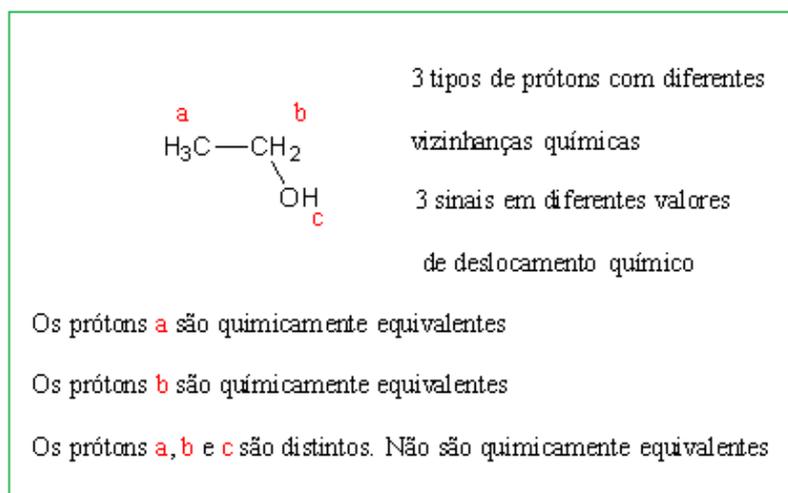


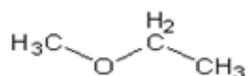
SEGUNDO EXERCÍCIO SOBRE RMN- H

- 1) Para cada uma das moléculas abaixo, assinale, com a mesma letra, prótons quimicamente equivalentes e, com letras diferentes, prótons que não são quimicamente equivalentes. Decida, também, quantos sinais haverá no espectro de RMN de H para cada uma dessas moléculas.

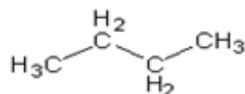
Ex:



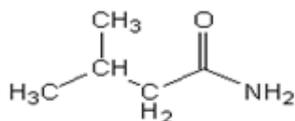
1a)



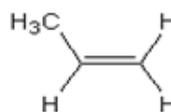
1b)



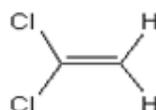
1c)



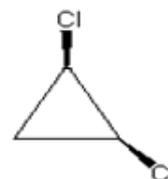
1d)



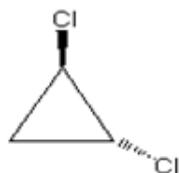
1e)



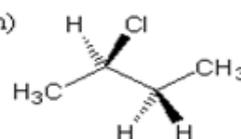
1f)



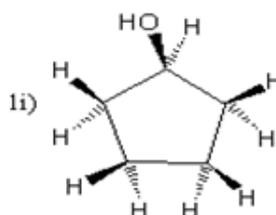
1g)



1h)

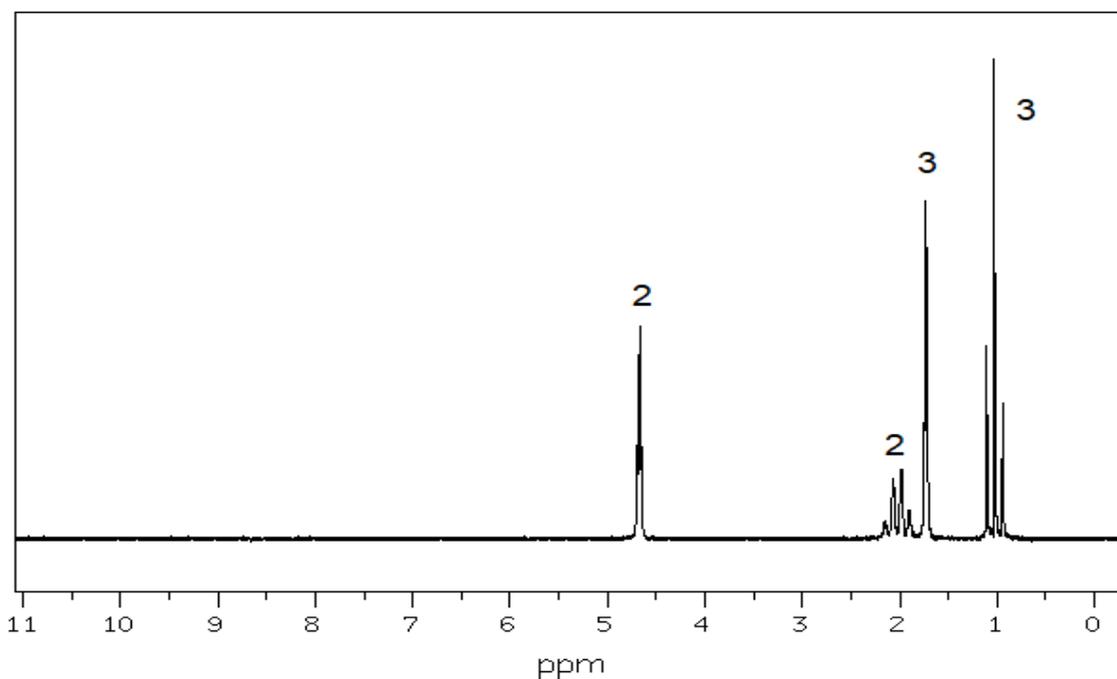
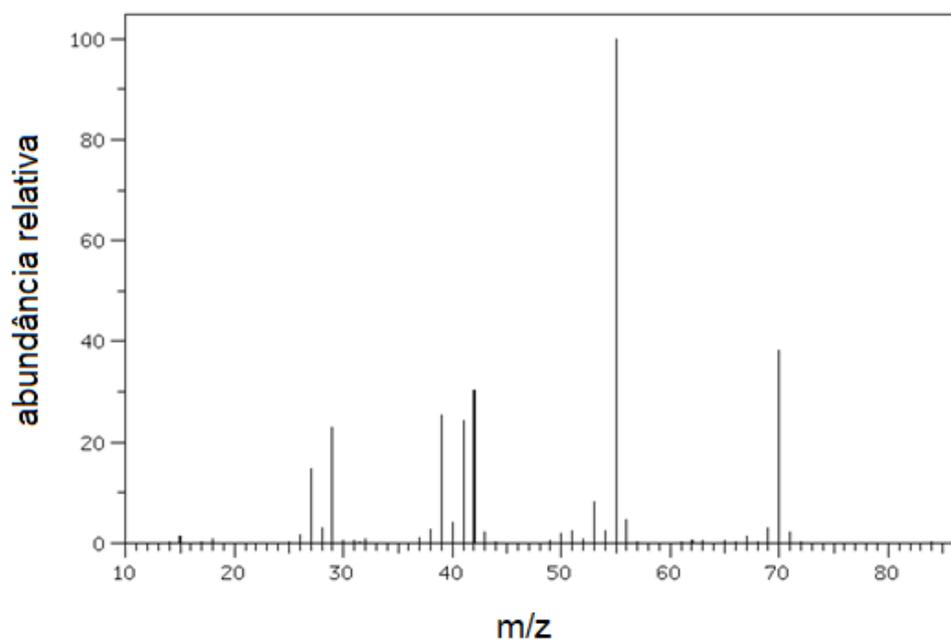


