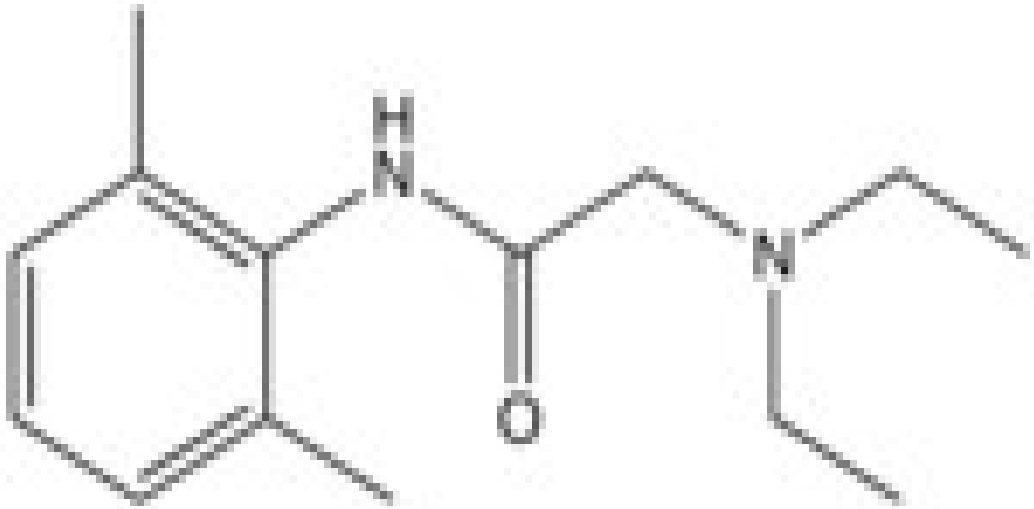
- **Resposta Exercício 4:**

- **O espectro-4A é da amina livre porque existe dois picos de estiramento dos dois hidrogênios do $NH_2$.(3450cm$^{-1}$ e 3320cm$^{-1}$) .**

- **O espectro-4B é do cloridrato da amina, devido os movimentos de vibrações estarem prejudicados pelo cloridrato, a "amina" apresenta uma banda larga nesta região (3600cm$^{-1}$ a 3300cm$^{-1}$).**

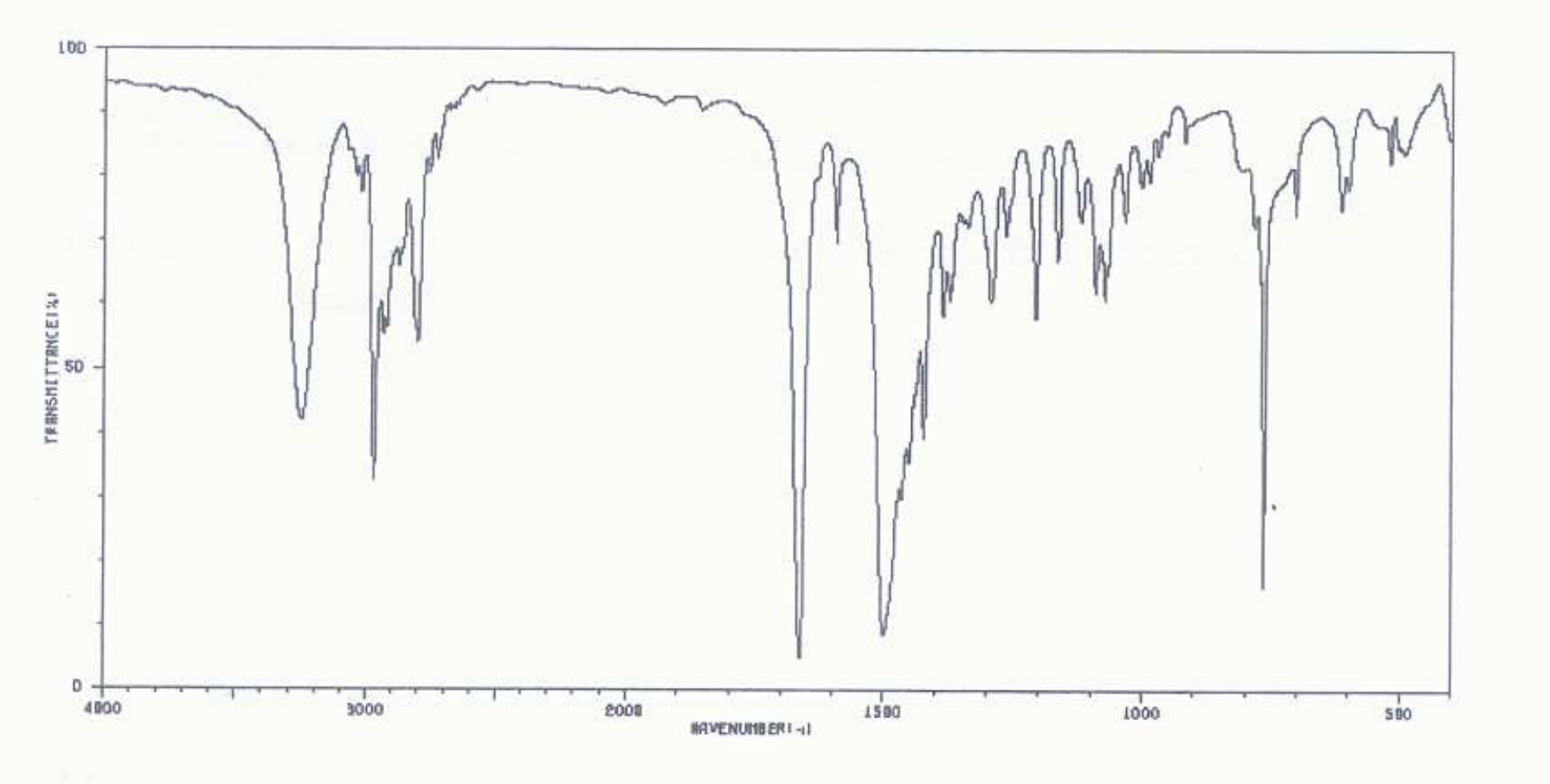
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 5:** O **espectro 5X** a seguir refere-se à lidocaína base livre ou ao cloridrato de lidocaína? Justifique.



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Espectro 5X**

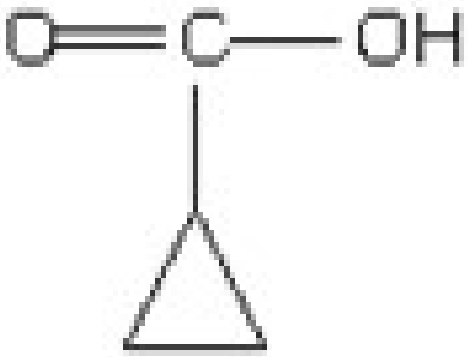


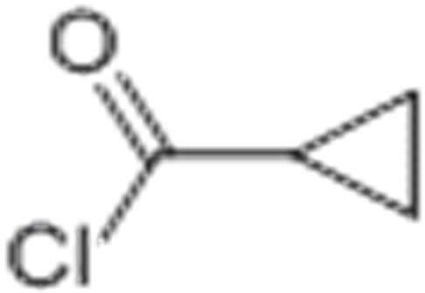
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

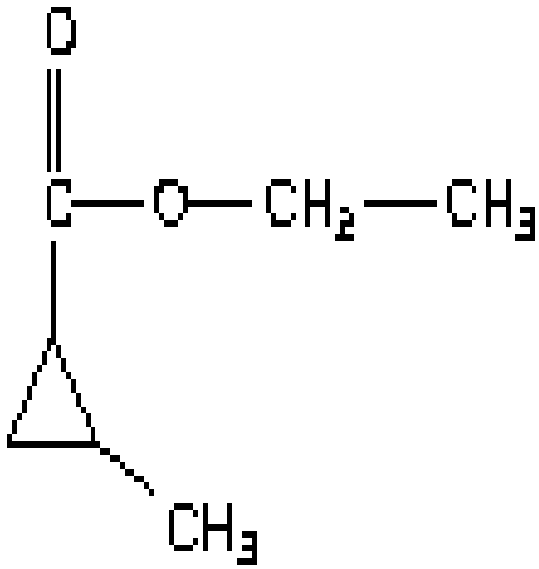
- **Resposta Exercício 5:**
- O **espectro 5X** é da lidocaína base livre, porque o sinal estiramento de NH (3260cm$^{-1}$) esta bastante agudo, o que caracteriza a presença de NH livre.

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 6:** Diferencie o espectro do ácido, do éster e do cloreto de ácido a seguir.

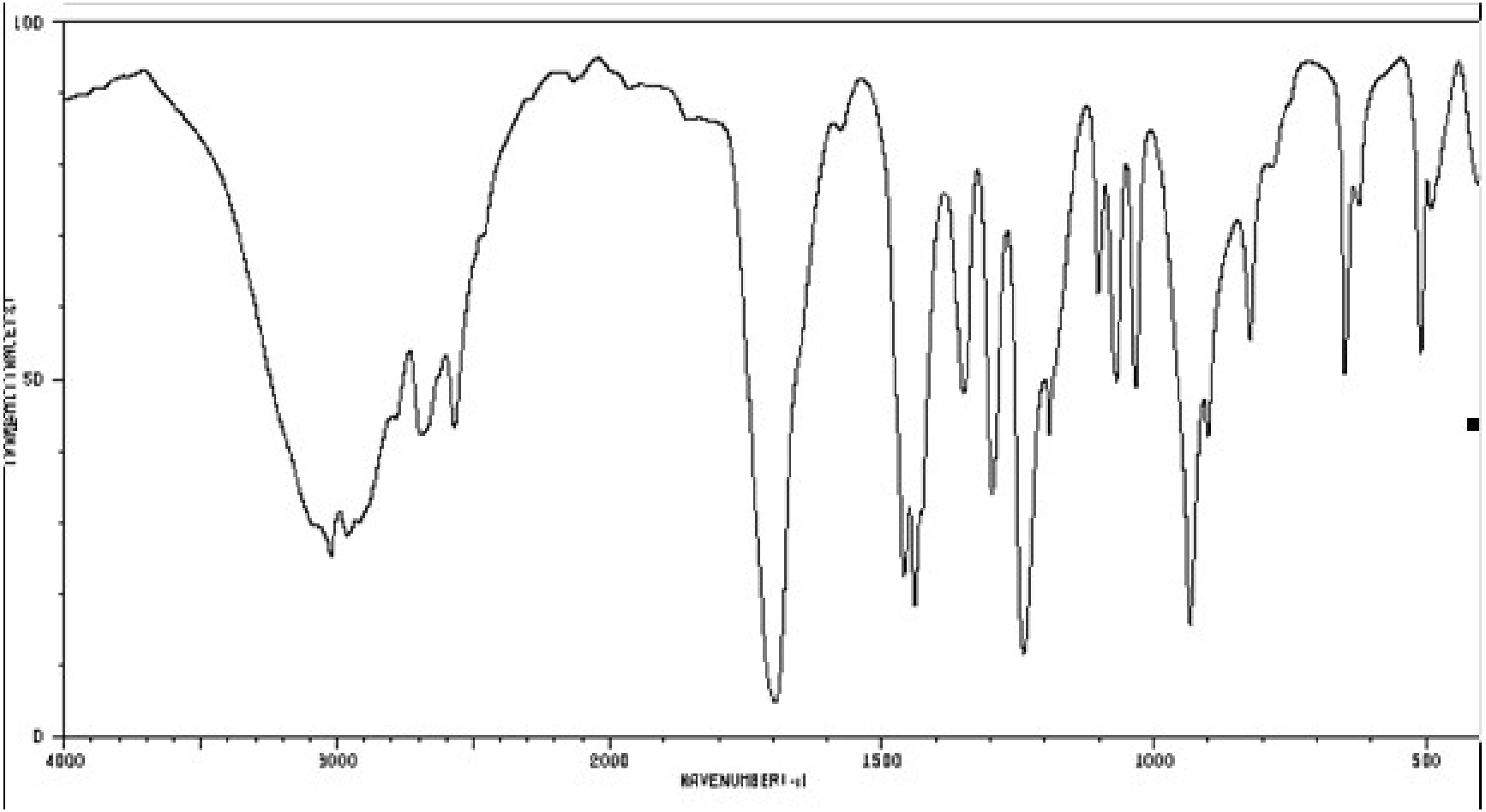


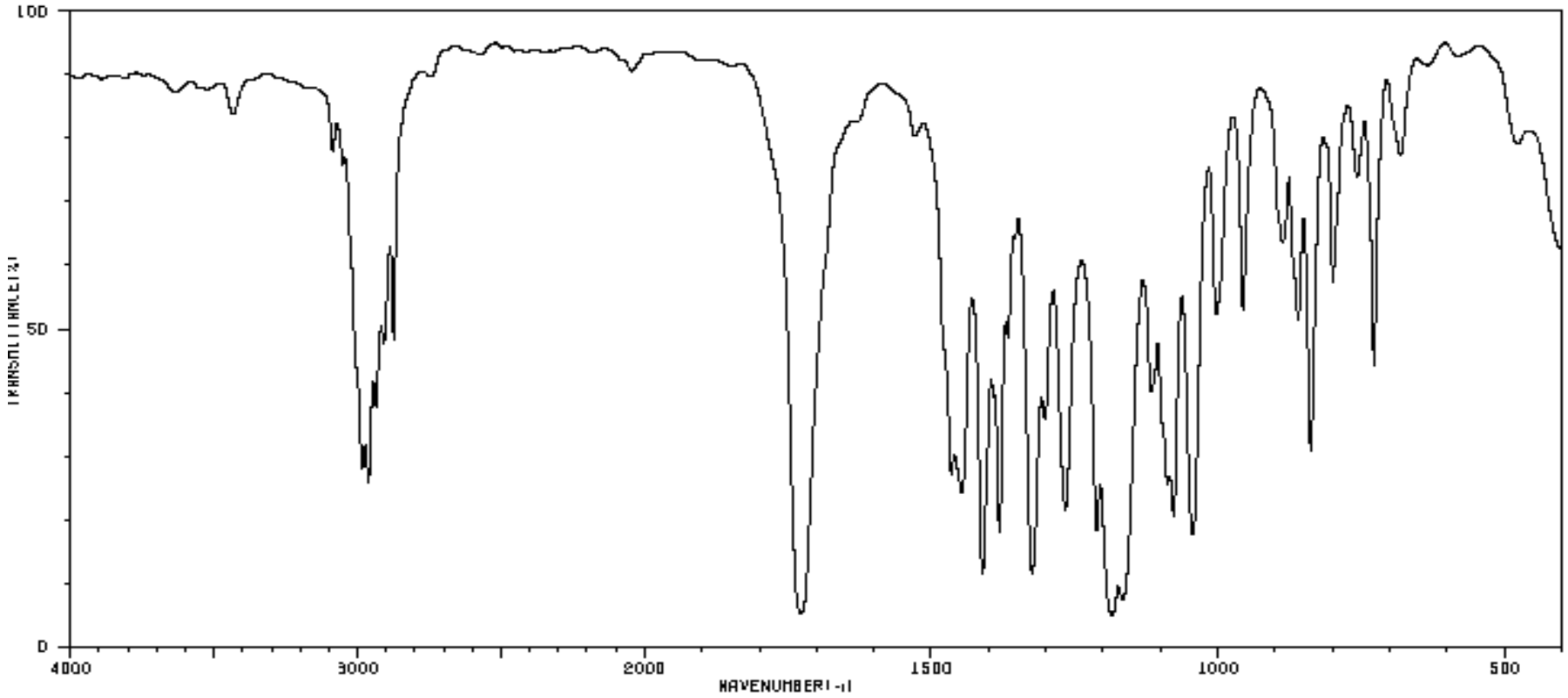
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Espectro 6A:**



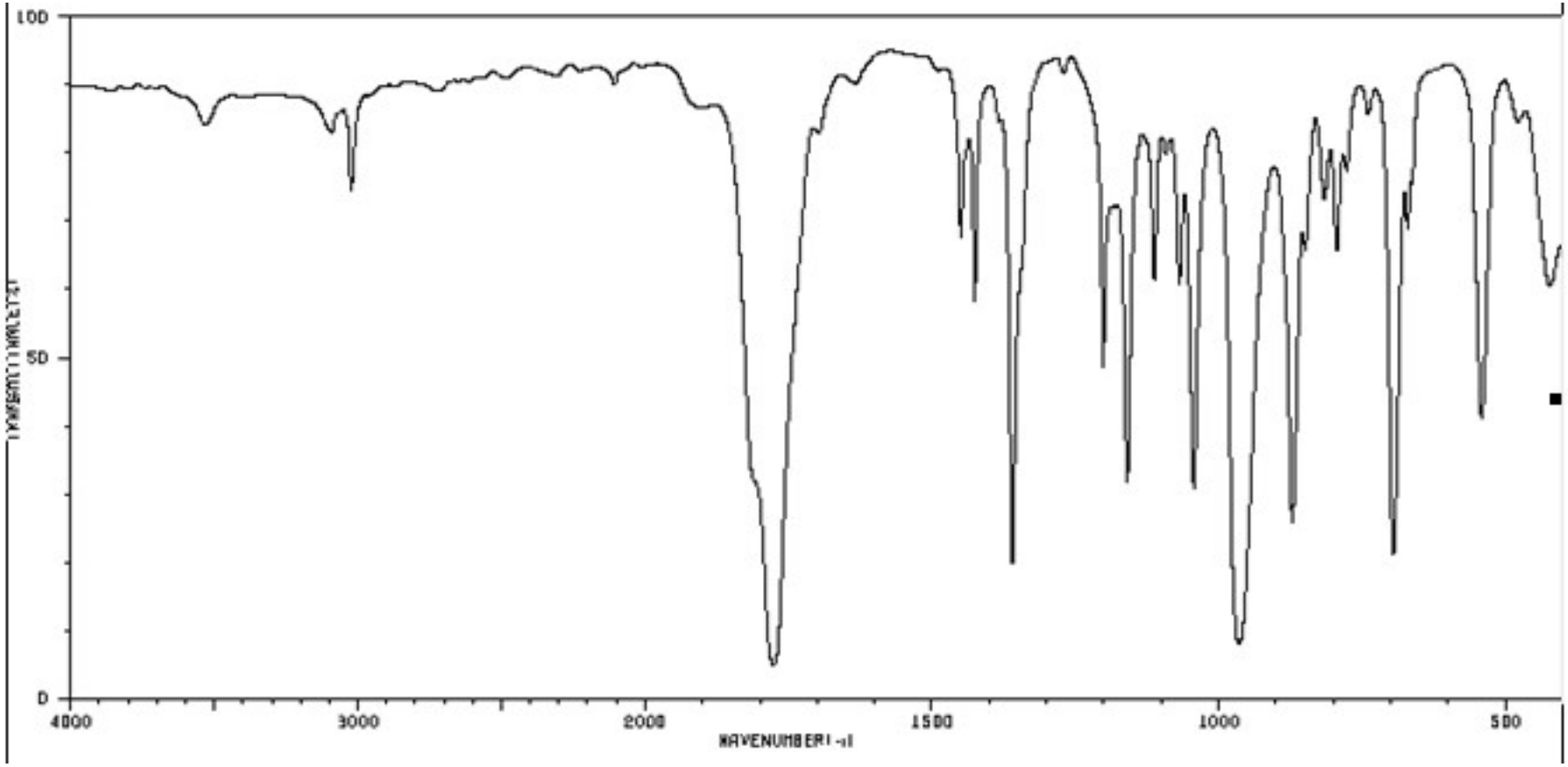
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Espectro 6B:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Espectro 6C:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta Exercício 6:**
- **Espectro 6A: Ácido carboxílico (Em 3300cm$^{-1}$ a 2600cm$^{-1}$ uma banda bastante larga característica de ácido)**
- **Espectro 6B: Éster (em 1720cm$^{-1}$ uma forte absorção característica de éster)**
- **Espectro 6C: Cloreto ácido (Em 1780cm$^{-1}$ forte absorção característica de cloreto ácido e não possui banda de absorção característica de grupo -OH)**

