

EXERCÍCIOS DE ESPECTROSCOPIA

Para resolver estes primeiros exercícios, use tudo o que você aprendeu.

- Use a regra do número 13 para descobrir a fórmula molecular quando ela não for dada. Lembre-se de que, se no espectro no infravermelho há evidência de grupo carbonila, OH, NH, ou NH₂, será necessário corrigir a fórmula inicialmente calculada. Calcule também o índice de instauração.
- Analise o espectro no infravermelho e indique a(s) banda(s) principal(is) para determinar o grupo funcional.
- Analise o espectro de RMN-H, no qual é dado o número de prótons relativo a cada sinal, ou aparece a integração feita pelo instrumento. Some o número de prótons e veja se concorda com a fórmula molecular proposta. Analise a multiplicidade dos sinais.
- Analise o espectro de C-13 desacoplado e o espectro de C-13 acoplado, se for fornecido.
-
- Analise o DEPT-135 se fornecido.
- Efetue cálculos de deslocamento químico tanto para RMN-H e para RMN C-13 para a fórmula estrutural que você está propondo, e compare os resultados com os dados do espectro real.
- Confirme sua proposta estrutural, analisando o pico base e outras fragmentações no espectro de massas.

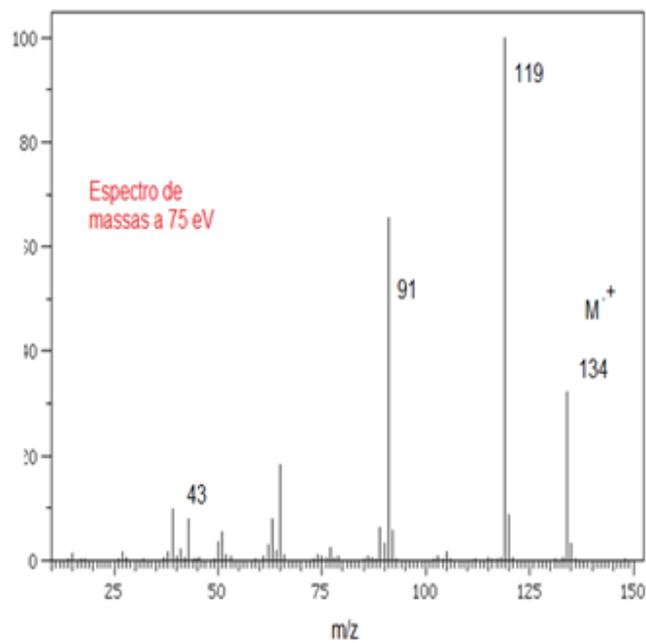
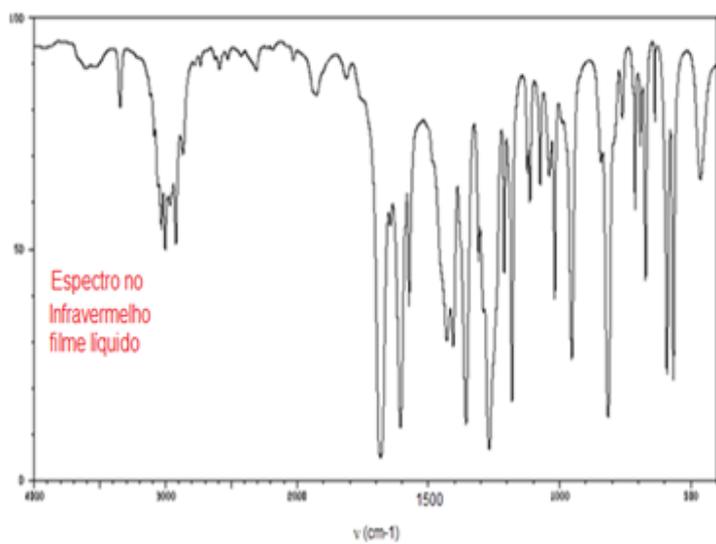
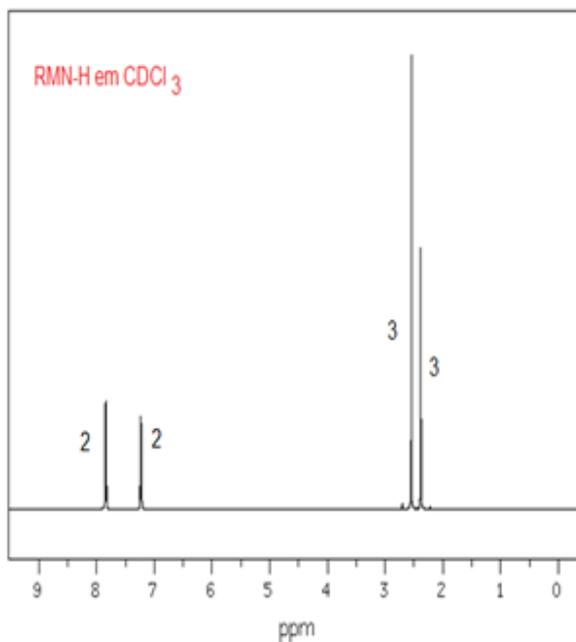
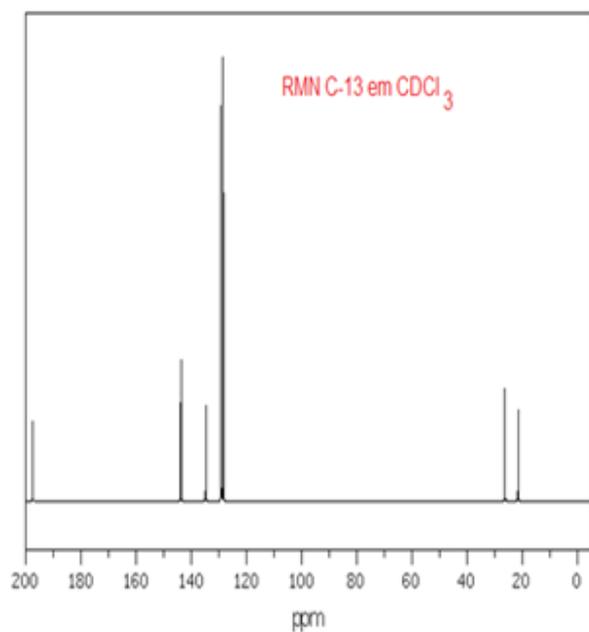
PS1. Carbonos quaternários e de grupo carbonila aparecem , no espectro de C-13 desacoplado, com baixa intensidade.

PS2. Hidrogênios de grupos OH ou NH₂ trocam o hidrogênio por deutério quando é adicionada uma gota de D₂O à solução da amostra. Os sinais desses hidrogênios deverão desaparecer com a adição da água deuterada.

