

**EXERCÍCIOS**

**EXERCÍCIOS**

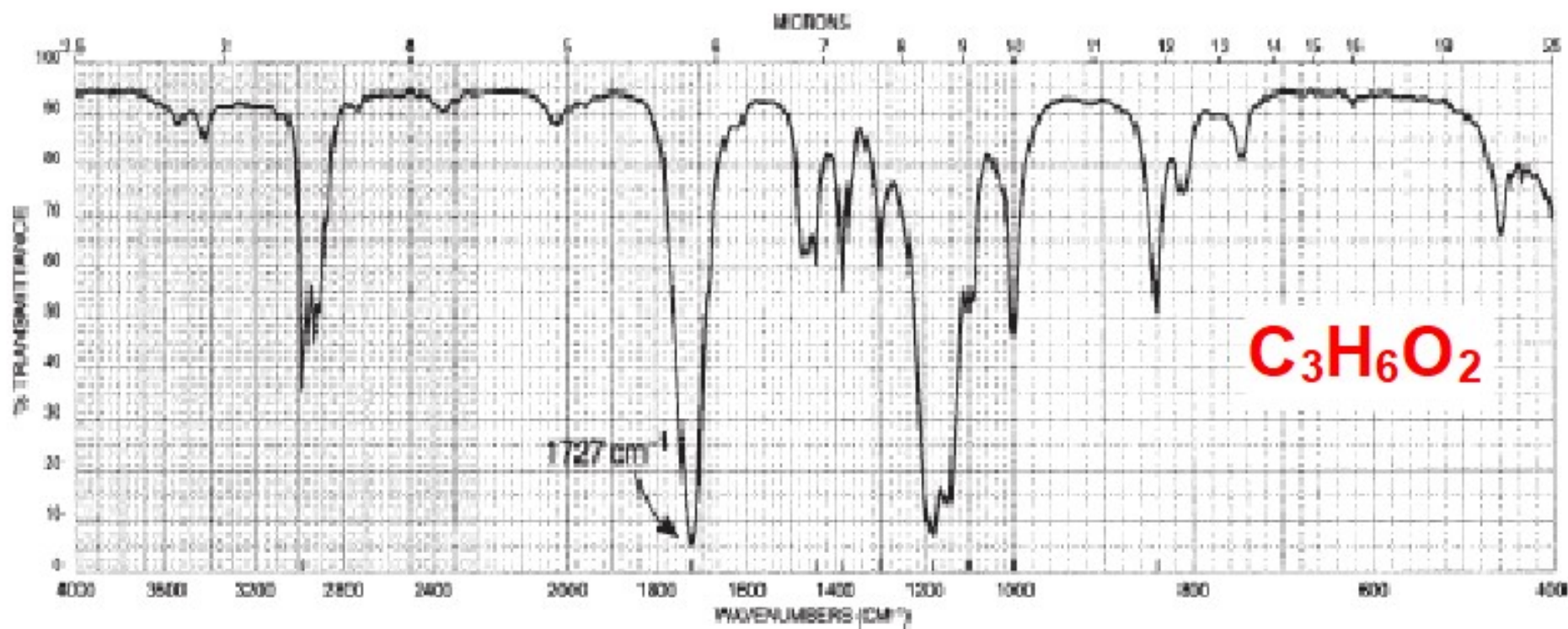
**RMN / FT-IR**

**(2ª Parte)**

**Prof. Dr. Antonio Aarão Serra**

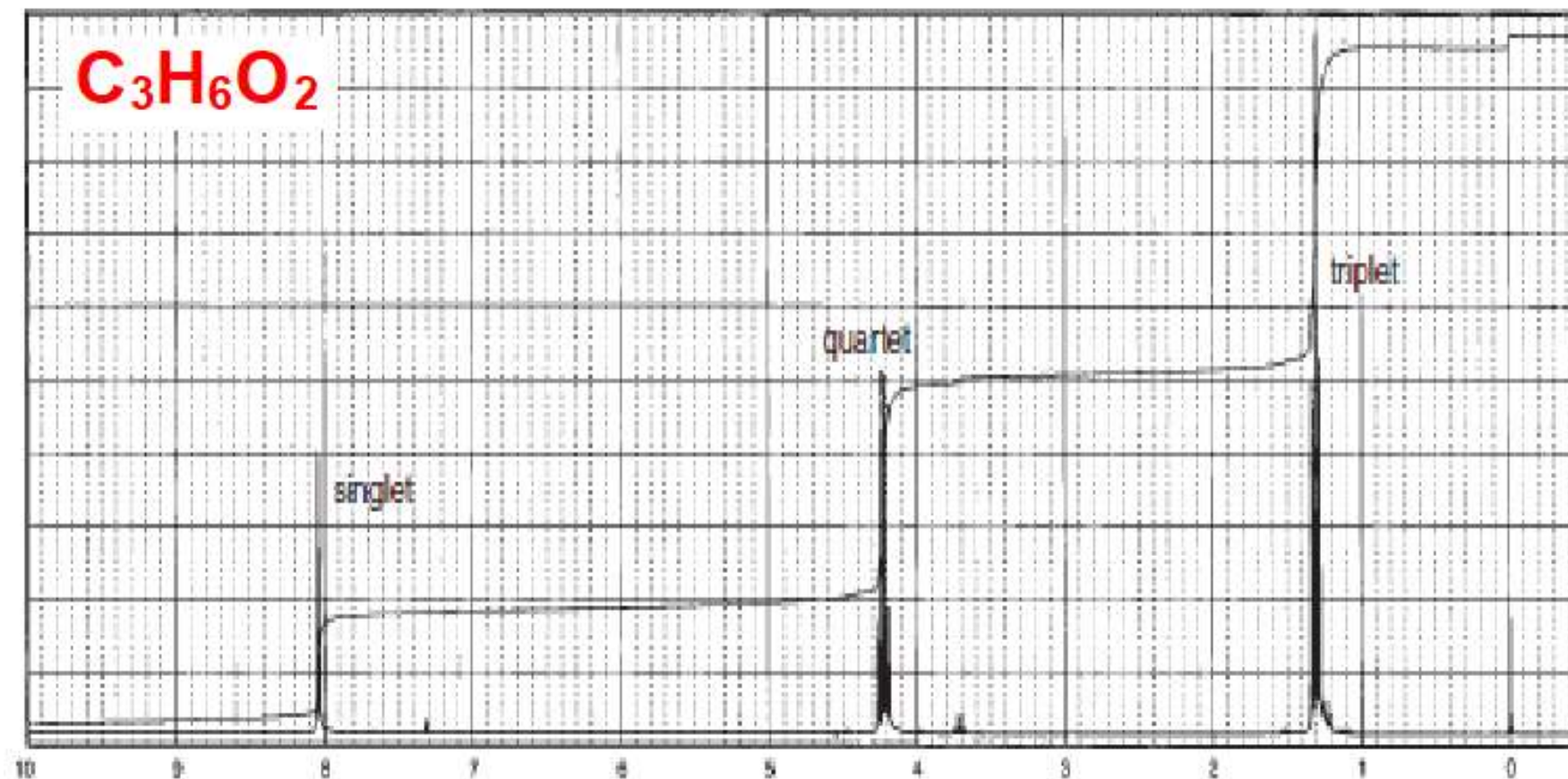
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Exercício 1:** Determine a estrutura do composto a partir de sua Análise Elementar ( $C_2H_9O_2$ ) e de seus espectros: (FT-IR /  $^1H$  RMN /  $^{13}C$  RMN).
- **Exercício 1: (Continua):** Espectro de FT-IR



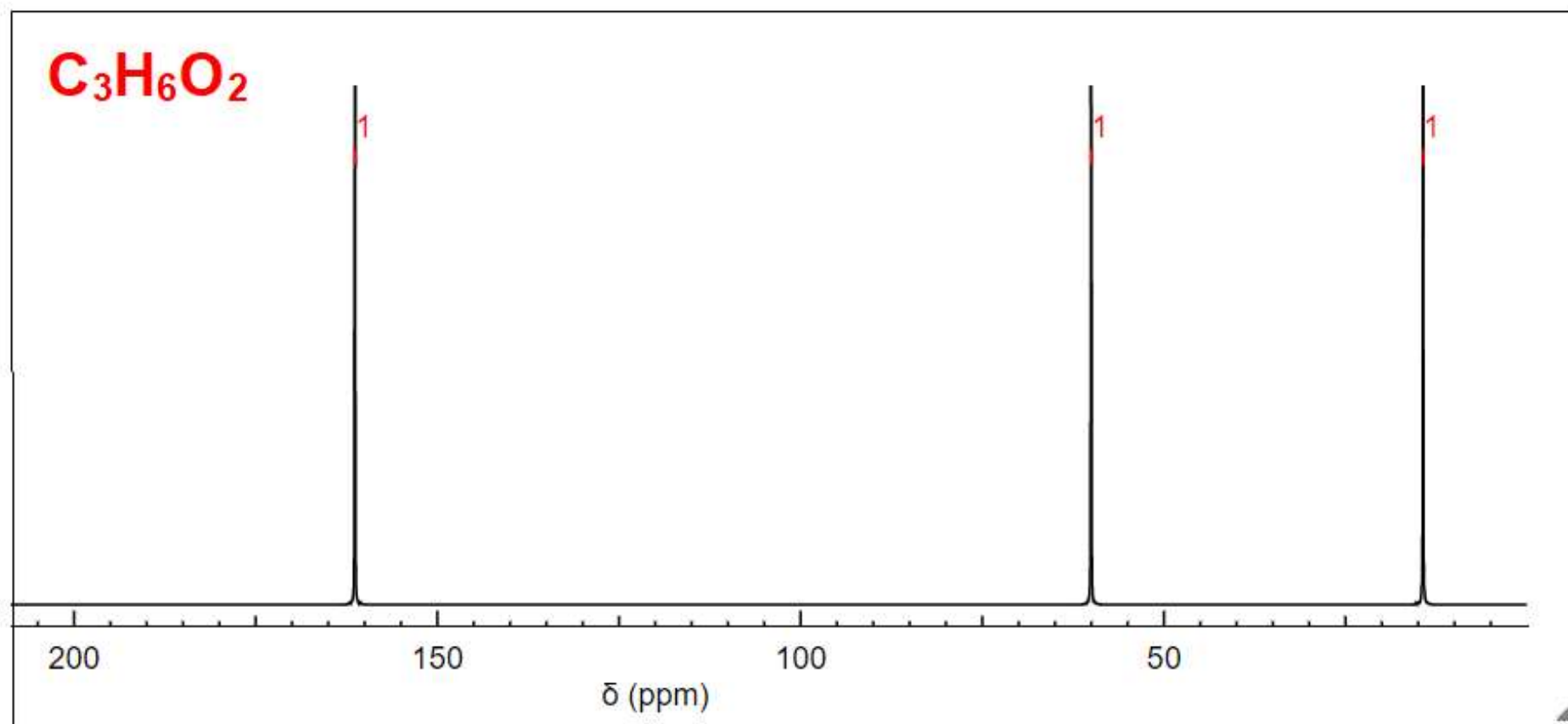
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 1: (Continua): Espectro de  $^1\text{H}$  RMN



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 1: (Continua): Espectro de  $^{13}\text{C}$  RMN:

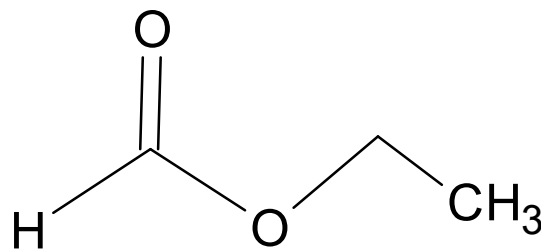


## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 1:** Sabemos AE ( $C_3H_6O_2$ );
- **Calculamos o IDH=1** (Sabemos que tem uma insaturação)
- **FT-IR:** Uma banda de absorção abaixo de  $3000\text{cm}^{-1}$  indica presença de grupo alifático. Uma banda em  $1727\text{cm}^{-1}$  indica uma carbonila. Provavelmente um éster.
  
- **$H^1$  RMN:** Um conjunto de 3 tipos de prótons diferentes.
- O singleto em 8,1ppm indica um próton desprotegido, provavelmente ligado a carbonila.
- O quarteto em 4,3ppm e o tripleto 1,3ppm indica a presença de um sistema  $-OCH_2-CH_3$ .

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

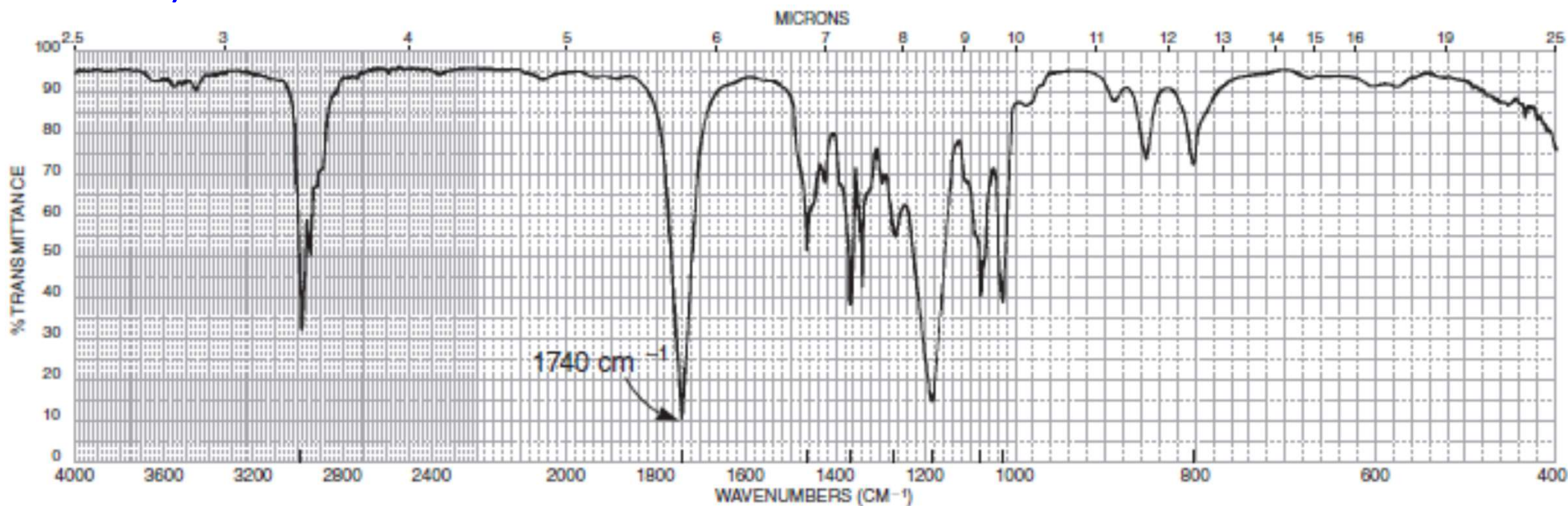
- **Resposta Exercício 1: (Continua)**
- **$^{13}\text{C}$  RMN:** 3 sinais de carbono-13 indica que o composto tem 3 carbonos, um carbono em 175ppm indica uma carbonila. Dois sinais um em 60ppm e outro em 15ppm indicam a presença do sistema  $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ . Provavelmente o composto é o **formato de etila**.