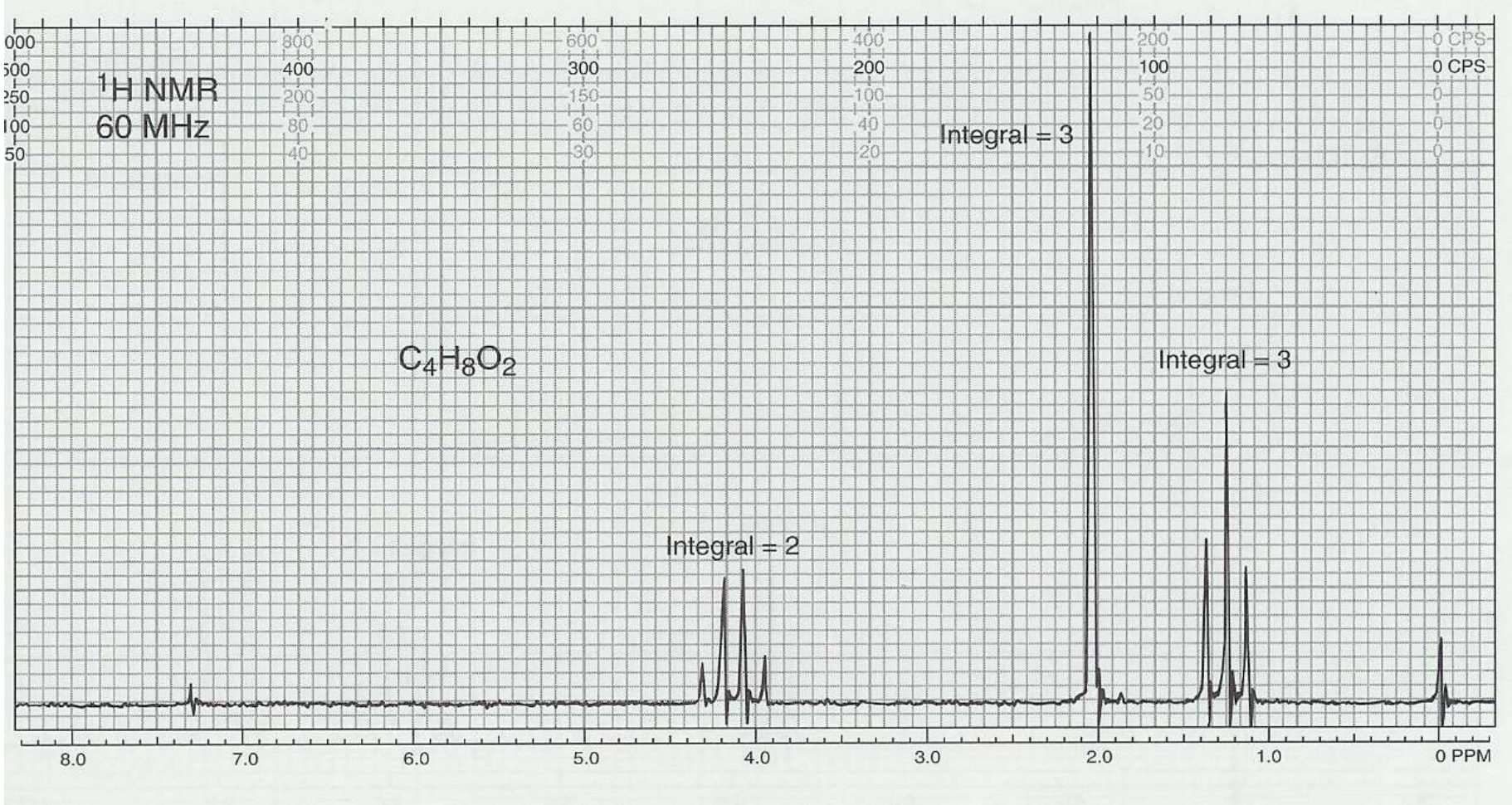
# EXERCÍCIOS

# DE

# AE/RMN

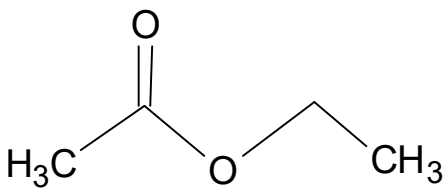
# EXERCÍCIOS AE/RMN

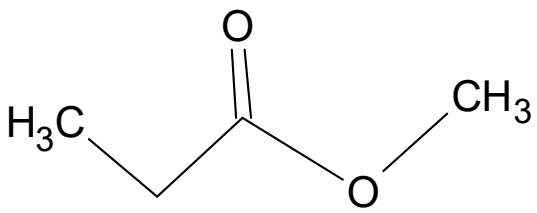
- **Exercício 7:** Determine a estrutura do éster (AE = $C_4H_8O_2$).



# EXERCÍCIOS AE/RMN

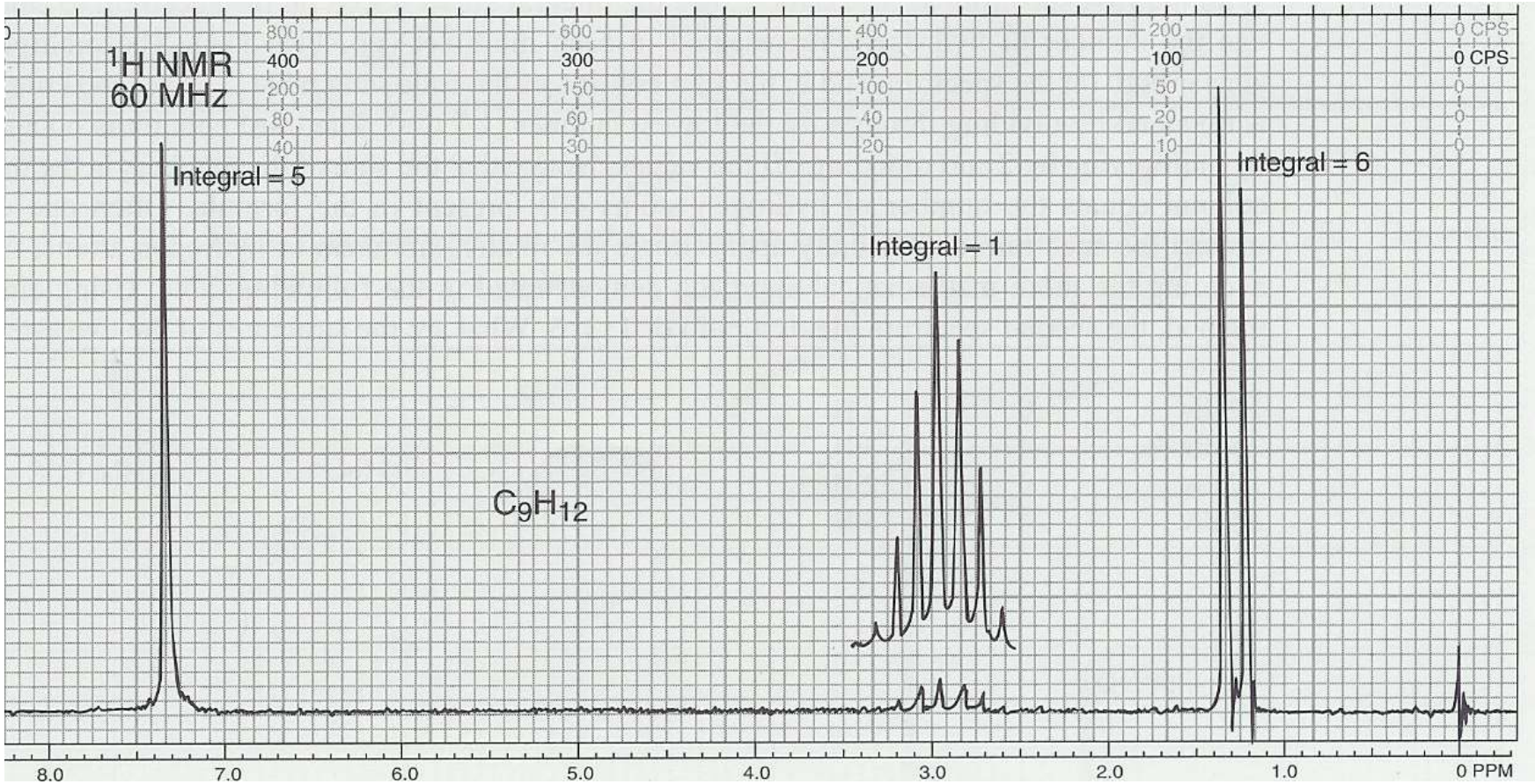
- **Resposta Exercício 7:**
- Análise Elementar (AE): $C_4H_8O_2$ IDH = 1
- Possui uma insaturação a carbonila porque é um éster (FT-IR)
- Podemos propor dois ésteres: pela integral e IDH
- -No **acetato de etila** o singleto do grupo $-CH_3$ ligado a carbonila deve sair perto de 2,0ppm a que confirmou o produto.
- -No **Etanoato de metila** o singleto do grupo $-CH_3$ ligado no oxigênio deve sair perto de 4ppm o que não se confirmou.



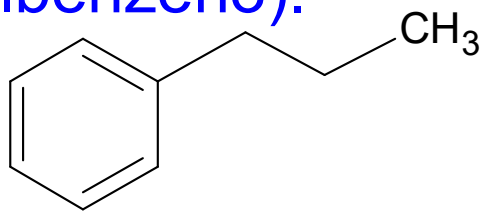
# EXERCÍCIOS AE/RMN

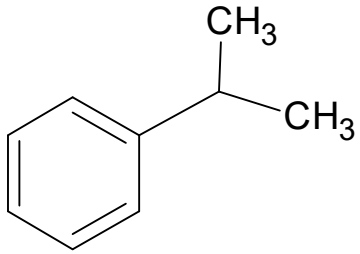
- **Exercício 8:** Determine a estrutura do hidrocarboneto aromático (AE = $C_9H_{12}$)



# EXERCÍCIOS AE/RMN

- **Resposta Exercício 8**: AE = $C_9H_{12}$ IDH = 4
- Podemos propor dois hidrocarbonetos aromáticos, então pelo IDH=4 podemos propor 2 hidrocarbonetos (Isopropilbenzeno e Propilbenzeno).

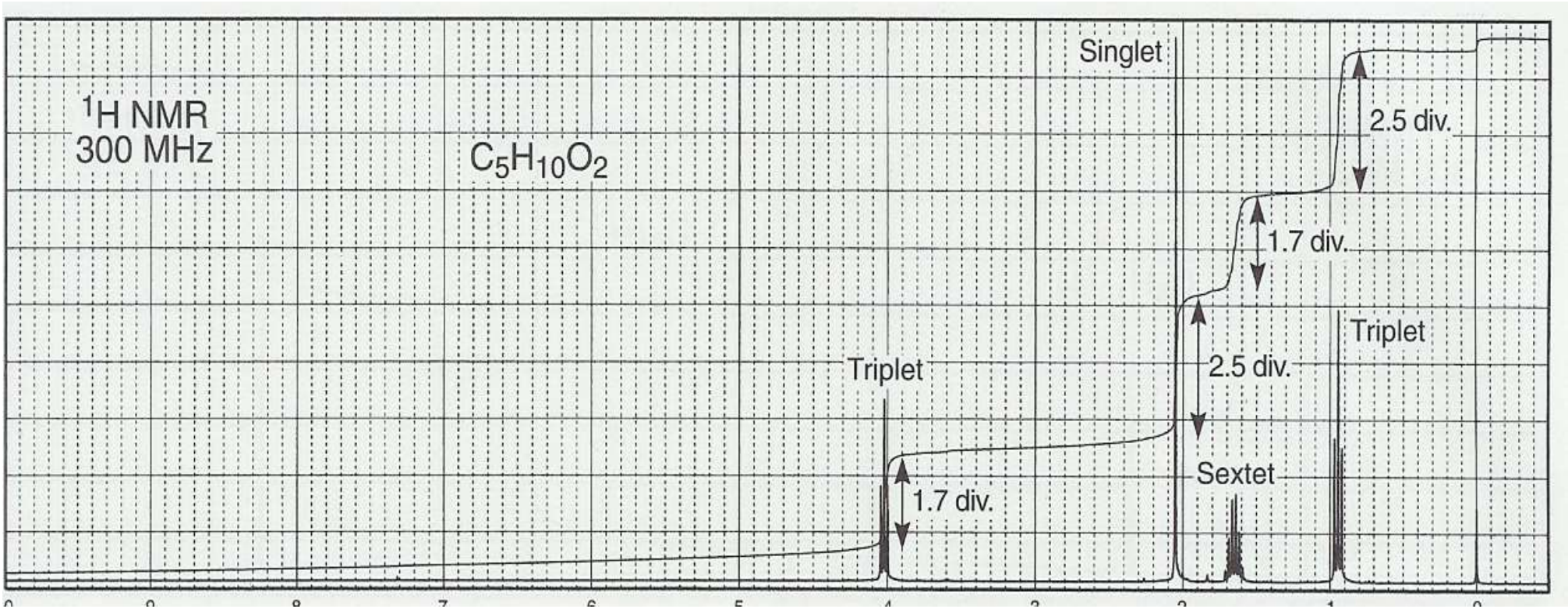



- Verificar o espectro de RMN que atende as estruturas.
- Não é o propilbenzeno porque no espectro de RMN não atende os dois sinais de grupo metila e nem a integral.
- É o isopropilbenzeno porque atende todos os sinais, isto é dois dupletos superpostos ($CH_3$ ; 1,2ppm e 1,3ppm), um septeto (CH; 2,9ppm) e aromáticos (CH; 7,3ppm) e satisfaz as integrais.

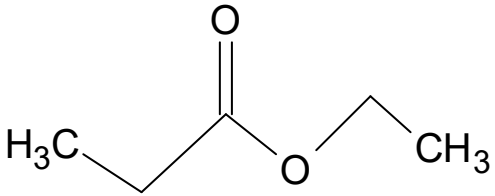
# EXERCÍCIOS AE/RMN

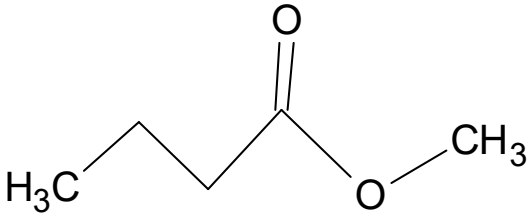
- **Exercício 9:** Determine a estrutura do éster (AE = $C_5H_{10}O_2$)

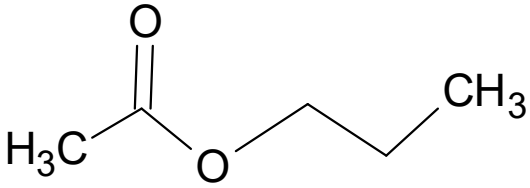


# EXERCÍCIOS AE/RMN

- **Resposta Exercício 9**: Sabemos que é um éster FT-IR); sabemos sua análise elementar (AE = $C_5H_{10}O_2$); sabemos o IDH = 1; Vamos analisar o RMN de próton. Podemos propor 3 ésteres.



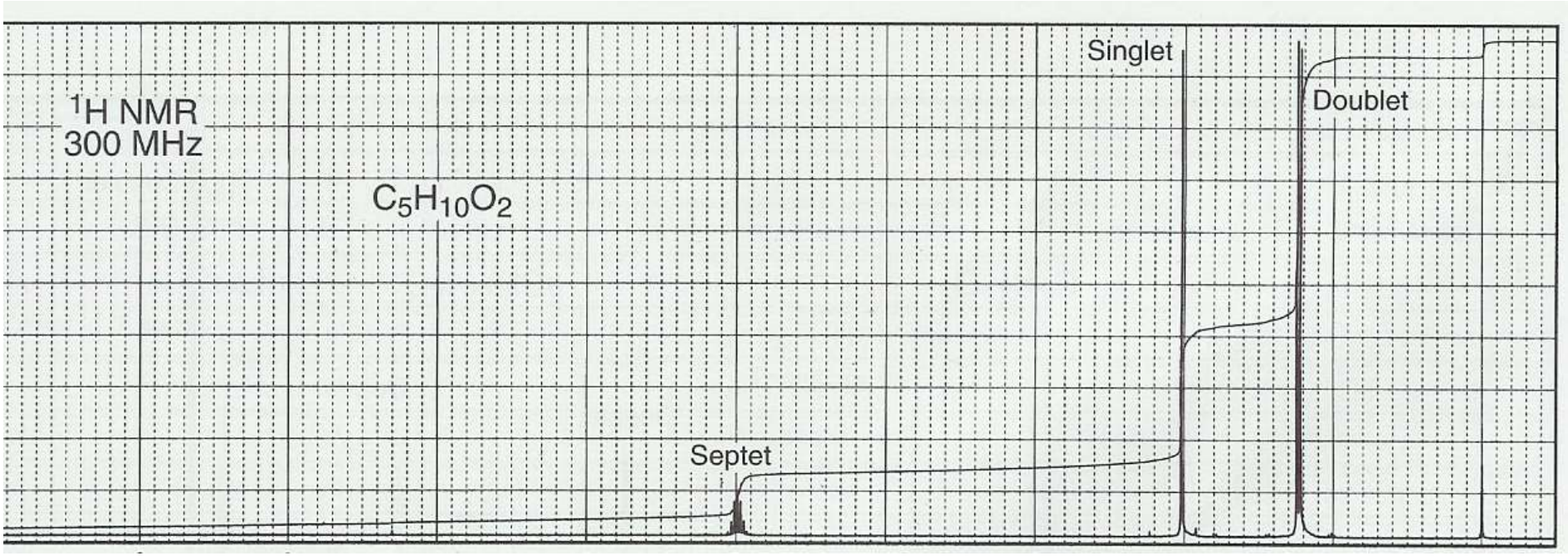




- O primeiro éster(**etanoato de etila)** é elimimado porque não daria nenhum sinal na forma de sexteto.
- O segundo éster**(propanoato de etila)** é eliminado porque o sinal do metila ligado ao oxigênio (O-$CH_3$) teria o sinal de um singleto, estaria desprotegido e apareceria perto de de 4,0 ppm.
- O terceiro éster **(acetato de propila)** provavelmente é a molécula porque o grupo metila ligado a carbonila, aparece como singleto, esta mais protegido e aparece em 2,1ppm.

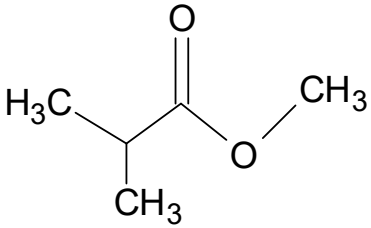
# EXERCÍCIOS AE/RMN

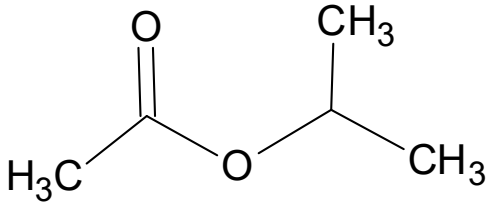
- **Exercício 10:** Determine a estrutura do éster (AE = $C_5H_{10}O_2$)



# EXERCÍCIOS AE/RMN

- **Resposta Exercício 10**: Sabemos que é um éster por FT-IR; sabemos que (AE = $C_5H_{10}O_2$); sabemos o IDH = 1; Vamos analisar o RMN de próton. Podemos propor 2 ésteres.

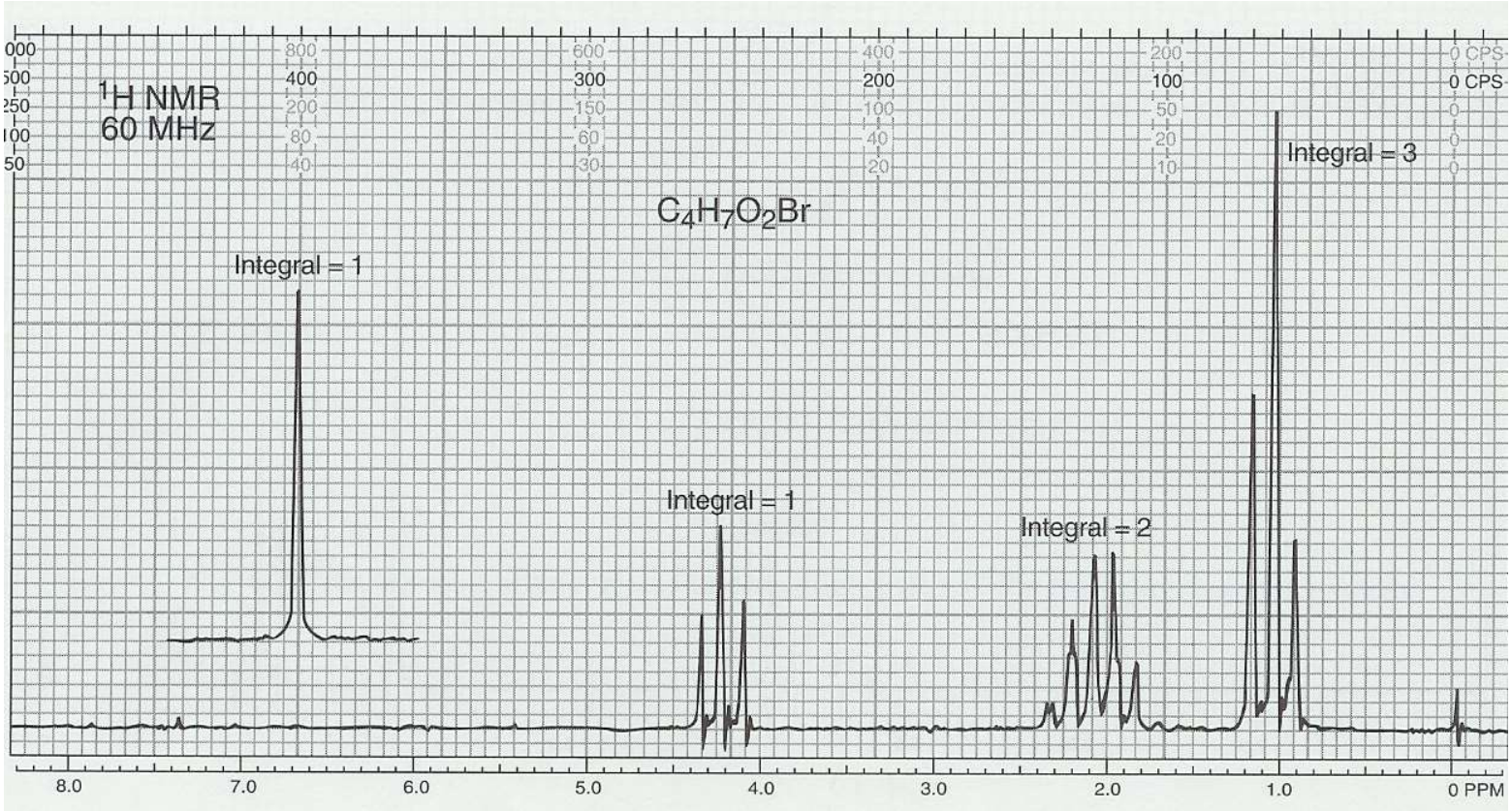



- O primeiro éster **(isopropanoato de metila)** é eliminado porque o sinal do metila ligado ao oxigênio (O-$CH_3$) teria o sinal de um singleto que estaria desprotegido e apareceria perto de de 4,0 ppm.
- O segundo éster **(acetato de isopropila)** provavelmente é a molécula correta, porque o grupo metila ligado a carbonila, aparece como singleto e esta mais protegido e aparece em 2,1ppm.

