

EXERCÍCIOS SOBRE ESPECTROMETRIA DE MASSAS

1) Para um composto que apresentou, no espectro de massas, um íon molecular de 136 m/z, utilize a regra do número 13, e proponha uma fórmula molecular com:

- a) C, H e um átomo de O.
- b) C,H e dois átomos de N.

2) No espectro de massas de um determinado composto, foram observados o íon molecular e fragmentos com os seguintes valores de m/z:

43, 57, 87, 101 e 116 (íon molecular)

Com base nesses dados,

- a) Calcule o índice de instauração da molécula, supondo que ela contenha C, H e um átomo de O.
- b) Decida qual dos seguintes compostos apresenta a fórmula estrutural correta, considerando-se a fragmentação observada no espectro de massas :

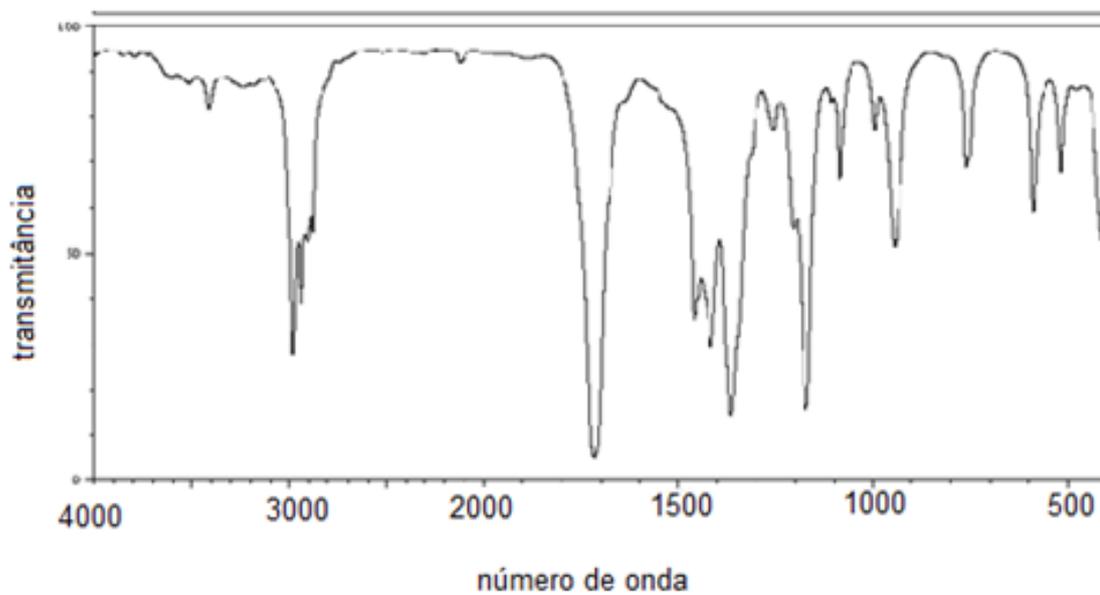
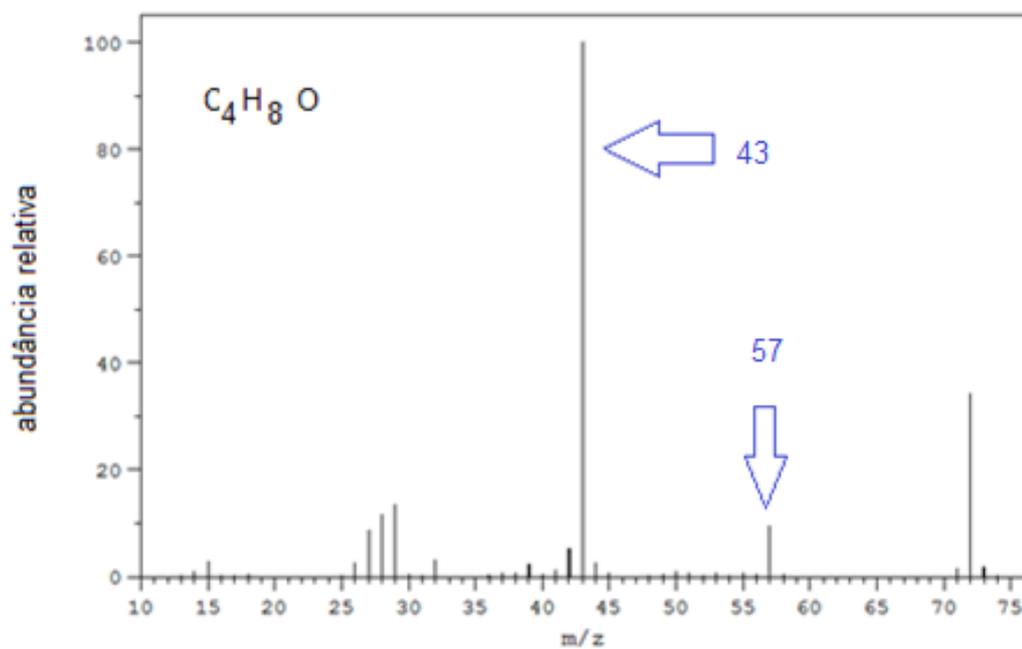
b₁) cloreto de n-propila