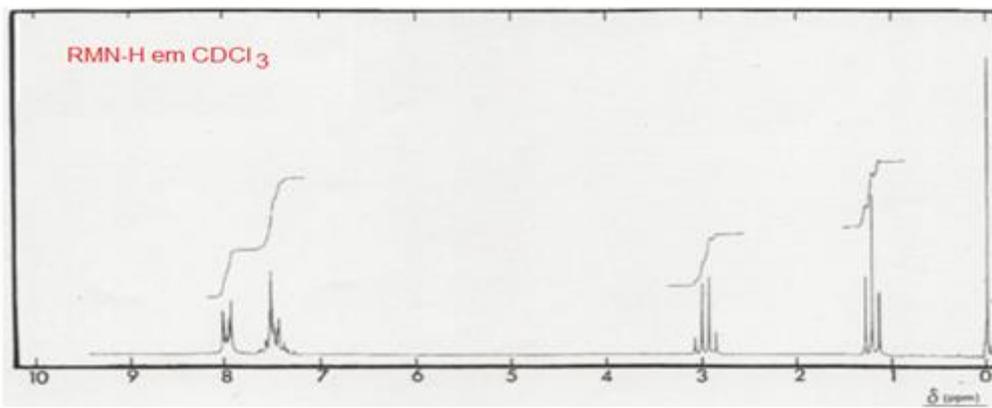
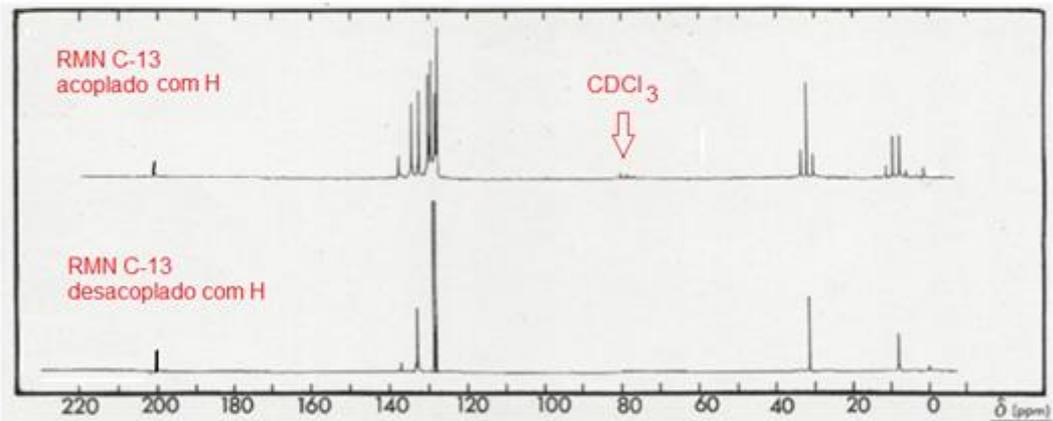
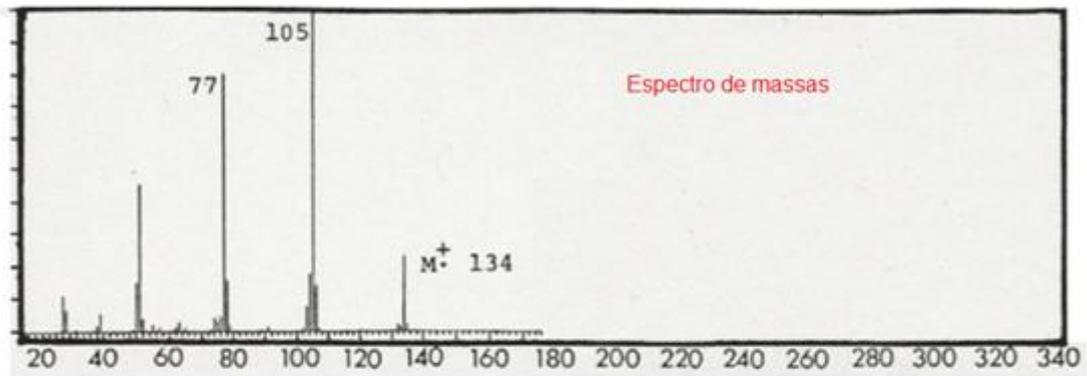
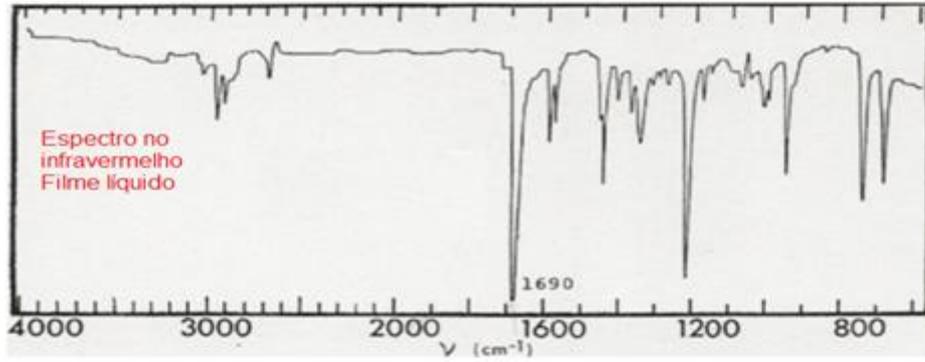
Não desanime com as dificuldades iniciais. Com a prática fica tudo mais fácil.

Em breve enviaremos as fórmulas estruturais que são as respostas dos exercícios. Se você não acertou, não se preocupe. Reavalie o exercício e isto será um ótimo aprendizado. Porém, só procure pelas respostas após ter realmente tentado chegar ao resultado, caso contrário não haverá o necessário aprendizado.