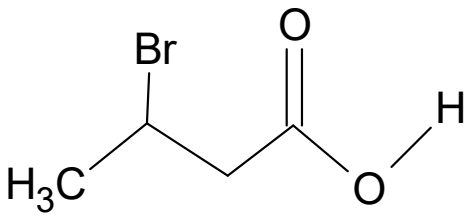
# EXERCÍCIOS AE/RMN

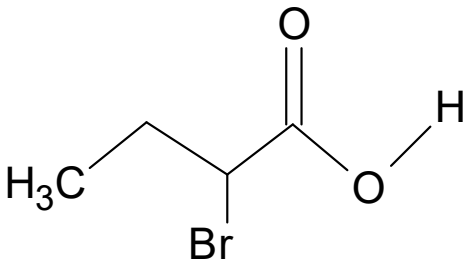
- **Exercício 11:** Determine a estrutura do ácido carboxílico (AE = $C_4H_7O_2Br$).



# EXERCÍCIOS AE/RMN

- **Resposta Exercício 11**: Sabemos que é um ácido carboxílico por FT-IR; Calculamos o IDH=1 então podemos propor duas fórmula:

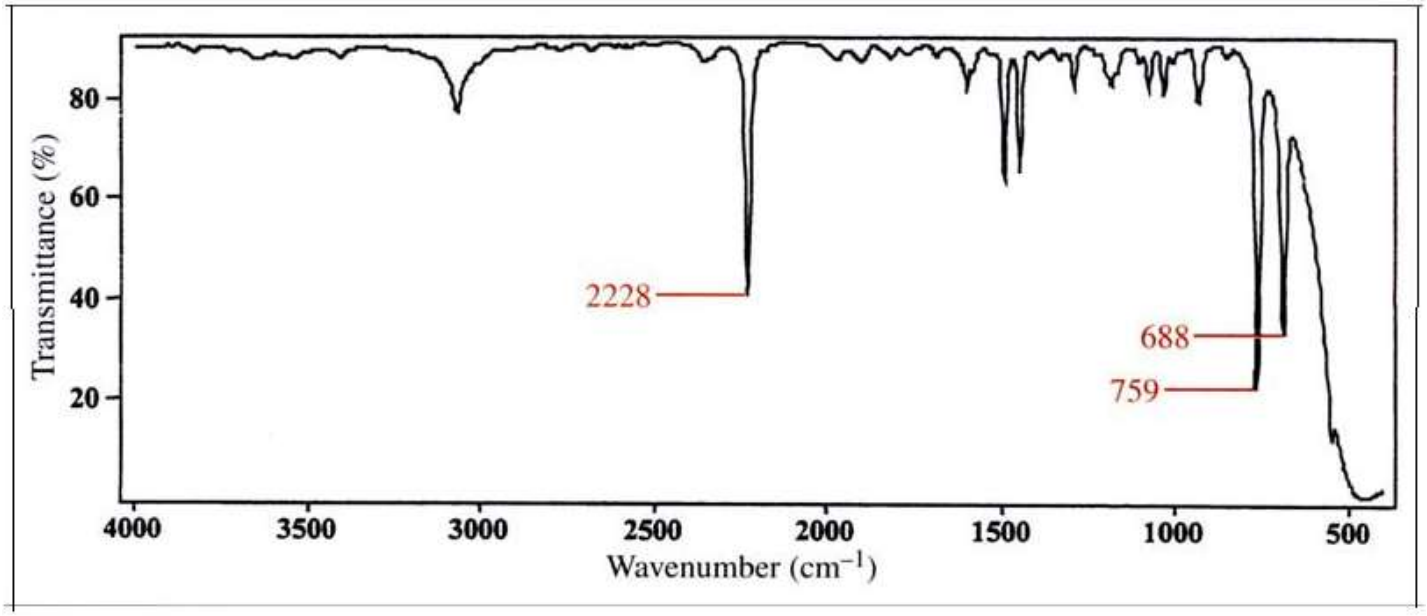



- Na molécula do **ácido 3-bromo butanoico**, o próton do **Br-CH** deveria apresentar se como um sinal de **sexteto,** por volta de **4,0ppm** (desprotegido), o que não ocorreu, portanto não é esta molécula. Deveria também ter dois dupletos para $CH_2$ e para $CH_2$.
- Na molécula do **ácido 2-bromobenzóico**, o próton do **Br-CH** aparece como um **tripleto**, por volta de **4,0ppm** (menos protegido), o que ocorreu como esperado, portanto a molécula é esta.

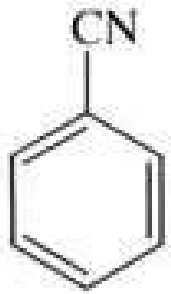
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 12:** Propor estruturas do composto a partir de sua análise elementar ($C_7H_5N$) e seu espectro de FT-IR.



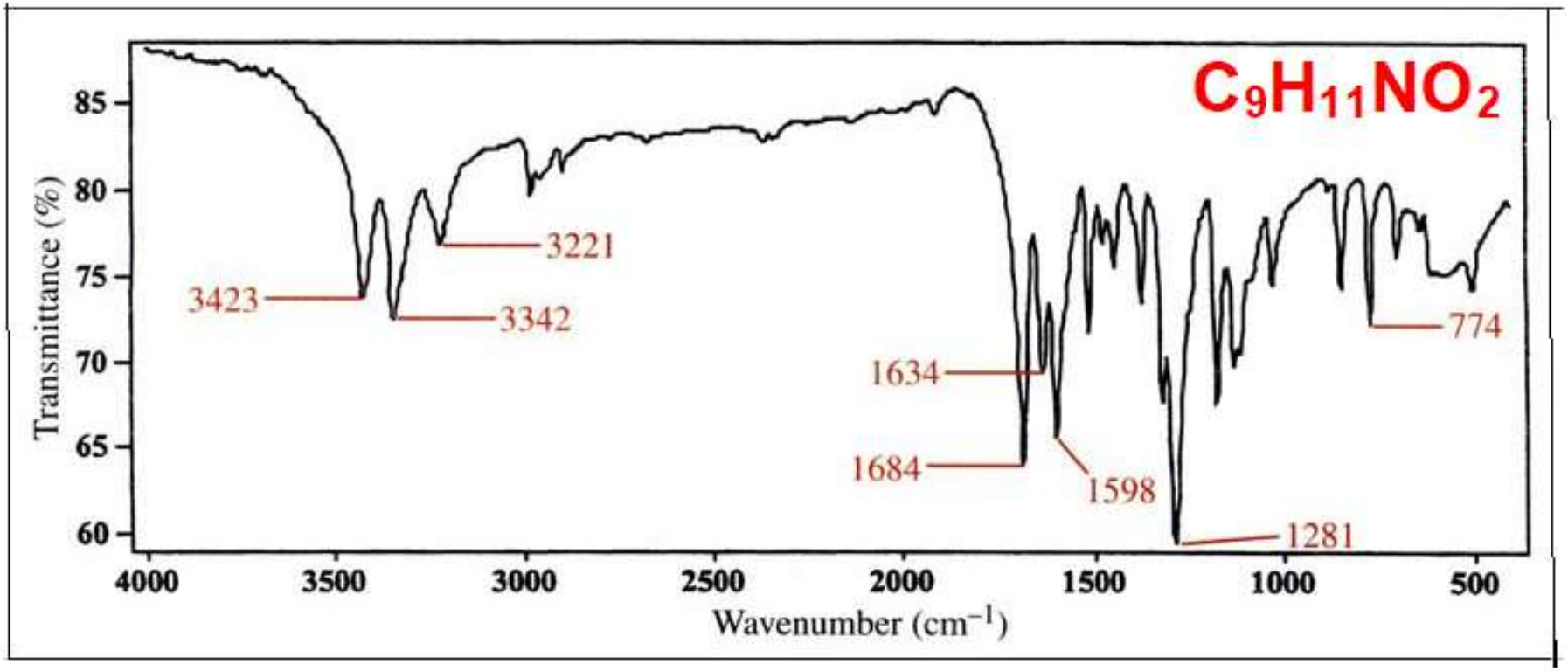
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 12:**
- Análise Elementar: $C_7H_5N$ IDH=6 (indica grupo aromático)
- Banda de absorções acima de 3000cm$^{-1}$, que indica que a molécula seja um aromático.
- Banda de absorção em 2228cm-1 indica a presença de tripla ligação C≡C ou C≡N.
- A formula proposta é:



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 13:** Propor estruturas do composto a partir de sua análise elementar ($C_9H_{11}NO_2$) e seu espectro de FT-IR.

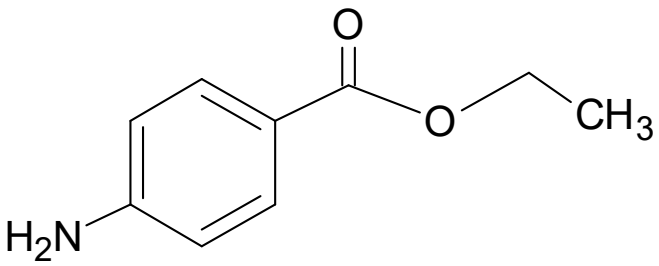


# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

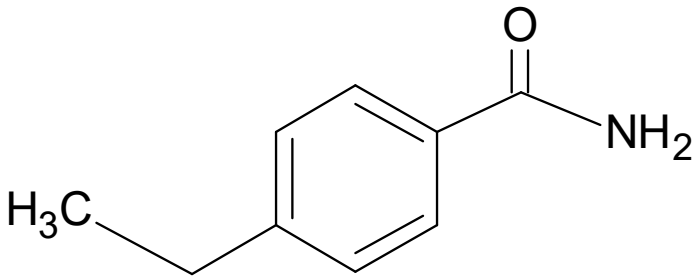
- **Resposta - Exercício 13:**
- Análise Elementar: $C_9H_{11}NO_2$ IDH=5 (indica grupo aromático)
- Banda de absorções acima de 3000cm$^{-1}$, que indica que a molécula seja um aromático.
- Banda de absorções abaixo de 3000cm$^{-1}$, que indica que a molécula tenha parte alifática.
- Banda de absorção em 3423cm$^{-1}$, 3342cm$^{-1}$ e 3221cm$^{-1}$ indica a presença do grupo $NH_2$ na molécula.
- Banda em 1684cm$^{-1}$ indica a presença de uma carbonila (C=O)

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 13 (Continua):**
- Ausência de grupo característico de -OH (não é um ácido) mas pode ser um éster.
- As estruturas propostas são:



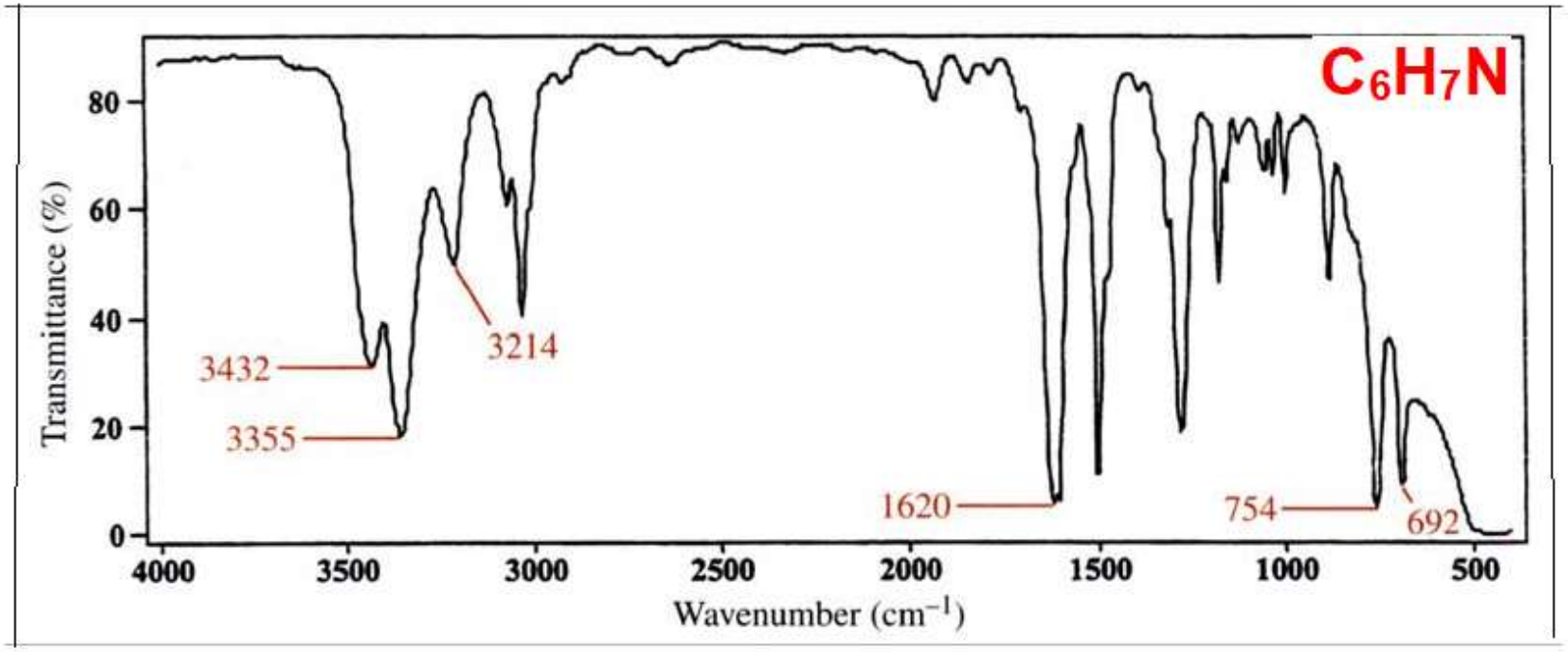

4-aminobenzoato de etila




4-etilbenzamida

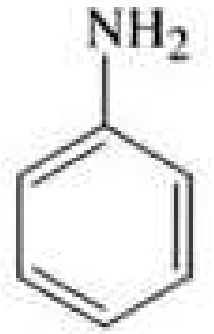
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 14:** Propor estruturas do composto a partir de sua análise elementar ($C_6H_7N$) e seu espectro de FT-IR.



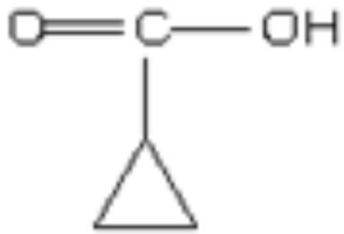
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

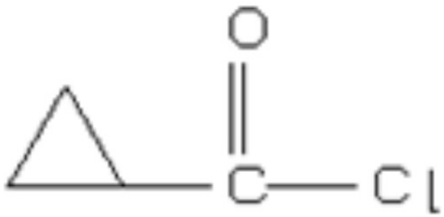
- **Resposta - Exercício 14:**
- Análise Elementar: $C_6H_7N$ IDH=4 (indica grupo aromático)
- Banda de absorções acima de 3000cm$^{-1}$, indica que a molécula seja um aromático.
- Banda de absorção em 3432cm$^{-1}$, 3355cm$^{-1}$ e 3214cm$^{-1}$ indica a presença do grupo $NH_2$ na molécula.
- A estrutura proposta é:

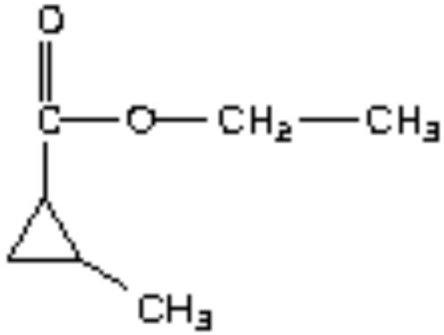


# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 15:** Relacione cada uma das estruturas químicas apresentadas abaixo com o espectro de infravermelho correspondente. Explique as absorções.

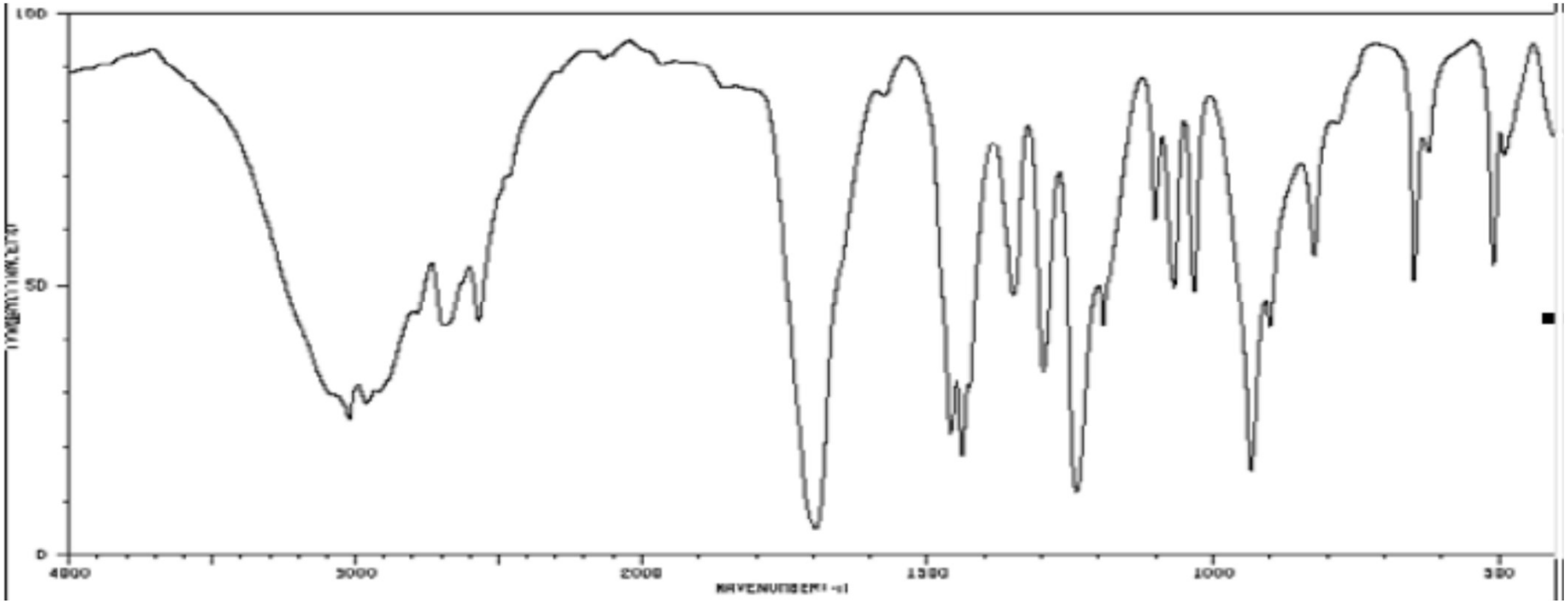


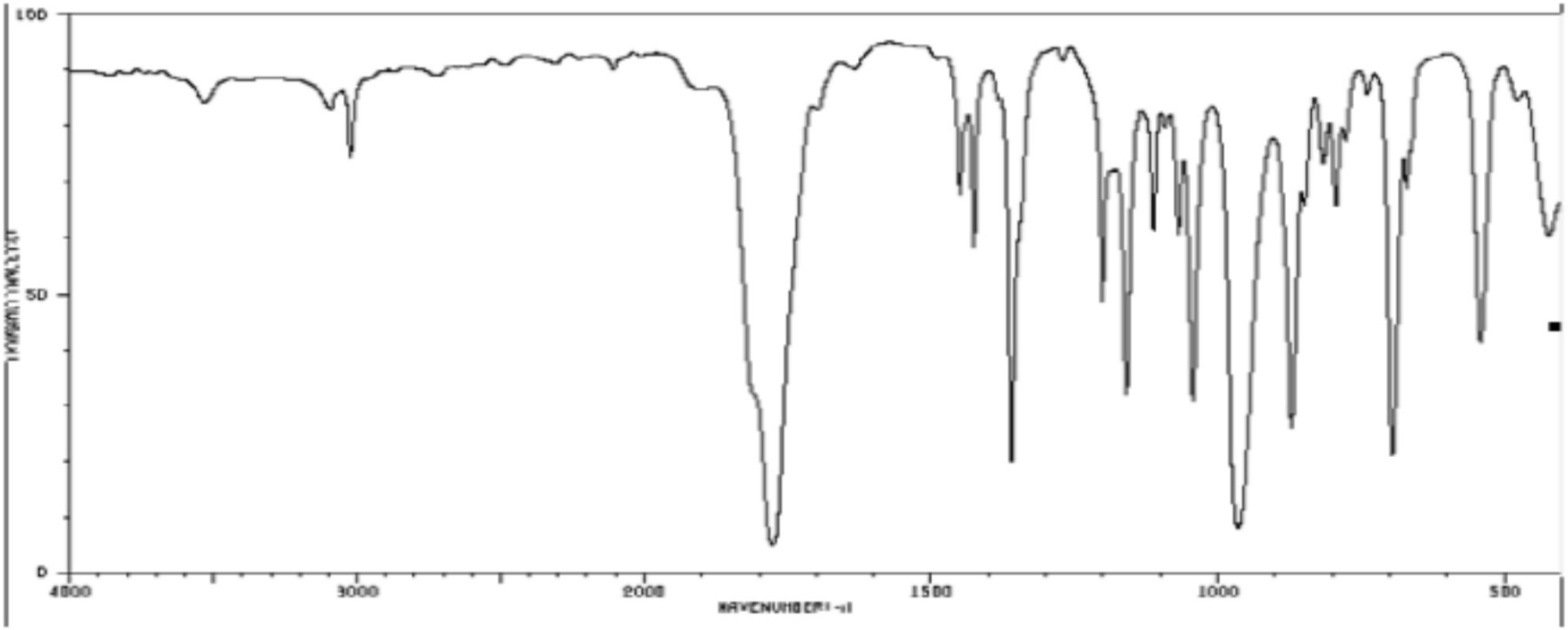
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 15 (Continua):**
- **Espectro 15A**