1i)



2) Com base nos espectros abaixo, decida a qual dos seguintes compostos eles correspondem :

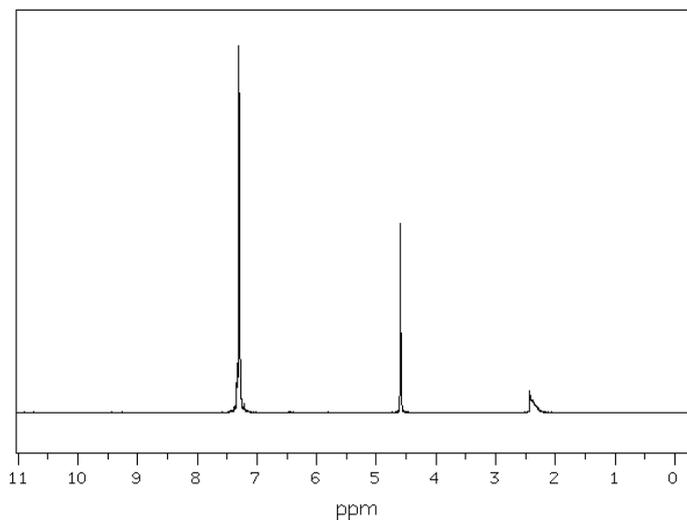
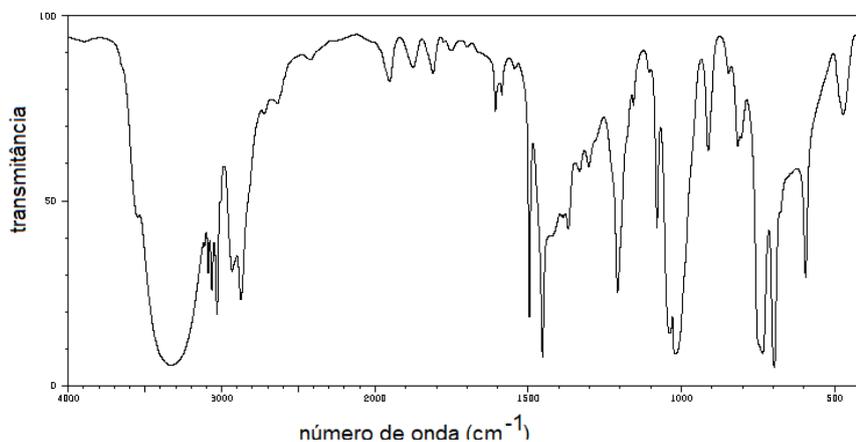
- a) 1-penteno
- b) 2-penteno
- c) ciclopentano
- d) 2-metil-1-buteno
- e) 2-metil-2-buteno



Observe como deve ser descrito o espectro de RMN de H :

(δ ppm, CDCl_3) = 1,03(t, 3H, $J = 7,0$ Hz), 1,72 (s, 3H) 2,01(q, 2H, $J = 7,0$ Hz), 4,67 (dois doubletos sobrepostos, 2H)

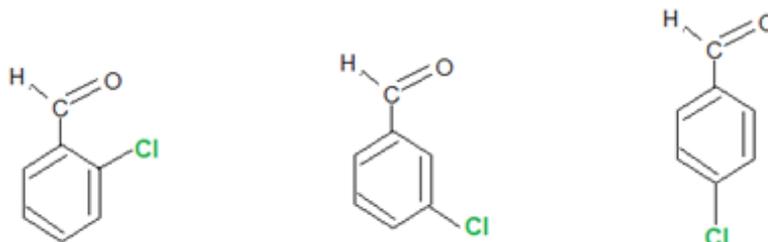
- 3) No espectro de massas de determinado composto, foi observado um íon molecular de $m/z = 108$. O composto possui apenas os elementos C, H e O.
- a) Com base nesses dados, determine uma possível fórmula molecular para o composto.
- b) Com base nos espectros de infravermelho e de RMN de ^1H , apresentados abaixo, e nos dados do item a, apresente uma possível fórmula estrutural para o composto em questão:



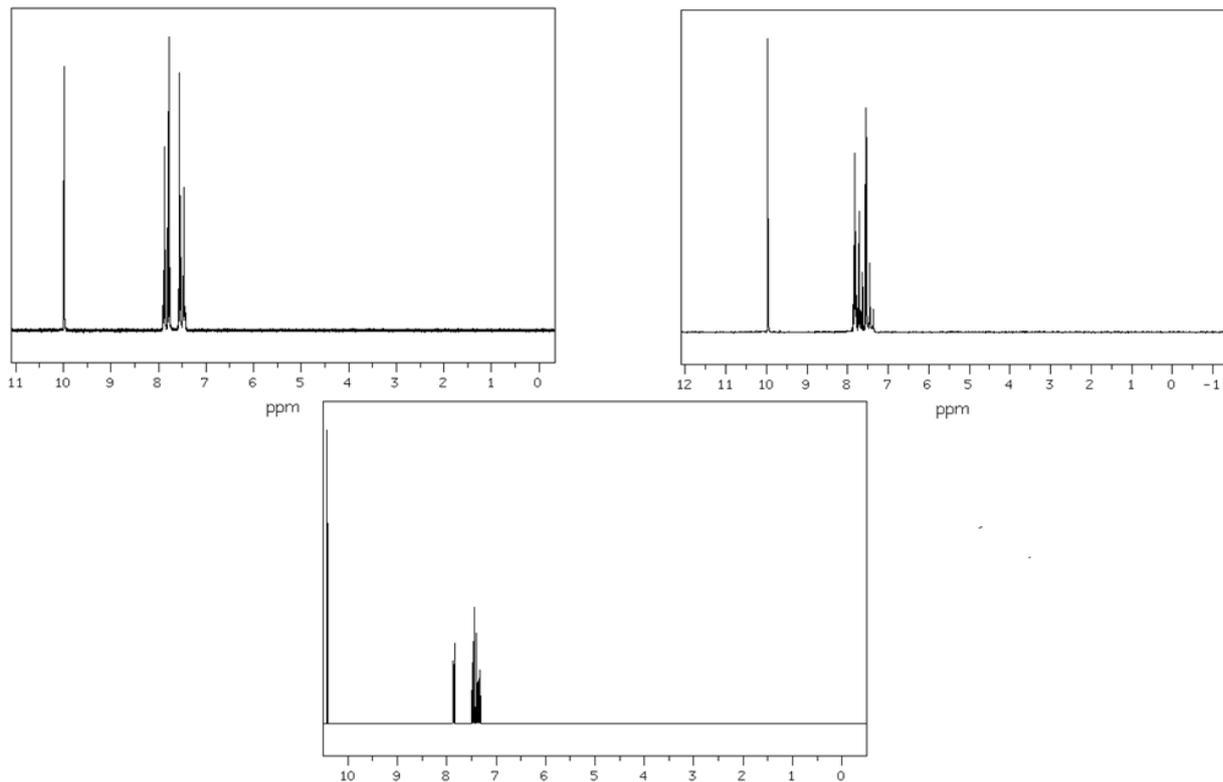
(δ ppm, CDCl_3) = 2,30 (sl, 1H), 4,59 (s, 2H), 7,30 (sl, 5H).

sl = singlete largo

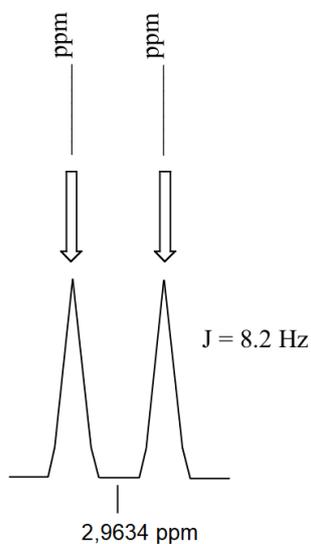
- 4) Para as seguintes moléculas:



- a) Em qual (is) há prótons quimicamente equivalentes mas que não são magneticamente equivalentes?
- b) Dados os espectros de RMN de ^1H abaixo, atribua-os a cada uma das moléculas de cloro-benzaldeído isoméricas.



- 5) Em um determinado espectro de RMN de H, obtido utilizando um instrumento de 300 MHz, foi observado um dubleto. O deslocamento químico desse sinal, em ppm, foi assinalado, corretamente, como a média entre os deslocamentos químicos dos dois sinais que constituem o dubleto :

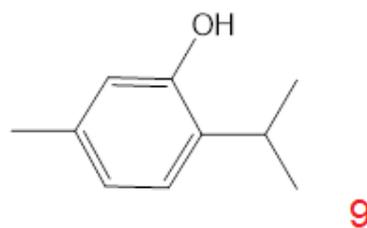
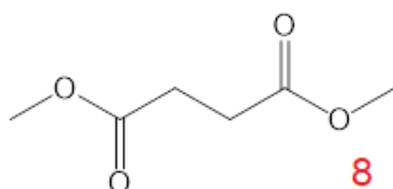
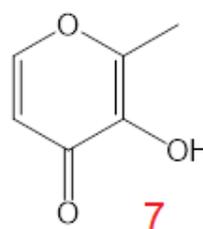
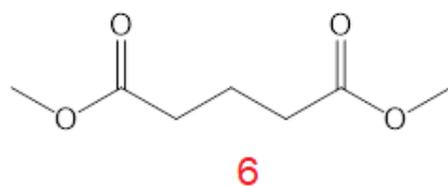
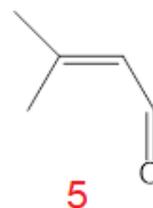
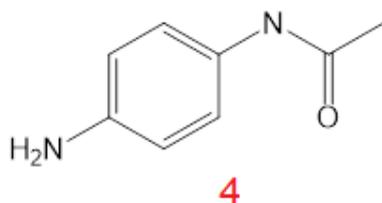
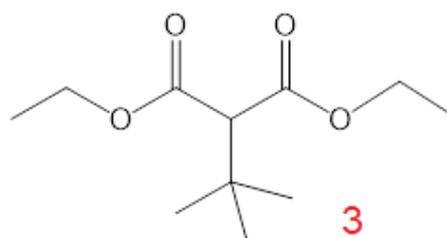
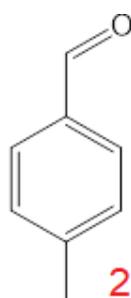
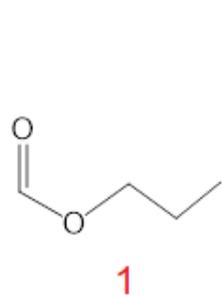