b₂) brometo de isso-propila

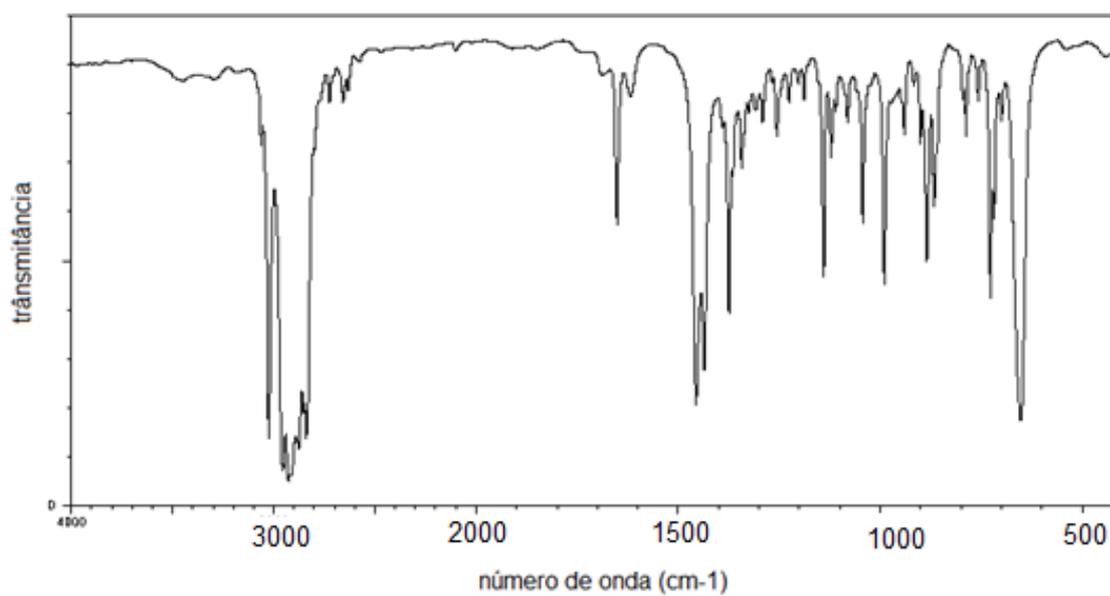
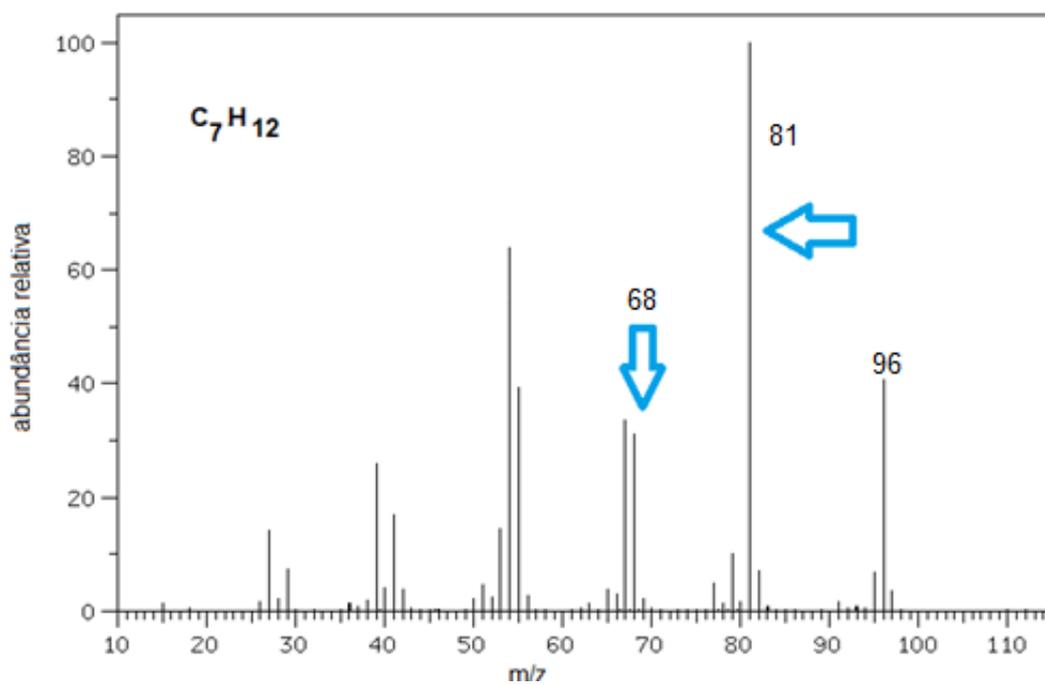
b₃) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{OCH}(\text{CH}_3)_2$