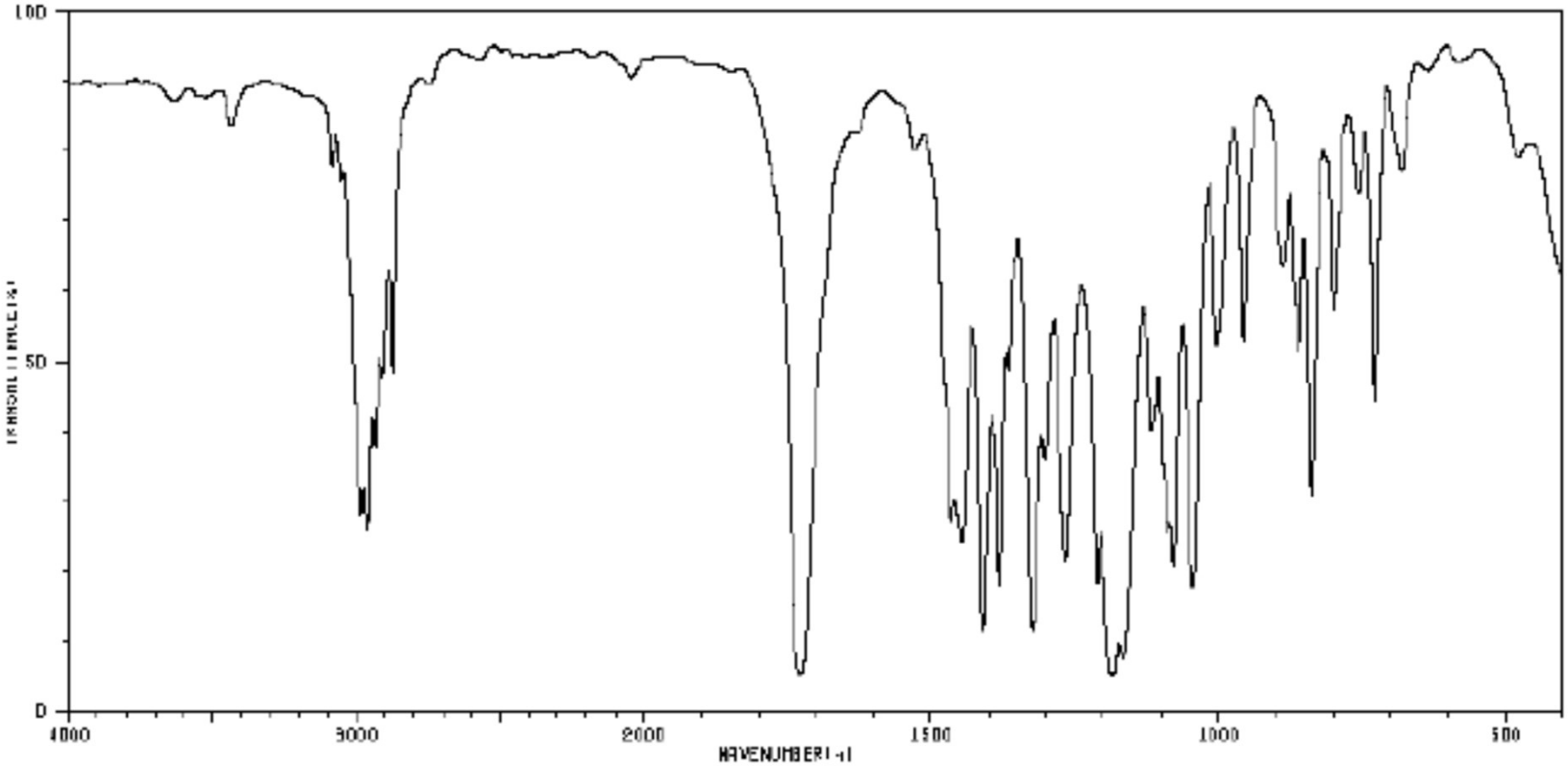
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 15 (Continua):**
- **Espectro 15B**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 15 (Continua):**
- **Espectro 15C**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

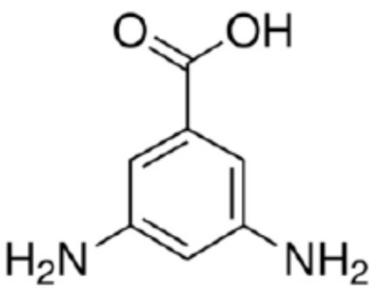
- **Resposta - Exercício 17:**
- **Ver espectros (15A, 15B e 15C) :** As três moléculas possuem carbonila, consequentemente todas possuem banda de absorção na região aproximada de 1700cm$^{-1}$. A banda de absorção referente a esta função não é um fator essencial para diferenciar os três espectros. Tem que procurar outra função.
- O que pode relacionar as três estruturas com os três espectros são as diferentes funções das moléculas: **ácido, Cloreto ácido e éster.**
- A estrutura com função **ácida** corresponde ao **espectro 15A**
- **Porque esta correlação:** O **espectro 15A** é o único que possui uma forte banda larga de absorção, na região de **3300cm$^{-1}$ a 2500cm$^{-1}$**, característica de hidroxila **(-OH)** de um composto ácido. Por isso atribui-se o **espectro 15A** a estrutura do **ácido carboxílico**. Tambem tem uma absorção característica de carbonila ácidos carboxílicos em **1700cm$^{-1}$ [dentro da faixa de ácidos carboxíicos (1730cm$^{-1}$ -1700cm$^{-1}$)]**

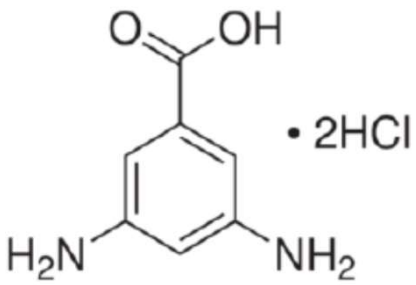
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 17 (Continua):**
- A estrutura com a função **cloreto** de **ácido,** corresponde ao **espectro 15B**
- **Porque esta correlação:** O **espectro 15B** é o único que não possui banda de absorção característica carbonila de cloreto ácido em **1780cm$^{-1}$** [dentro da faixa de absorção das carbonilas de cloretos ácidos **(1810cm-1 a 1775cm-1)]**. Por isso atribui-se o **espectro 15B** a estrutura do **cloreto ácido**.
- A estrutura com a função **éster** corresponde ao **espectro 15C**
- **Porque esta correlação:** O **espectro 15C** é o único que possui bandas de absorções em 1730cm-1, característica de éster [dentro da faixa de absorção de éster (1750cm-1 a 1735cm-1)]. Por isso atribui-se o **espectro 15C** aestrutura do **éster**.

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

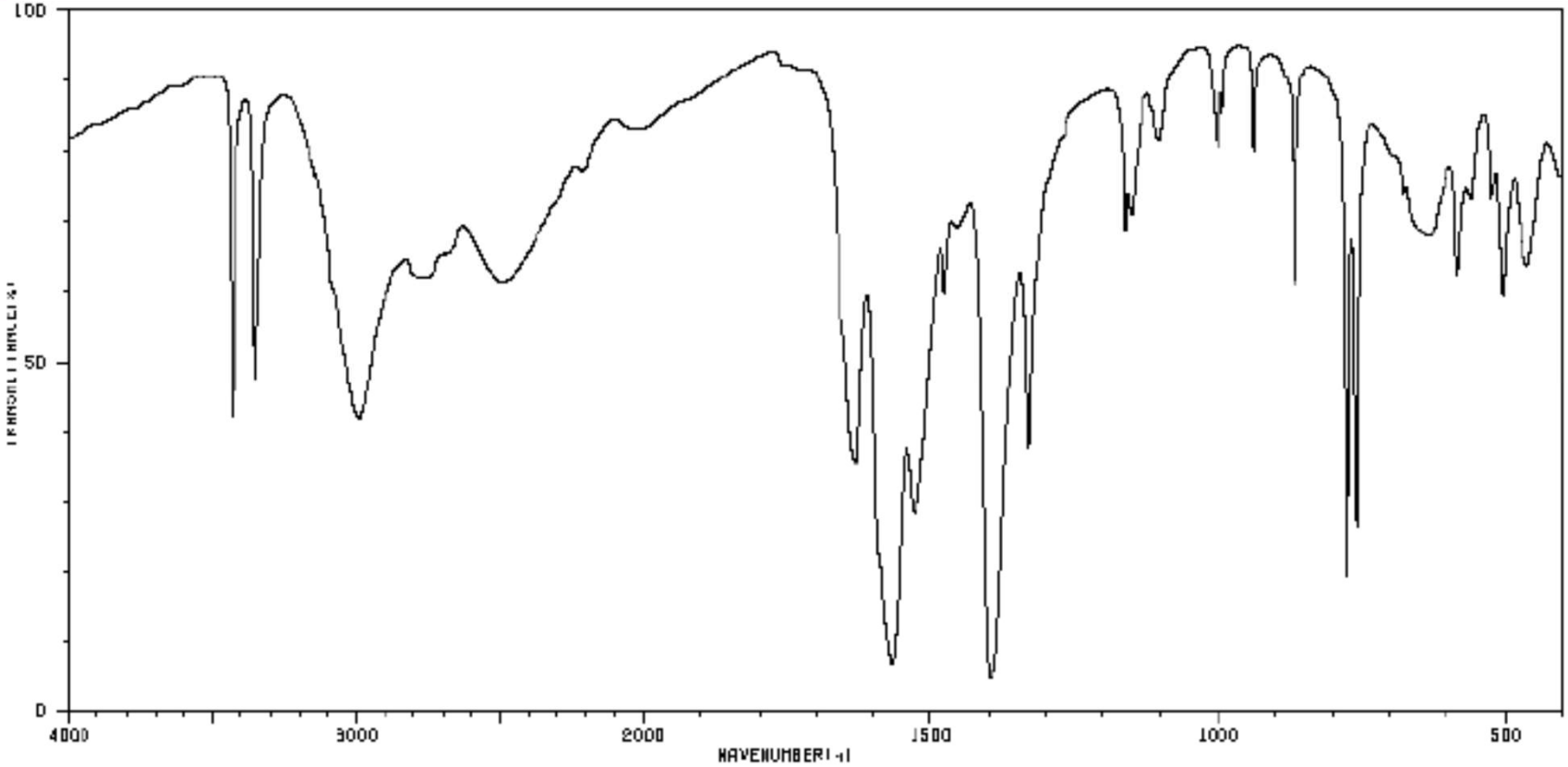
- **Exercício 16:** Relacione cada uma das estruturas químicas apresentadas abaixo com o espectro de infravermelho correspondente. Explique as absorções.



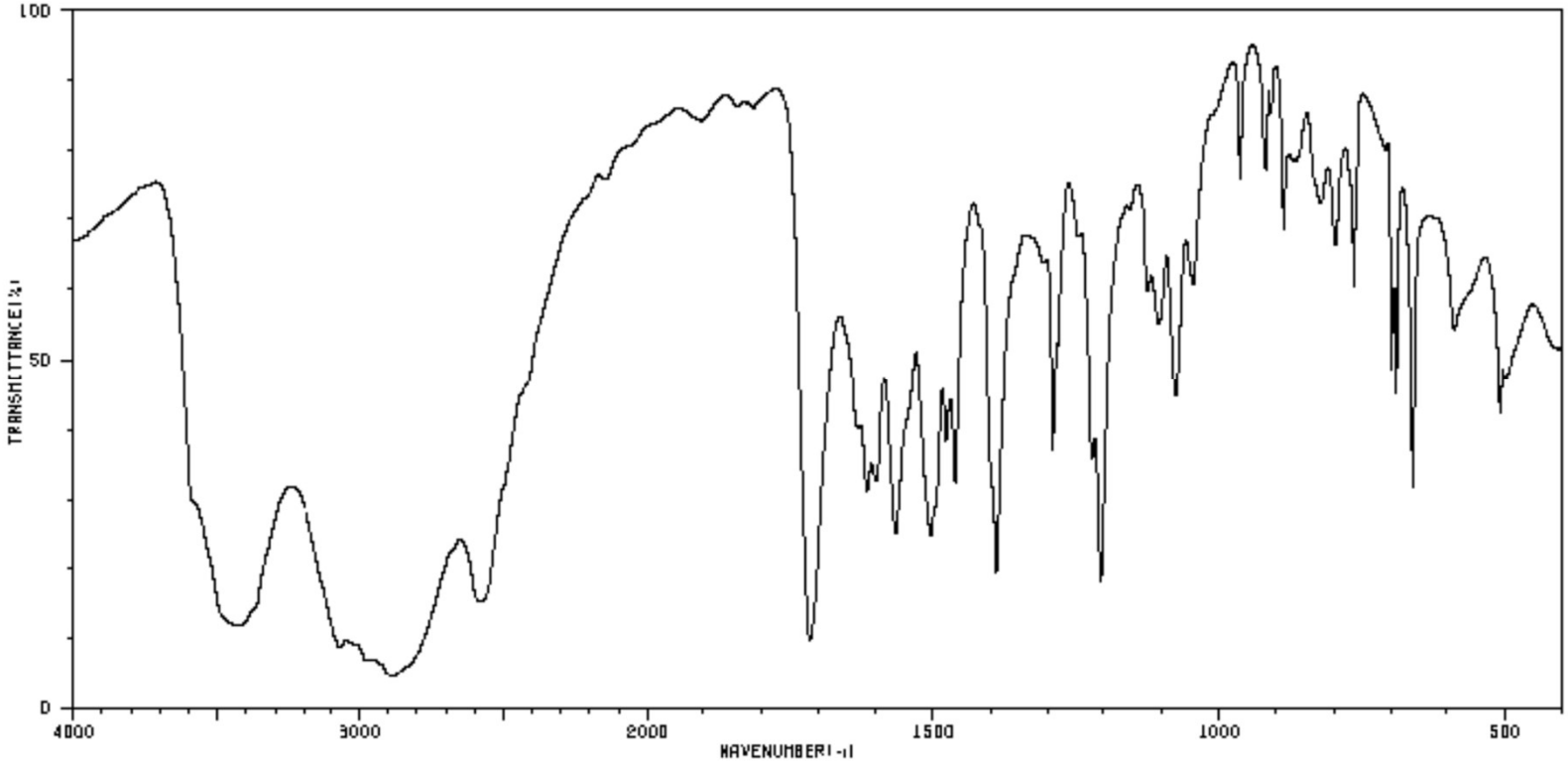
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 16 (Continua):**
- **Espectro 16A:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 16 (Continua):**
- **Espectro16B**

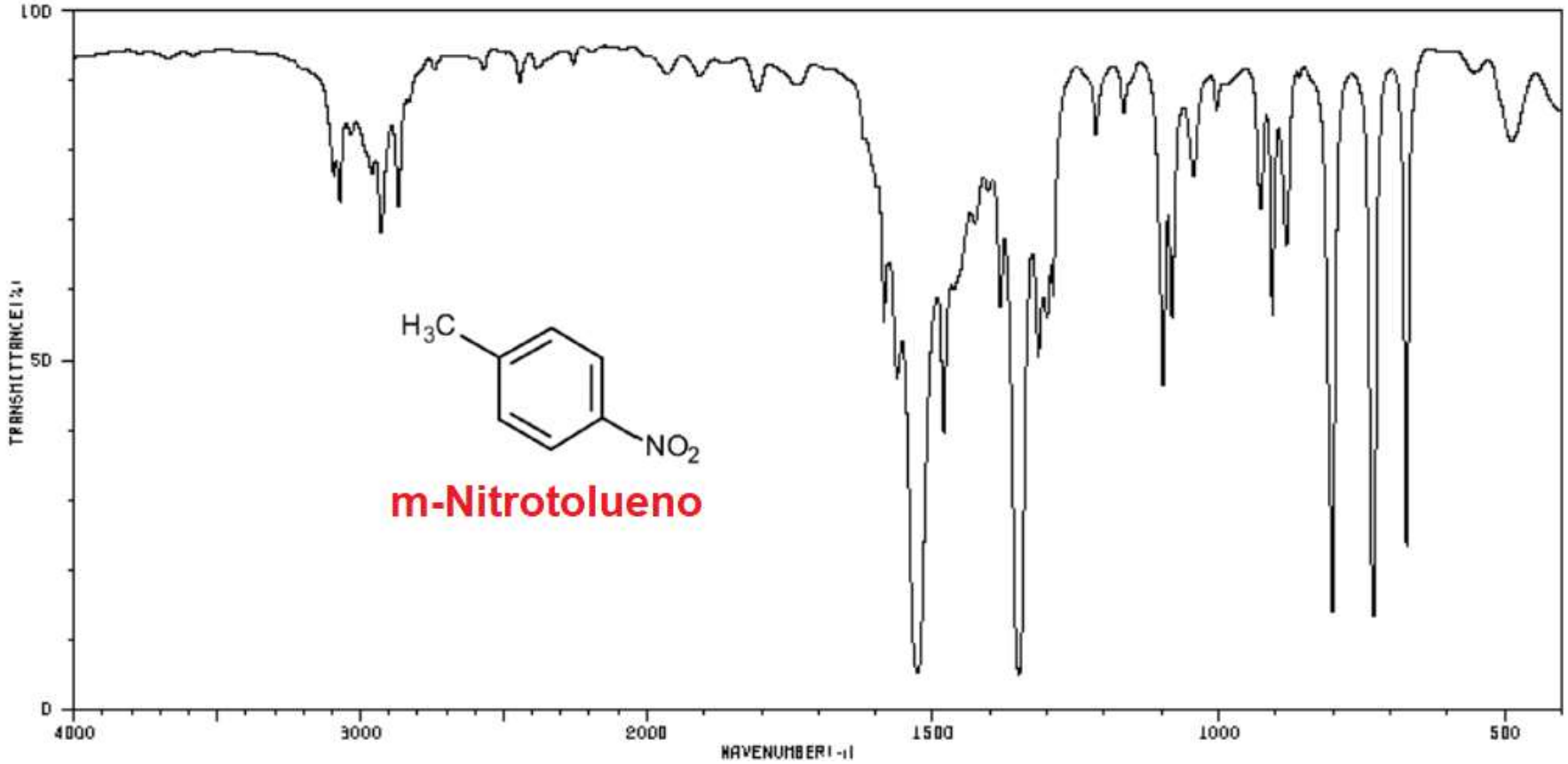


# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 16:**
- A 1ª estrutura (ácido 1,4-aminobenzóico livre) corresponde ao **espectro 16A.**
- **Porque a correlação:** A 1ª estrutura **(ácido 1,4-diaminobenzóico livre)** tem a amina livre, consequentemente fornece um duplo sinal em **3500cm$^{-1}$ e outro em 3400cm$^{-1}$**, referente aos hidrogênios livres da amina.
- A 2ª estrutura (cloridrato do ácido 1,4-aminobenzóico) corresponde ao **espectro 16B.**
- **Porque a correlação:** A 2ª estrutura **(Cloridrato de ácido 1,4-diaminobenzóico)** tem os dois hidrogênios das duas aminas presas pelo cloridrato formado com as duas moléculas de HCl, isso mascara os sinais fornecendo bandas largas e deformadas na região **(3300cm$^{-1}$ a 2800cm$^{-1}$)** porque os elétrons livres ficam preso no HCl, na forma de cloridrato e dificulta as vibrações ocorrerem livremente, produzindo sinais distorcidos.