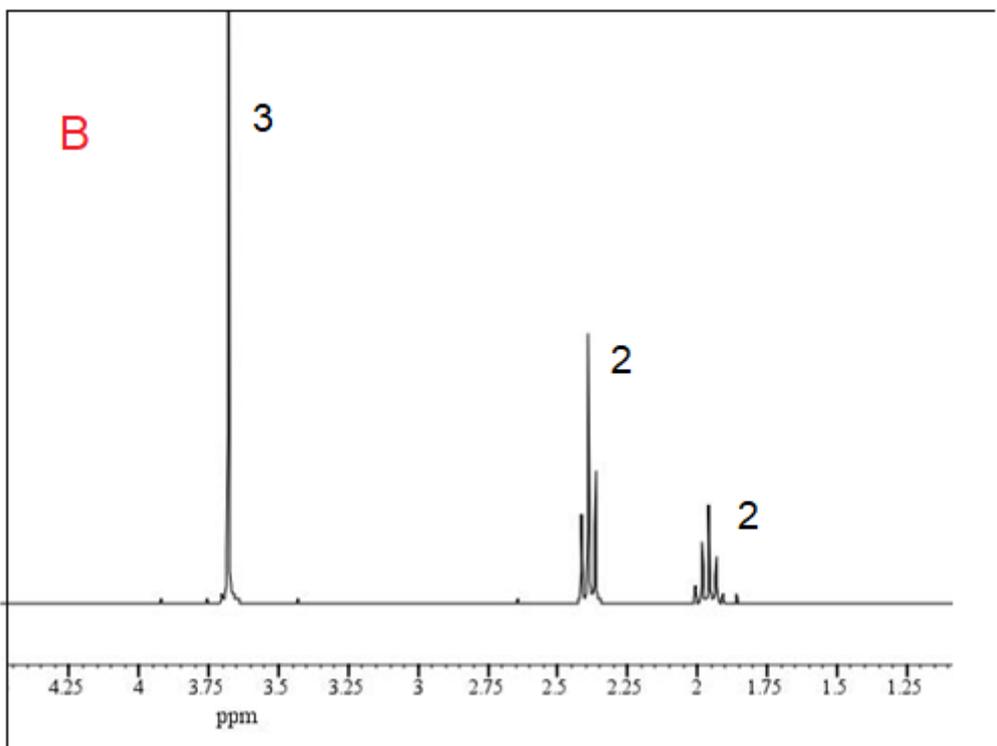
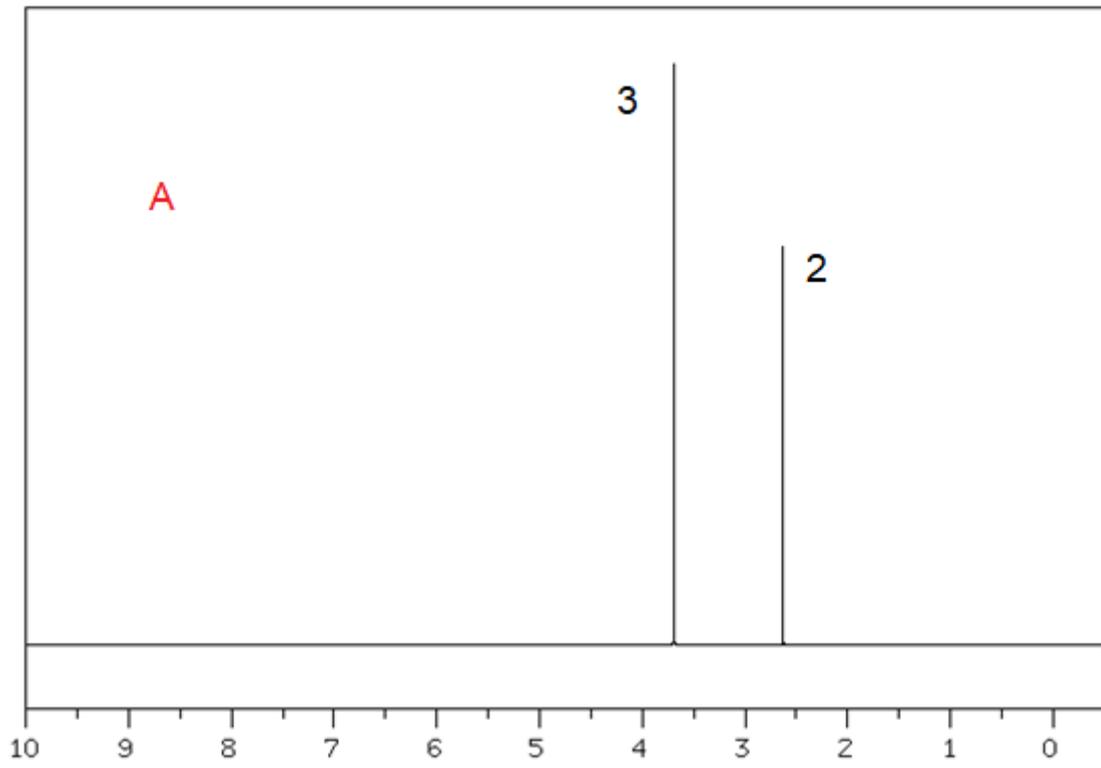
- a) Para este sinal, calcule o valor, em ppm, de cada sinal que constitui o dubleto. Exprese os valores com uma incerteza de 0,0001 ppm.