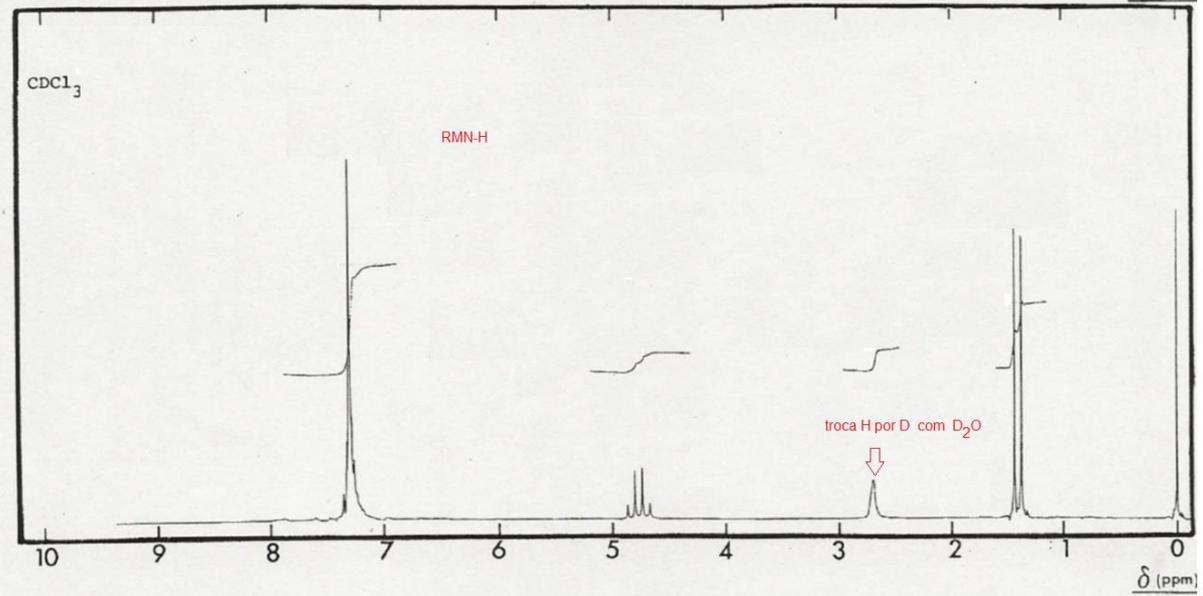
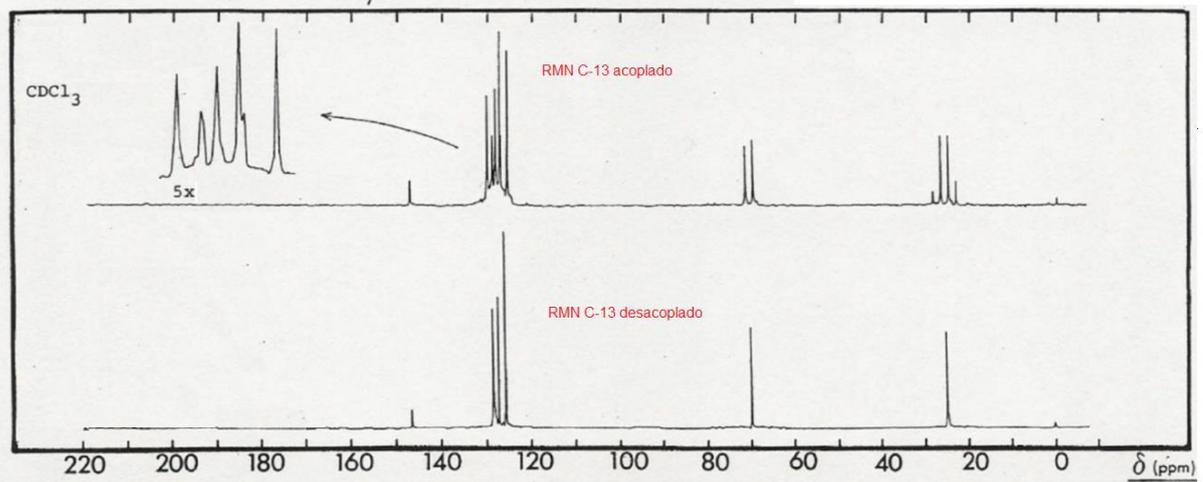
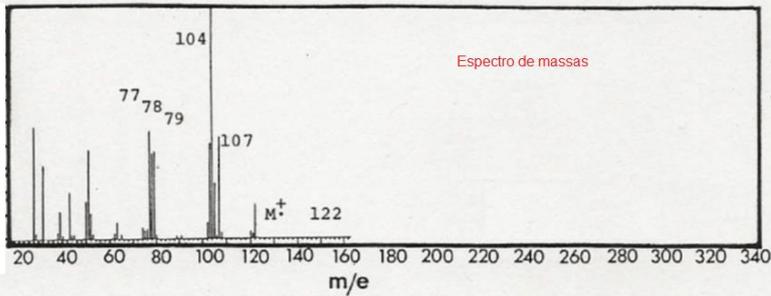
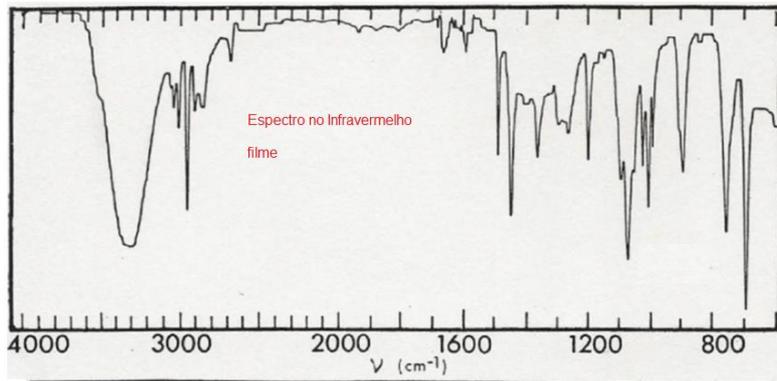
Exercício 1