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 17:** Analise os espectros abaixo, relacionando e explicando as principais bandas de absorção



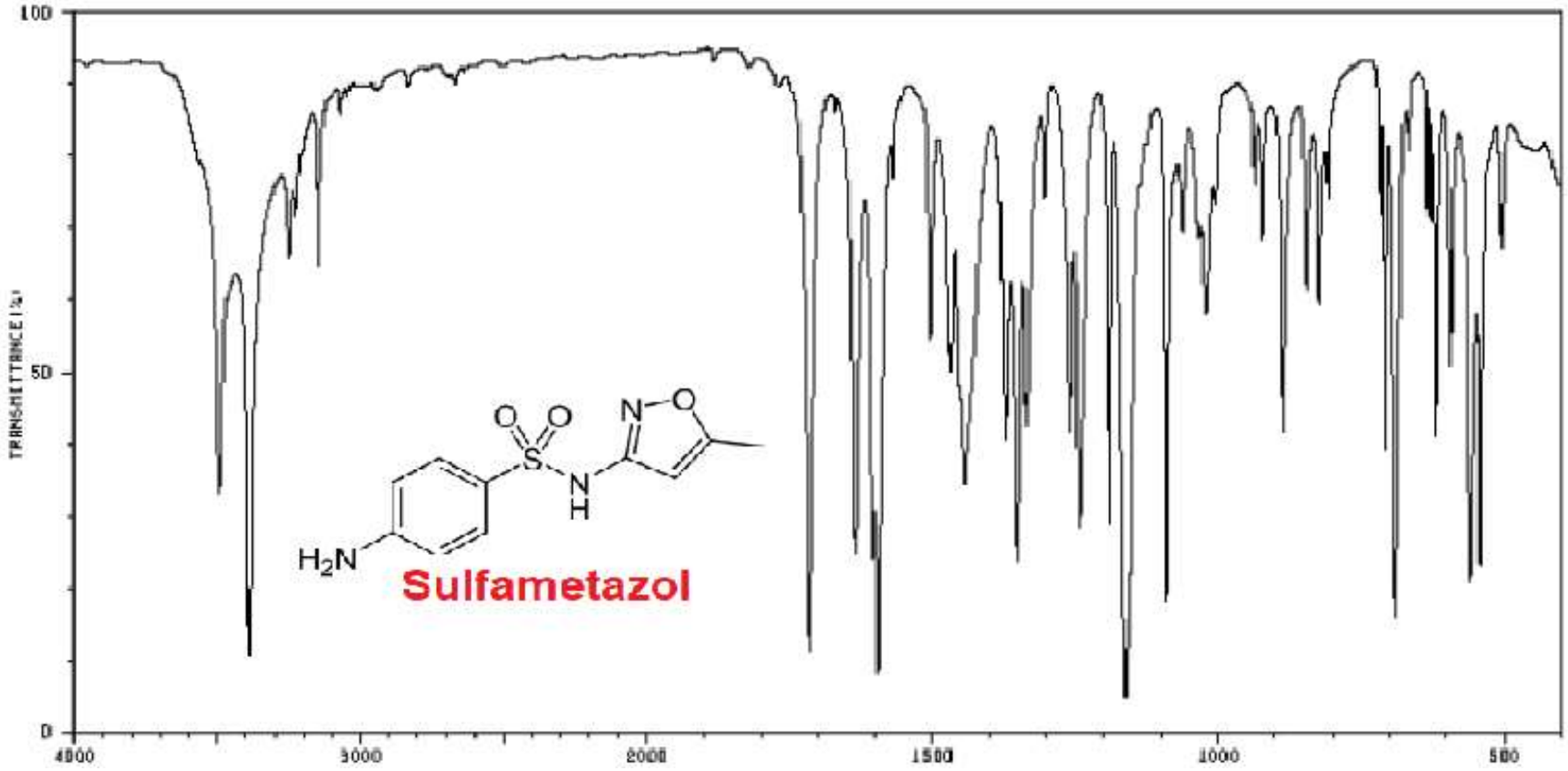
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 17:**
- **m-nitrotolueno:** Com finalidade de auxiliar na identificação deste composto (m-nitrotolueno) pode-se atribuir as bandas de absorção de **C-H acima de 3000cm$^{-1}$,** indicando **anel aromático** Observa-se também bandas de absorção **C-H abaixo de 3000cm$^{-1}$** indicando **grupo alifático.**

- Ainda para ajudar na identificação da substituição do anel aromático em **meta**, observa-se as bandas, com formatos característicos na região de **2000cm$^{-1}$ e 1667cm$^{-1}$**. Para confirmar que é um composto **1,4-dissubstituído** (substituição na posição meta**)** observa-se também as três bandas característica, de forte intensidade, em **800cm$^{-1}$, 720cm$^{-1}$e 680cm$^{-1}$.** As duas bandas de absorção característica do grupo **$NO_2$** podem ser atribuídas as duas bandas de forte intensidade em **1520cm$^{-1}$ e 1330cm$^{-1}$**.

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 18:** Analise os espectros abaixo, relacionando e explicando as principais bandas de absorção.



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

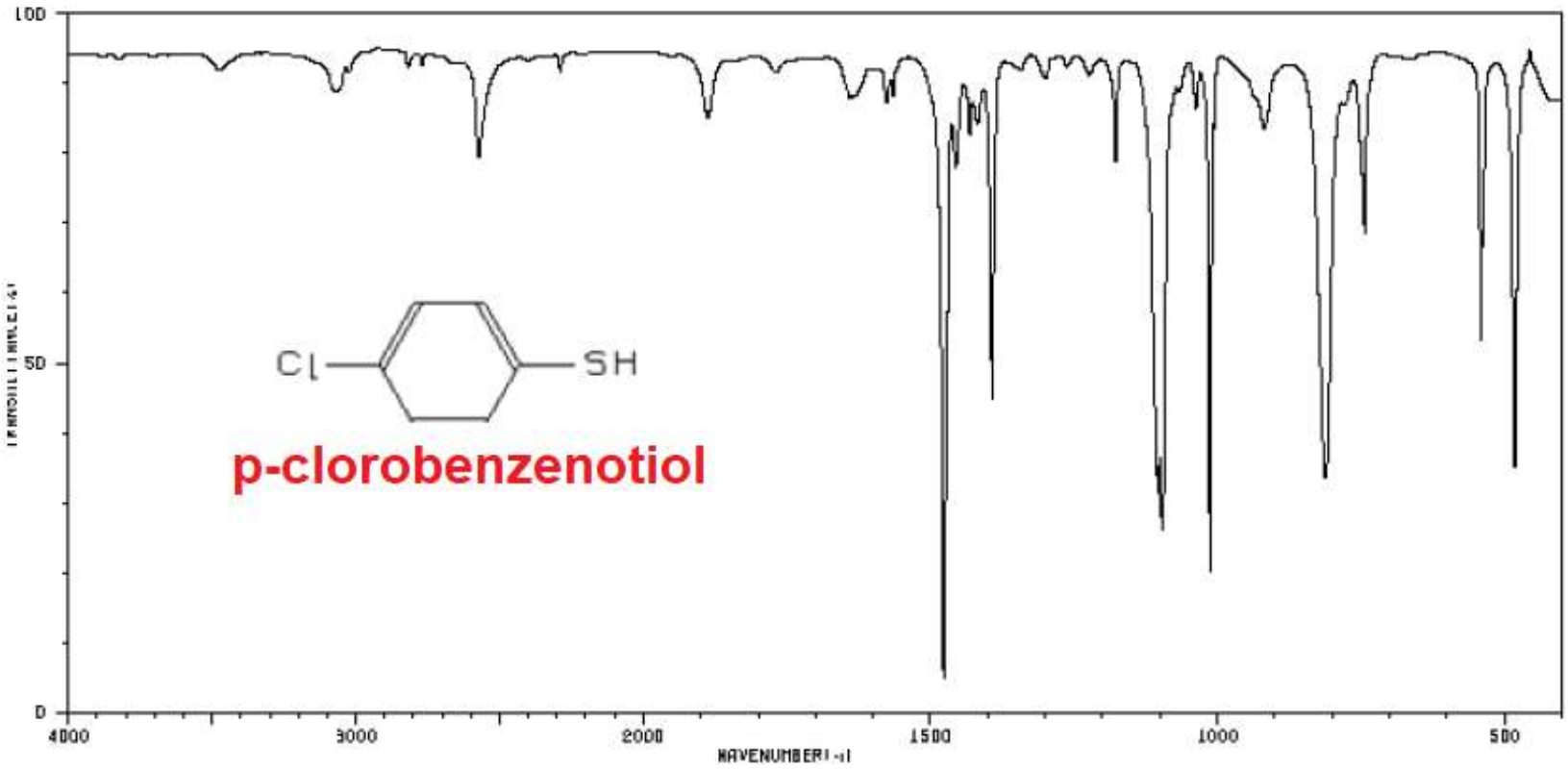
- **Resposta - Exercício 8:**
- **Sufametoxazol:** Com finalidade de auxiliar na identificação deste composto (sulfametoxazol) as bandas **acima de 3000cm$^{-1}$** são características de **C-H aromático** e as **bandas abaixo de 3000cm$^{-1}$,** de baixa intensidade, são características de **C-H alifáticos**.
- Para saber se o composto é **para substituído**, observa-se bandas de absorção, com formatos característicos na região de **2000cm$^{-1}$ a 1667cm$^{-1}$ (Não significativo no espectro).**
- Para confirmar que é um composto **1,4-dissubstituído** (ou seja substituído na posição **para)** observa-se também banda de absorção característica em **850cm$^{-1}$**.

## EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 18 (Continua):**
- **Sufametoxazol:**
- Observa-se facilmente também duas absorções características de **N-H do $NH_2$** (amina primária livre), em **3500 $cm^{-1}$ a 3400$cm^{-1}$** do espectro, aparecendo em forma de um dupleto.
- A absorções características do grupo **$SO_2$** (sulfonamida) apresentam intensidade média em **1180$cm^{-1}$ e 1100$cm^{-1}$** (estiramento assimétrico e simétrico).

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 19:** Analise os espectros abaixo, relacionando e explicando as principais bandas de absorção.



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

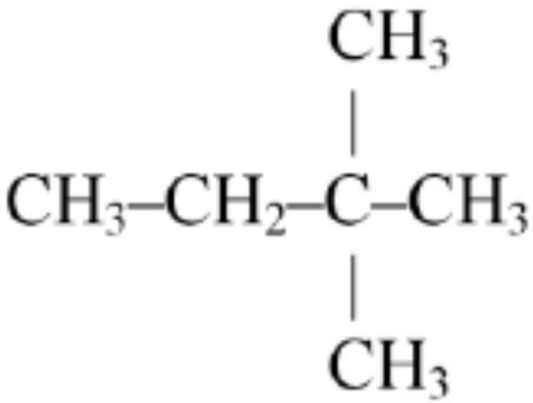
- **Resposta - Exercício 19:**
- **p-Clorobenzenotiol:**
- Com finalidade de auxiliar na identificação a banda acima de 3000cm$^{-1}$, de muito baixa intensidade, é característica de C-H aromático.
- O sinal próximo de 2250cm$^{-1}$ corresponde provavelmente ao estiramento do grupo S-H. (não significativo no espectro)
- Os sinais entre 2000cm$^{-1}$ e 1667cm$^{-1}$ são característicos de substituição **para** no anel (Não significativo no espectro).

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

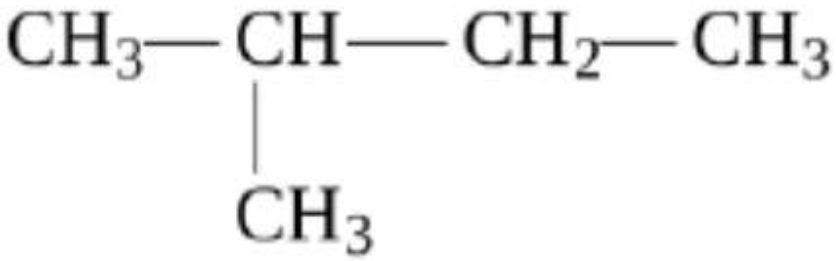
- **Resposta - Exercício 19 (Continua):**
- **p-Clorobenzenotiol:**
- A absorção correspondente C=C do anel ocorre em pares entre 1600cm$^{-1}$ e 1475cm$^{-1}$.
- Para confirmar que é um composto 1,4-dissubstituído (ou seja substituído na posição **para)** observa-se também uma banda de absorção característica em 810cm$^{-1}$.
- Encontra-se banda de absorção em 710cm-1, característica de ligação C-CL (entre 785cm$^{-1}$ a 540cm$^{-1}$).

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 20:** Relacione cada estrutura com seu espectro. Explique.



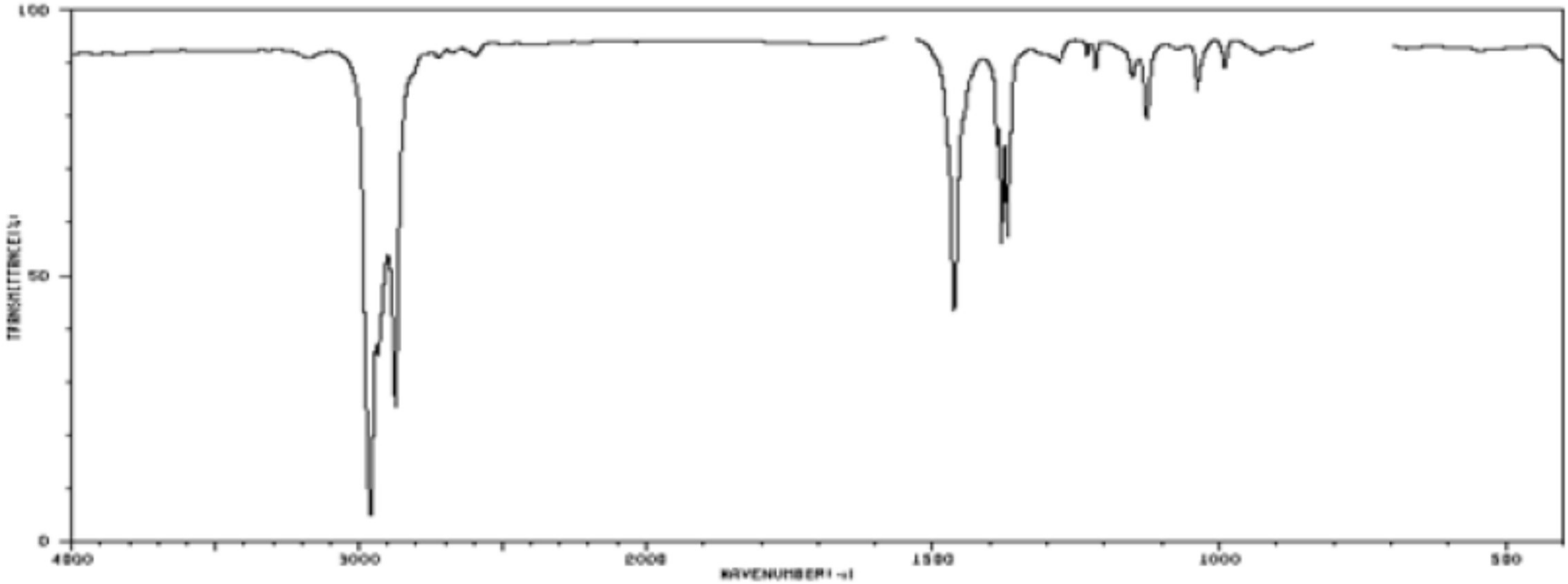
2,2-dimetilbutano



2-metilbutano

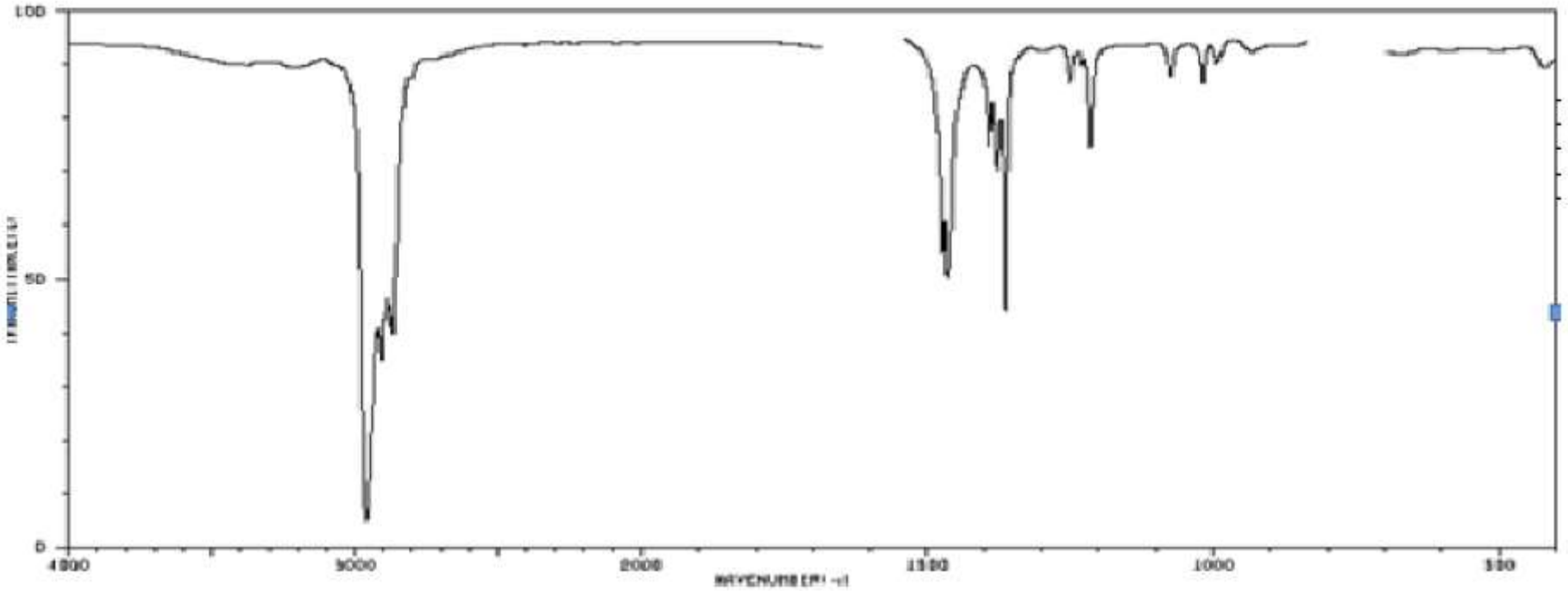
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 20 (Continua):**
- **Espectro 20A:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 20 (Continua):**
- **Espectro 20B:**



## EXERCÍCIOS AE/FT-IR

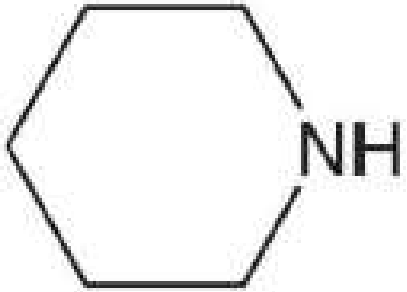
- **Resposta - Exercício 20:**
- **O Espectro 20A corresponde ao 2-metilbutano**
- **Porque a correlação:** Encontra se bandas de absorção em forma de um dupleto em 1350cm$^{-1}$ e 1355cm$^{-1}$ (entre 1500cm$^{-1}$ e 1300cm$^{-1}$) que é característica do grupo isopropila, um dupleto bem definido, referente ao C-H do **grupo isopropila [-CH(CH$_3$)$_2$].**

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

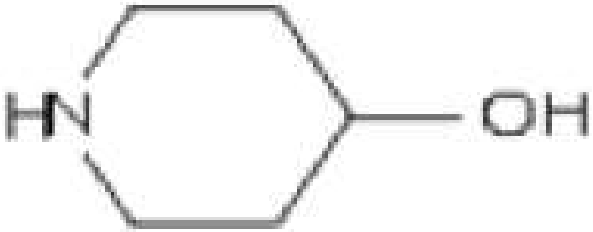
- **Resposta - Exercício 20 (Continua):**
- **O Espectro 20B corresponde ao composto 2,2-dimetilbutano**
- **Porque a correlação:** Na mesma região entre **1500cm$^{-1}$ e 1300cm$^{-1}$** observa-se, como característica do grupo **t-butila** um dupleto que não é bem definido.

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 21:** Relacione cada estrutura com seu espectro. Explique.