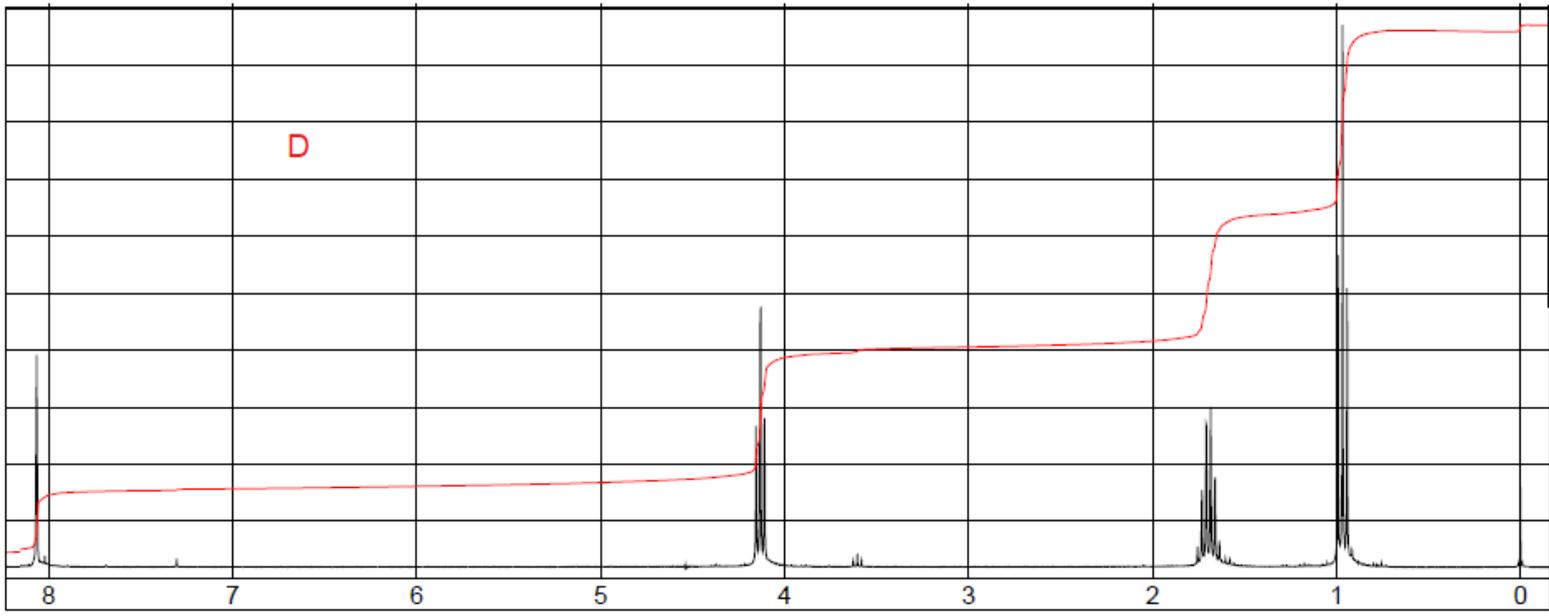
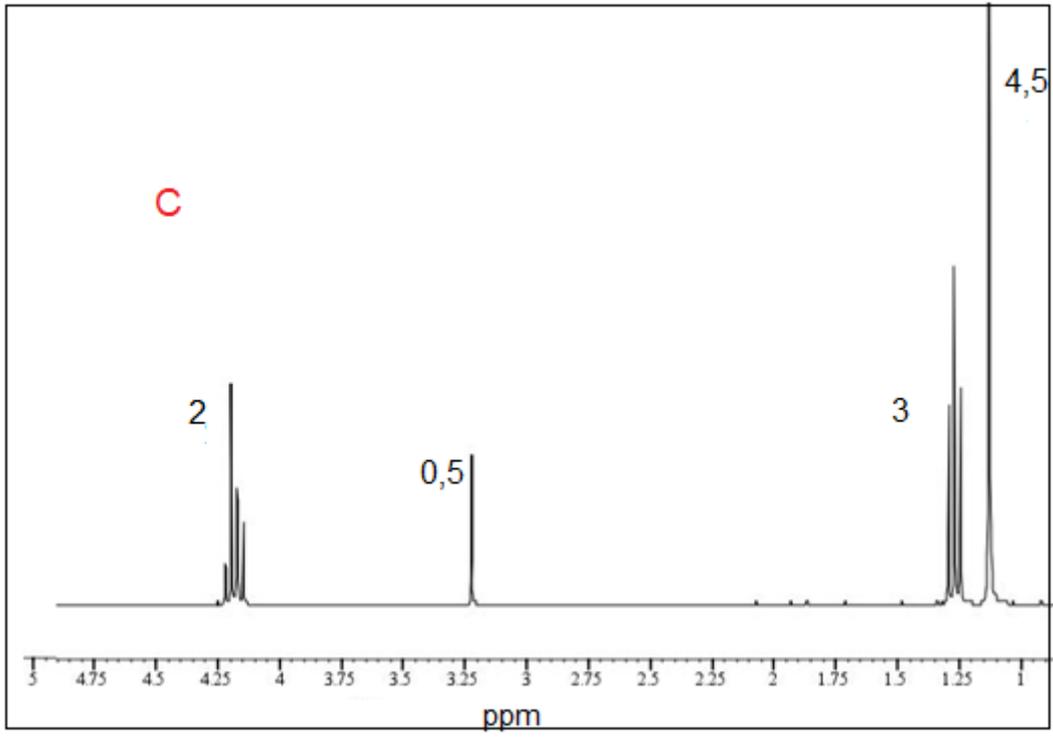
- b) Seguindo a mesma lógica, como deveríamos calcular o deslocamento químico de :
- b1) um quarteto
 - b2) um quinteto
 - b3) um dubleto de dubletos?