3) Para cada um dos espectros de massa apresentados abaixo, observe os fragmentos assinalados. Para ajudar na identificação da função orgânica, é apresentado o correspondente espectro no infravermelho. Calcule o índice de insaturação e consulte, também, o guia de fragmentação e funções orgânicas. Com base nesta análise, dê a fórmula estrutural do composto em questão.

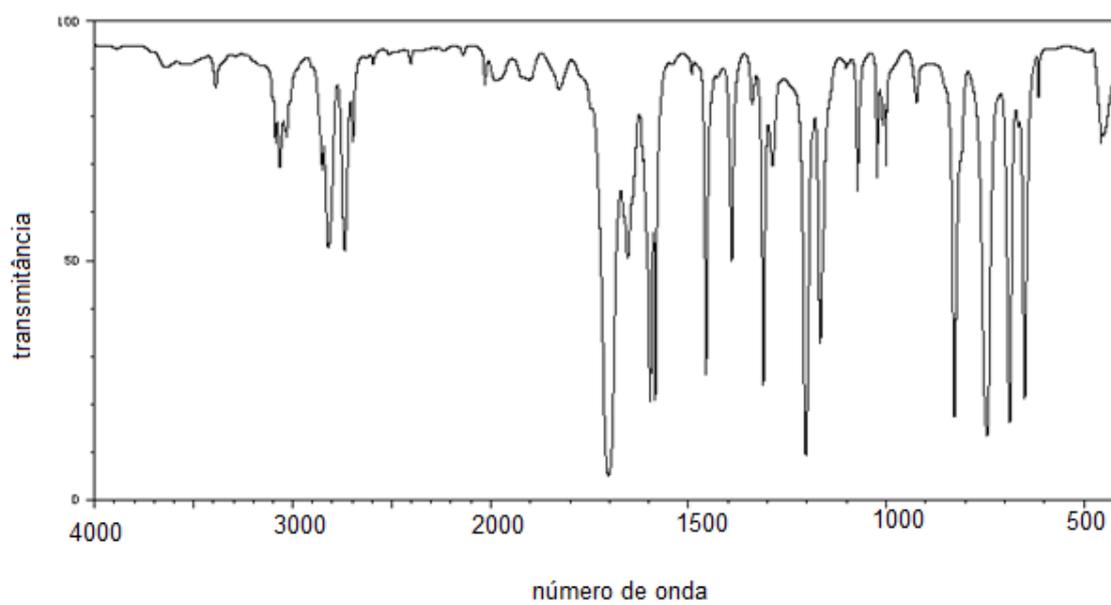
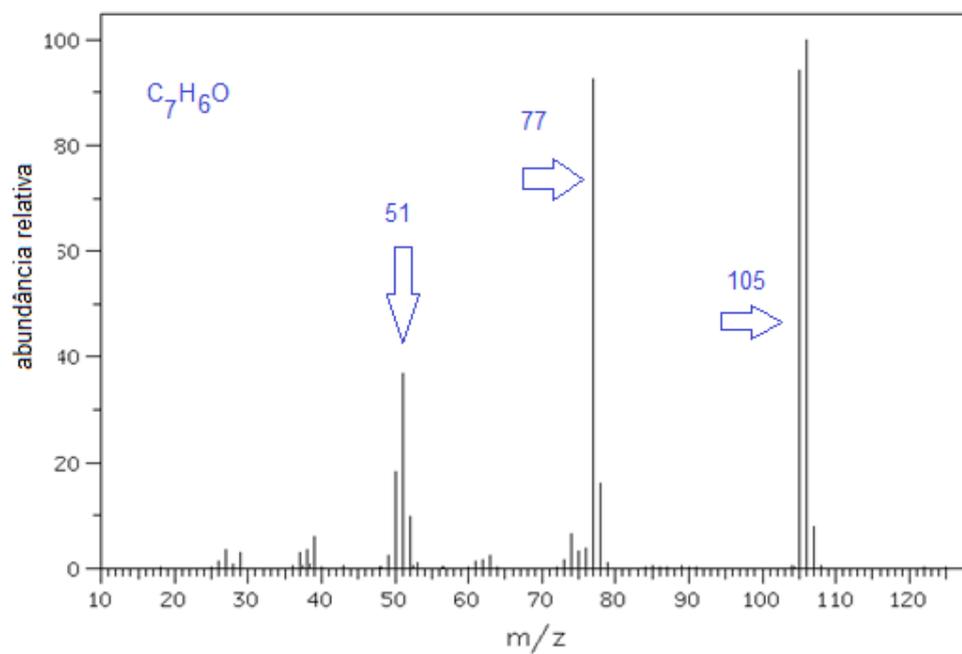
3a)