**Formiato de etila**

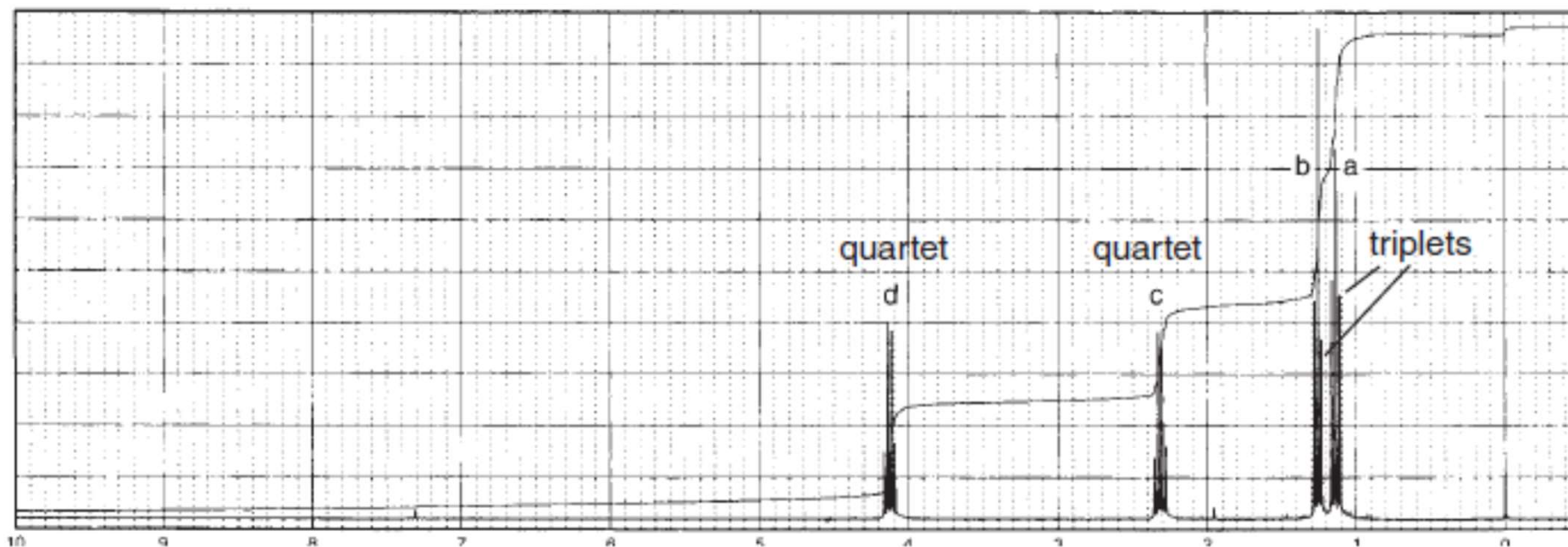
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Exercício 2:** Determine a estrutura do composto que apresenta (**AE =  $C_5H_{10}O_2$** ) os espectros os seguintes espectros: (FT-IR /  $^1H$  RMN /  $^{13}C$  RMN).



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

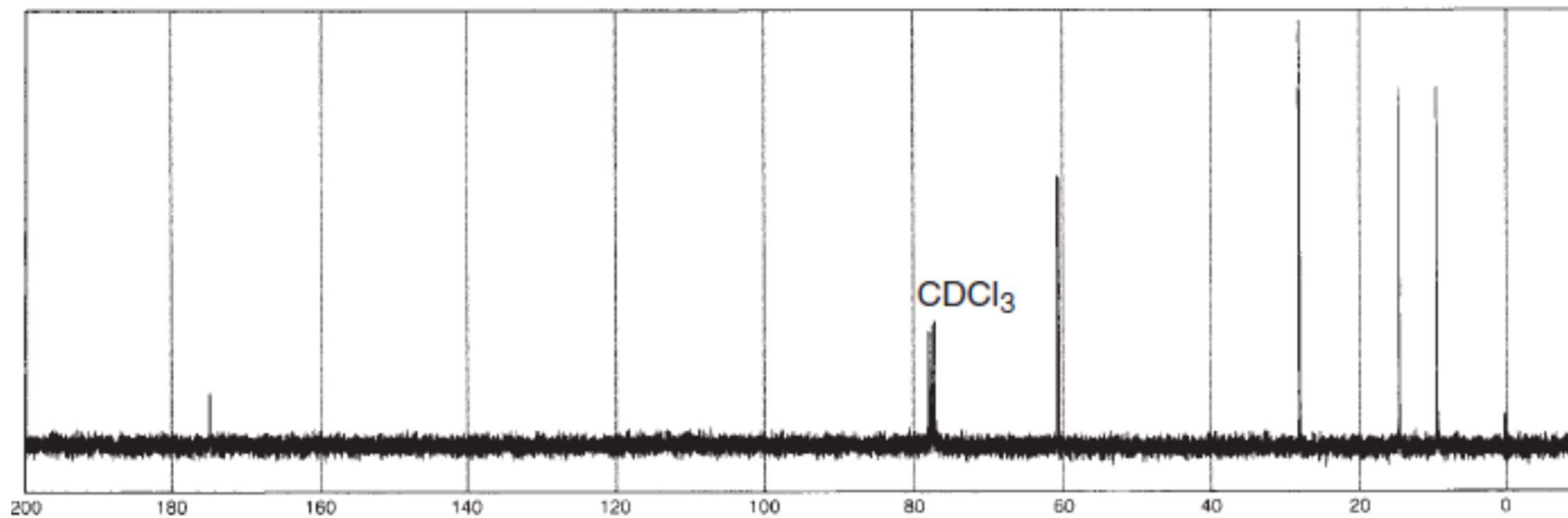
- Exercício 2 (Continua): Espectro de  $^1\text{H}$  RMN:





## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 2 (Continua): Espectro de  $^{13}\text{C}$  RMN:

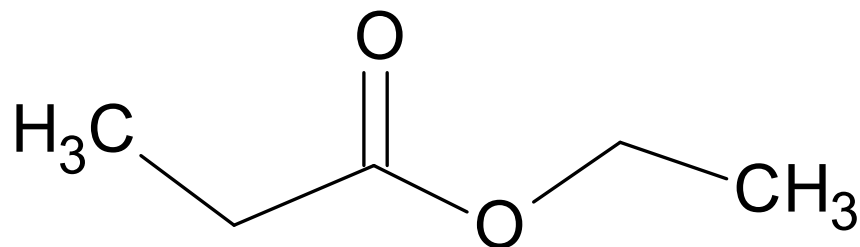


## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 2:** Sabemos que  $C_5H_{10}O_2$  e  $IDH=1$
- O  $IDH=1$  uma insaturação, indica que o composto é alifático.
- **FT-IR:** Encontra-se banda de absorção em  $1740\text{cm}^{-1}$  que indica a presença de carbonila de éster. Encontra-se bandas de absorção abaixo de  $3000\text{cm}^{-1}$  que indica que o composto é alifático.
- **$^1\text{H}$  RMN:** As integrais mostram uma proporção (2:2:3:3) indica sistema a presença de sistema  $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ . Dois quarteto e dois tripleto indica a presença de grupos  $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ . Dois quartetos um em 4,2ppm indica o  $\text{CH}_2$  perto da carbonila ( $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{C}=\text{O}$ ) e o outro quarteto em 2,4 indica que o  $\text{CH}_2$  perto do oxigênio ( $\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{O}$ ). Com sabemos que é um éster e tem o grupo  $\text{CH}_3\text{CH}_2-$ , pudemos propor a molécula do **etanoato de etila**, que satisfaz plenamente o espectro.

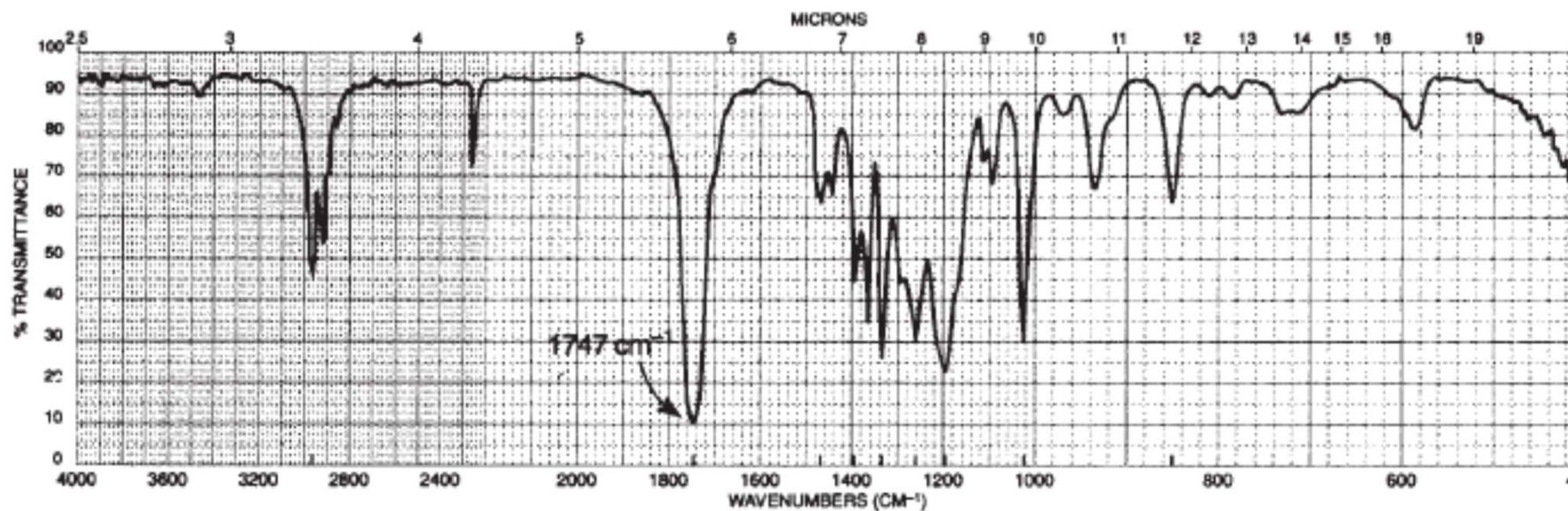
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 2 (Continua):**
- **$^{13}\text{H}$  RMN:** os cinco sinais indicam que o composto tem 5 carbonos, o sinal em 174ppm indica a presença de uma carbonila (C=O), provavelmente de éster.
- **Chegamos a conclusão que o composto provavelmente é o etanoato de etila.**



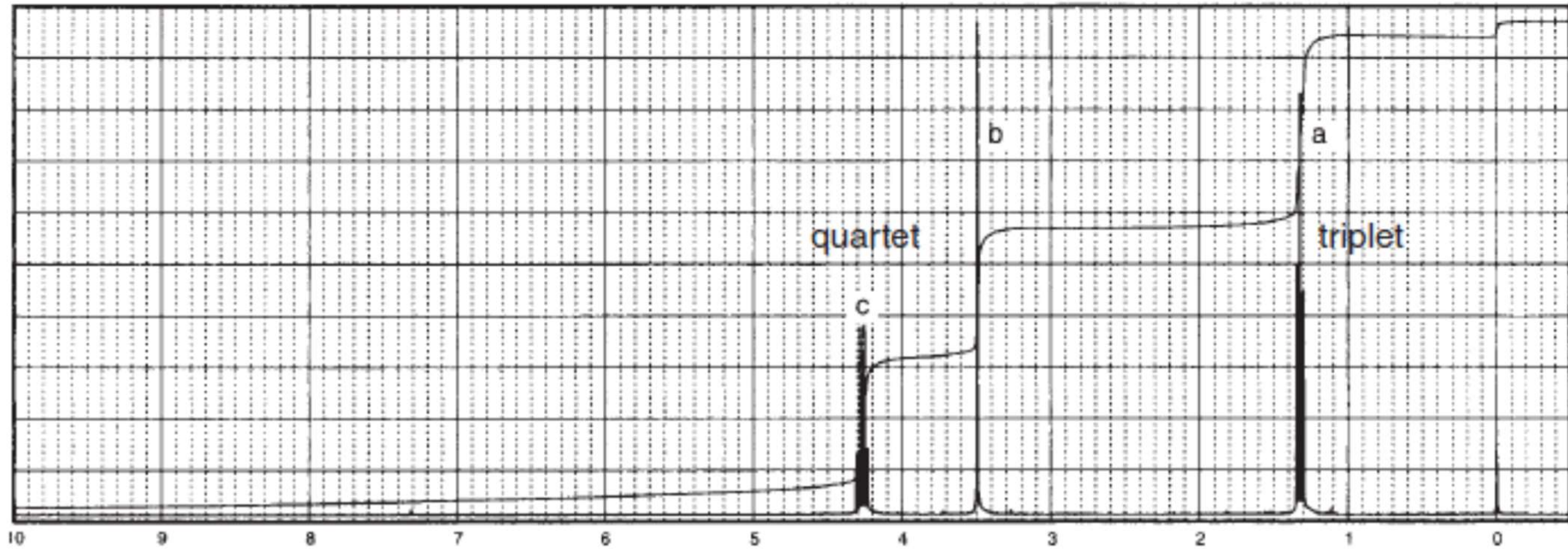
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Exercício 3:** Determine a estrutura do composto que tem a fórmula molecular  $C_5H_7NO_2$  e seus espectros são (FT-IR /  $^1H$  RMN /  $^{13}C$  RMN).
- **Exercício 3: Espectro de FT-IR**



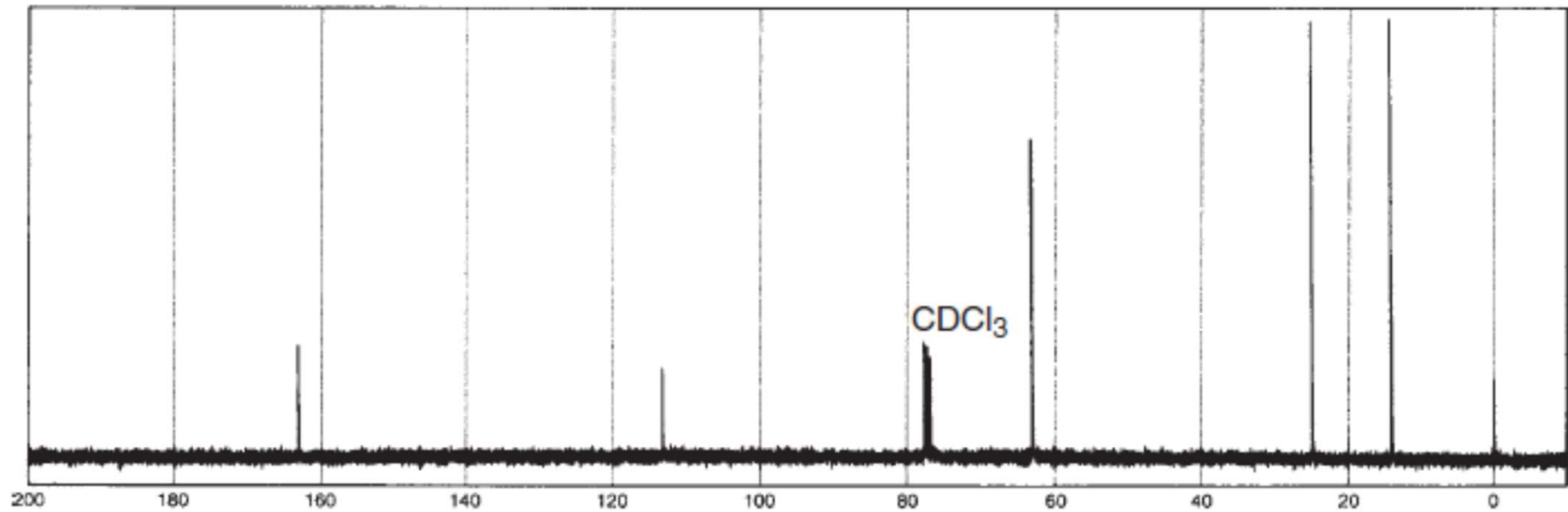
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 3 (Continua) Espectro de  $^1\text{H}$  RMN:



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 3 (Continua) Espectro de  $^{13}\text{C}$  RMN:

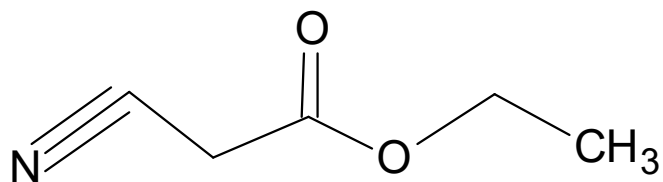


## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 3:** Sabemos que a fórmula  $C_5H_7NO_2$  e o IDH= 3.
- **FT-IR:** Existe uma banda de absorção de éster em  $1747\text{cm}^{-1}$ , Existe mais duas insaturações, provavelmente por uma tripla ligação ( $C\equiv C$ ) ou ( $C\equiv N$ ). Comprovamos a presença da absorção da tripla ligação em  $2260\text{cm}^{-1}$ . Observa-se também bandas absorções C-H alifático abaixo de  $300\text{cm}^{-1}$ .
- **$^1\text{H}$  RMN:** Existe três tipos de prótons diferentes. Um quarteto e um tripleto, característico de grupo  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}$ , respectivamente em 4,3ppm e 1,3ppm. Um singleto em 3,5ppm indica um grupo metileno ( $-\text{CH}_2\text{-}$ ) sem prótons como vizinho..