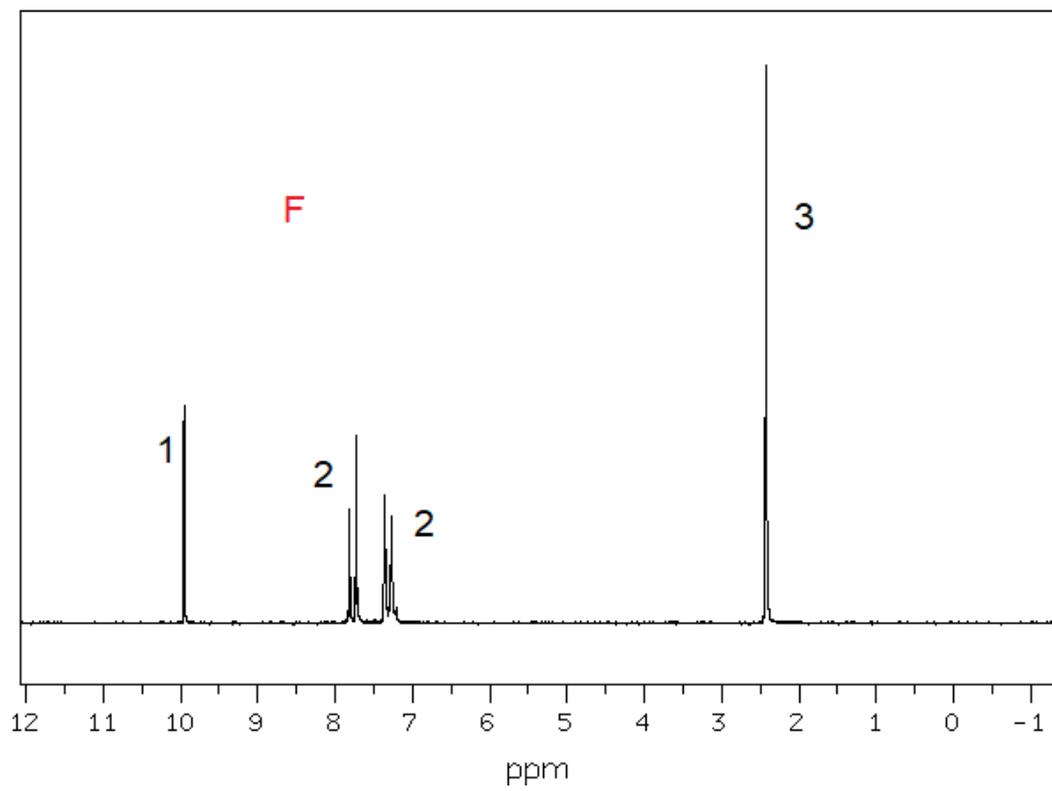
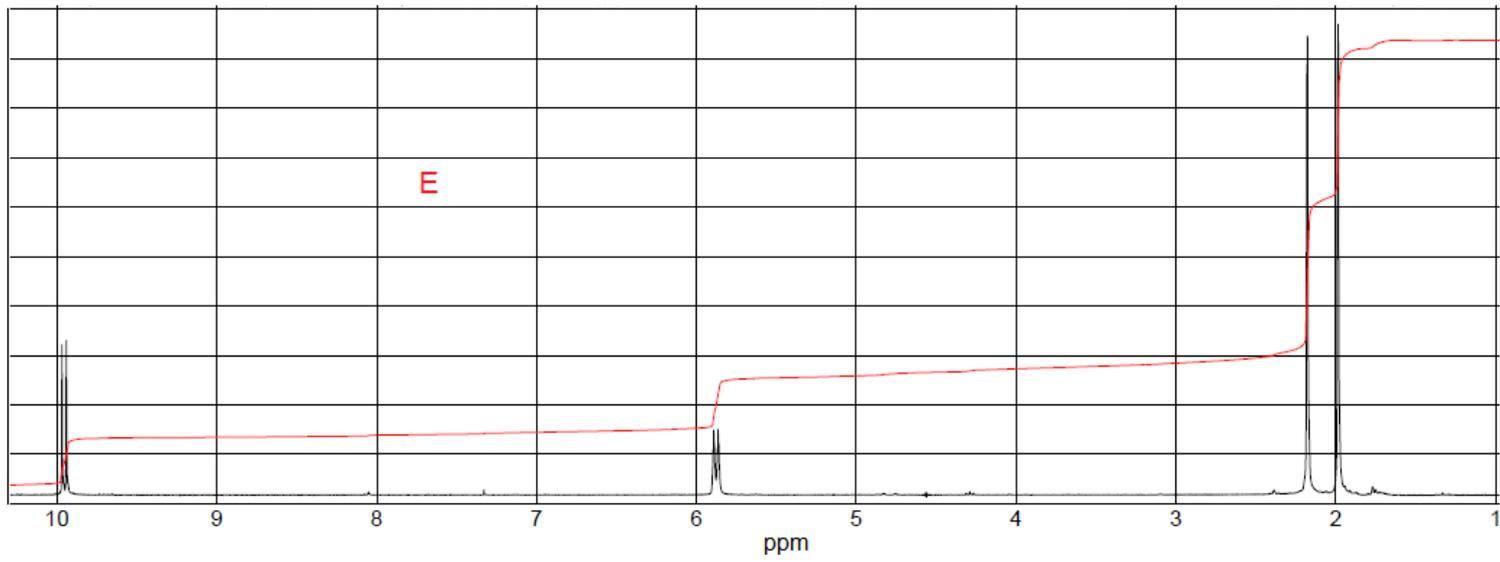
6) Escolha a estrutura correta para cada um dos espectros de RMN de ^1H e estão apresentados logo após as estruturas.

