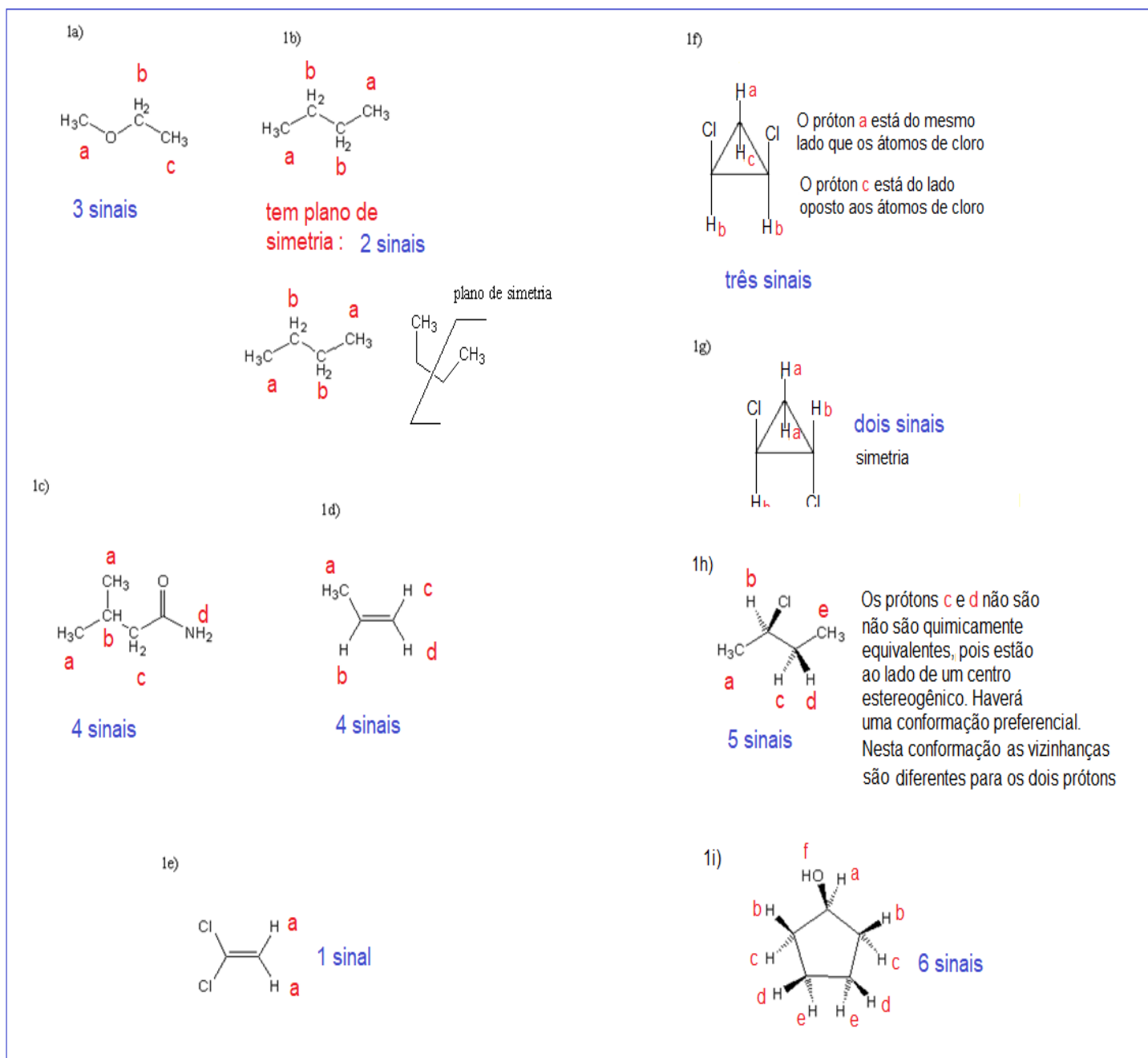


RESOLUÇÃO DO SEGUNDO EXERCÍCIO DE RMN-H



2) a resposta certa é **d**, ou seja, o composto é o 2-metil-1-buteno.