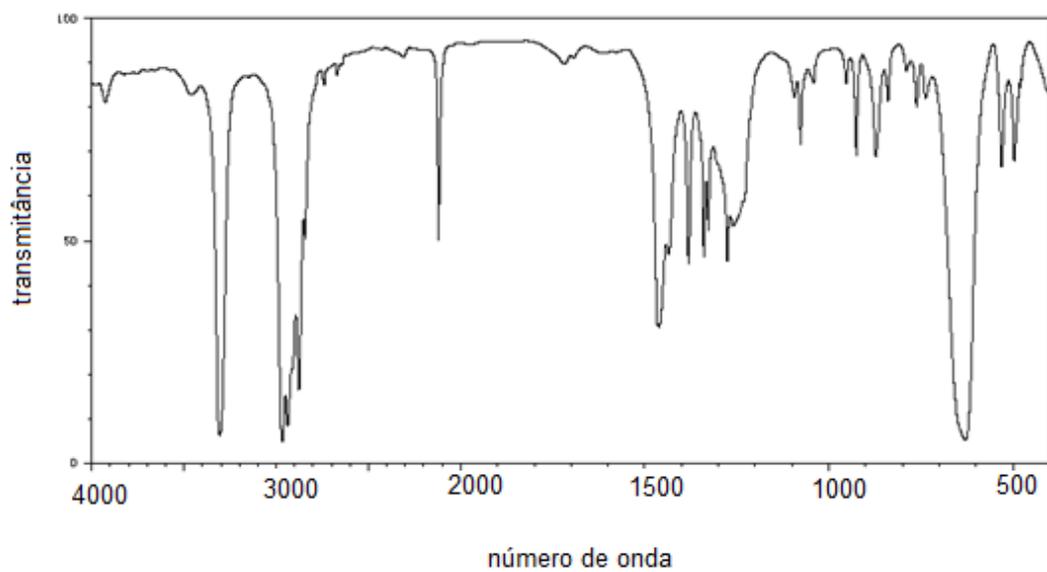
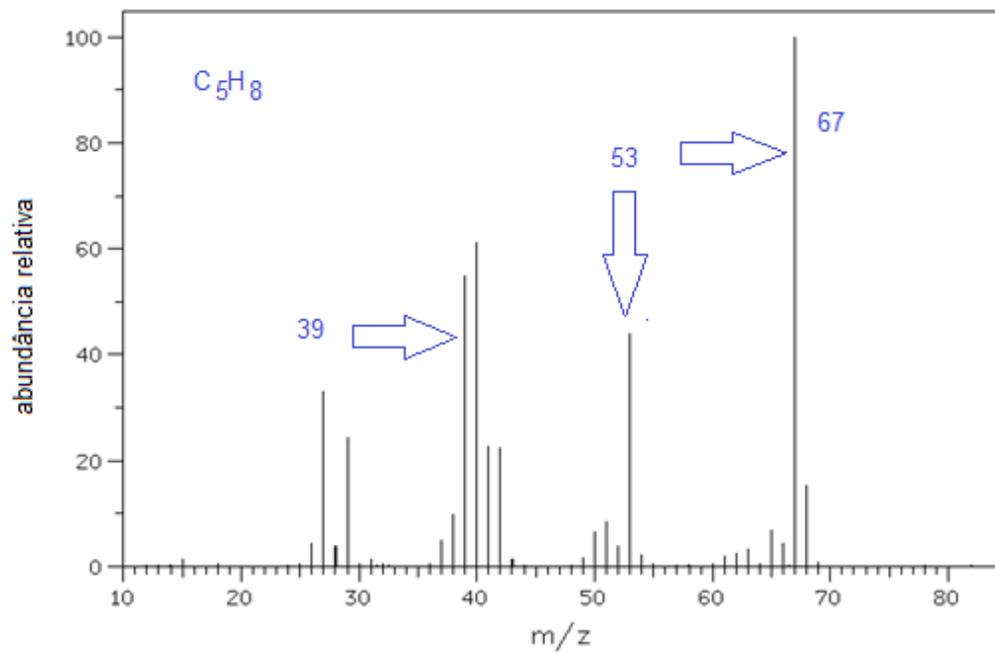
3b) dica : é um composto cíclico.