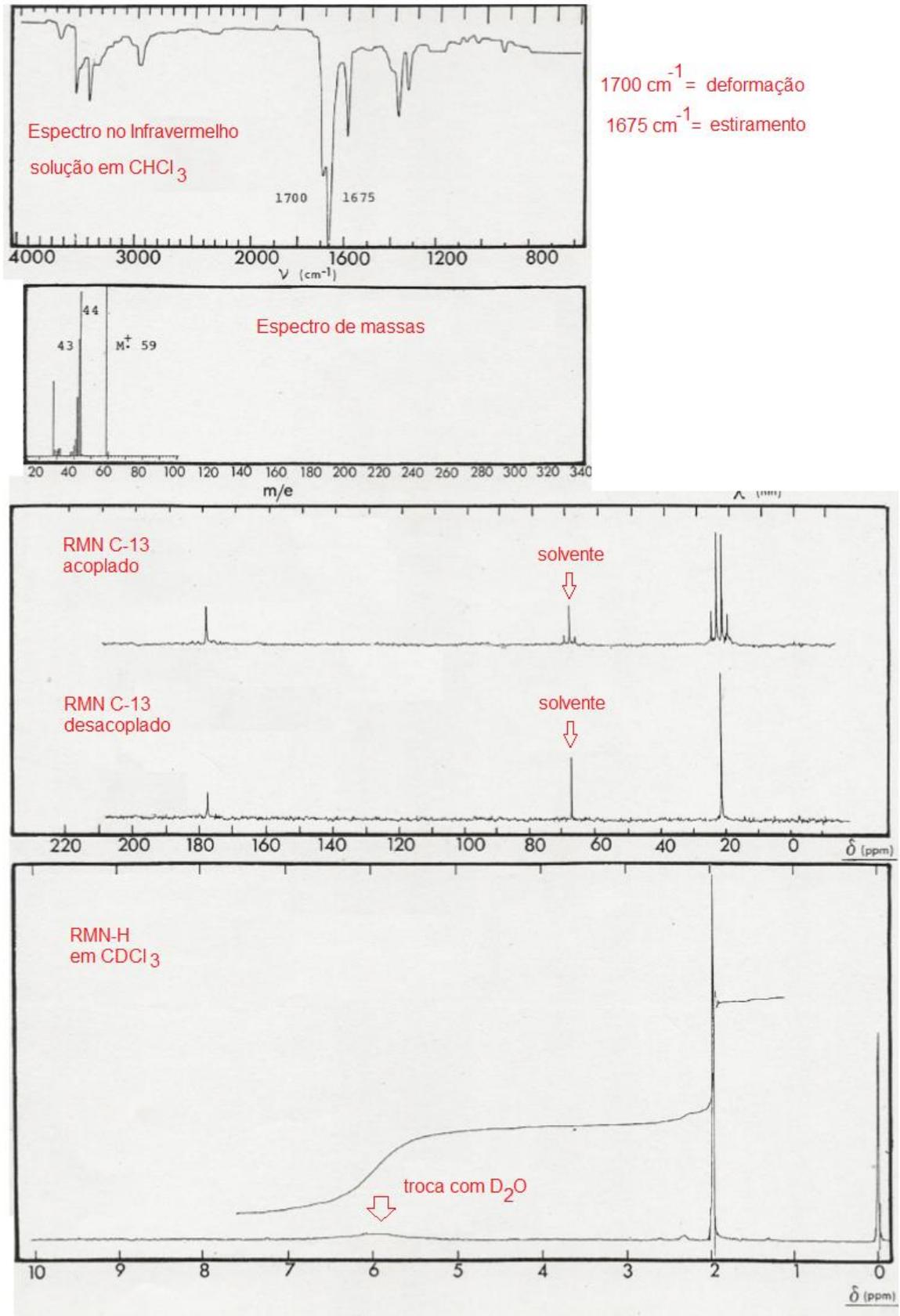
Exercício 2



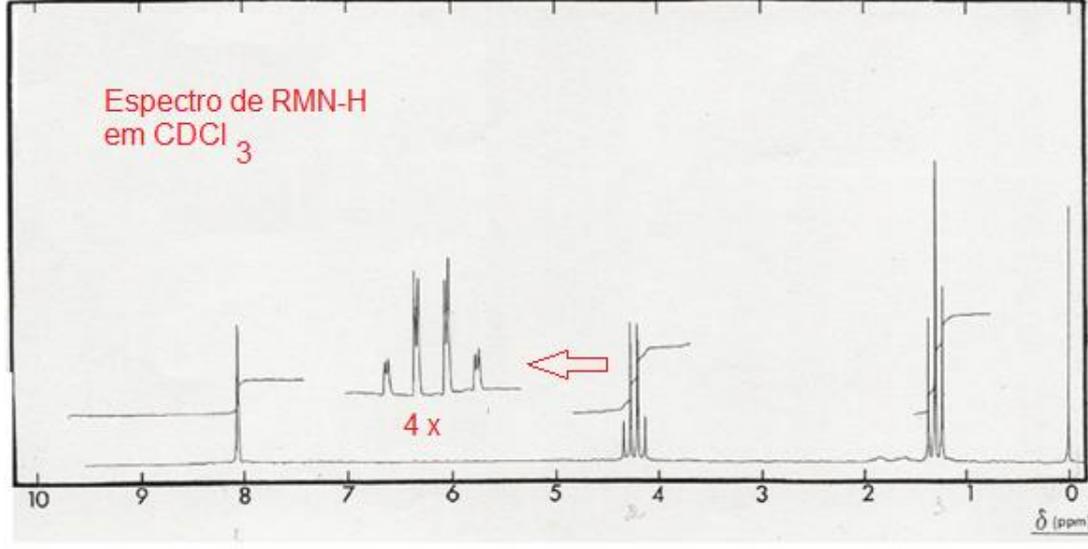
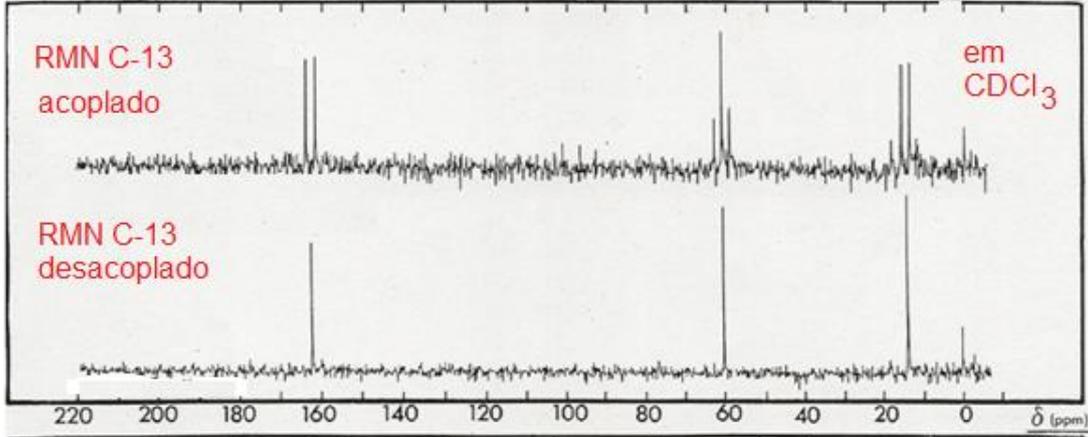
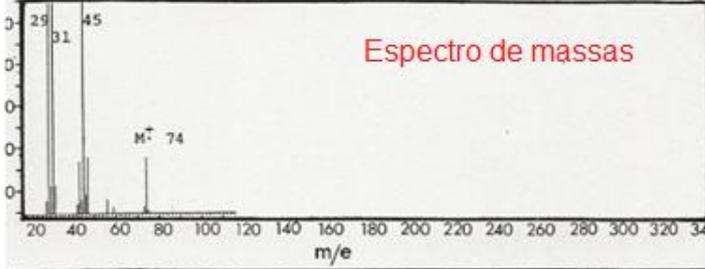
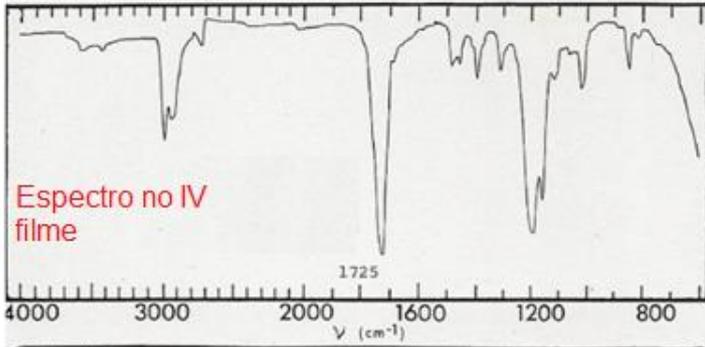
Exercício 3