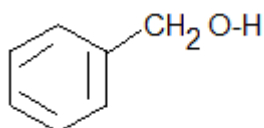
3)

Fórmula molecular : $108/13 = 8,30$ $r = 4$ $C_8H_{12} - CH_4$ (devido a um átomo de O) = C_7H_8

índice de insaturação : $[(n-r+2) / 2] + 1 = 4$

O espectro no infravermelho indica tratar-se de um álcool e pode conter um anel aromático.

Pelo número de insaturações, pode ser o álcool benzílico :



Vejam os o espectro de RMN de H:

A descrição do espectro é :

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

Portanto, coerente com o espectro esperado para o álcool benzílico:

5 prótons aromáticos em 7,30 ppm (singleto largo porque os prótons *orto*, *meta* e o próton *para* são distintos, mas com deslocamentos químicos muito semelhantes.

O grupo metileno (CH_2) deve-se apresentar como um singleto.

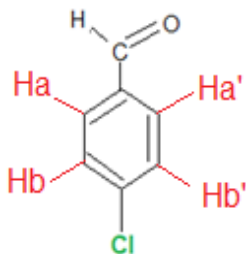
O grupo OH corresponde a um pico alargado, devido à existência de ligações de hidrogênio.

A existência de um grupo OH poderia ser confirmada adicionando-se à solução, em clorofórmio deuterado, algumas gotas de água deuterada. Haveria troca do hidrogênio do grupo hidroxila por deutério. Como a frequência de ressonância do deutério é diferente da frequência de ressonância de próton, o sinal correspondente ao grupo OH deverá desaparecer após a adição de D_2O . Esse tipo de experiência vale, também, quando houver a suspeita de que existe um grupo amino na molécula. NH_2 também troca na presença de D_2O .

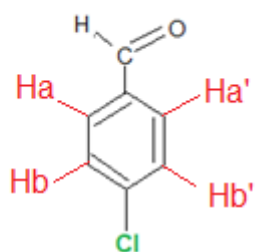


4)

a) apenas em

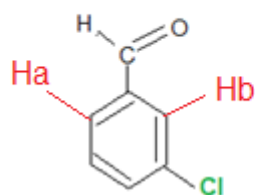


b) cálculos :



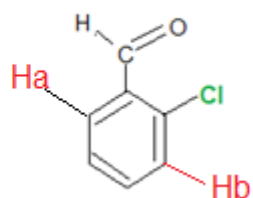
$$\text{Ha } 7,36 + (0,53 - 0,07) = 7,82$$