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 3 (Continua):**
- **$^{13}\text{C}$  RMN:** O sinal do grupo **carbonila (C=O)** aparece em **163ppm**, o sinal do grupo nitrila (C $\equiv$ N) aparece em 113ppm. O sinal em do CH<sub>2</sub> perto da carbonila aparece 63ppm. Os dois sinais em 25ppm e 14ppm são atribuídos respectivamente ao grupo metileno e metila da molécula. Baseado nos dados propomos a molécula do **cianoacetato de etila**.

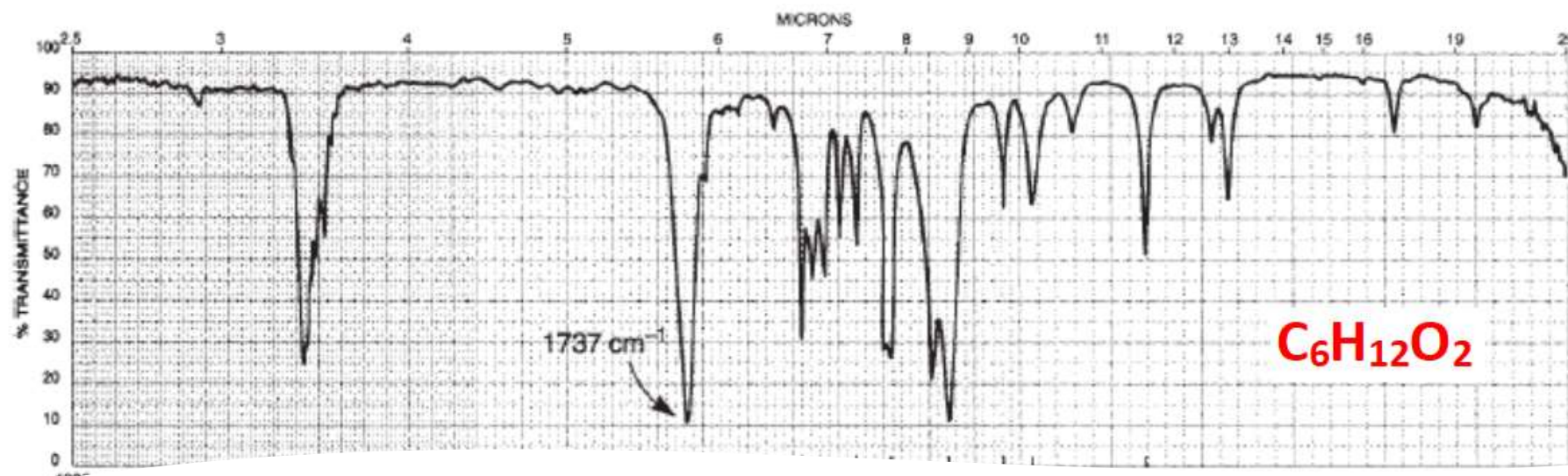


**CIANOACETATO DE ETILA**



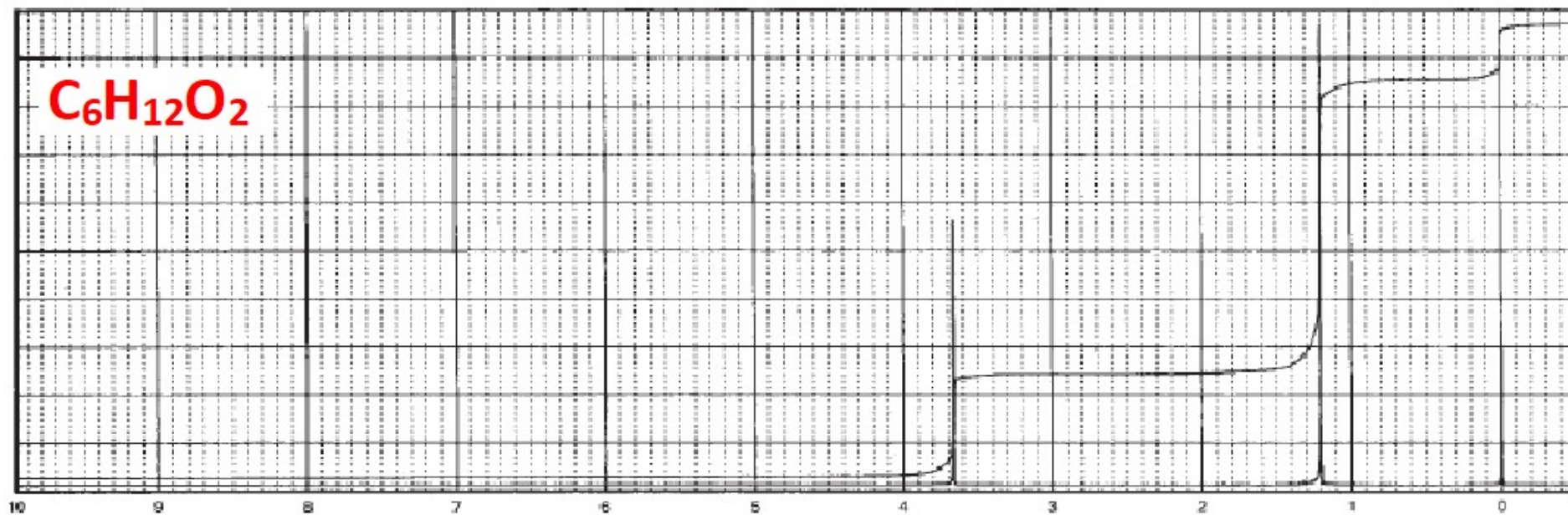
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Exercício 4:** Determine a estrutura do composto que tem a fórmula molecular  $C_6H_{12}O_2$  e seus espectros são (FT-IR /  $^1H$  RMN /  $^{13}C$  RMN).
- **Exercício 15:** Espectro de FT-IR



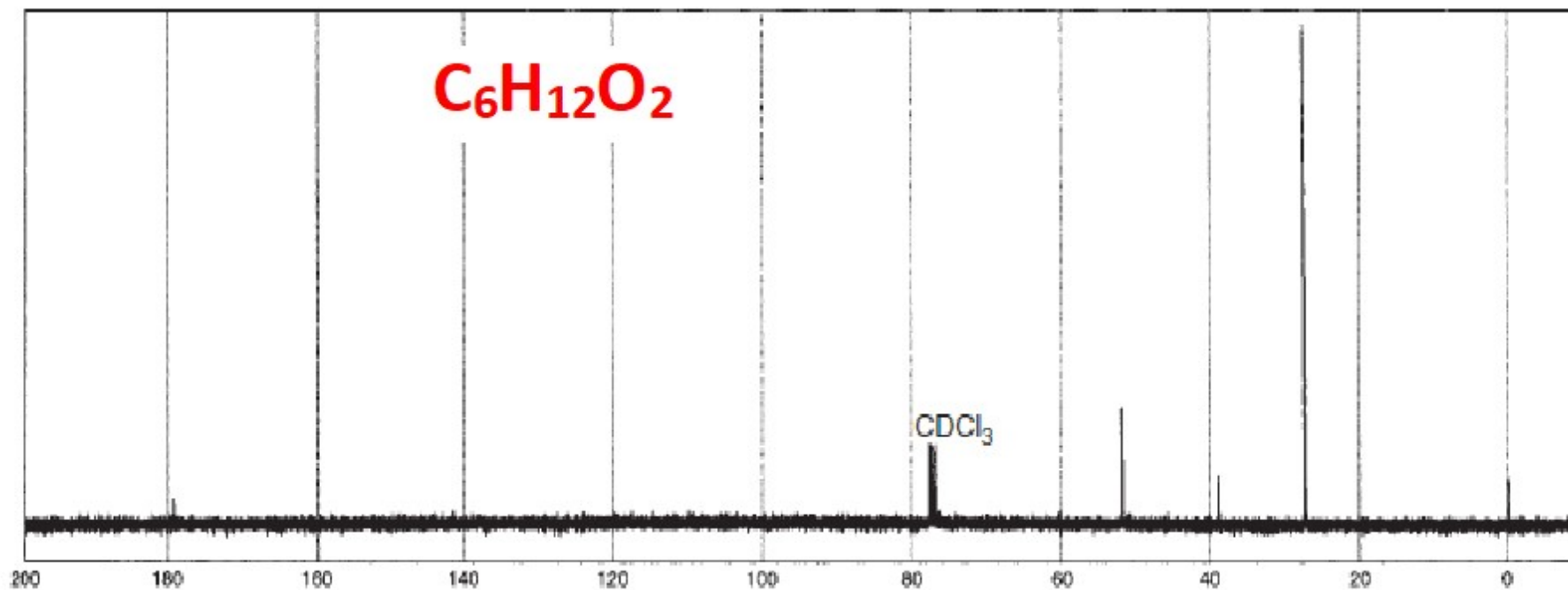
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 4 (Continua): Espectro de  $^1\text{H}$  RMN:



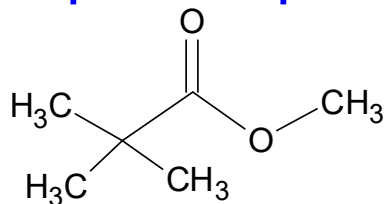
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 4 (Continua): Espectro de  $^{13}\text{C}$  RMN:

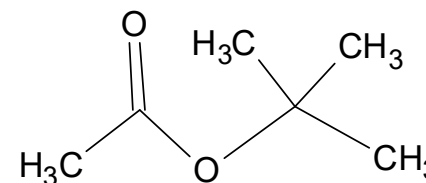


## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 4:** Sabemos que a fórmula  $C_6H_{12}O_2$  e o IDH= 1.
- **FT-IR:** Existe uma banda de absorção de **éster em  $1735cm^{-1}$** . Absorções características de **C-H** alifático abaixo de  **$3000cm^{-1}$** .
- **$^1H$  RMN:** Existem somente dois grupos de prótons e pela integral, suas proporções são: **(3 : 9)**. Poderíamos pensar em dois ésteres: Verificamos que o sinal com 9 prótons ( $3CH_3$ ) está em 1,2ppm, o que indica que esta ligado a carbonila, portanto o espectro provavelmente é o 2,2-dimetil propanoato de etila.



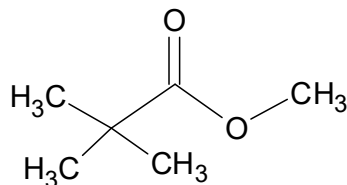
**2,2-dimetil propanoato  
de etila**



**Acetato de trimetila**

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

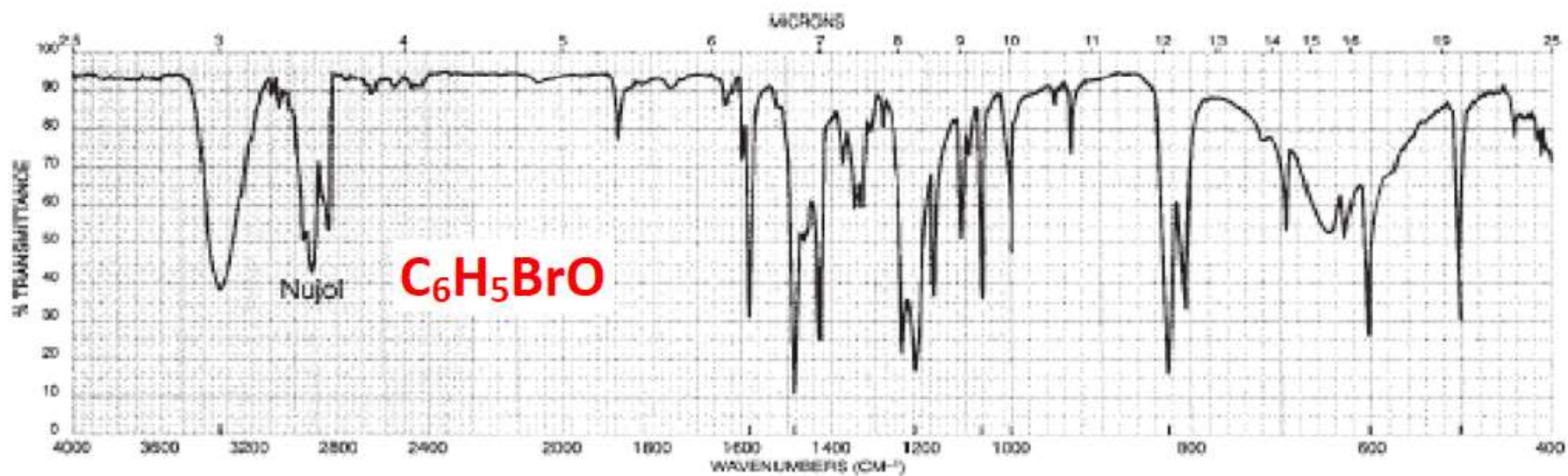
- **Resposta Exercício 4 (Continua):**
- **$^{13}\text{C}$  RMN:** Existem 4 sinais referentes aos 4 diferentes tipos de carbono da molécula proposta. O pico em 179ppm é referente ao carbônio da carbonila do éster. O pico em 46ppm indica o carbono tetrassubstituído ( $-\text{C}(\text{CH}_3)_3$ ). O pico em 39ppm é do carbono do  $-\text{O}-\text{CH}_3$  do éster metílico. O pico em 23ppm são dos carbonos dos três grupos metila ( $-\text{C}(\text{CH}_3)_3$ ).
- Provavelmente o éster é o 2,2-dimetil propanoato de metila



**2,2-dimetil propanoato  
de metila**

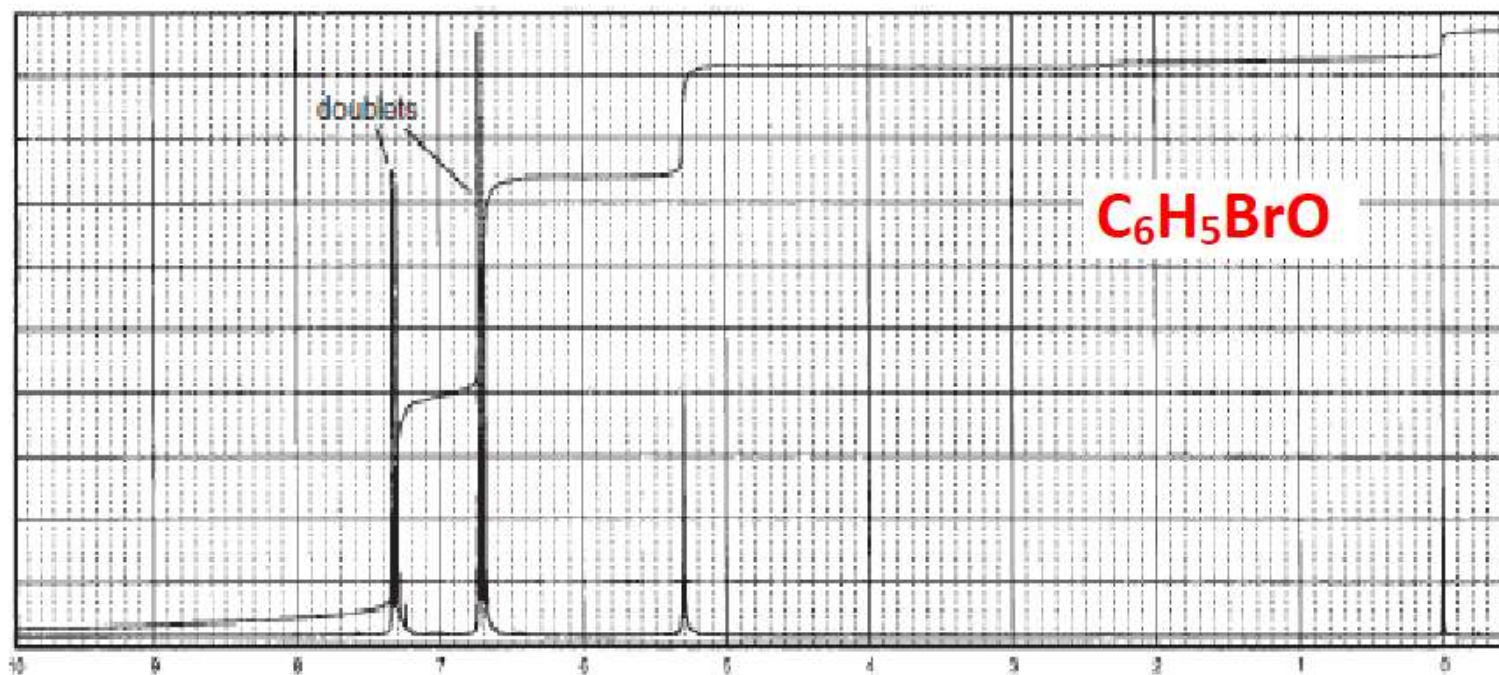
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Exercício 5:** Determine a estrutura do composto que tem a fórmula molecular  $C_6H_5BrO$  e seus espectros são (FT-IR /  $^1H$  RMN /  $^{13}C$  RMN).
- **Exercício 5:** Espectro de FT-IR