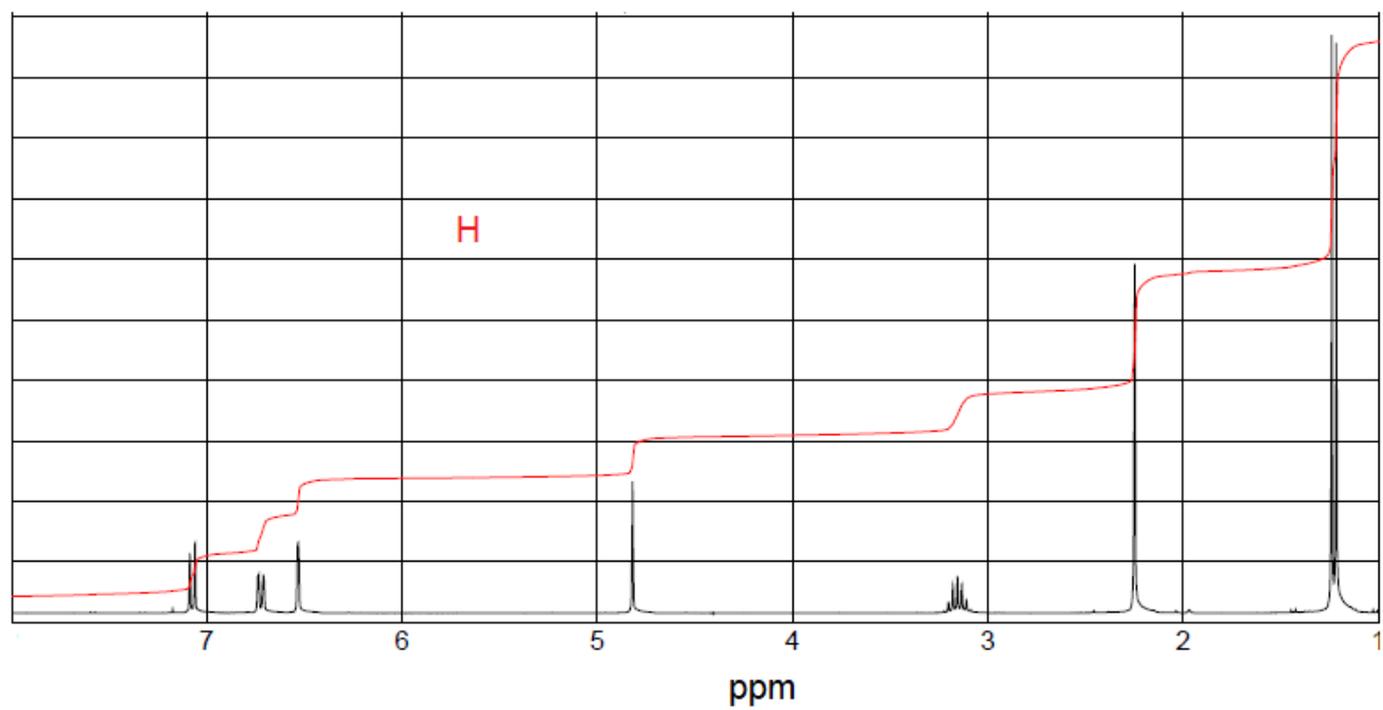
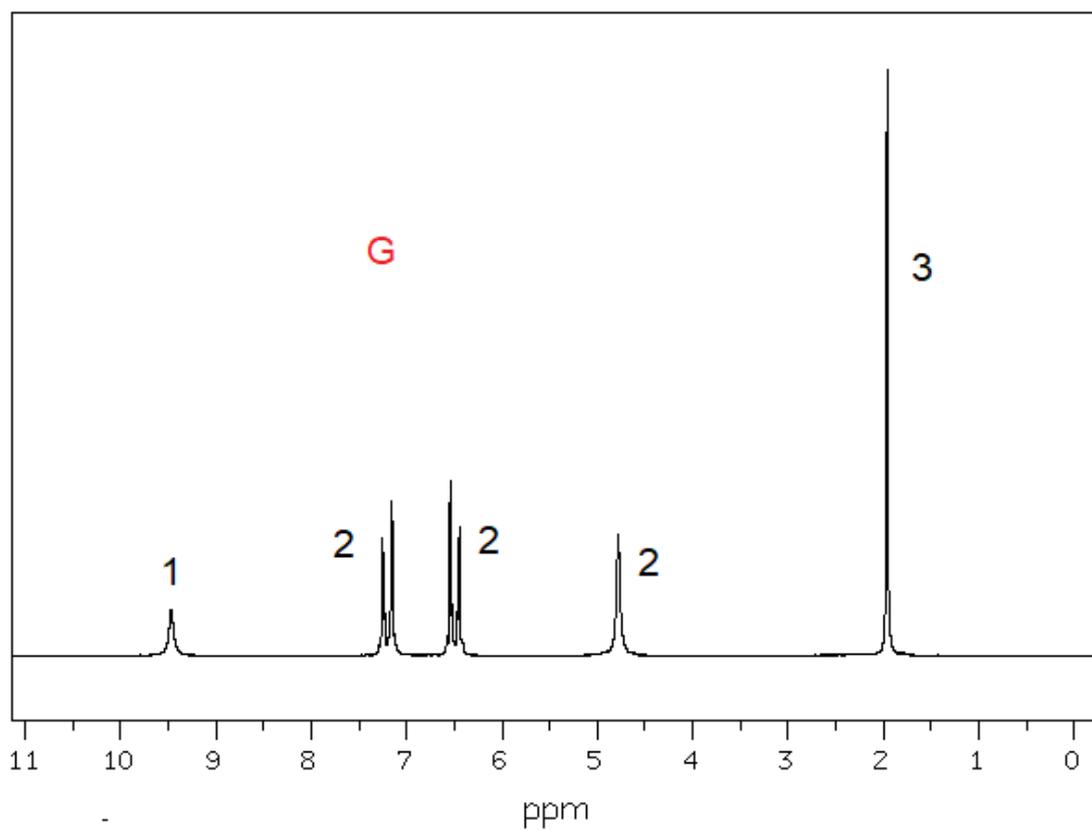
DICA : Antes de procurar o espectro correspondente a cada estrutura, determine o número de sinais esperados e a multiplicidade de cada sinal.