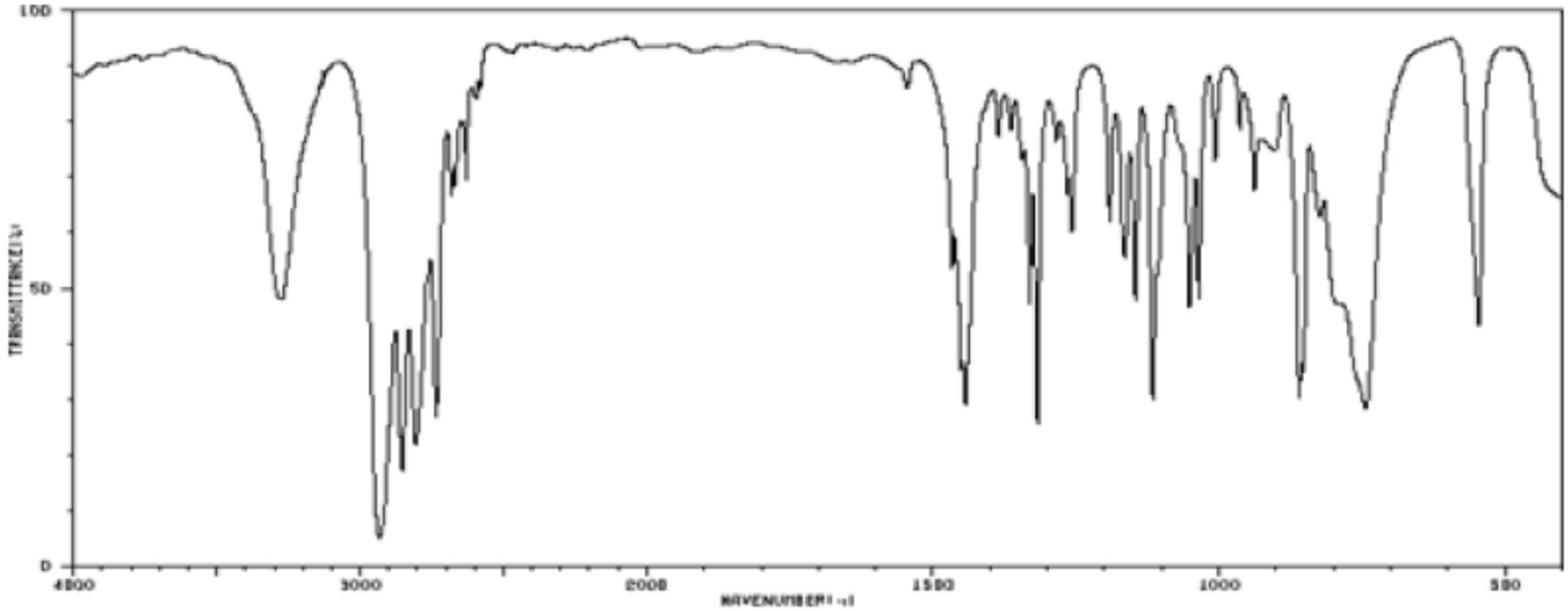

**Piperidina**




**4-Piperidinol**

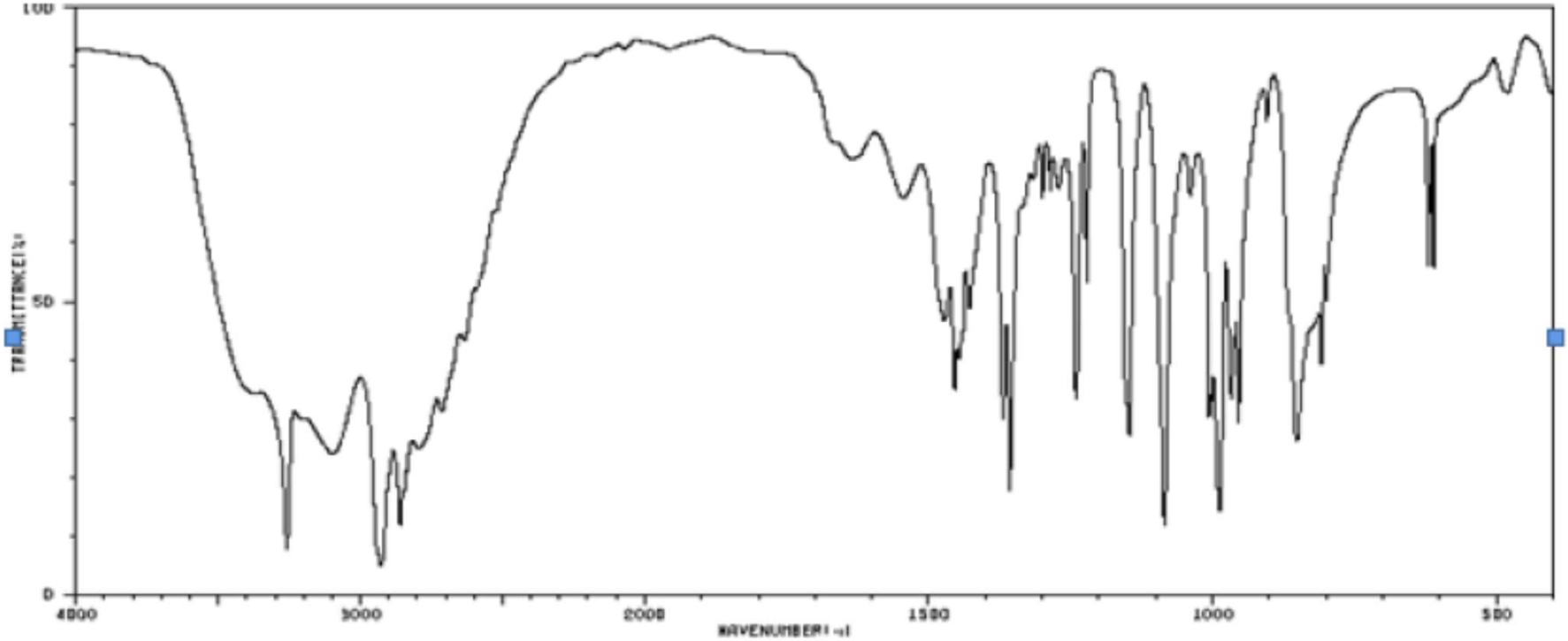
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 21 (Continua):**
- **Espectro 21A:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 21 (Continua):**
- **21B:**



## EXERCÍCIOS AE/FT-IR

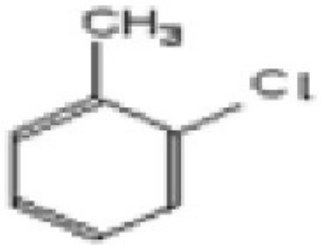
- **Resposta - Exercício 21:**
- **O espectro 21A corresponde a estrutura da piperidina**
- **Porque a correlação:** Em **3330cm$^{-1}$** (região entre 3500cm$^{-1}$ a 3200cm$^{-1}$) observa-se uma banda de absorção, bem definida, característica de **N-H** de amina secundária.
- **Abaixo de 3000cm$^{-1}$** podem ser observadas bandas de absorção características de C-H de $CH_2$.

## EXERCÍCIOS AE/FT-IR

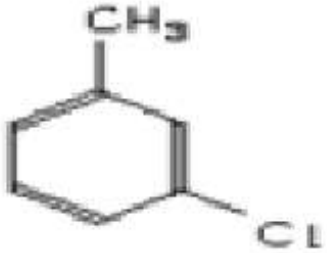
- **Resposta - Exercício 21 (Continua):**
- **O Espectro 2B corresponde a estrutura do 4-piperidinol**
- **Porque a correlação:** Na região entre **2600cm$^{-1}$ e 2400cm$^{-1}$**, observa-se sobreposição das bandas de absorção características de **N-H** com a banda de absorção de **–O-H** e de **-C-H** de $CH_2$, consequentemente um aglomeramento destas bandas de absorção não permite uma identificação adequada.

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

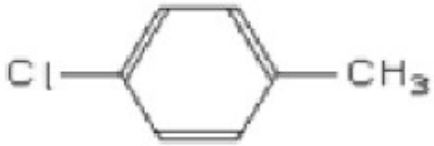
- **Exercício 22:** Explique as principais bandas de absorção no infravermelho para os espectros abaixo, justificando se é derivado o, m ou p. (Não esqueça de colocar a estrutura correta em cada espectro).




o-Clorotolueno



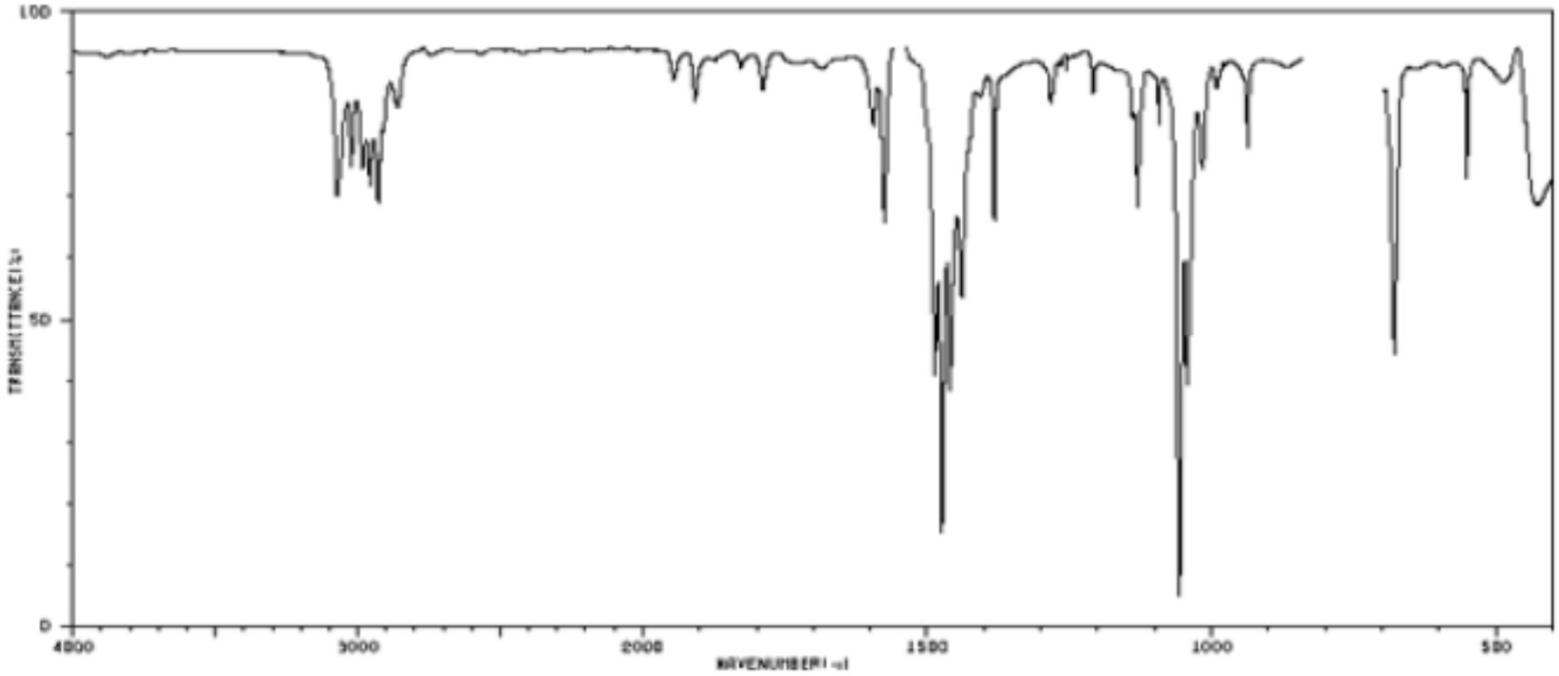

m-Clorotolueno




p-Clorotolueno

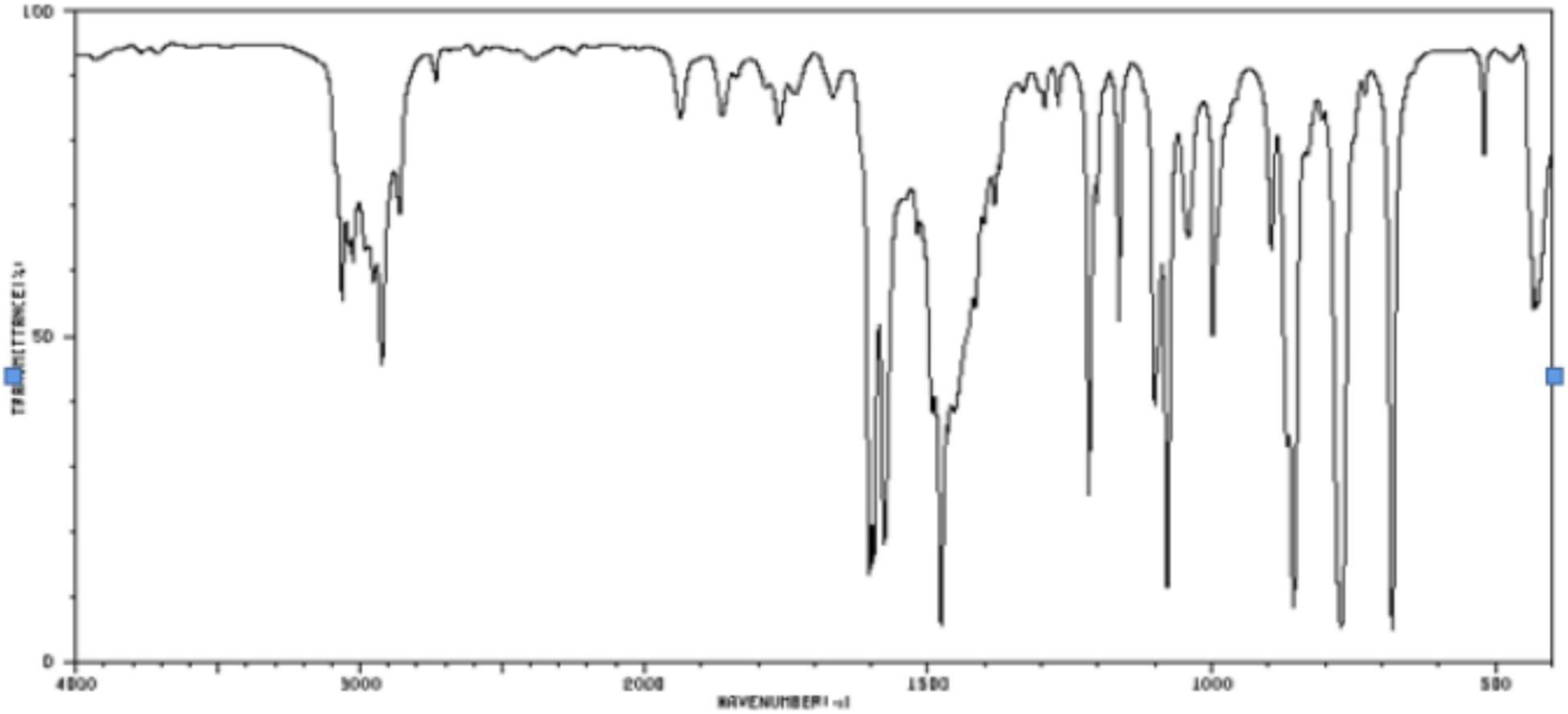
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 22 (Continua):**
- **Espectro 22A:**



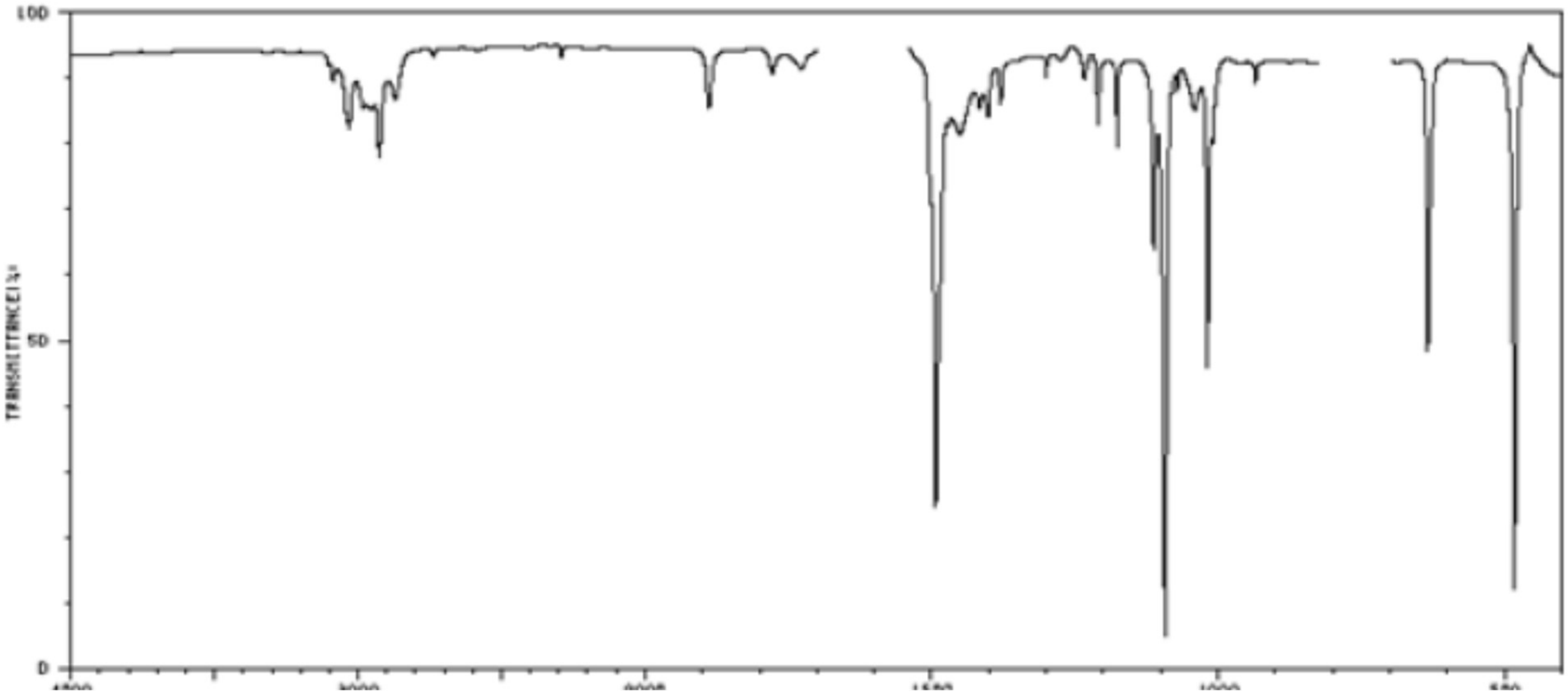
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 22 (Continua):**
- **Espectro 22B:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 22 (Continua):**
- **Espectro 22C:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 22:**
- **Geral:** A banda de absorção acima de **3000cm$^{-1}$** (entre 3000cm$^{-1}$ a 3100cm$^{-1}$) de baixa intensidade é característica de **C-H aromático**. O sinal abaixo de **3000cm$^{-1}$** é característico de **C-H** de $CH_3$. As bandas de absorção entre **2000cm$^{-1}$ e 1667cm$^{-1}$** são característicos de substituição do anel aromático **nas posições (orto, meta ou para).** A banda de absorção correspondente **C=C** do anel ocorre em pares entre **1600cm$^{-1}$ e 1475cm$^{-1}$.** Encontra-se entre **785cm$^{-1}$ a 540cm$^{-1}$** absorção característica da ligação **C-Cl.**

## EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 22 (Continua):**
- **O espectro 2A é o (o-clorotolueno):**
- Para confirmar que é um composto **1,2-dissubstituído** (ou seja substituído na posição **orto)** observa-se também uma banda de absorção característica de média intensidade em.
- Deveria obervar as**680cm$^{-1}$** bandas com formatos característicos na região de **2000cm$^{-1}$ e 1667cm$^{-1}$(Não observada).**

## EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 22 (Continua):**
- **O espectro 2B (m-clorotolueno):**
- Para confirmar que é um composto **1,3-dissubstituído** (ou seja substituído na posição **meta)** observa-se três bandas de absorção, de forte intensidade, características em **860cm$^{-1}$, 780cm$^{-1}$ e 680cm$^{-1}$**.
- Provavelmente também poderá observar as bandas com formatos características de anel **meta substituído** na região de **2000cm$^{-1}$ e 1667cm$^{-1}$**.