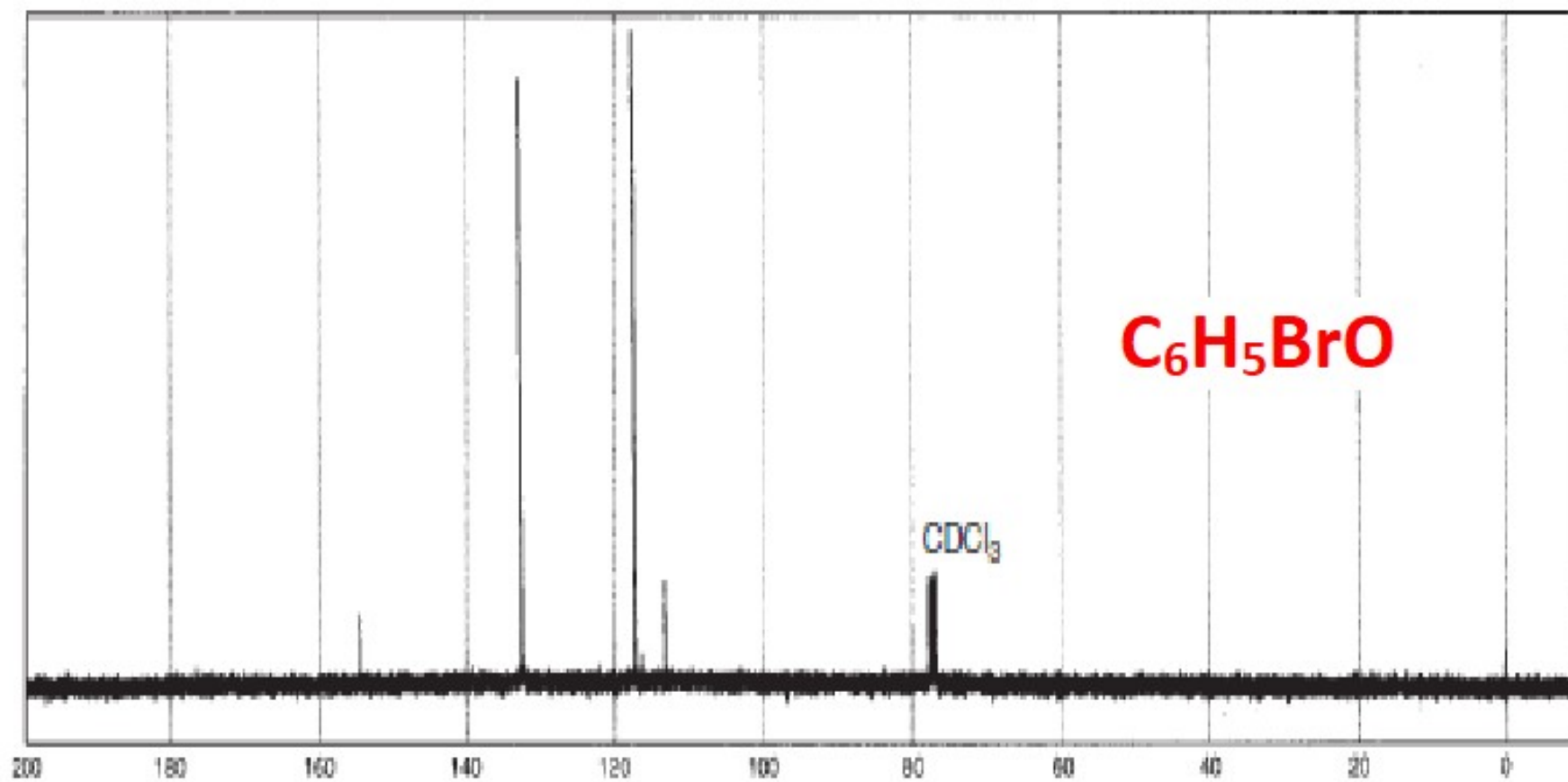
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 5 (Continua): Espectro de  $^1\text{H}$  RMN



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 5 (Continua): Espectro de  $^{13}\text{C}$  RMN



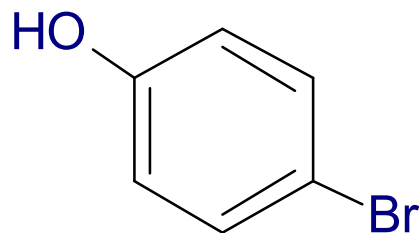


## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 5:** Sabemos que a fórmula  $C_6H_5BrO$  e o IDH= 4 (Provavelmente é um anel aromático)
- **FT-IR:** Existe uma banda de absorção em  $3300\text{cm}^{-1}$  característica de  $-OH$  provavelmente é um fenol. O solvente do espectro é **nujol** o que dificulta observar bandas de C-H (aromático e alifático).
- **$^1H$  RMN:** Existem 3 tipos diferentes de sinais de prótons. O que nos indica uma certa simetria na molécula. Então somente pode ser o **bromo** na posição **para** do fenol. Podemos propor o composto **p-bromofenol**. Os **dois prótons** do anel aromático vizinhos da hidroxila (duplete) caem em **7,3ppm (duplete)** e os outros **dois prótons** vizinhos do bromo (duplete) caem em **6,7ppm (duplete)**, e o próton da hidroxila (**singleto**) cai em **6,3ppm**. Confirmando a estrutura.

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

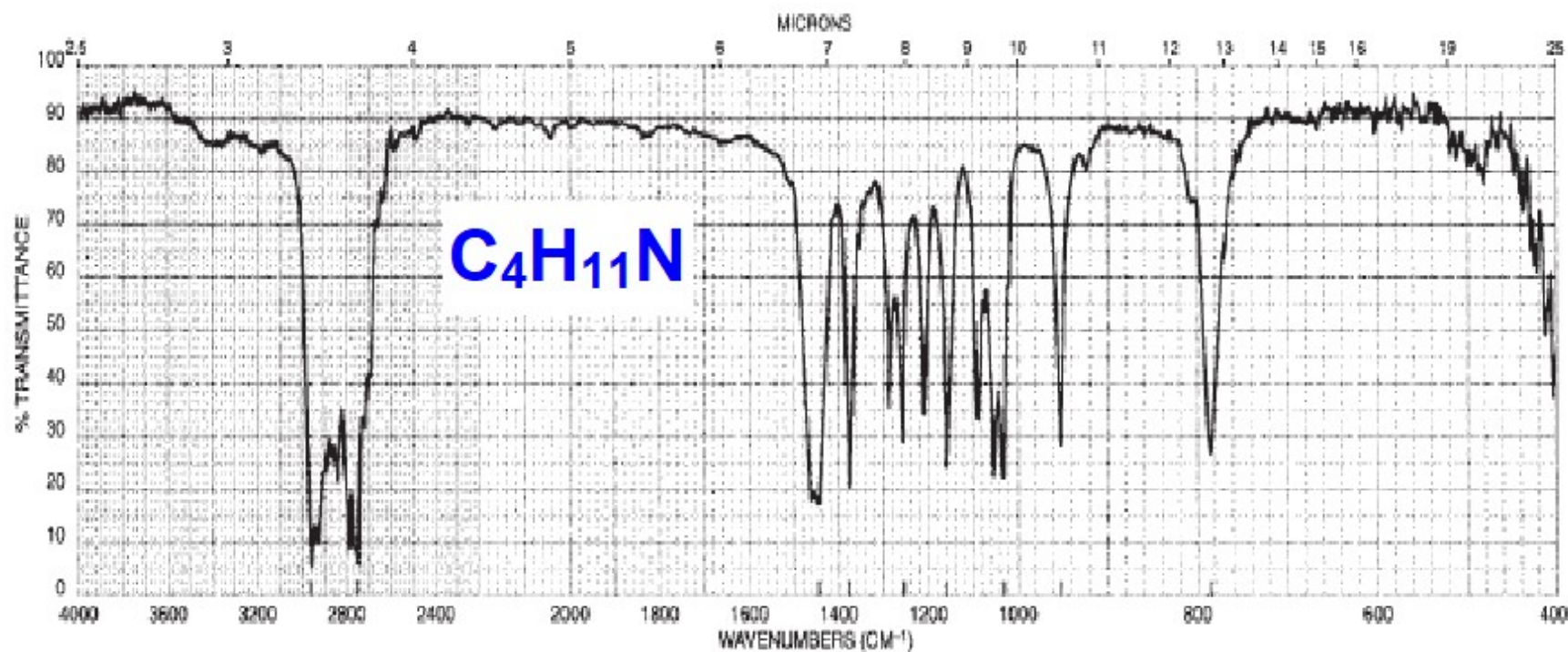
- Resposta Exercício 5 (Continua):
- $^{13}\text{C}$  RMN: Existem **4 diferentes tipos de carbono**. O primeiro sinal em **155ppm** (mais desprotegido), que provavelmente é o carbono ligado a hidroxila. O segundo sinal em 135ppm que corresponde aos dois carbonos mais próximos da hidroxila. O terceiro sinal em 118ppm que corresponde aos dois carbonos mais próximos do bromo. O quarto sinal em 115ppm (menos desprotegido) que corresponde ao carbono ligado no bromo.



**p-Bromofenol**

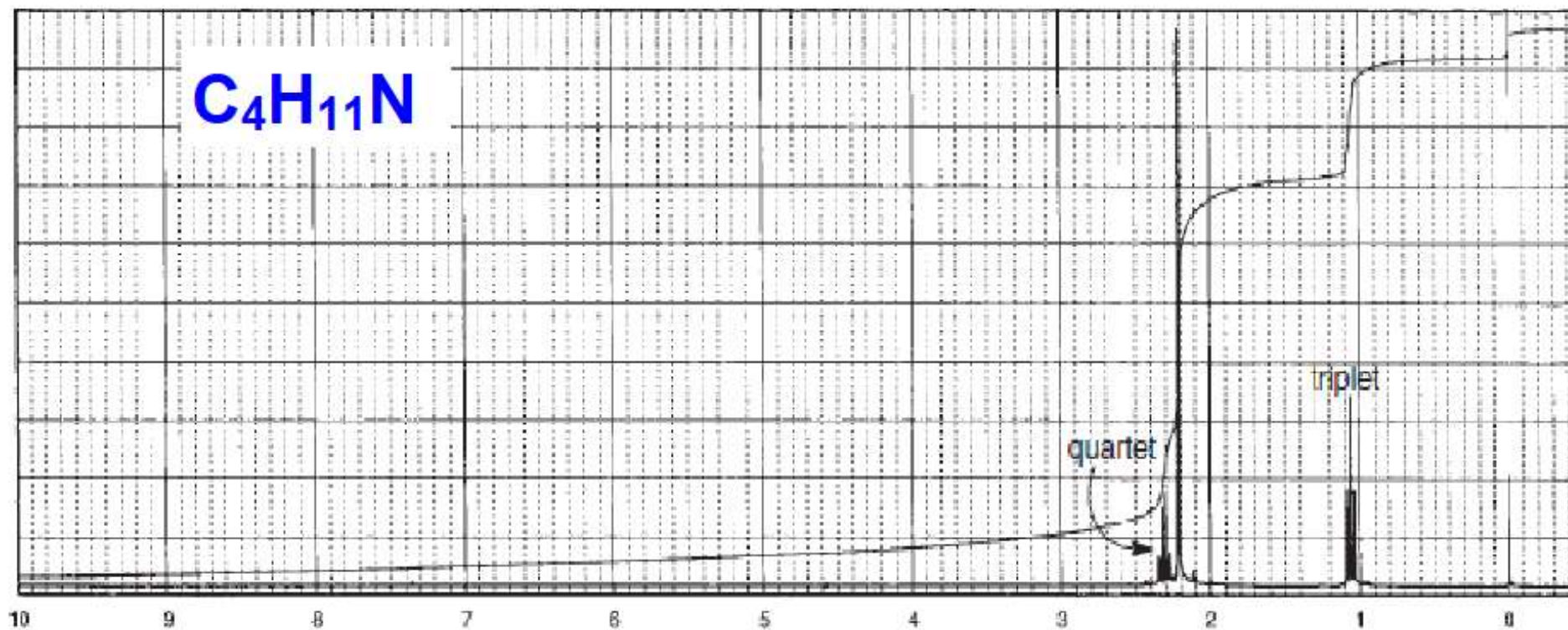
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Exercício 6:** Determine a estrutura do composto que tem a fórmula molecular  $C_4H_{11}N$  e seus espectros são (FT-IR /  $^1H$  RMN /  $^{13}C$  RMN).
- **Exercício 6:** Espectro de FT-IR



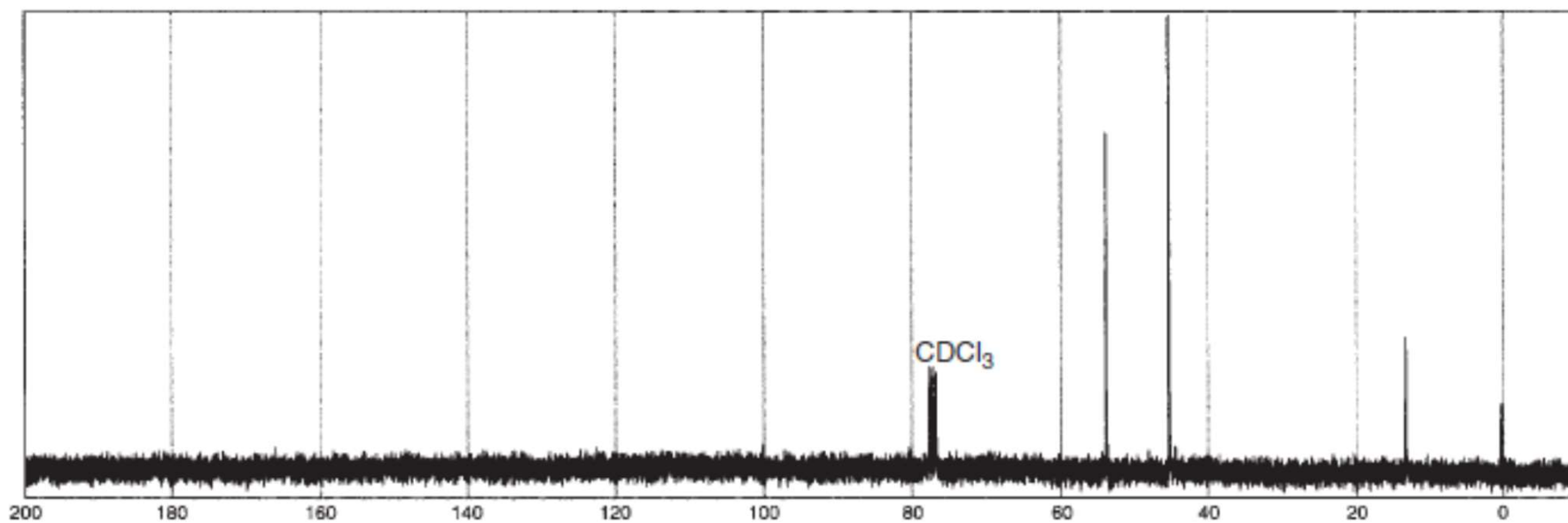
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 6 (Continua) Espectro de  $^1\text{H}$  RMN:



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 6 (Continua) Espectro de  $^{13}\text{C}$  RMN:

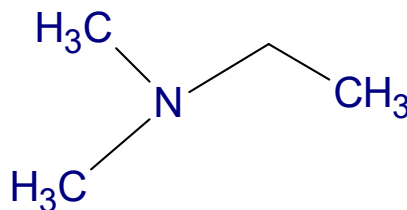


## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 6:** Sabemos que a fórmula  $C_4H_{11}N$  e o IDH= 0 (Não temos insaturação ou anel)
- **FT-IR:** Existe bandas de absorção de C-H abaixo de  $3000\text{cm}^{-1}$  indicando que o composto é alifático.
- **$^1\text{H}$  RMN:** Existem 3 tipos diferentes de sinais de prótons. Um sinal em 2,30ppm (quarteto) e um sinal em 1,10ppm (triplete) indicando um provavelmente um sistema do tipo  $-\text{CH}_2\text{CH}_3$ . Pela integral podemos confirmar a proporção (2 : 3).
- Um outro sinal em 2,20ppm (singleto) indicando provavelmente grupos metilas sem vizinhos prótonados e sua integração é 6 prótons, Provavelmente são dois grupos metilas ligado no nitrogênio.
- Fazendo um exercício com o resultado da análise elementar da para propor a N,N-Dimetiletamina.