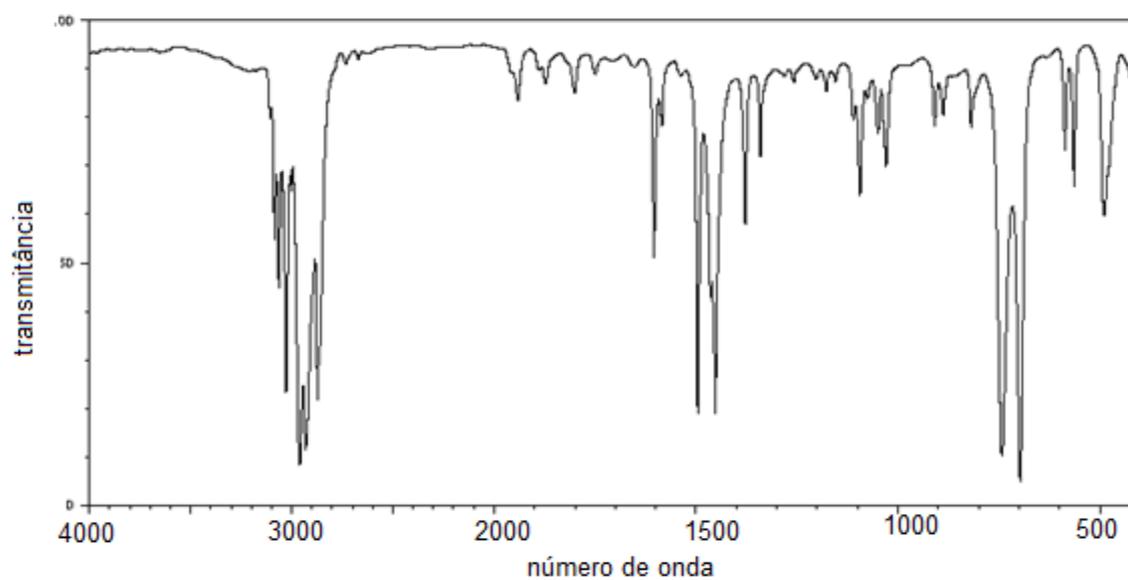
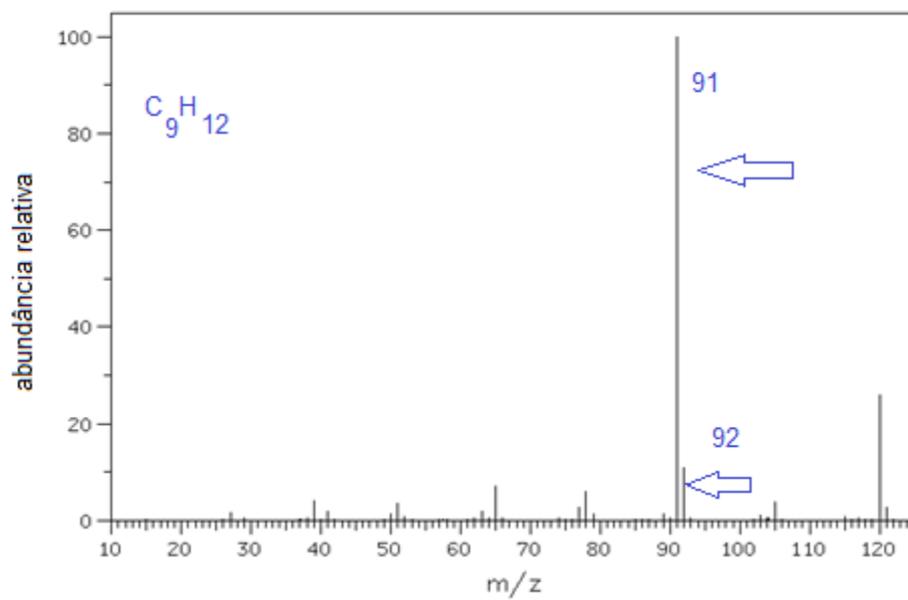
3c)