## EXERCÍCIOS AE/FT-IR

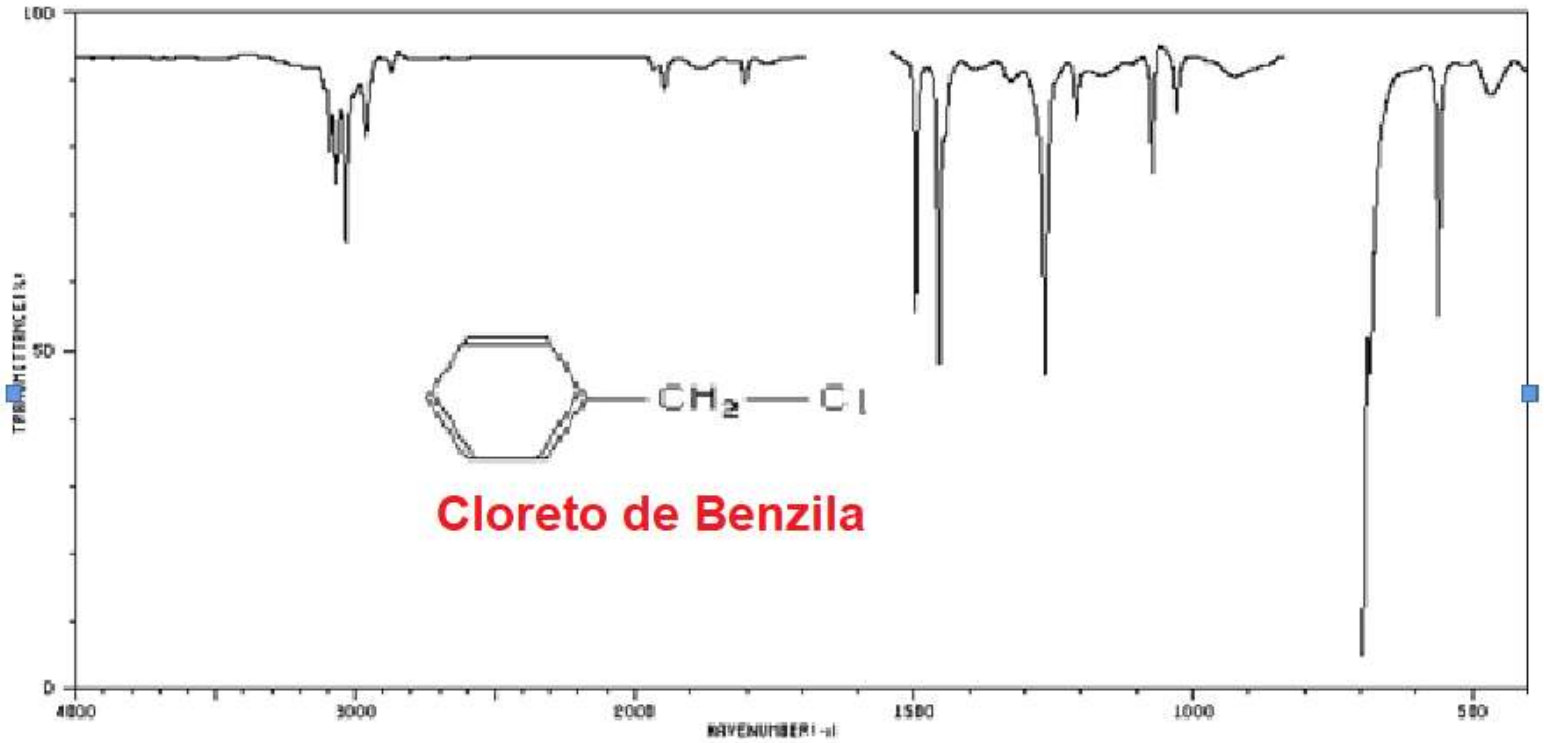
- **Resposta - Exercício 22 (Continua):**
- **Terceiro Espectro (p-clorotolueno):**
- Para confirmar que é um composto **1,4-dissubstituído** (ou seja substituído na posição **para)** observa-se também uma banda de absorção característica, de forte intensidade, em **1100cm$^{-1}$.**
- Provavelmente também poderá observar as bandas com formatos característicos de anéis **para substituidos** na região de **2000cm$^{-1}$ e 1667cm$^{-1}$.**

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 23:** Analise as bandas de absorção de estiramento C=O e estiramento C-Cl nos espectros a seguir. Procure os valores para cada caso.

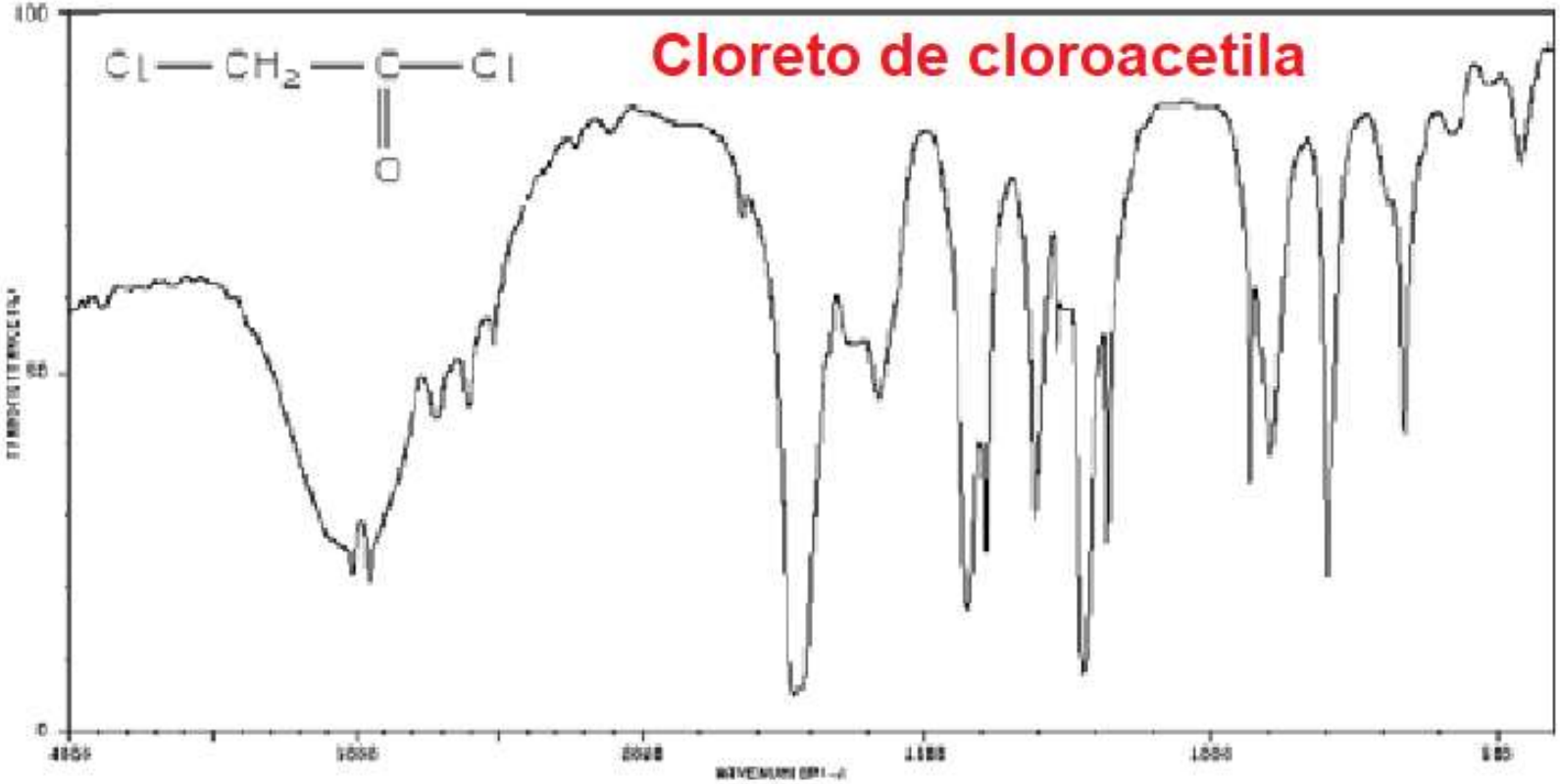
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 23 (Continua):**
- **Espectro 23A:**



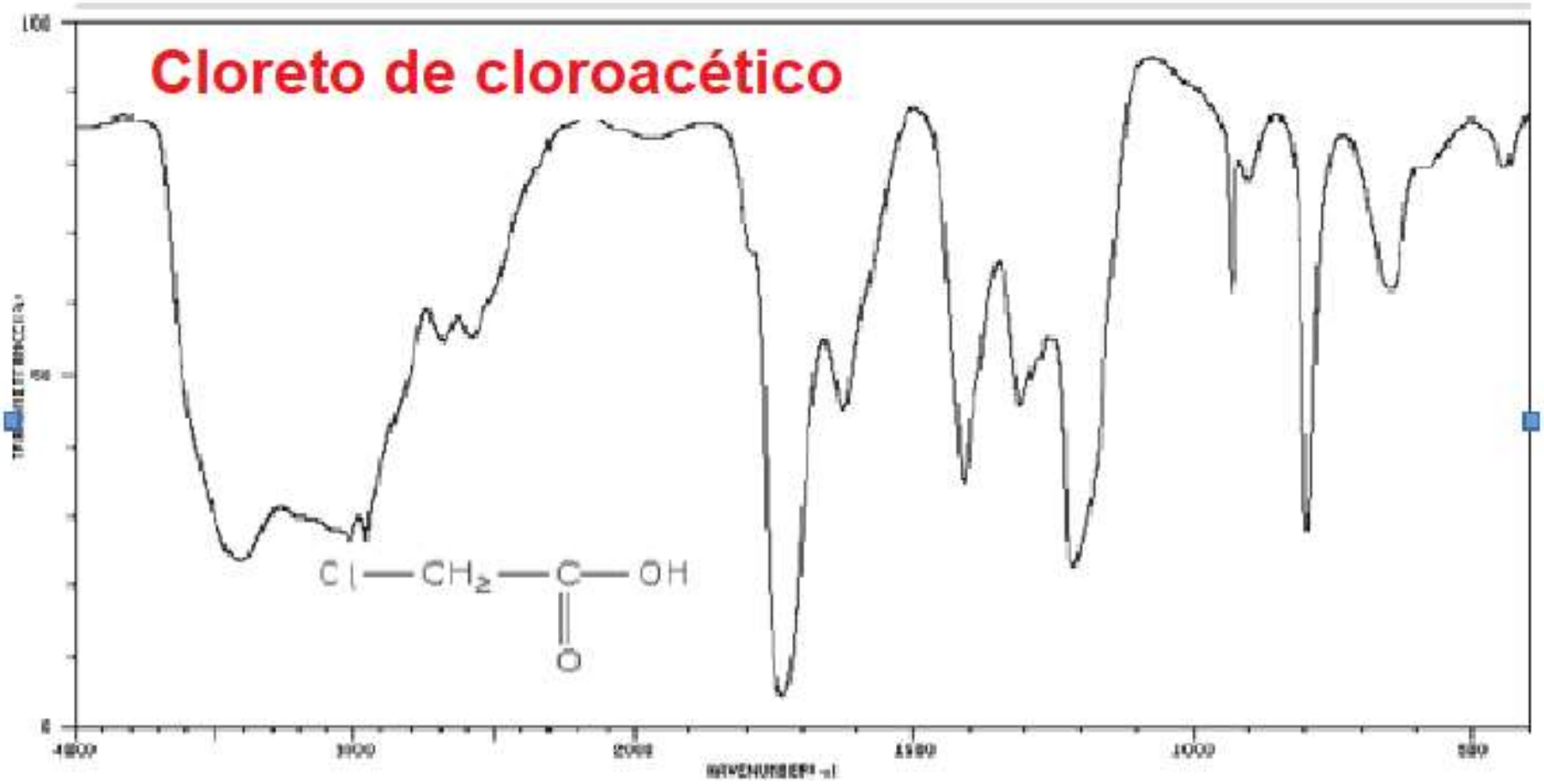
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 23 (Continua):**
- **Espectro 23B:**



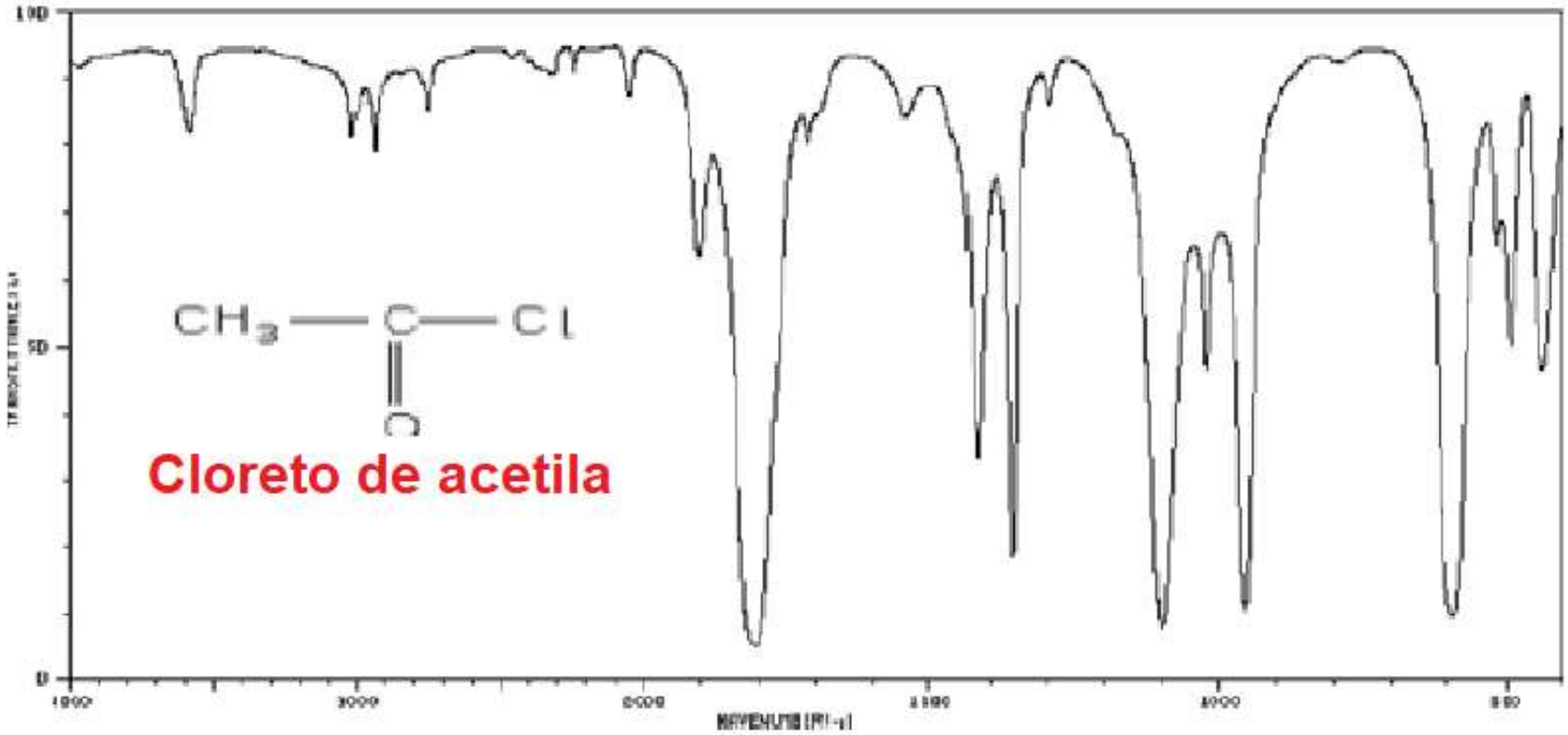
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 23 (Continua):**
- **Espectro 23C:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 23 (Continua):**
- **Espectro 23D:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 23:**
- **Espectro 23A: Cloreto de benzila**
- **C=O** (Não tem carbonila só tem carbono benzílico ligado ao cloro)
- **C-Cl** (Banda de absorção na região de **785cm$^{-1}$ a 540cm$^{-1}$**)

- **Espectro 23B: Cloreto de cloroacetila**
- **C=O** (Banda de forte absorção em aproximadamente em **1725cm$^{-1}$**)
- **C-Cl** (Banda de absorção na região de **785cm$^{-1}$ a 540cm$^{-1}$**)
- **Obs.:** O efeito conhecido como efeito ($\alpha$) do cloro sobre a banda de absorção da carbonila é compensado (neutralizado) pelo outro cloro ligado ao grupo $CH_2$ desse composto (**Ver mais detalhes no espectro 23D).**

## EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 23 (Continua):**
- **Espectro 23C: Cloreto de cloroacético**
- **C=O** (Banda de forte absorção em aproximadamente em 1725cm$^{-1}$)
- **C-Cl** (Banda de absorção na região de **785cm$^{-1}$ a 540cm$^{-1}$**)
- **Obs.:** O efeito conhecido como efeito ($\alpha$) da hidroxila sobre a banda de absorção da carbonila é compensado (neutralizado) pelo cloro ligado ao grupo $CH_2$ desse composto (Ver mais detalhes no item d).

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

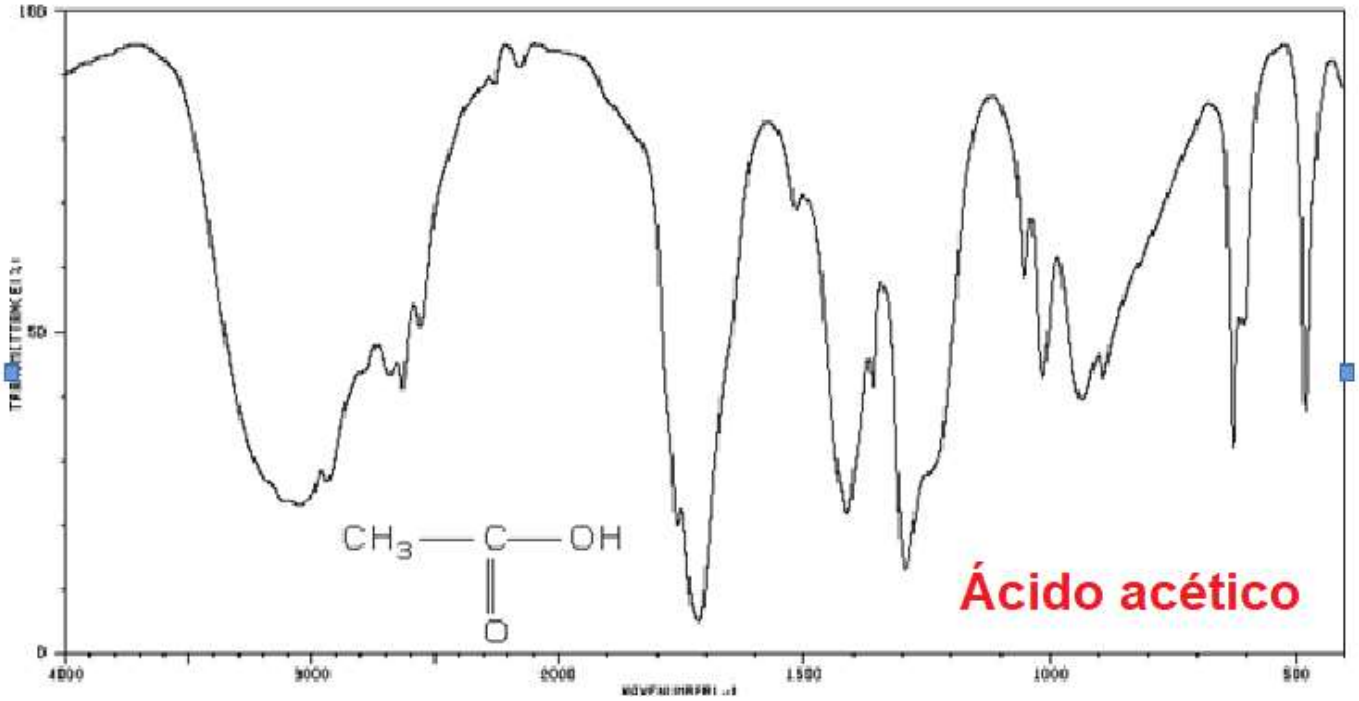
- **Resposta - Exercício 23 (Continua):**
- **Espectro 23: Cloreto de acetila**
- **C=O** Pode-se verificar uma banda de forte absorção (aproximadamente em 1810cm$^{-1}$), em valor bem superior, as carbonilas (C=O) anteriores. Este efeito é conhecido como efeito ($\alpha$) do cloro sobre a banda de absorção da carbonila. O cloro, por ser eletronegativo, possui efeito indutivo suficiente para deslocar a absorção da carbonila para valores superiores.
- **C-Cl** (Banda de absorção na região de 785cm$^{-1}$ a 540cm$^{-1}$)

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 23 (Continua):**
- **Espectro 23D: Cloreto de acetila**
- **Obs.:** É importante conhecer o e**feitos de substituição alfa ($\alpha$):** Quando o carbono **($\alpha$)** próximo a carbonila é substituído por um **cloro (ou outro átomo de halogênio),** a banda de carbonila **muda para uma frequência** mais alta pelo efeito indutivo do cloro. O efeito remove elétrons do carbono da ligação C=O. Essa remoção é compensada por um aperto da ligação (encurtamento), que aumenta a sua constante de força e leva a um aumento na frequência de absorção. Este efeito é válido para todos os compostos carbonílicos.