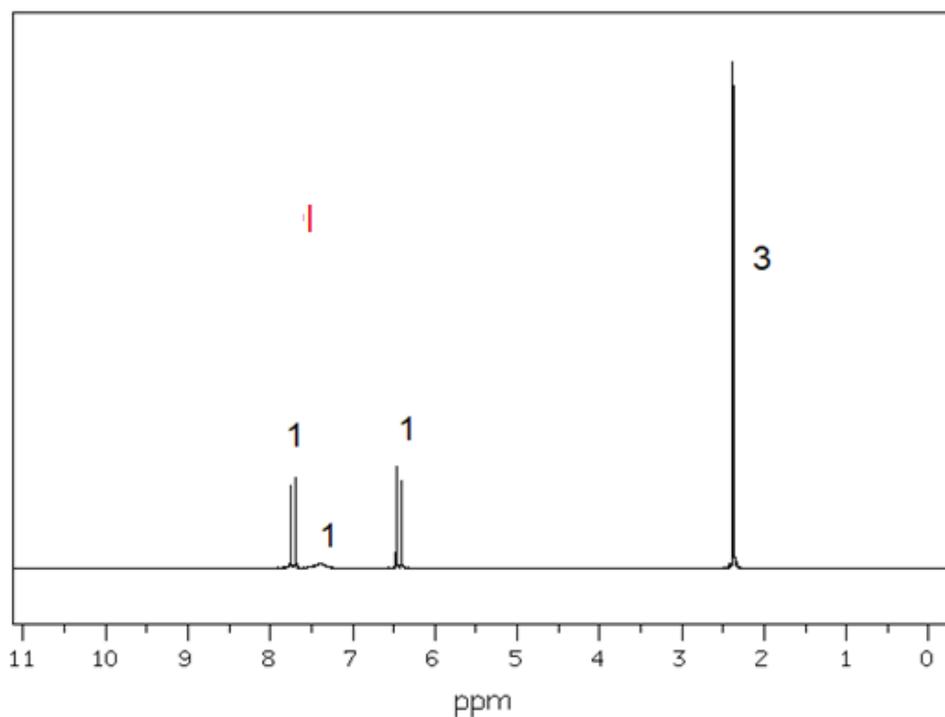






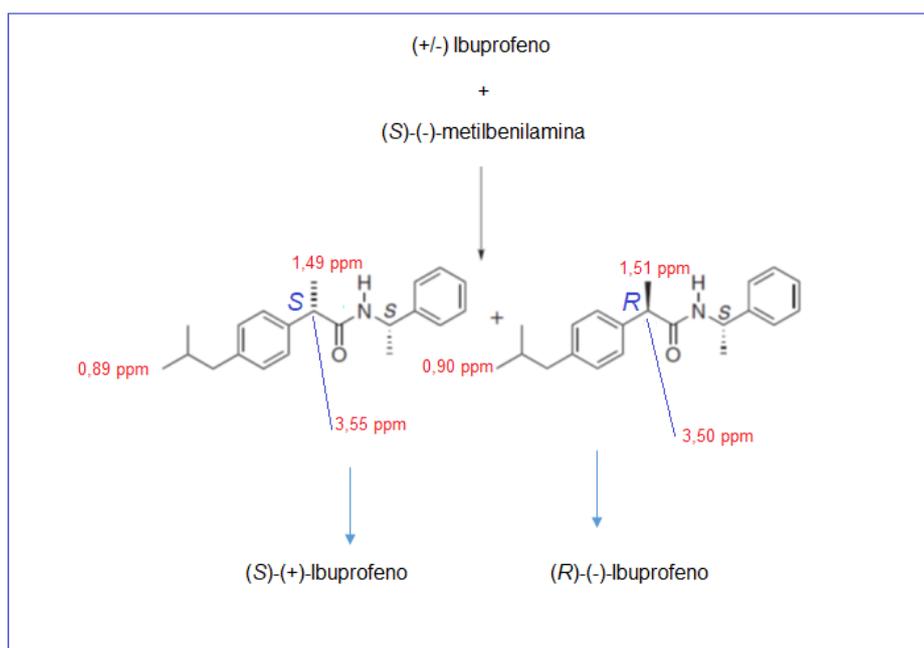






7) O fármaco ibuprofeno é comercializado na sua forma racêmica. Quando o (+/-) ibuprofeno foi tratado com a (S)(-)-metilbenilamina, formaram-se amidas diastereoméricas:

Referência :A.L.Romero, L.H.B.Baptistella, F.Coelho e P.Imamura, Quim.Nova **2012**,35,1680.



Desta forma é possível separar os dois enantiômeros do Ibuprofeno. Esses dois enantiômeros, agora separados, apresentam diferentes propriedades biológicas. Este é um método de separação de enantiômeros, frequentemente utilizado na indústria farmacêutica.

Não é possível distinguir enantiômeros por RMN de H, pois apresentarão espectros idênticos. Porém, para dois diastereoisômeros, os espectros podem ser bem diferentes. A figura acima apresenta os deslocamentos químicos de alguns sinais das duas amidas diastereoméricas.

- Qual a multiplicidade do sinais assinalados em vermelho para a amida de configuração *S,S*
- Se registrarmos, em separado, os espectros de RMN de H de soluções de mesma concentração de (*S*)-Ibuprofeno e de (*R*)-Ibuprofeno e, em seguida, misturarmos as duas soluções e registrarmos um novo espectro, esse novo espectro será

- diferente dos anteriores quanto aos deslocamentos químicos dos sinais.
- idêntico aos dois anteriores.
- diferente dos anteriores quanto à multiplicidade dos sinais.
- igual aos anteriores mas com sinais mais intensos.
- diferente dos anteriores, pois os sinais terão se anulado.

- Este é o espectro do ibuprofeno racêmico. Os deslocamentos químicos dos sinais são: 0,89 ; 1,52 ; 1,87 ; 2,47 ; 3,72 ; 7,12 ; 7,24 e 10,5 ppm. Desenhe a molécula e atribua cada um desses sinais ao(s) próton(s) correspondente.