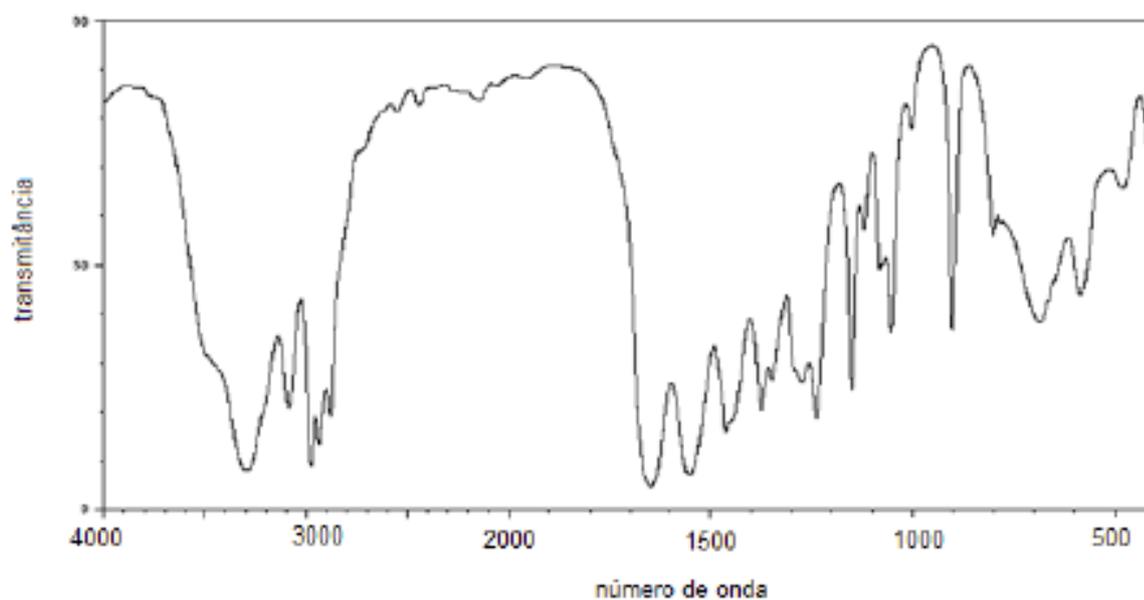
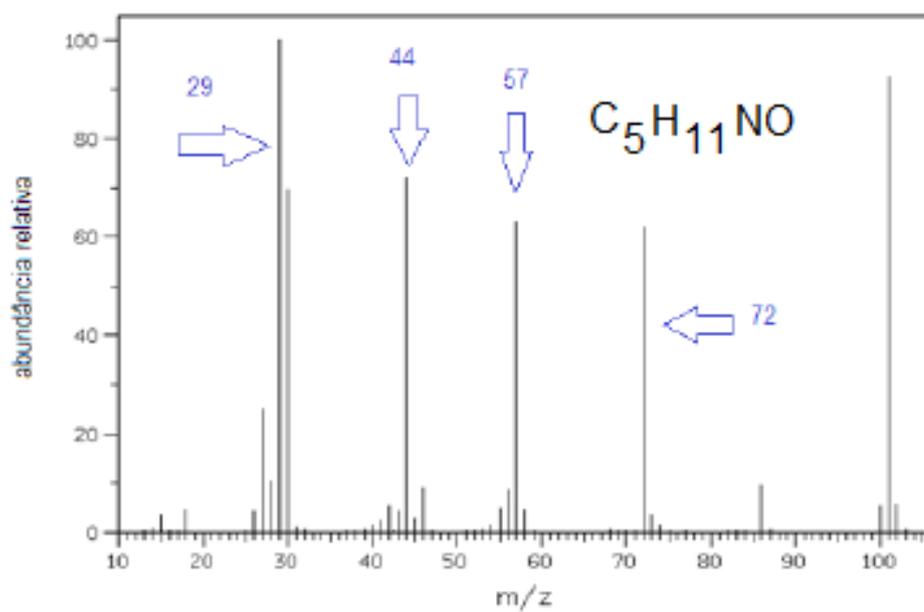
3d)