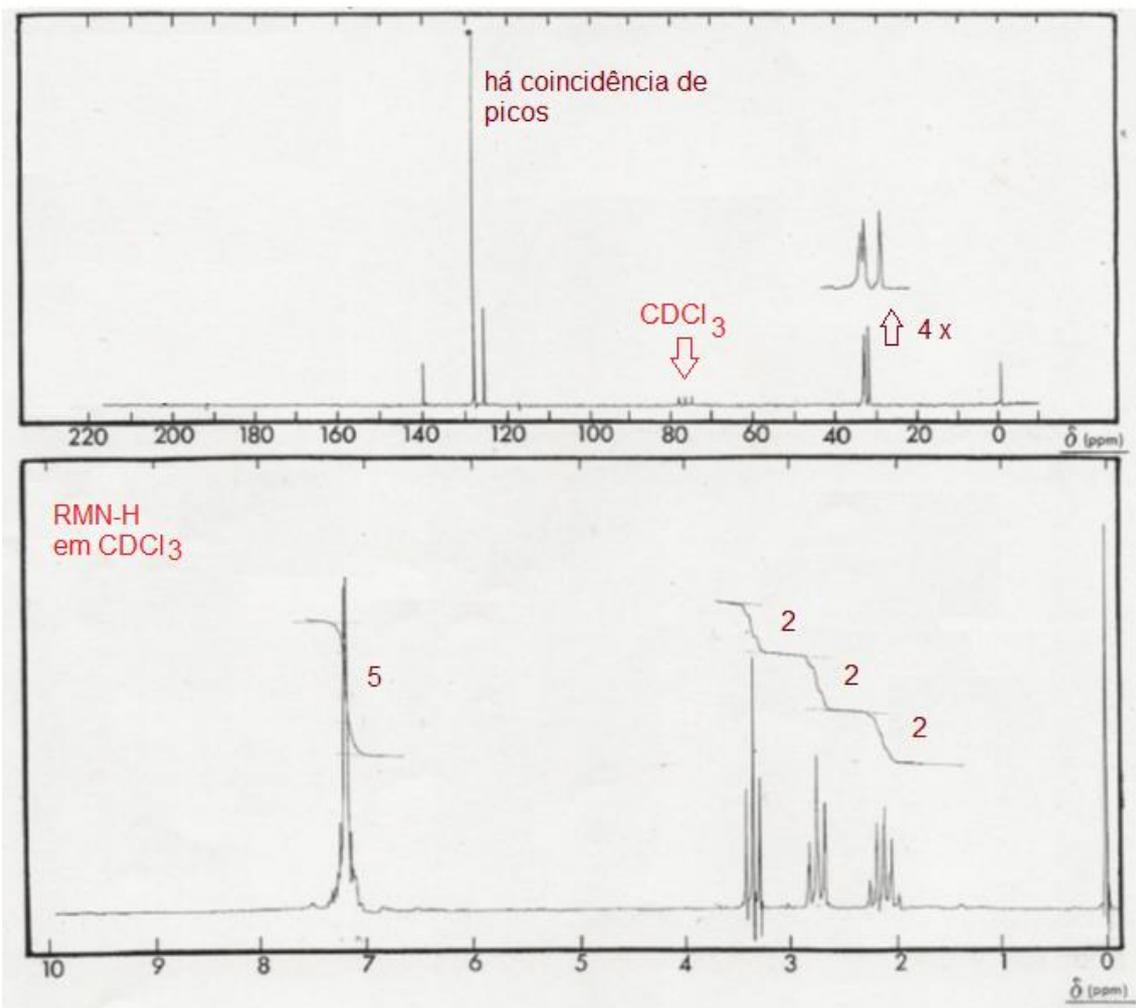
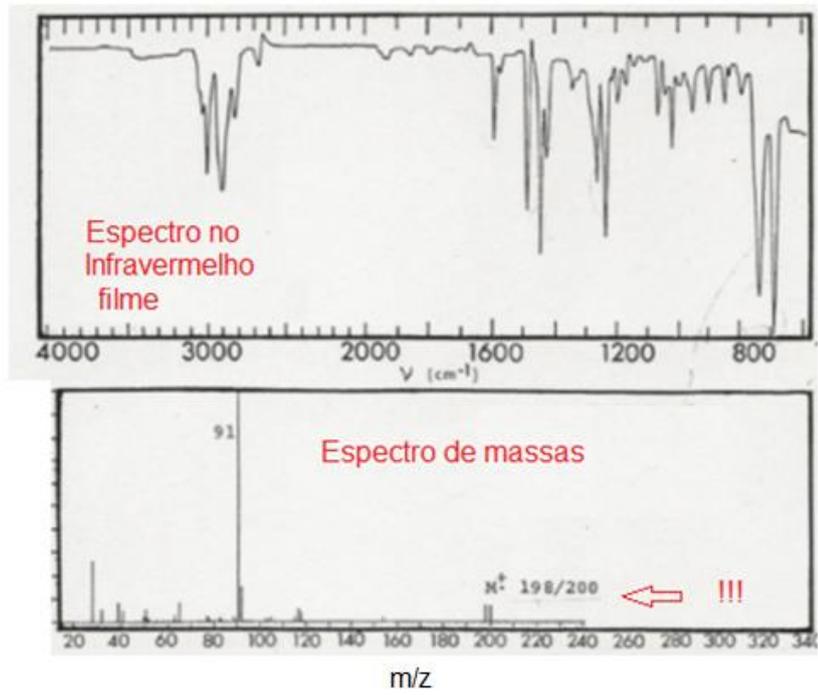
Exercício 4