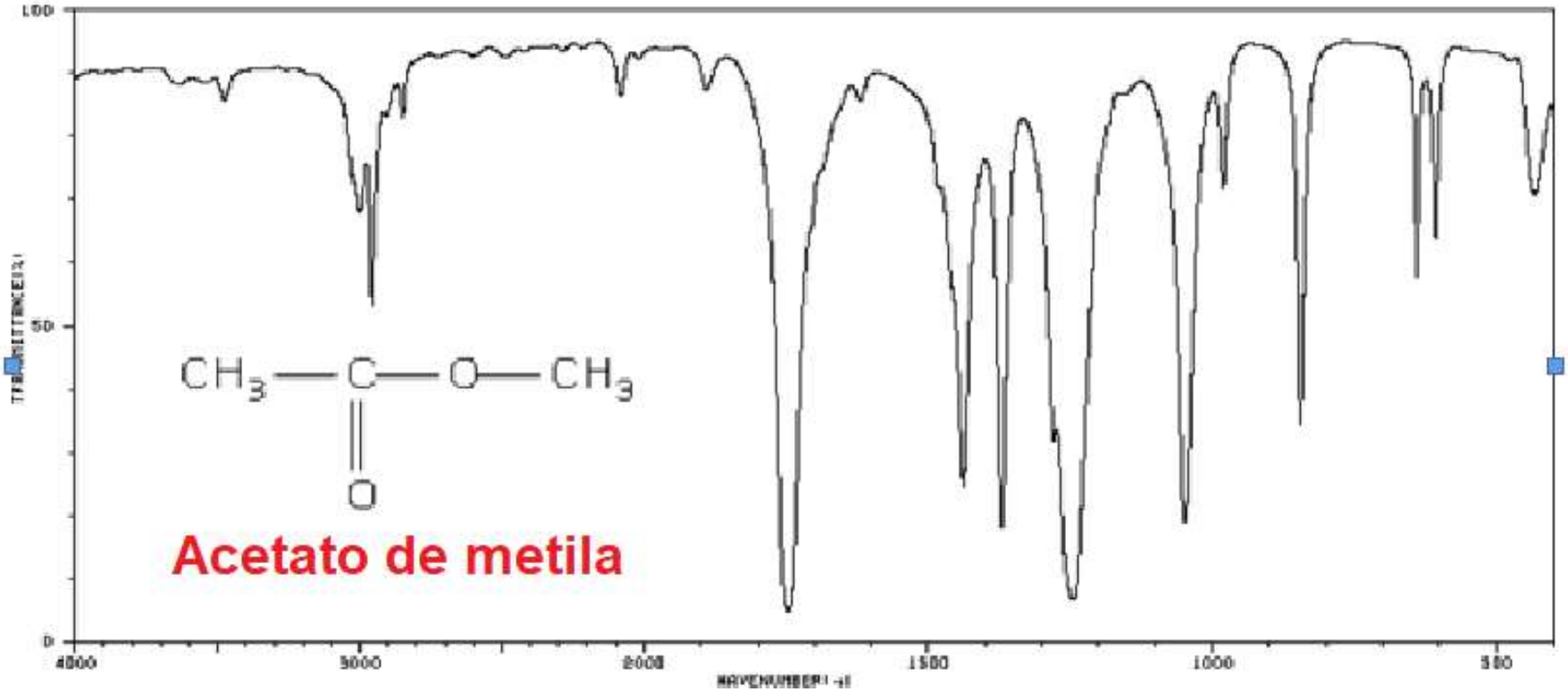
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 24:** Analise as bandas de absorção de estiramento C=O nos compostos abaixo. Procure os valores para cada caso.
- **Espectro 24A:**



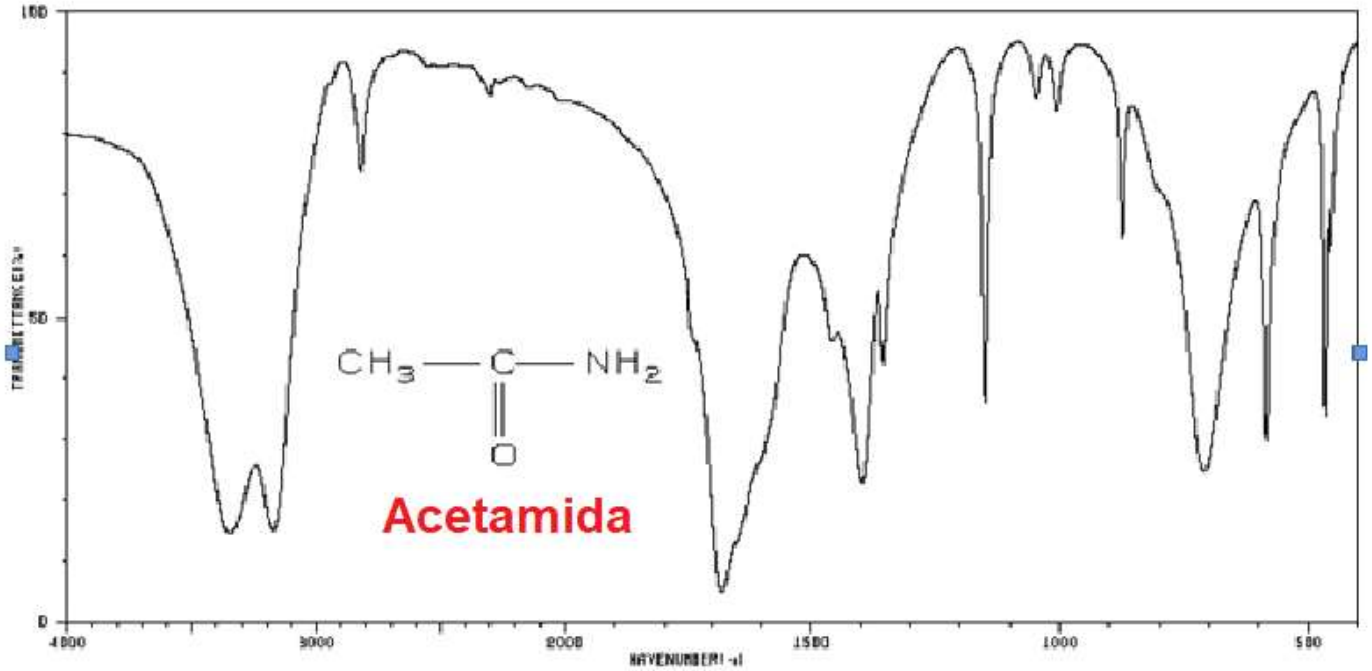
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 24 (Continua):**
- **Espectro 24B:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 24 (Continua):**
- **Espectro 24C:**



## EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 24:**
- **Espectro 24A: Ácido acético**
- Na região de carbonila em **1730cm-1 (entre 1730cm$^{-1}$ a 1700cm$^{-1}$)** observa-se a banda de absorção da carbonila **(C=O)** que apresenta-se como uma banda de estiramento alargada, com um pequeno ombro, que indica ressonância do grupo carboxila. Normalmente é característica vir acompanhada de uma banda muito larga de OH entre 3400cm$^{-1}$ a 2400cm$^{-1}$ sobreposta com bandas de absorções de C-H de $CH_3$.

## EXERCÍCIOS AE/FT-IR

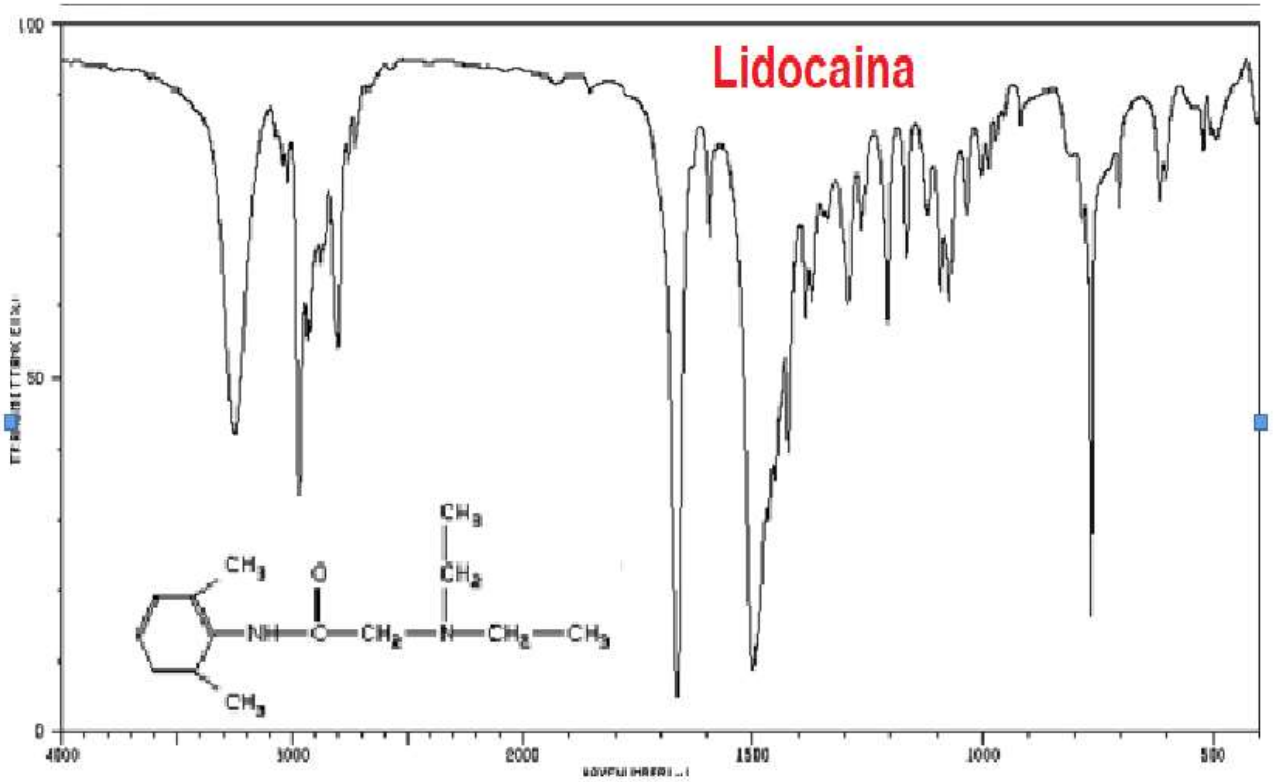
- **Resposta - Exercício 24 (Continua):**
- **Espectro 24B: Acetato de metila**
- A absorção **C=O em 1750cm$^{-1}$**, apresenta-se como uma banda, bem definida, de estiramento na região de **1750cm$^{-1}$ a 1735cm$^{-1}$**. Como complemento apresenta duas bandas de absorção da ligação **C-O** de éster, uma mais forte e alargada que a outra, na região de **1300cm$^{-1}$ a 1000cm$^{-1}$.**

## EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 24 (Continua):**
- **Espectro 24C: Acetamida**
- A absorção em **1680cm$^{-1}$ (entre 1680cm$^{-1}$ a 1630cm$^{-1}$)** ocorre a banda de absorção da carbonila **(C=O)** que apresenta-se como uma banda de estiramento alargada, com um pequeno ombro, que indica ressonância do grupo amida. Normalmente é característica vir acompanhada de banda de absorção de **N-H de $NH_2$** de amidas não substituídas, apresenta-se como duas bandas próximas de **3350cm$^{-1}$ e 3180cm$^{-1}$**.

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 25:** Identifique as principais bandas de absorção no infravermelho da lidocaina. Observe se o espectro abaixo é de base livre ou cloridrato.

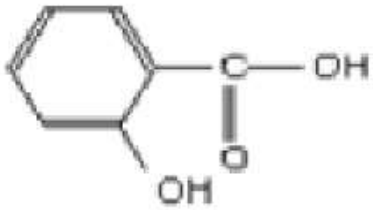


# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

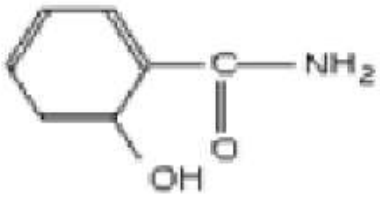
- **Resposta - Exercício 25:**
- A banda de absorção em **3250cm$^{-1}$** é característica de absorção do **N-H** de amida dissubstituída, provavelmente o espectro é de **uma base livre**. A banda **acima de 3000cm$^{-1}$** de muito baixa intensidade é característica de C-H aromático. Absorção **abaixo de 3000** é característica de **C-H** de alifático. A absorção **C=O** da função amida ocorre aproximadamente em **1680cm$^{-1}$ a 1630cm$^{-1}$**. Absorção de **C-N** de aminas alifáticas apresenta-se entre **1250cm$^{-1}$ e 1000cm$^{-1}$**. Uma banda de absorção forte próxima de **750cm$^{-1}$** corresponde ao anel **orto** substituído.

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 26:** Relacione cada uma das estruturas químicas apresentadas abaixo com o espectro infravermelho correspondente. Justifique.



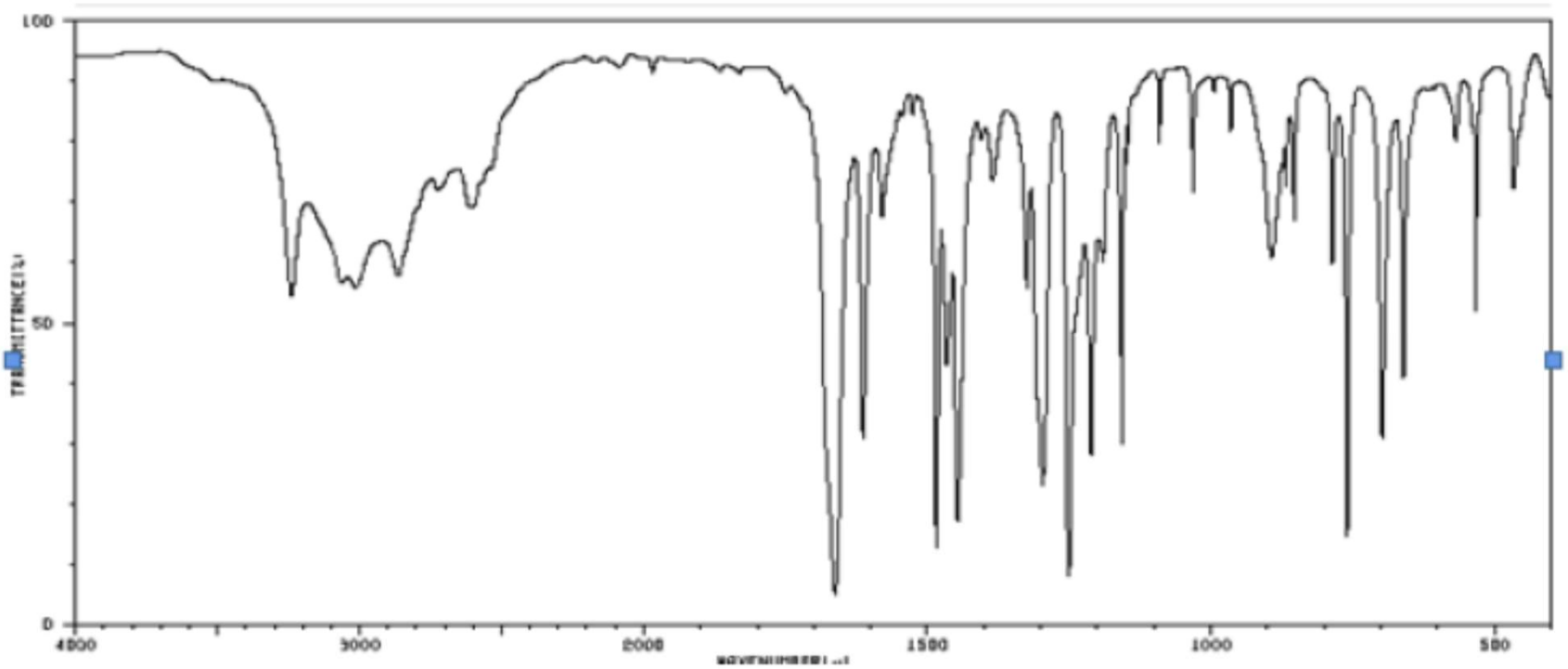

Ácido o-hidroxibenzóico




o-Hidroxibezamida

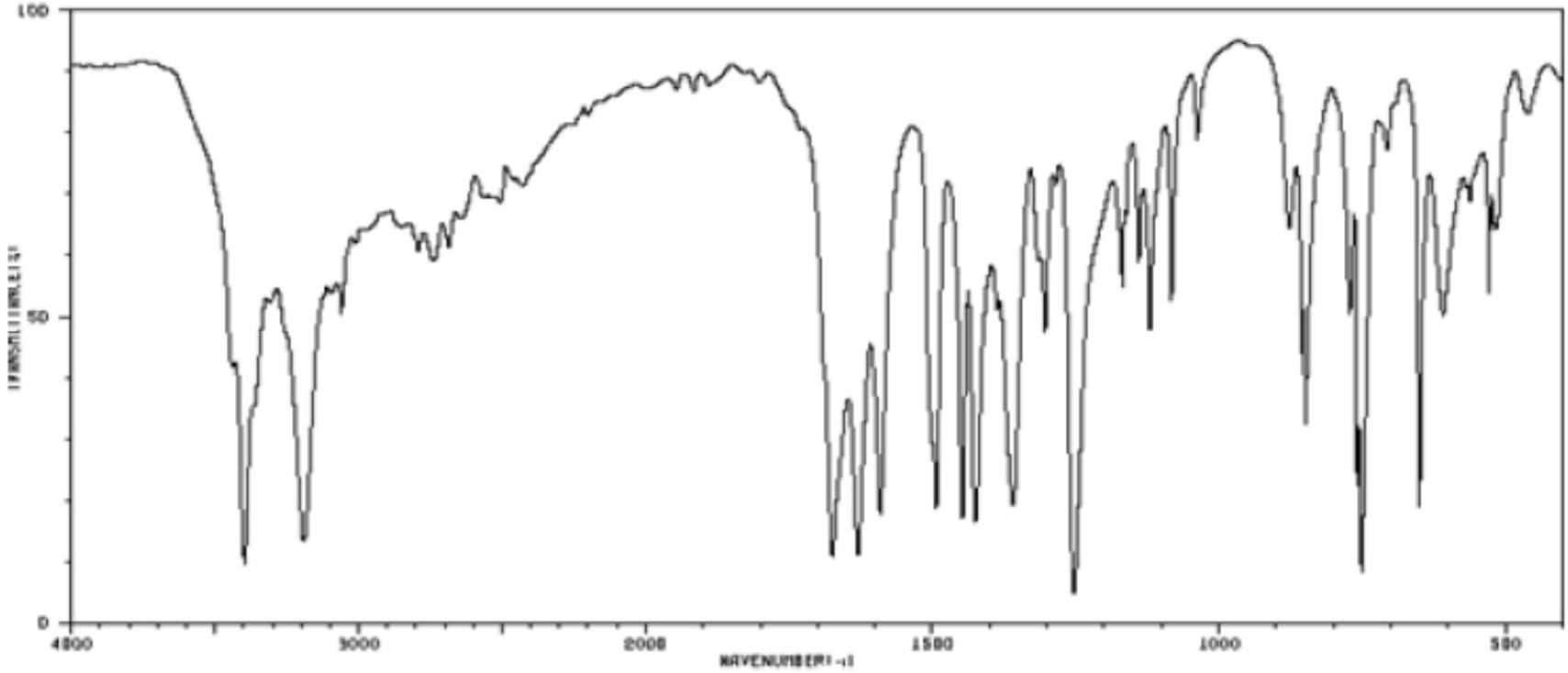
# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 26 (Continua):**
- **Espectro 26A:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Exercício 26 (Continua):**
- **Espectro 26B:**



# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 26:**
- **O Espectro 26A: ácido salicílico (ácido o-hidroxibenzóico)**
- **Justificativa:**
  - A banda larga entre **3400cm$^{-1}$ e 2400cm$^{-1}$** corresponde a absorção de **-O-H** do ácido carboxílico. Nesta região estão sobrepostas as bandas **O-H** (fenol) e **C-H** aromático. Por ser um ácido carboxílico verifica-se uma absorção forte em **1680cm$^{-1}$** característica de carbonila **(C=O)** de ácido. Uma banda de absorção forte próxima de **750cm$^{-1}$** corresponde ao anel orto substituído.

# EXERCÍCIOS AE/FT-IR

- **Resposta - Exercício 26 (continua):**
- **Espectro 26B: Salicilamida (o-hidroxibenxamida)**
- **Justificativa:**

  - Absorção **N-H de $NH_2$** de amidas apresenta-se como duas bandas próximas de **3350cm$^{-1}$ e 3180cm$^{-1}$**. O **O-H** fenólico apresenta-se sobreposto as bandas de **$NH_2$** de amidas onde pode-se observar um pequeno ombro em **3430cm$^{-1}$**. O C-H aromático apresenta absorção próximo de 3100cm$^{-1}$**.** Por ser uma amida verifica-se uma banda de absorção forte em **1680cm$^{-1}$** característica de carbonila **(C=O) da amida**. Absorção forte próxima de **750cm$^{-1}$** corresponde ao anel **orto** substituído.

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

# VAMOS PARA

# A

# 2ªPARTE