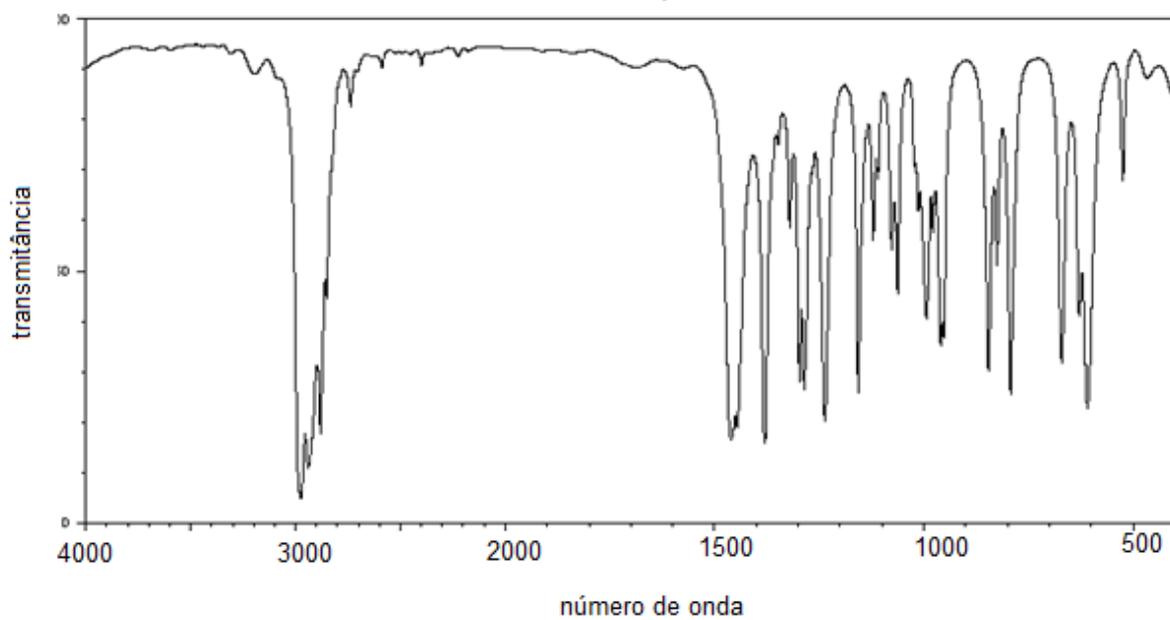
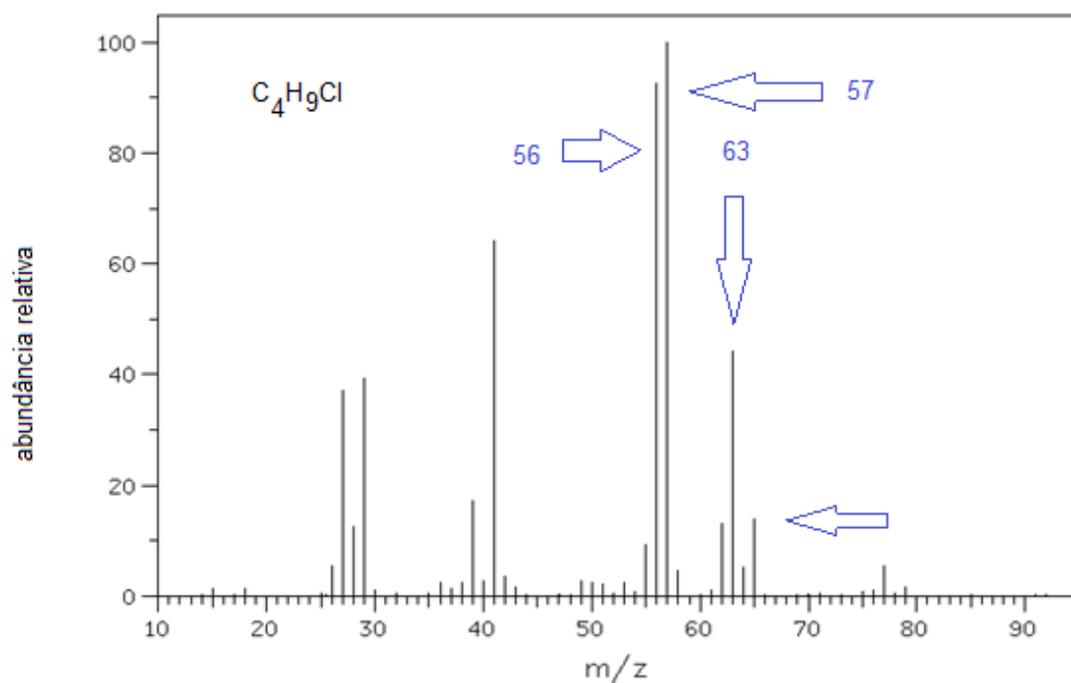
3e) tem uma cadeia lateral saturada



3f) Atenção à Regra do nitrogênio !



3g)



3h) Este é um desafio ! É um composto aromático. Em especial, tente descobrir a origem do sinal em 79 m/z.