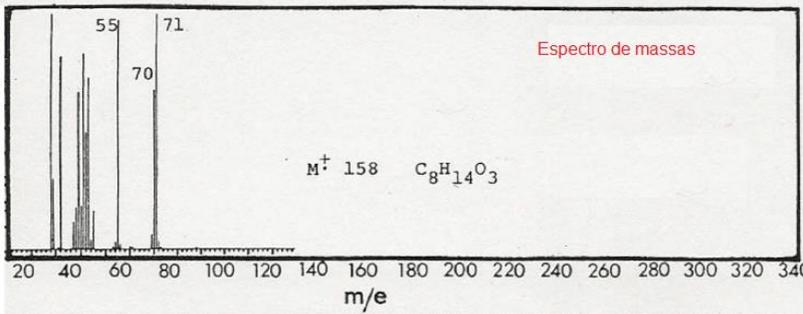
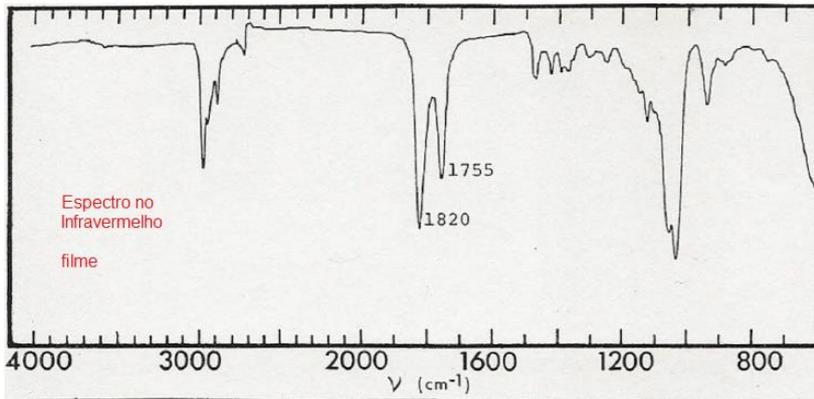
Exercício 5



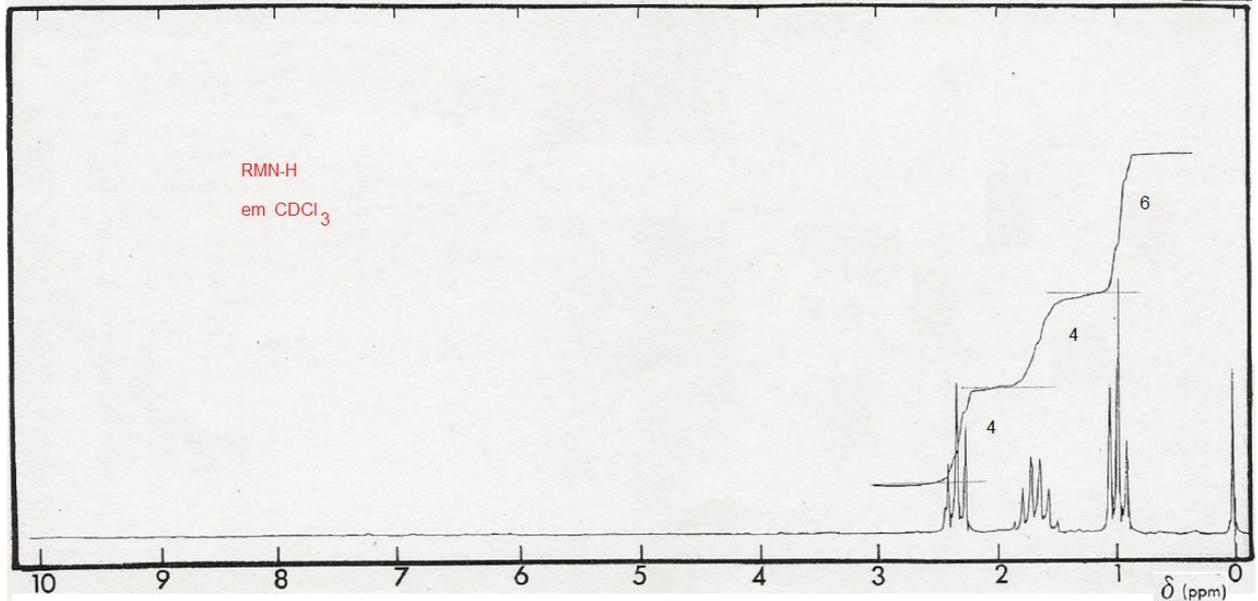
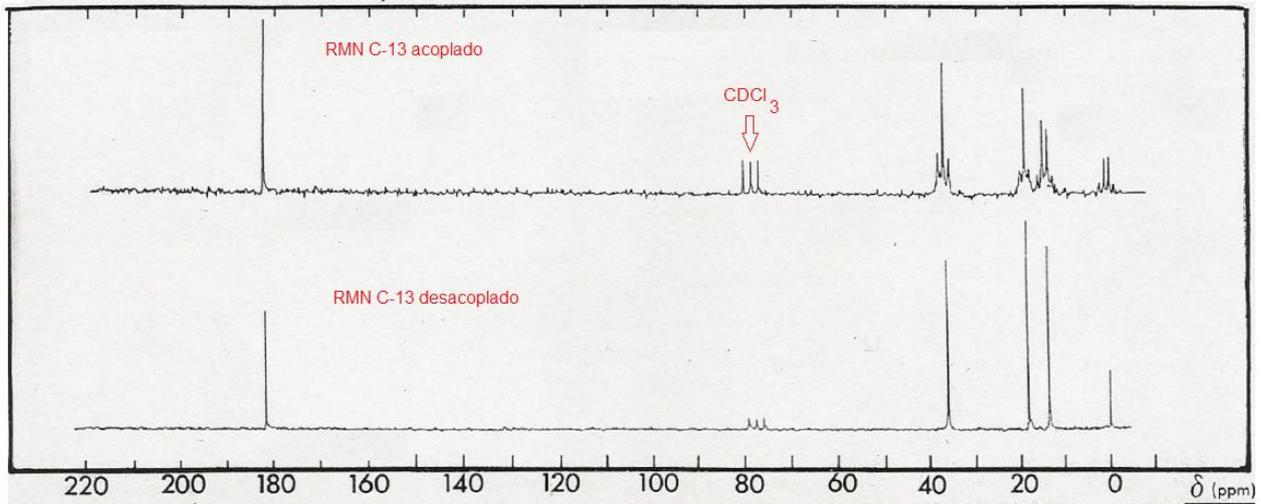
Exercício 6