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

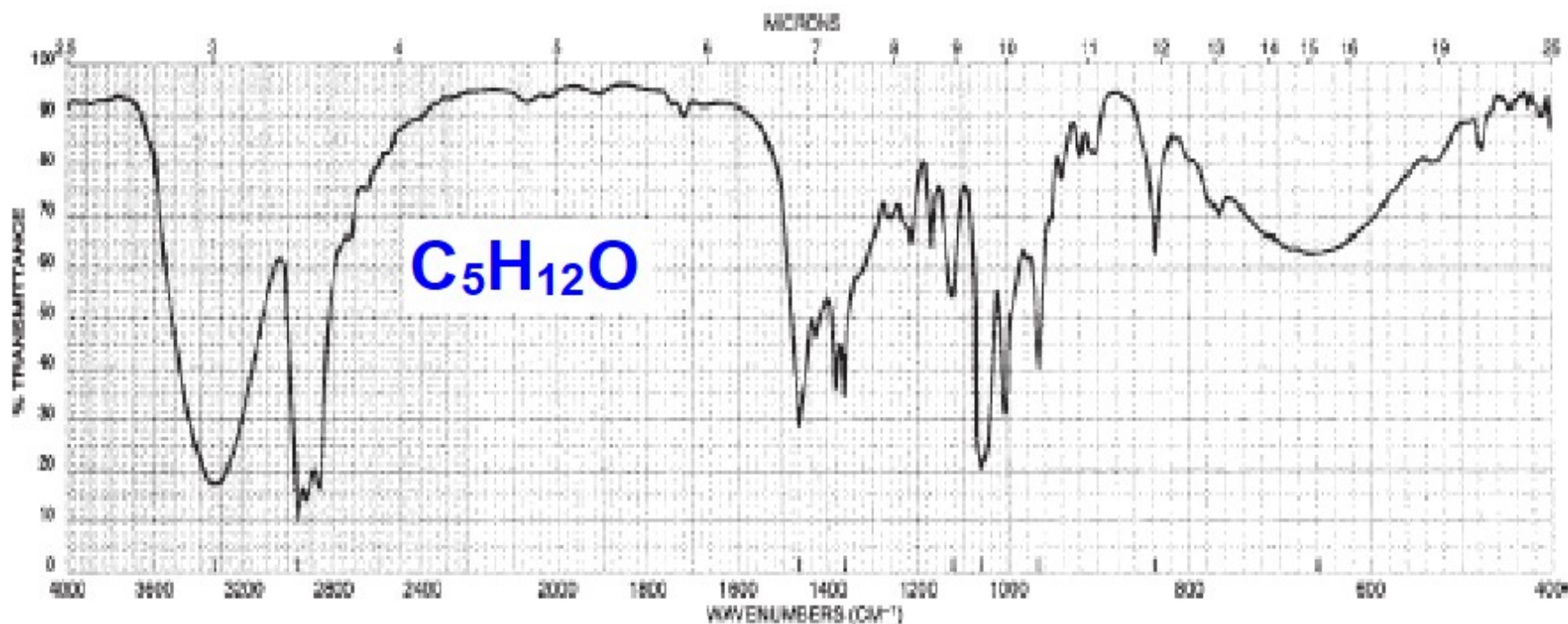
- **Resposta Exercício 6 (Continua):**
- **$^{13}\text{C}$  RMN:** Existem 3 tipos de carbono o que sustenta mais nossa proposição. Um sinal de carbono em 52ppm (desprotegido), provavelmente de duas metilas ligadas diretamente ao nitrogênio (metilas equivalentes). Outro sinal de carbono em 45ppm referente ao grupo metileno ( $-\text{CH}_2-$ ). Finalmente o sinal em 12ppm do grupo metila ( $-\text{CH}_3$ ) o carbono mais protegido. A fórmula proposta é da **N,N-dimetietilamina**.



**N,N-Dimetietilamina**

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

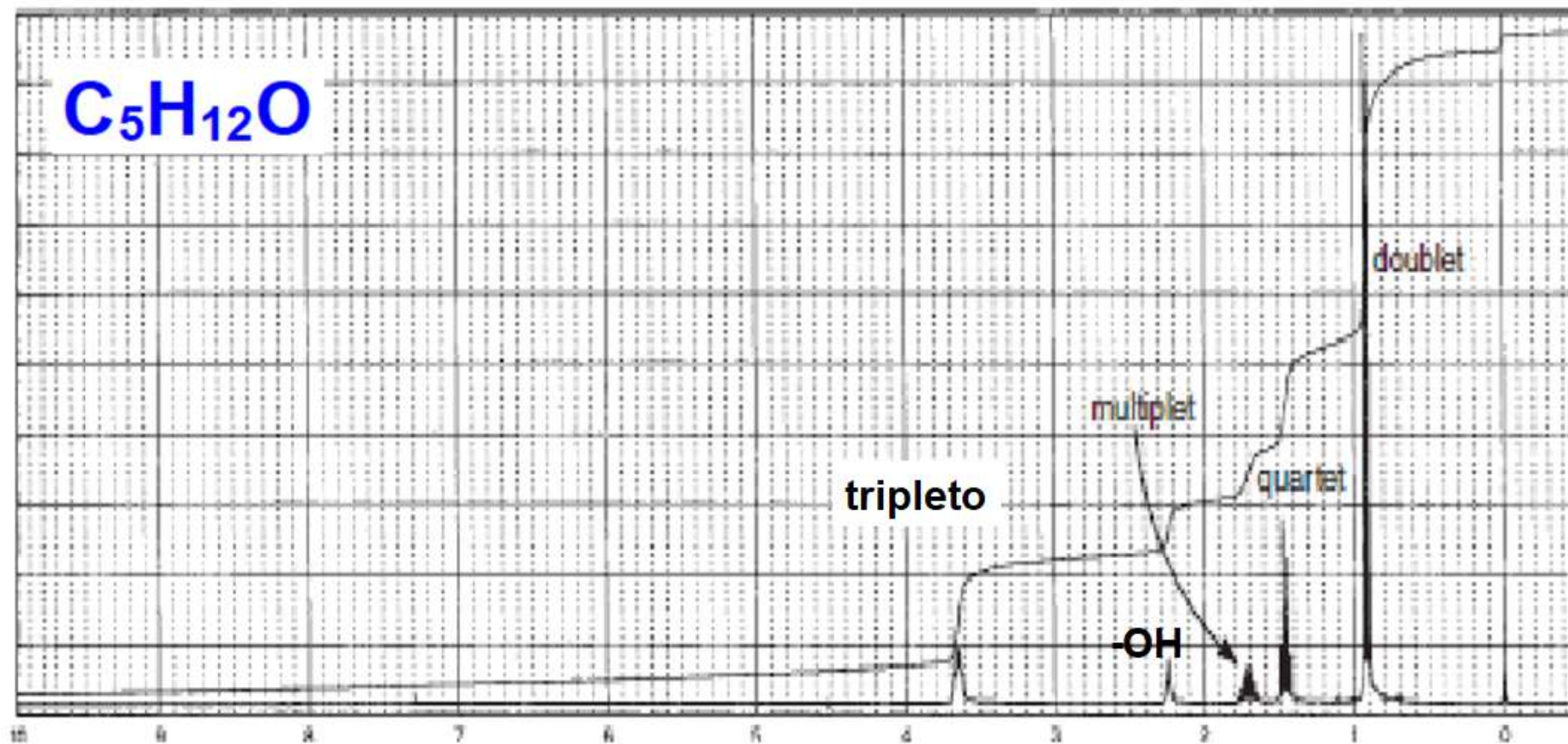
- **Exercício 7:** Determine a estrutura do composto que tem a fórmula molecular  $C_5H_{12}O$  e seus espectros são (FT-IR /  $^1H$  RMN /  $^{13}C$  RMN).
- **Exercício 7 Espectro de FT-IR:**





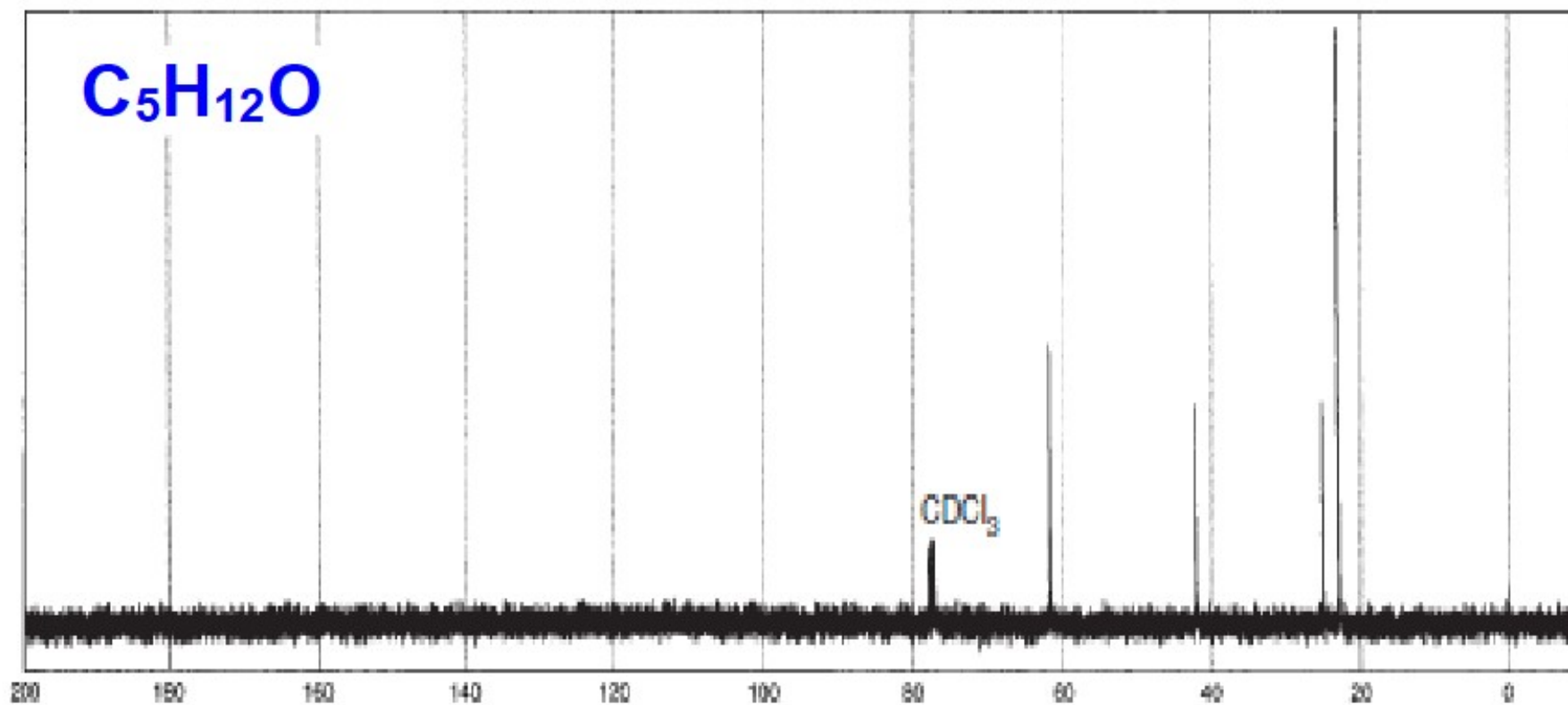
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 7 (Continua) Espectro de  $^1\text{H}$  RMN:



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 7 (Continua) Espectro de  $^{13}\text{C}$  RMN:

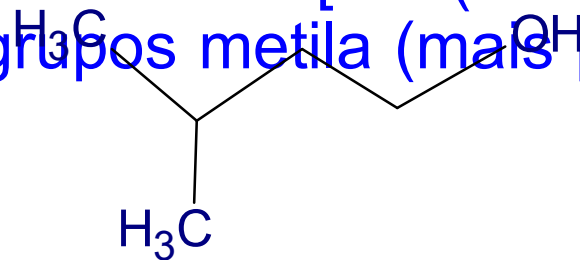


## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 7:** Sabemos que a fórmula  $C_5H_{12}O$  e o IDH= 0 (Não temos insaturação ou anel)
- **FT-IR:** Existe bandas de absorção em  $3300\text{cm}^{-1}$  que é característica de grupo  $-OH$  de álcool. Poderia ser de  $-OH$  de ácido, mas esta eliminado porque não possui banda de absorção na região de carbonila. **Existe bandas de absorção de C-H abaixo de  $3000\text{cm}^{-1}$  indicando que o composto é alifático.**
- **$^1H$  RMN:** Existem 5 tipos diferentes de sinais de prótons, na proporção (2:1:1:2:6) o que confirma a fórmula. Provavelmente é um álcool ( $-OH$ ), que apresenta um singleto em 2,2ppm, com sinal largo que é característica da hidroxila dos álcoois. O sinal em 3,65ppm (mais desprotegido) é um tripleto, então deve ser de um grupo metileno ligado a hidroxila ( $CH_2-CH_2-OH$ ). O sinal em forma de multiplete é característico de CH vizinho de dois grupos metila e de um grupo metileno. O sinal de um quarteto em 1,45ppm indica um grupo metileno( $CH_2$ ) vizinho de grupo metino (CH) e metileno( $CH_2$ ). Um sinal em 0,9ppm (duplete) indica dois grupos metilas ( $CH_3$ ) vizinho do grupo metino (CH). O composto provavelmente é o **3-metil-1-butanol.**

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

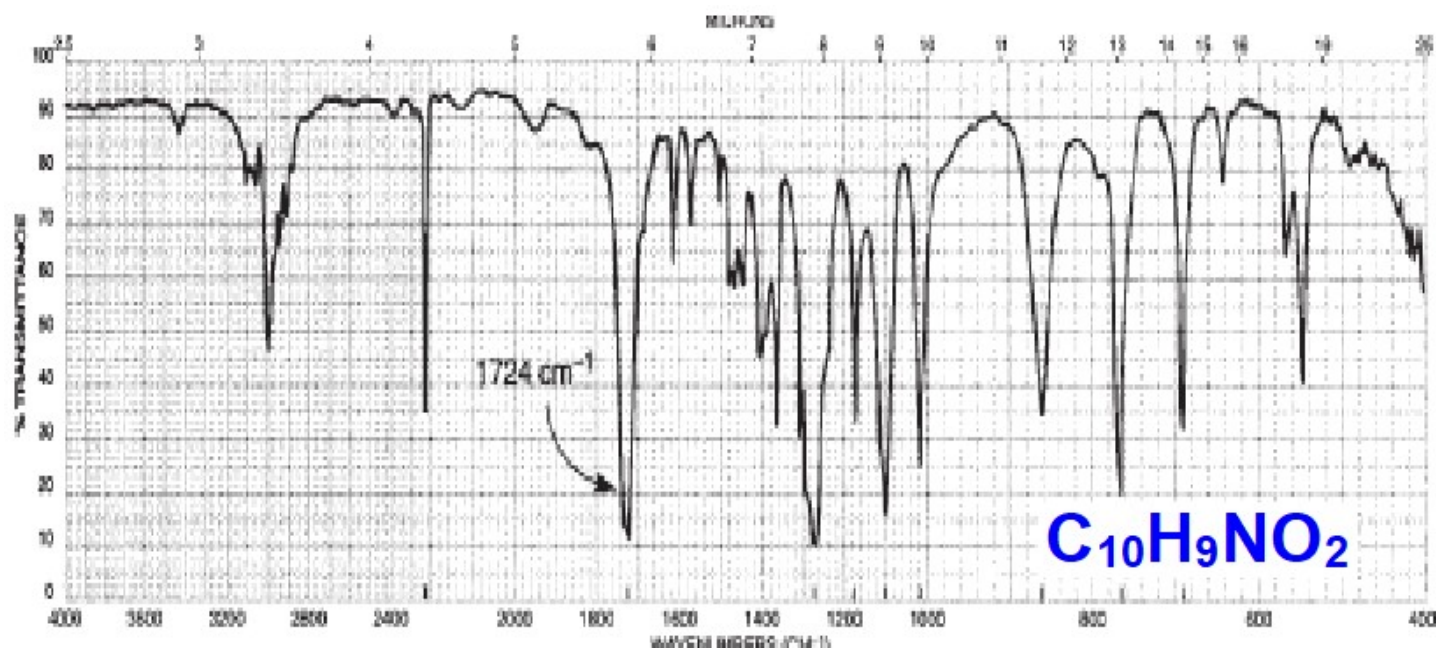
- Resposta Exercício 7 (Continua):
- $^{13}\text{C}$  RMN: Existem **4 tipos** de carbono o que sustenta mais a nossa proposição. O primeiro sinal em **61ppm** encontra-se o grupo metileno ligado a hidroxila o carbono mais desprotegido ( $-\text{C}\text{H}_2\text{-OH}$ ). O segundo sinal em **42ppm** é o outro metileno ligagos ao metino e ao metileno ( $-\text{CH}-\text{C}\text{H}_2\text{-CH}_2$ ). O terceiro sinal em **23ppm** é do metino [ $-\text{C}\text{H}(\text{CH}_3)_2$ ]. O quarto sinal em **2,2ppm** é dos dois grupos metila (mais protegidos). A estrutura proposta é:



**3-metil-1-butanol**

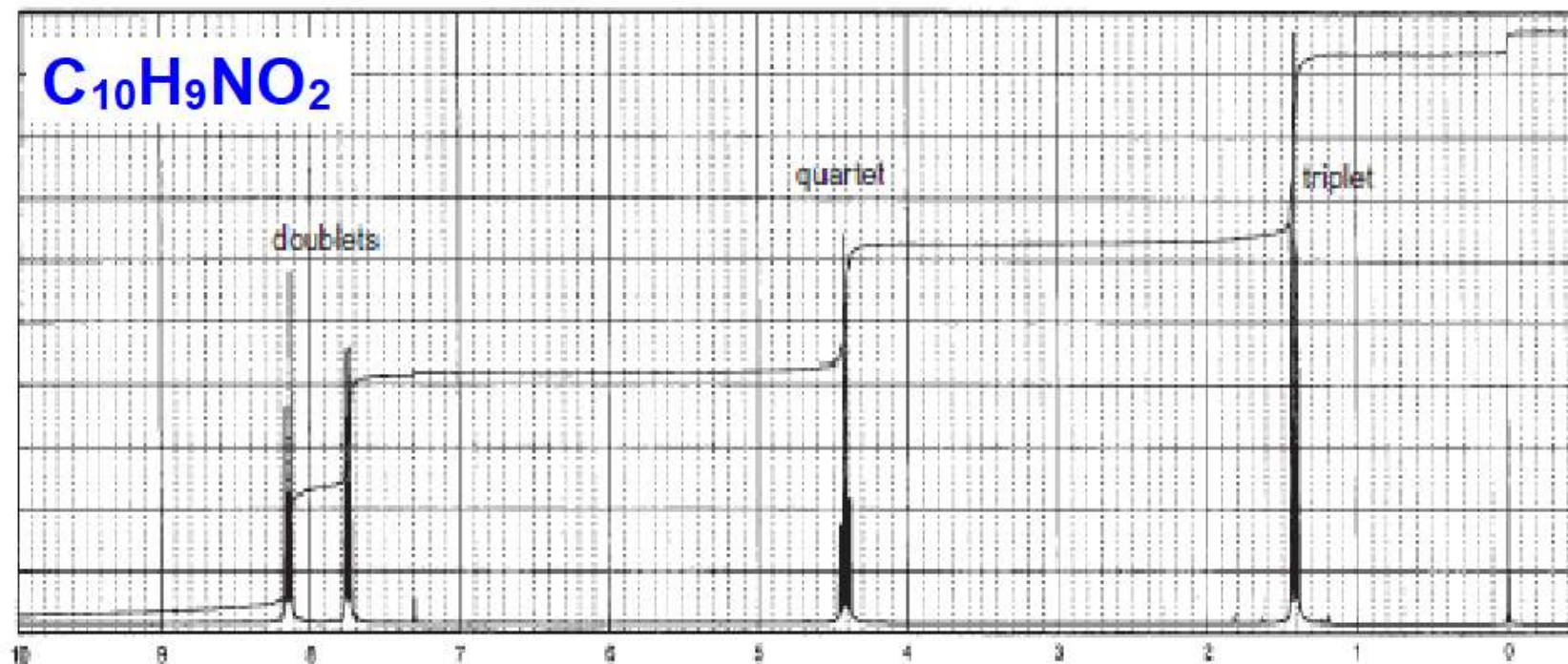
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Exercício 8:** Determine a estrutura do composto que tem a fórmula molecular  $C_{10}H_9NO_2$  e seus espectros são (FT-IR /  $^1H$  RMN /  $^{13}C$  RMN).
- **Exercício 8 Espectro de FT-IR:**



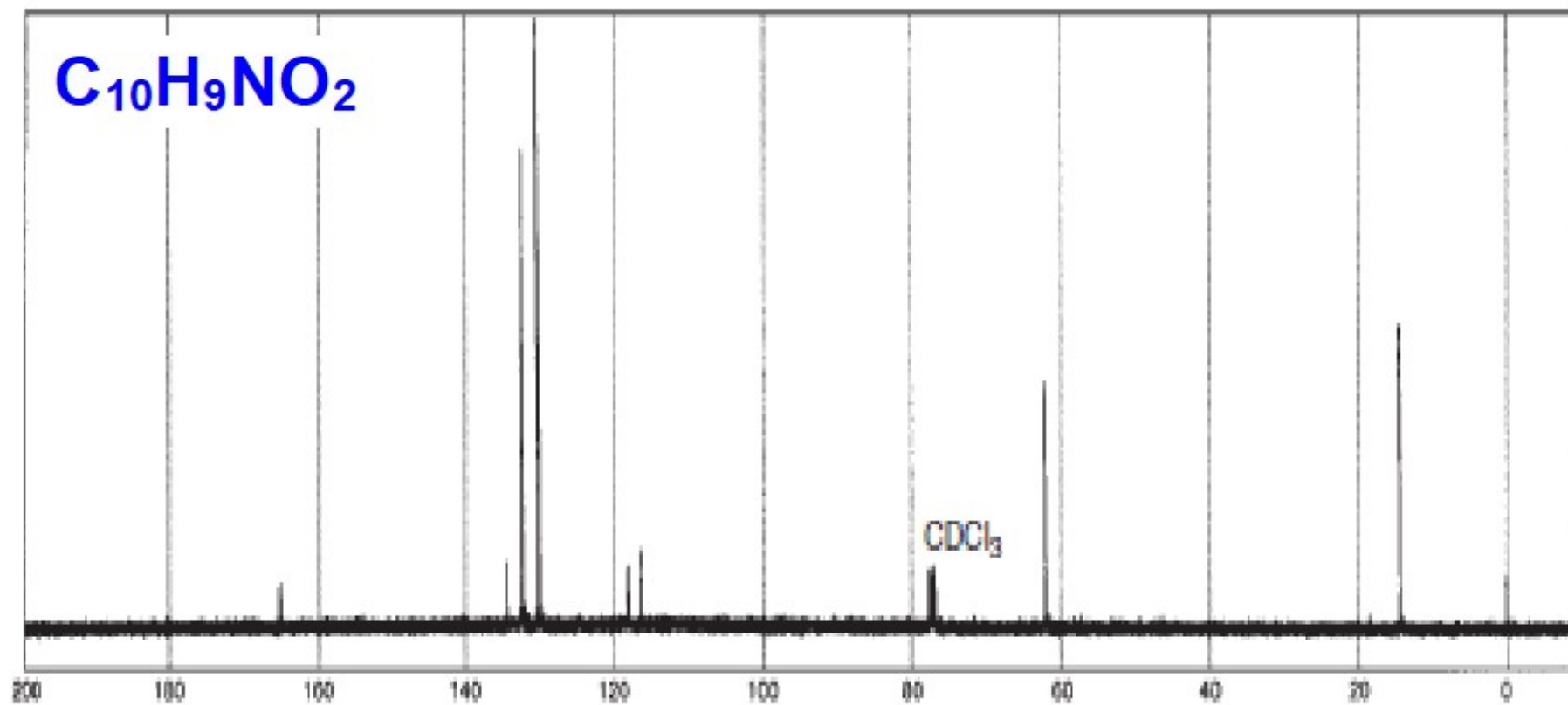
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 8 (Continua) Espectro de  $^1\text{H}$  RMN:



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 8 (Continua) Espectro de  $^{13}\text{C}$  RMN:



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 8:** Sabemos que a fórmula  $C_{10}H_9NO_2$  e o IDH= 7 (Provavelmente um anel aromático)
- **FT-IR:** . Existe bandas de absorção de C-H acima e abaixo de  $3000\text{cm}^{-1}$  indicando que o composto pode ser aromático com partes alifática.
- Existe bandas de absorção em  $1724\text{cm}^{-1}$  que é característica de banda de absorção na região de carbonila, provavelmente um éster.
- Existe bandas de absorção característica de tripla ligação em  $2350\text{cm}^{-1}$  indicando que poderia ser ( **$-C\equiv C$  ou  $-C\equiv N$** ). Por ter o valor de  $2350\text{cm}^{-1}$ , provavelmente é um grupo ciano
- Pelas bandas de absorção em  $1500\text{cm}^{-1}$ ,  $1450\text{cm}^{-1}$  e  $1400\text{cm}^{-1}$  e  $840\text{cm}^{-1}$  indica uma substituição em **para** no anel aromático.
- A forma das bandas de absorção na região de  $2000\text{cm}^{-1}$  a  $1667\text{cm}^{-1}$ , indica uma substituição na posição **para** no anel aromático.



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

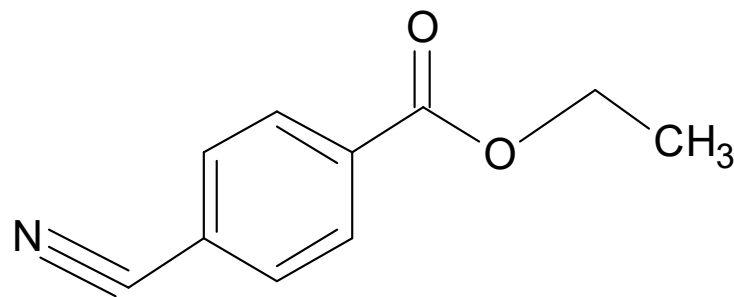
- **Resposta Exercício 8 (Continua):**
- **$^1\text{H}$  RMN:** Existem 4 tipos diferentes de sinais de prótons, na proporção (2:2:3).
- Os dois dupletos em 8,2ppm ( $2\text{H}_{\text{orto}}$ ) e 7,7ppm ( $2\text{H}_{\text{meta}}$ ) indicam uma substituição em para no anel aromático.
- O sinal de um quarteto em 4,4ppm e o sinal de um tripleto em 1,4ppm indica ser um sistema ( $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-O-CO-}$ ) do éster.
- Pela Análise elementar ( $\text{C}_{10}\text{H}_9\text{NO}_2$ ) e pelo cálculo do IDH=7, pela análise de FT-IR e pela análise de  $^1\text{H}$  RMN, podemos sugerir que o composto seja o **4-cianobenzoato de etila**.

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 8 (Continua):**
- **$^{13}\text{C}$  RMN:** Existem 8 tipos de carbono o que sustenta mais a nossa proposição.
- Provavelmente o primeiro sinal em **165ppm** é da carbonila do éster.
- Provavelmente o segundo sinal em **132ppm** é carbono quaternário ligado a carbonila.
- Provavelmente o terceiro sinal em **131ppm** são dos dois carbonos orto ao grupo carbonila.
- Provavelmente o quarto sinal em **130ppm** são dos dois carbonos em meta em relação a carbonila.

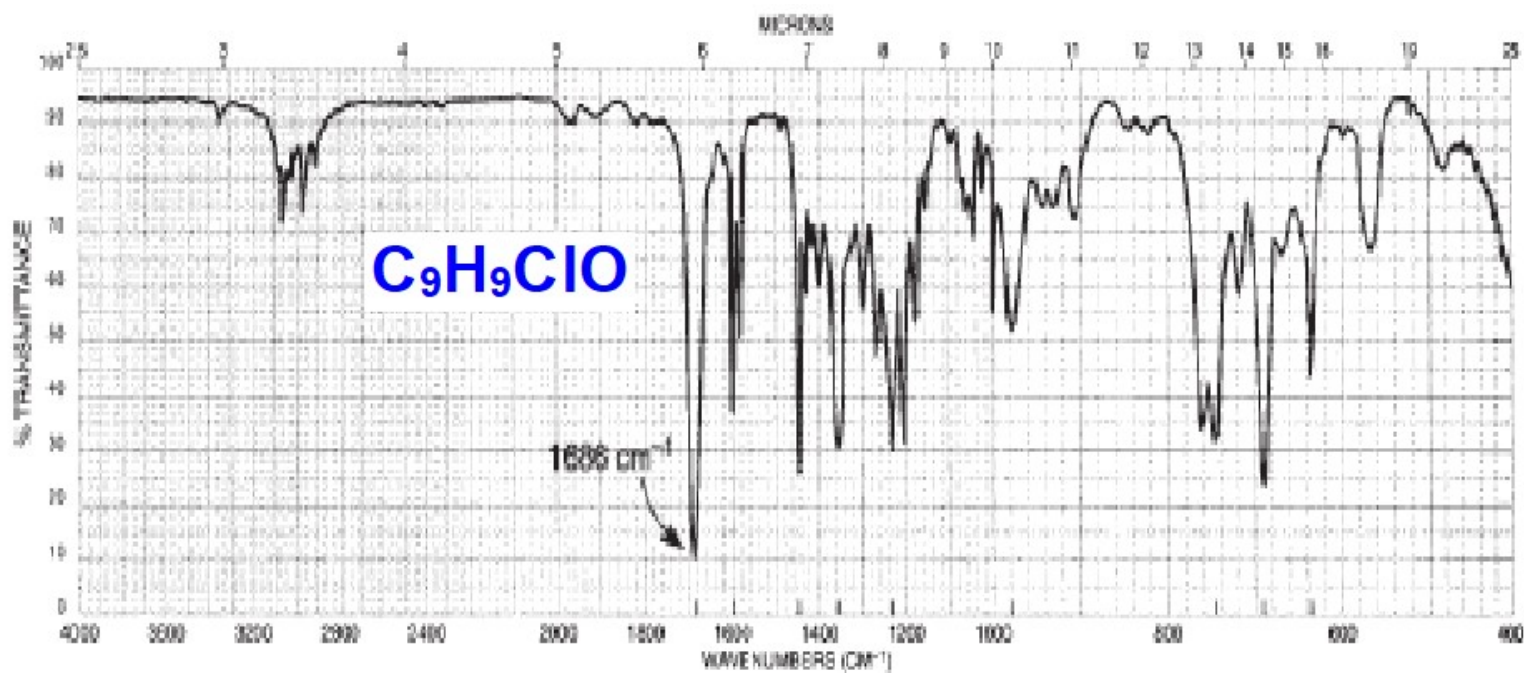
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Resposta Exercício 8 (Continua):
- $^{13}\text{C}$  RMN: (Continua)
- Provavelmente o quinto sinal em **119ppm** é do carbono quaternário ligado ao grupo clano.
- Provavelmente o sexto sinal em **118ppm** é do carbono do grupo ciano.
- O sétimo sinal em **61ppm** é do grupo metileno ligado ao oxigênio do éster.
- O oitavo sinal em **15ppm** é do grupo metila. A estrutura proposta é:



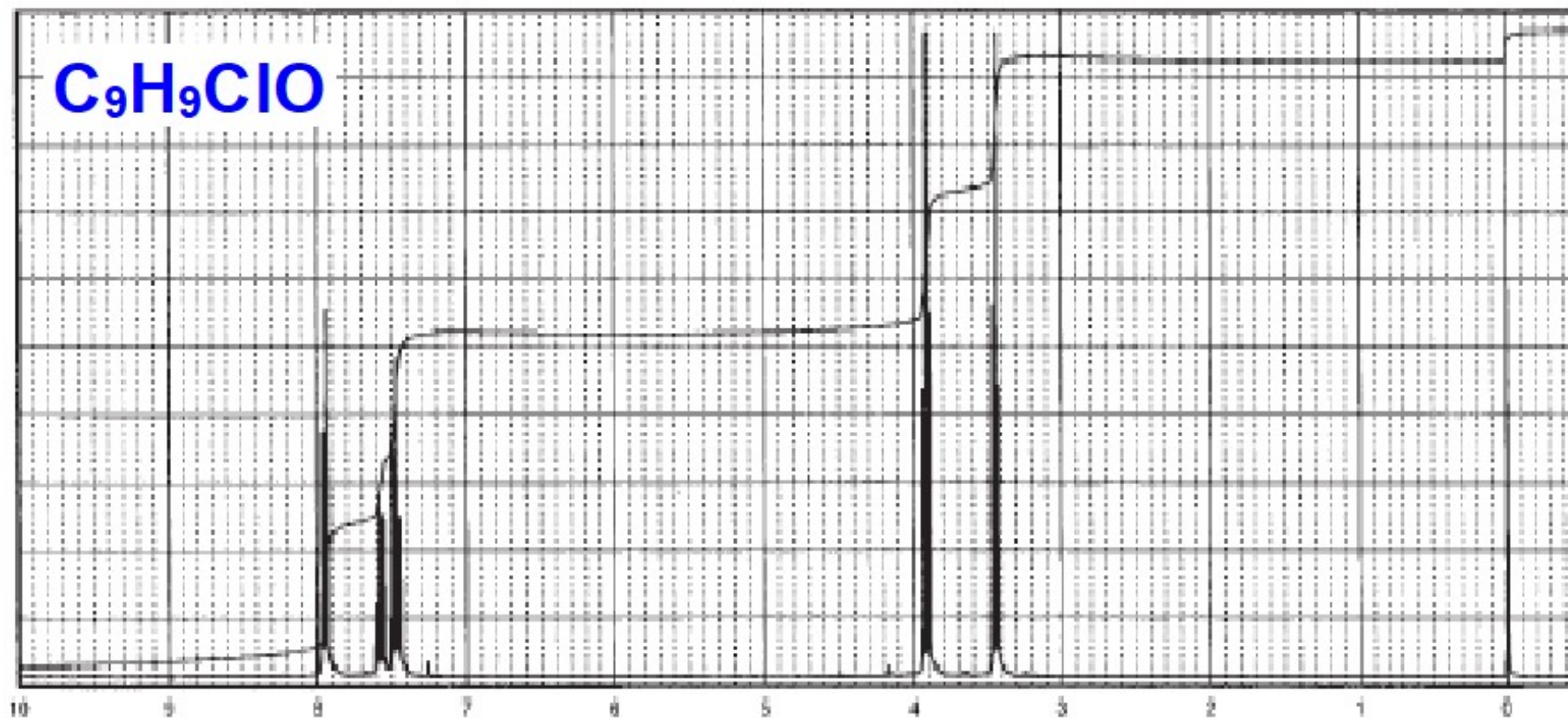
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Exercício 9:** Determine a estrutura do composto que tem a fórmula molecular  $C_9H_9ClO$  e seus espectros são (FT-IR /  $^1H$  RMN /  $^{13}C$  RMN).
- **Exercício 9 Espectro de FT-IR:**



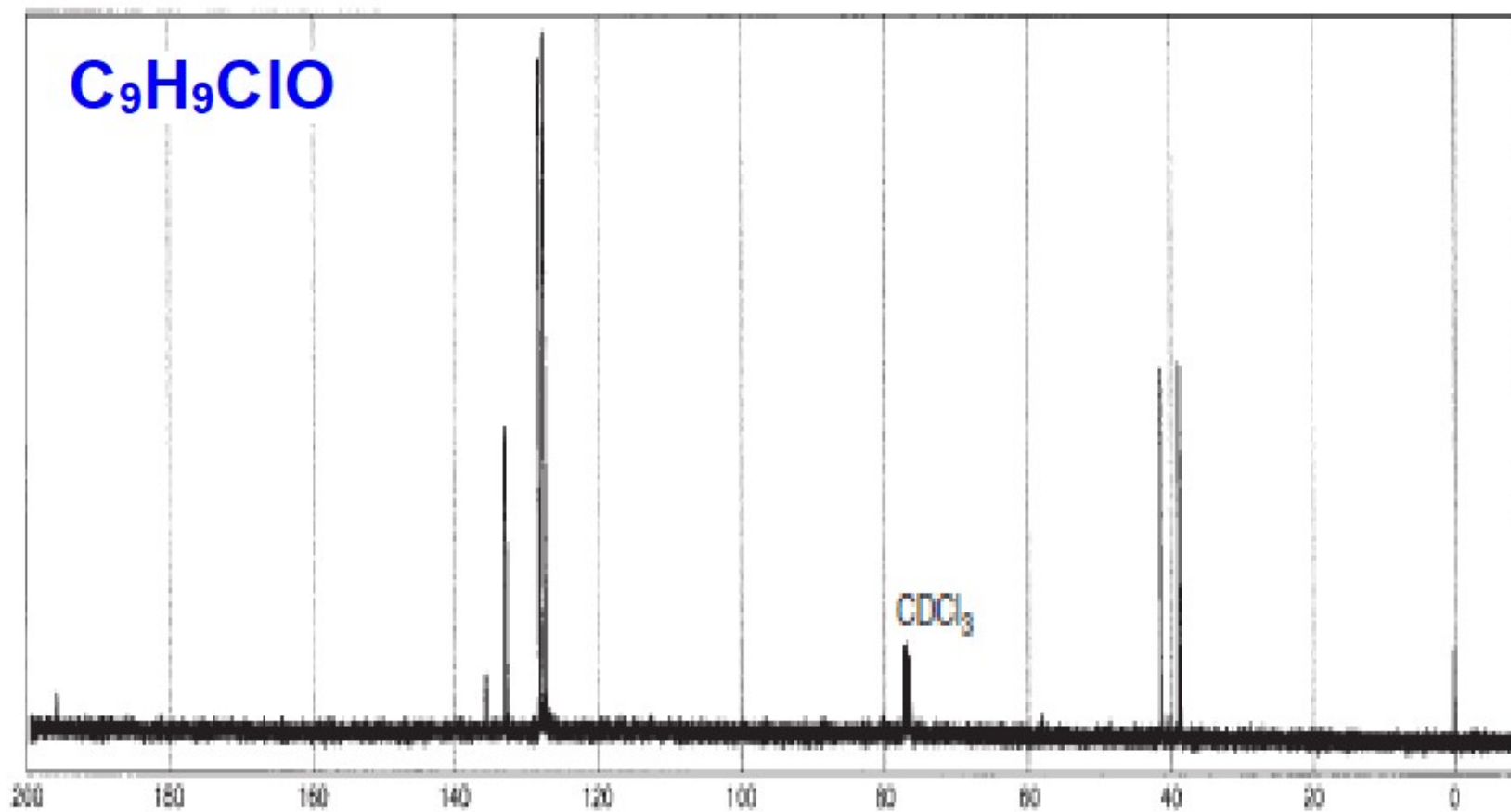
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 9 (Continua) Espectro de  $^{13}\text{C}$  RMN:



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 9 (Continua) Espectro de  $^1\text{H}$  RMN:



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 9:** Sabemos que a fórmula  $C_9H_9ClO$  e o IDH= 5 (Provavelmente um anel aromático)
- **FT-IR:** Existe bandas de absorção de C-H acima e abaixo de  $3000\text{cm}^{-1}$  indicando que o composto pode ser aromático com partes alifática.
- Existe bandas de absorção em  $1686\text{cm}^{-1}$  que é característica de banda de absorção na região de carbonila, provavelmente uma cetona conjugada.
- A forma das bandas de absorção na região de  $2000\text{cm}^{-1}$  a  $1667\text{cm}^{-1}$ , não forneceu informação suficiente.
- Provavelmente bandas de absorção em  $750\text{cm}^{-1}$  e  $700\text{cm}^{-1}$  indica que o anel aromático é monossustituído.
- Em  $750\text{cm}^{-1}$  é provável a ligação  $-CH_2-Cl$

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 9 (Continua):**
- **$^1\text{H}$  RMN:** Existem **5 tipos** diferentes de sinais de prótons, na proporção **(2:1:2:2)** o que confirma a fórmula.
- O primeiro grupo de sinal em **7,9ppm** são os dois prótons em orto do anel aromático.
- O segundo grupo de sinal em **7,6ppm** é do próton situado em para do anel aromático.
- O terceiro grupo de sinal em **7,4ppm** são dos dois prótons situado na posição meta do anel aromático.
- O quarto grupo de sinal em **3,9ppm** são do grupo metileno ligado ao cloro.
- O quinto grupo de sinal em **3,4ppm** são do grupo metileno ligado a carbonila.
- O composto provavelmente é o **3-cloro-1-fenil-1-propanona**.

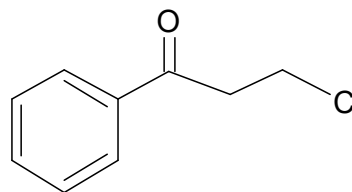


## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 9 (Continua):**
- **$^{13}\text{C}$  RMN:** Existem 7 tipos de carbono o que sustenta mais a nossa proposição.
- O primeiro sinal em **198ppm** corresponde a carbonila da cetona.
- O segundo sinal em **135ppm** corresponde ao carbono ligado ao grupo cetona.
- O terceiro sinal em **132ppm** corresponde ao carbono na posição para do anel aromático.
- O quarto sinal em **129ppm** corresponde aos dois carbonos na posição meta do anel aromático.
- O quinto sinal em **128ppm** corresponde aos sinais dos dois carbonos situados na posição orto do anel aromático.

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

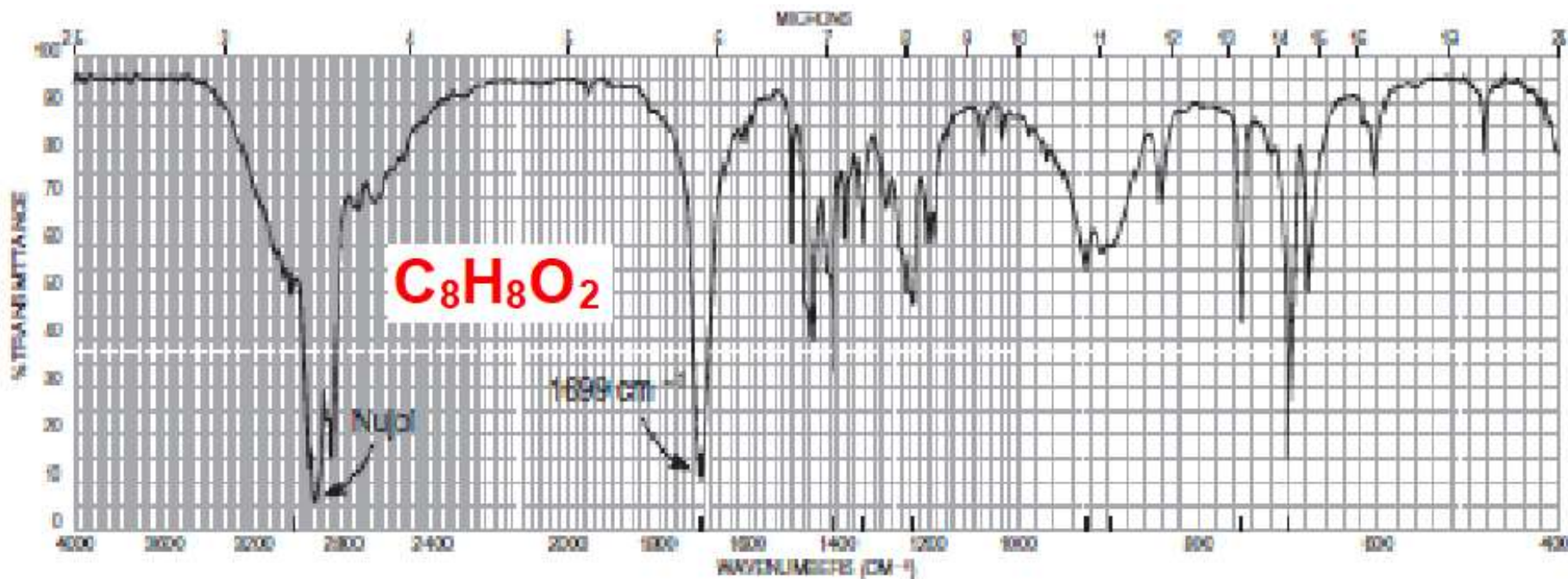
- Resposta Exercício 9 (Continua):
- $^{13}\text{C}$  RMN: O sexto sinal em **41ppm** corresponde ao grupo metileno ligado ao cloro.
- O sétimo sinal em **39ppm**, corresponde ao grupo metileno ligado ao grupo carbonila.
- A estrutura proposta para o composto é do **3-cloropropilfenona**:



**3-Cloropropilfenona**  
**ou**  
**3-Cloro-1-fenil-1-propanona**

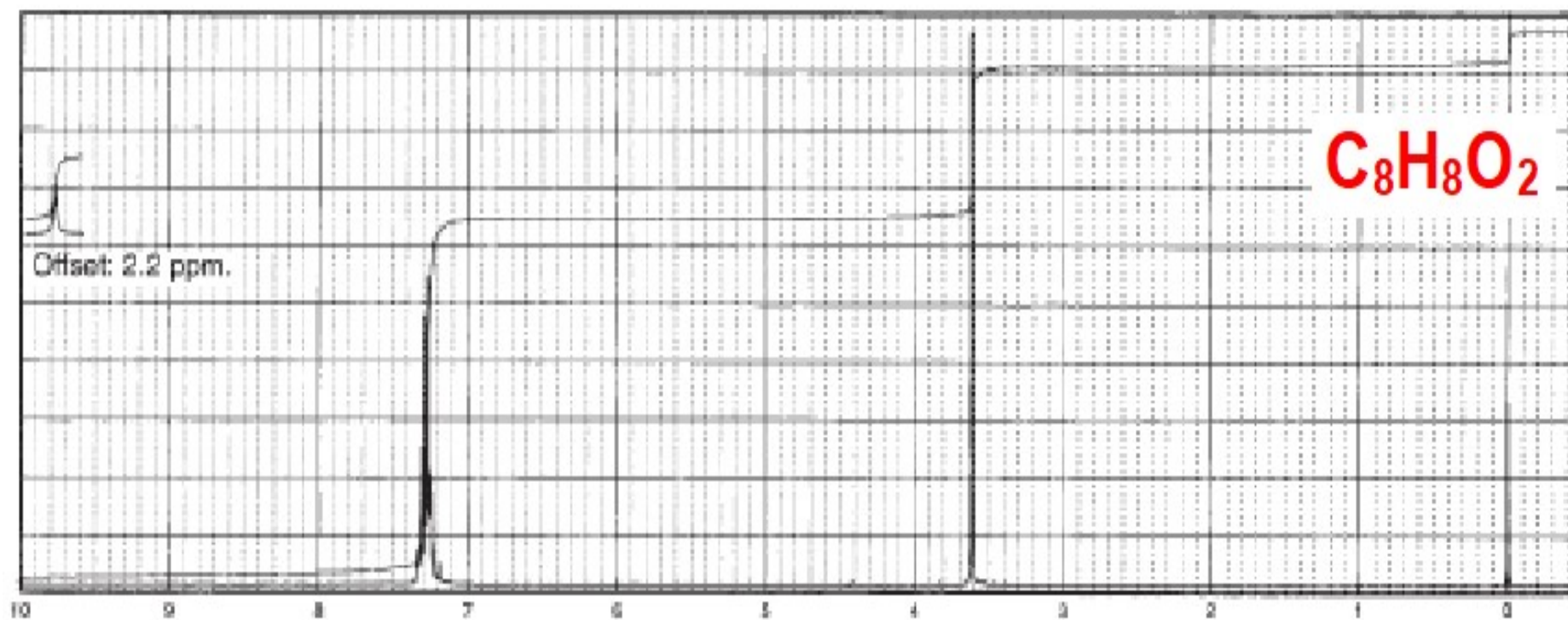
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Exercício 10:** Determine a estrutura do composto que tem a fórmula molecular  $C_8H_8O_2$  e seus espectros são (FT-IR /  $^1H$  RMN /  $^{13}C$  RMN).
- **Exercício 10 - Espectro de FT-IR:**