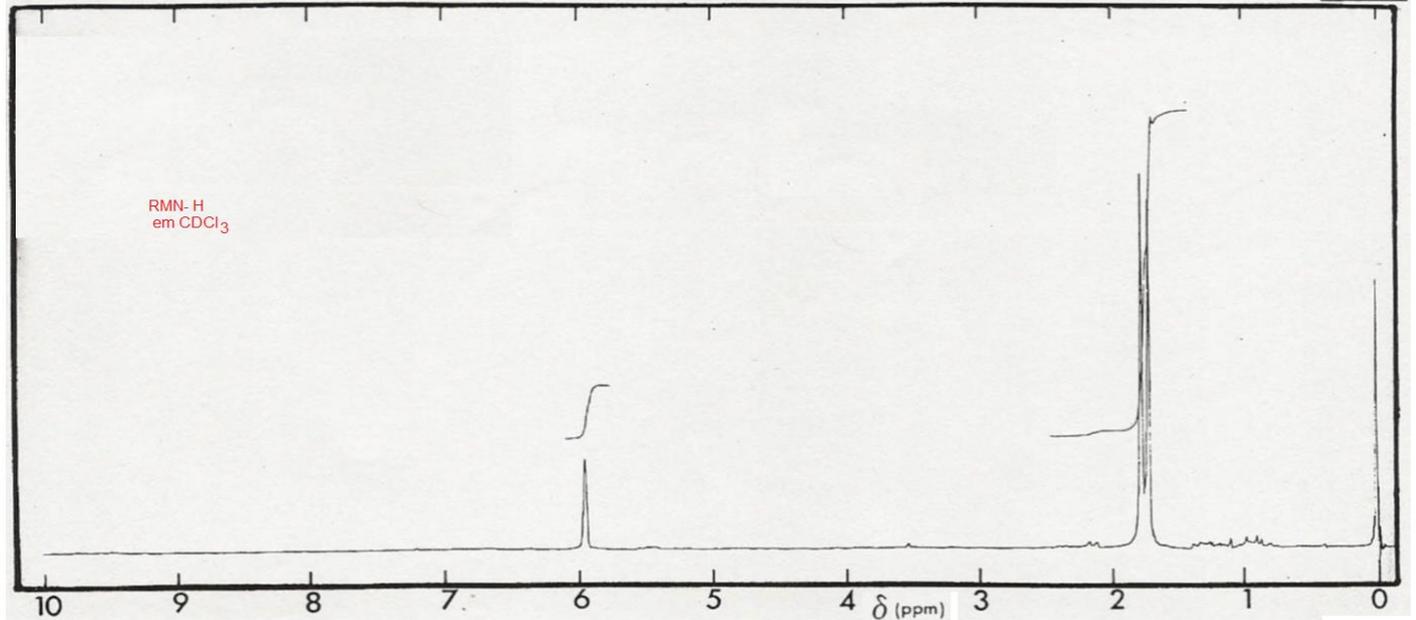
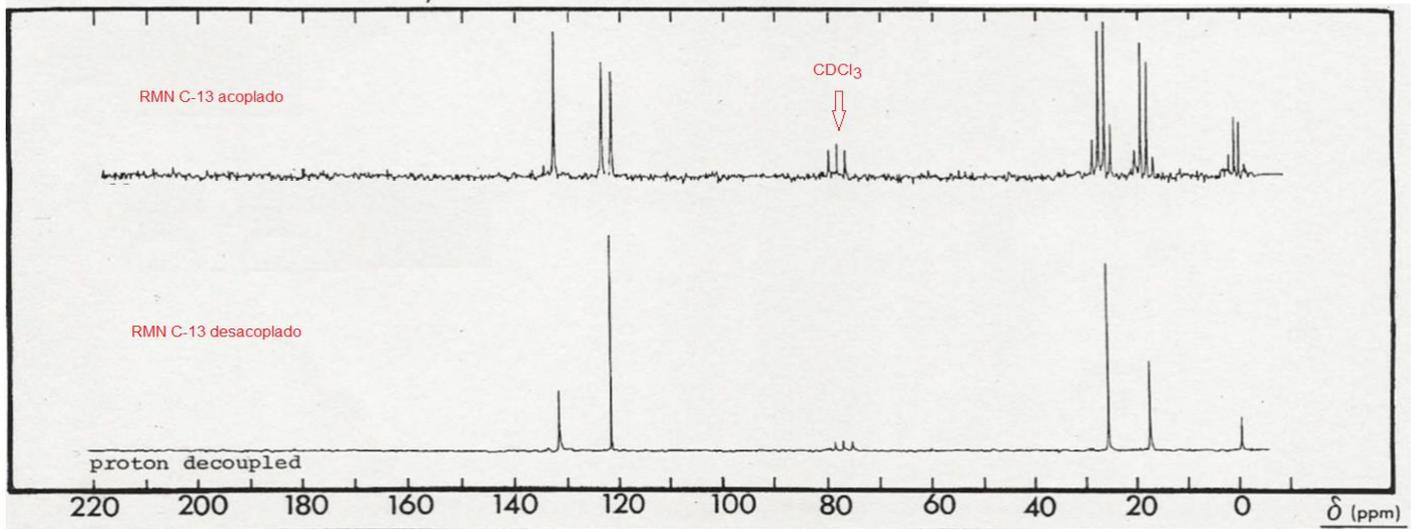
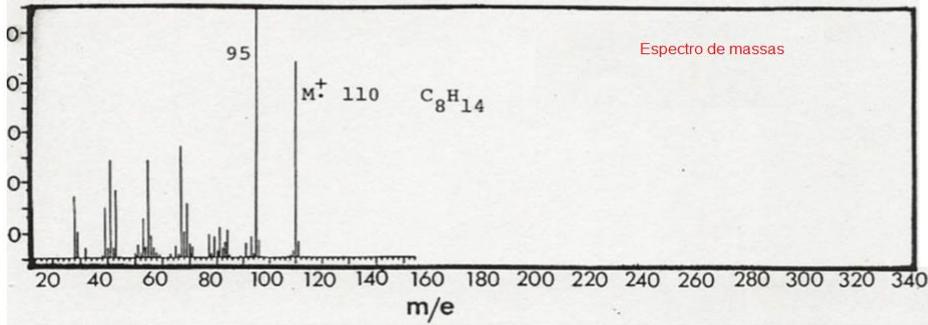
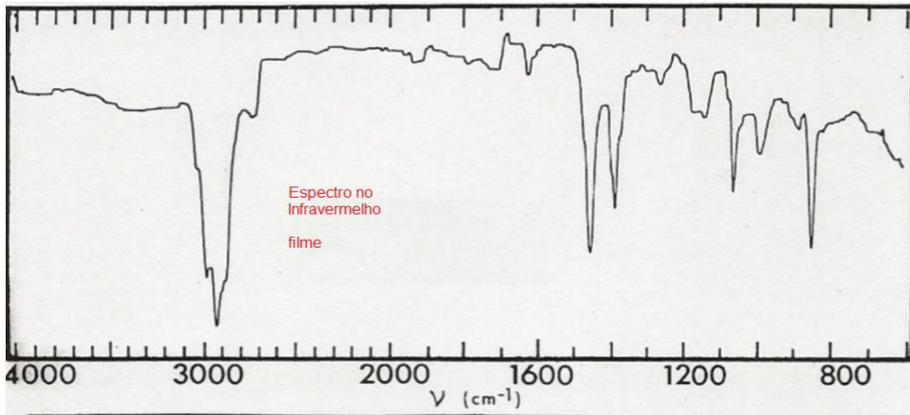
Exercício 7



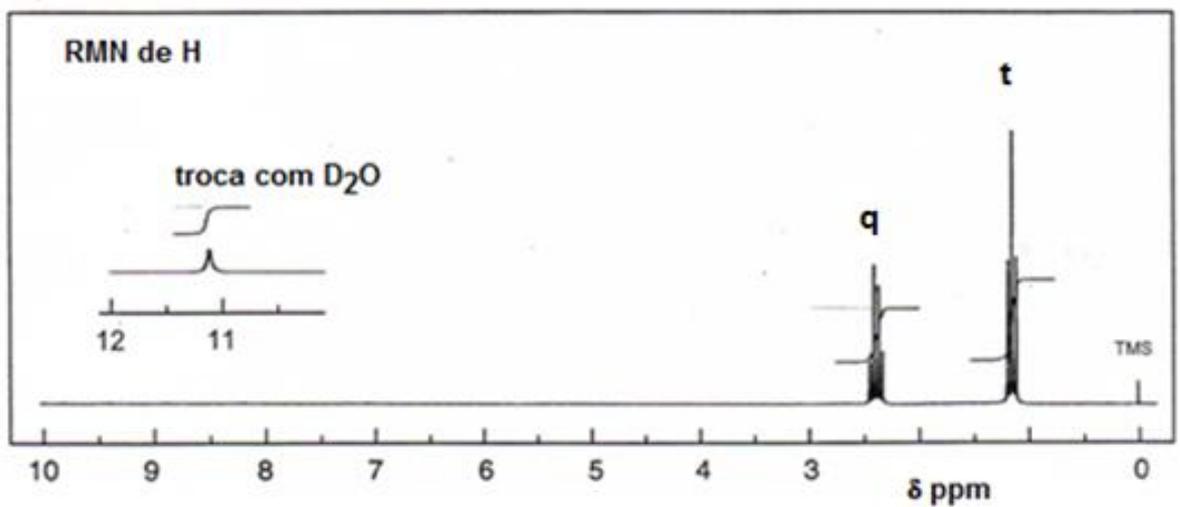
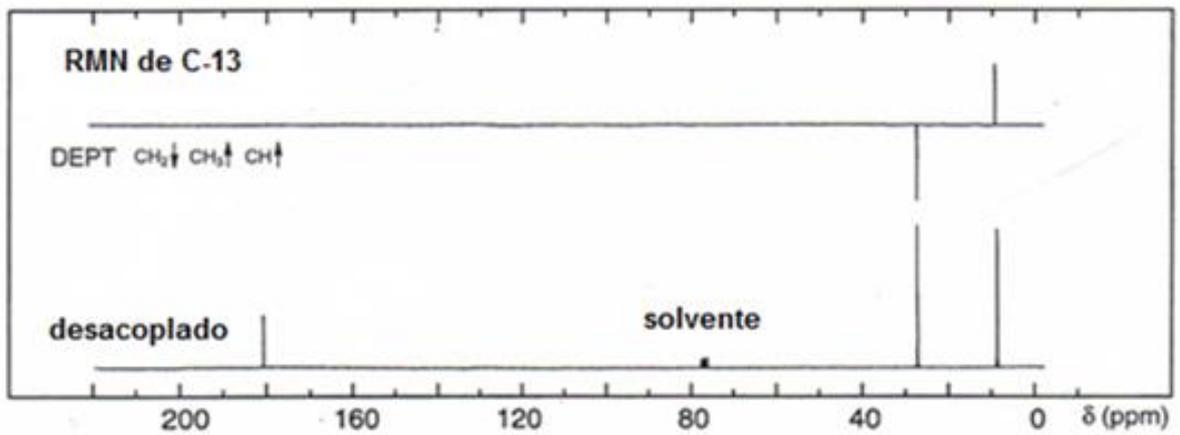
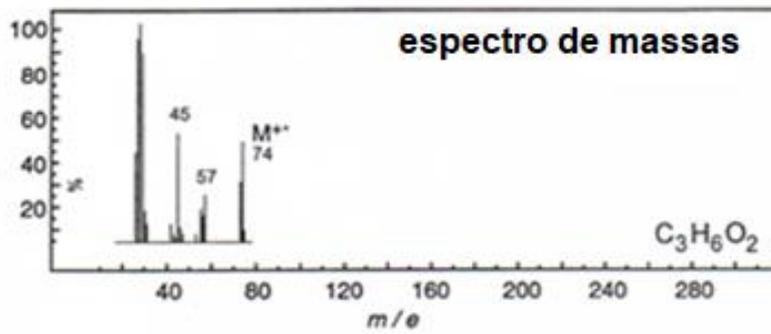
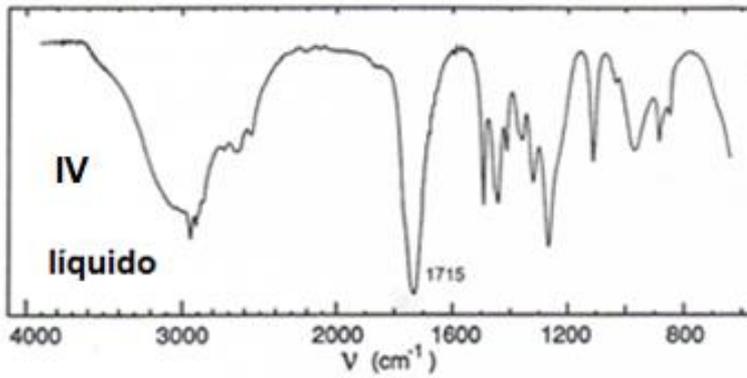
o sinal do ion molecular é muito pouco intenso, menos de 1% e, portanto, é pouco visível.



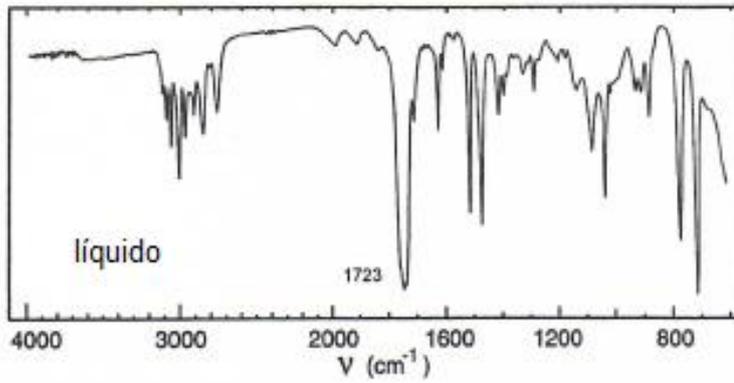
Exercício 8



Exercício 9



Exercício 10



IV