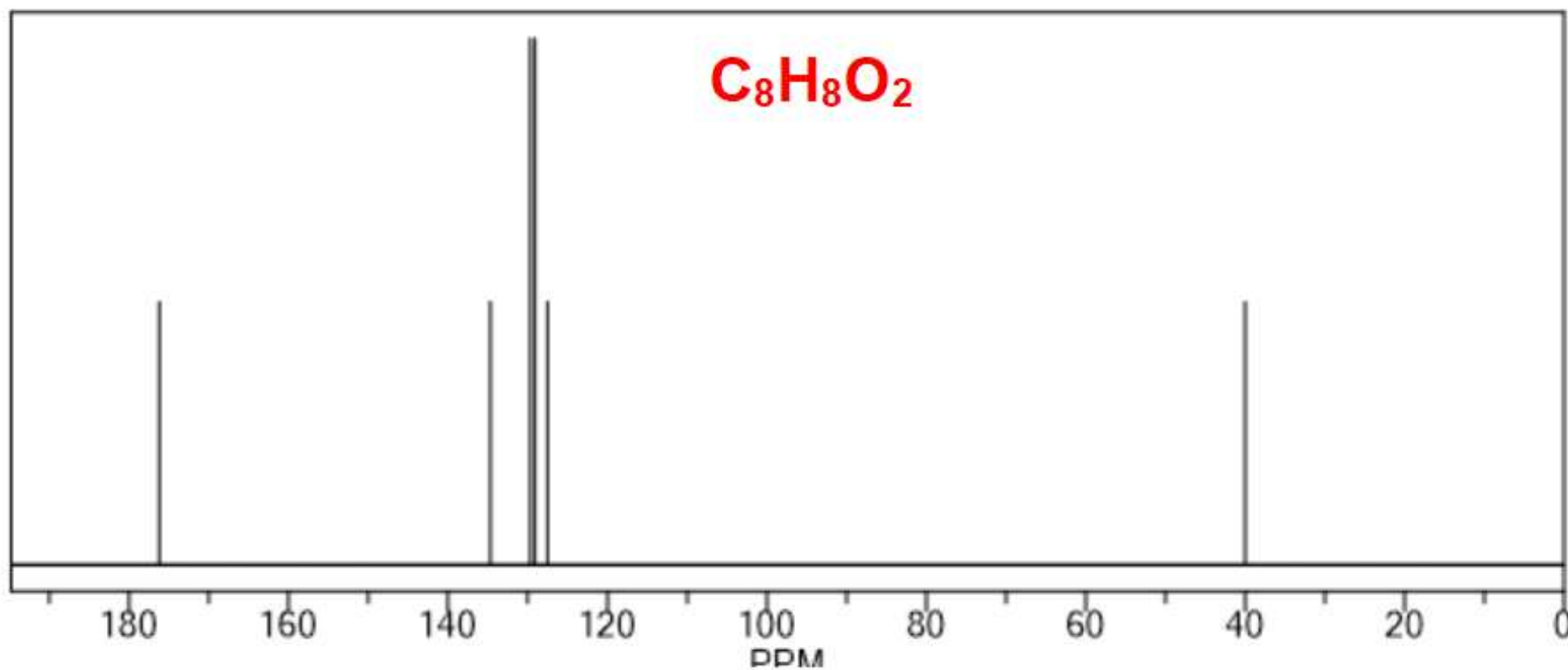
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 10 (Continua) Espectro de  $^1\text{H}$  RMN:



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- Exercício 10 (Continua) Espectro de  $^{13}\text{C}$  RMN:



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 10:** Sabemos que a fórmula  $C_8H_8O_2$  e o IDH= 5 (Provavelmente um anel aromático)
- **FT-IR:** Existe bandas de absorção largas  $3200\text{cm}^{-1}$  a  $3100\text{cm}^{-1}$  provavelmente de  $-OH$  de ácido carboxílico.
- Existe bandas de absorção de C-H acima e abaixo de  $3000\text{cm}^{-1}$  indicando que o composto pode ser aromático com partes alifática (**esta prejudicado pelo solvente nujol**).
- Existe bandas de absorção em  $1699\text{cm}^{-1}$  que é característica de banda de absorção na região de carbonila.
- A forma das bandas de absorção na região de  $2000\text{cm}^{-1}$  a  $1667\text{cm}^{-1}$ , não forneceu informação suficiente.
- Provavelmente bandas de absorção em  $750\text{cm}^{-1}$  e  $700\text{cm}^{-1}$  indica que o anel aromático é monossustituído.

## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 9 (Continua):**
- **$^1\text{H}$  RMN:** Existem **3 tipos** diferentes de sinais de prótons, na proporção **(1:5:2)**.
- O primeiro sinal em **2,2ppm** é do próton do grupo  $-\text{OH}$  que pode aparecer em qualquer lugar do espectro.
- O segundo grupo de sinal em **7,3ppm** são os 5 prótons aromáticos.
- O terceiro grupo de sinal em **3,6ppm** são dos grupo metileno.
- Podemos sugerir que o composto é o **ácido fenil acético**.

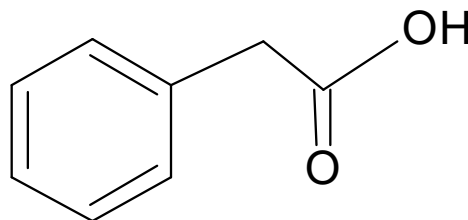
## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 10 (Continua):**
- **$^{13}\text{C}$  RMN:**
- Existem 6 tipos de carbono o que sustenta a nossa proposição.
- O primeiro sinal em **177ppm** corresponde a carbonila do ácido carboxílico.
- O segundo sinal em **135ppm** corresponde ao  $\text{C}_q$  ligado ao grupo cetona.
- O terceiro sinal em **130ppm** corresponde ao carbono na posição orto do anel aromático.
- O quarto sinal em **129ppm** corresponde aos dois carbonos na posição meta do anel aromático.



## EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

- **Resposta Exercício 10 (Continua):**
- O quinto sinal em **127ppm** corresponde aos sinais dos dois carbonos situados na posição para do anel aromático.
- O sexto sinal em **40ppm** corresponde aos dois prótons metilênicos vizinhos do anel aromático.
- Podemos propor que o composto é:

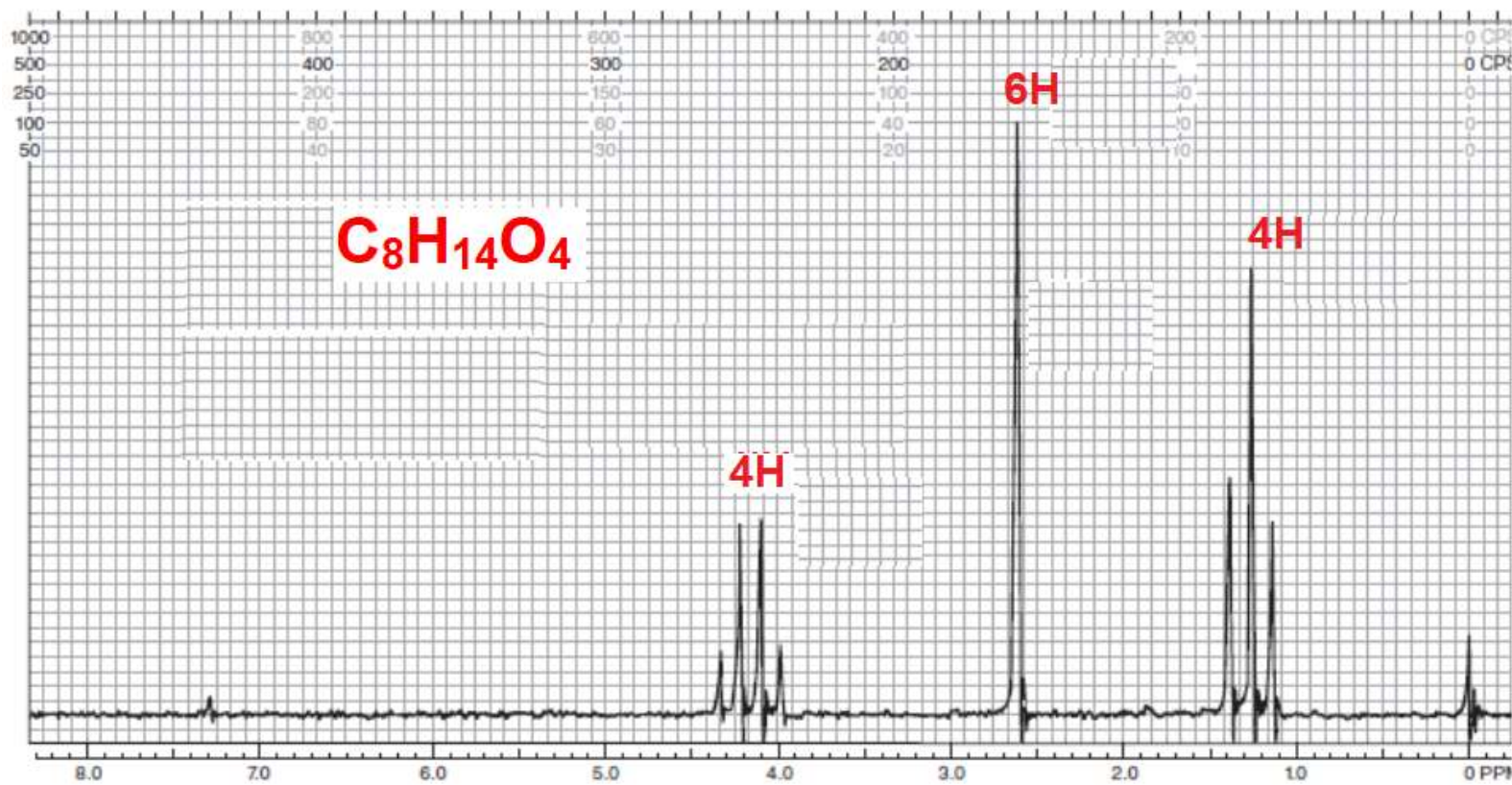


**Ácido fenilacético**

## EXERCÍCIOS AE/RMN/FT-IR

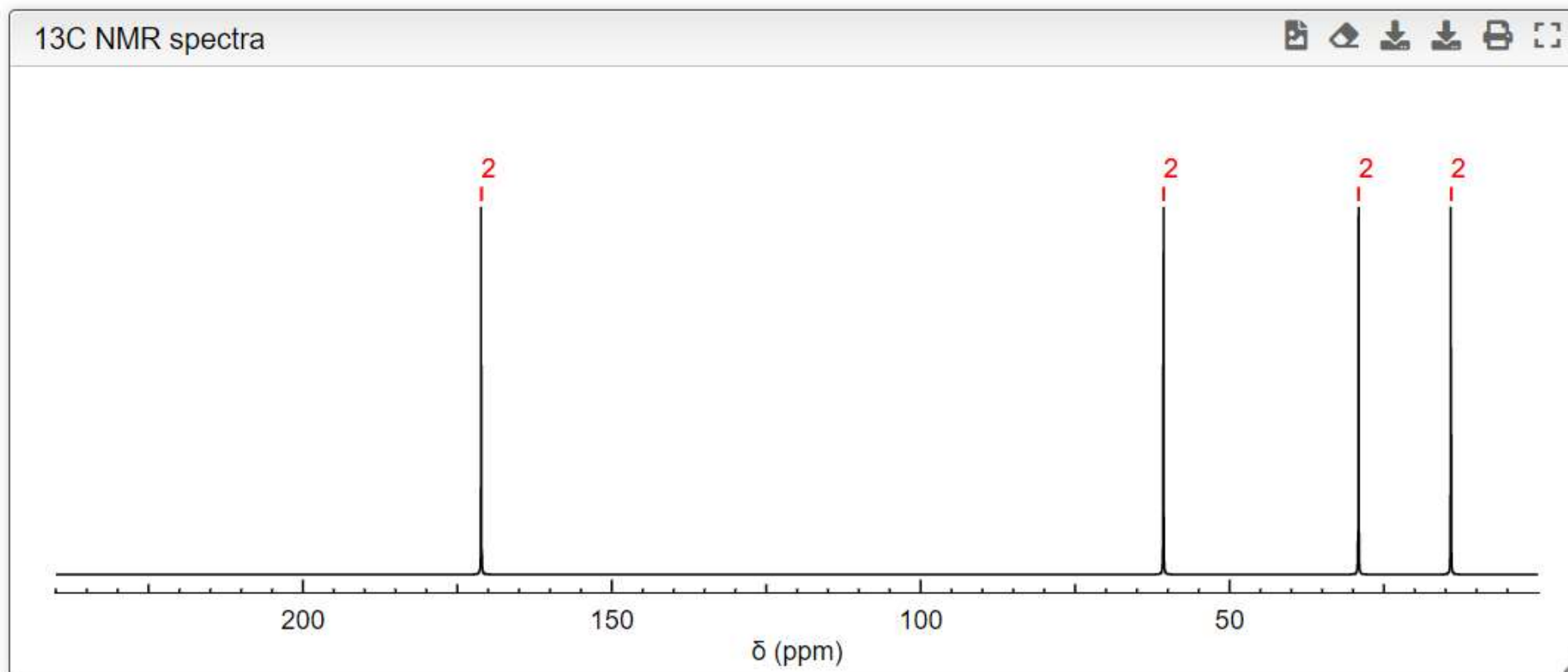
**Exercício 11:** Proponha a estrutura do éster a partir da AE/RMN.

**Espectro de  $^1\text{H}$  RMN:**



## EXERCÍCIOS AE/RMN/FT-IR

### Exercício 11 (Continua): Espectro de $^{13}\text{C}$ RMN:

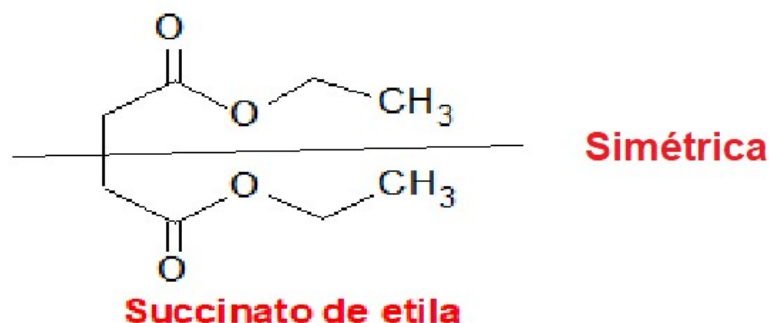


## EXERCÍCIOS AE/RMN/FT-IR

- Resposta - Exercício 11:
- Análise Elementar:  $C_8H_{14}O_4$  IDH=2
- Análise do Espectro de  $^1H$  RMN:
- A integral mostra uma proporção (4:6:4)
- Apresenta 3 tipos diferentes de prótons.
- Tem um **tripeto** em **1,25ppm** e um quarteto em **4,15ppm** indica a presença de um sistema  $-O-CH_2-CH_3$ .
- Sabemos que é um éster ( $-CH_2-COO-CH_2CH_3$ ).
- Para satisfazer a quantidade de prótons **14H** somente se a molécula for simétrica isto é ter duas partes iguais.
- Podemos propor o **éster dietilsalicílico**.

## EXERCÍCIOS AE/RMN/FT-IR

- Resposta - Exercício 11 (Continua):
- Análise Elementar:  $C_8H_{14}O_4$  IDH=2
- Análise do Espectro  $^{13}C$  RMN: 173,1ppm (2 C=O), 61,2ppm (-O-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-O-), 29,5ppm (2 CH<sub>2</sub> ligado na carbonila), 14,1ppm 2 CH<sub>3</sub>).
- O espectro apresenta 4 tipos de carbonos o que confirma nossa proposição: Succinato de etila (estrutura simétrica)



# EXERCÍCIOS RMN/FT-IR

**ATÉ**

**A**

**P1**