$$\text{Hb } 7,36 + (0,18 - 0,02) = 7,52$$



$$\text{Ha } 7,36 + (0,53 - 0,13) = 7,76$$

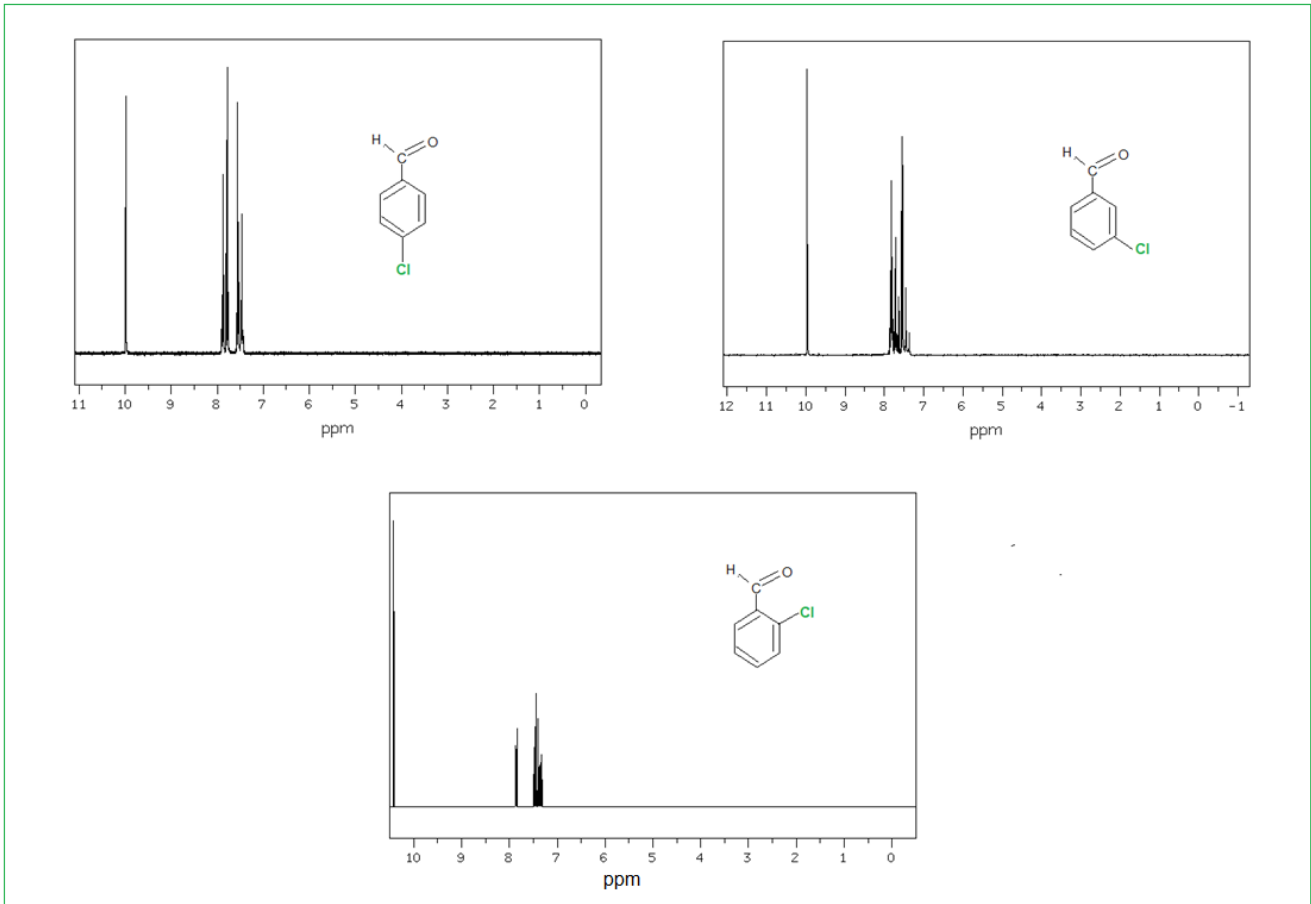
$$\text{Hb } 7,36 + (0,53 - 0,02) = 7,87$$



$$\text{Ha } 7,36 + (0,53 - 0,07) = 7,82$$

$$\text{Hb } 7,36 + (-0,02 + 0,18) = 7,38$$

Portanto, vide próxima página

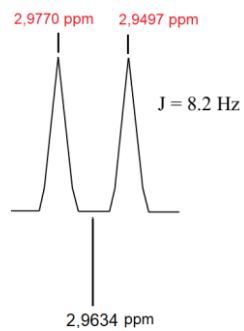


5) Cálculo do valor de J em ppm : valor em ppm = frequência do instrumento x J

a)

$X \cdot 300 = 8,20$ (igualar o número de algarismos significativos)

$$X = 0,0273 \text{ ppm}$$



b1) para um quarteto, devemos calcular a média dos deslocamentos químicos dos picos centrais.

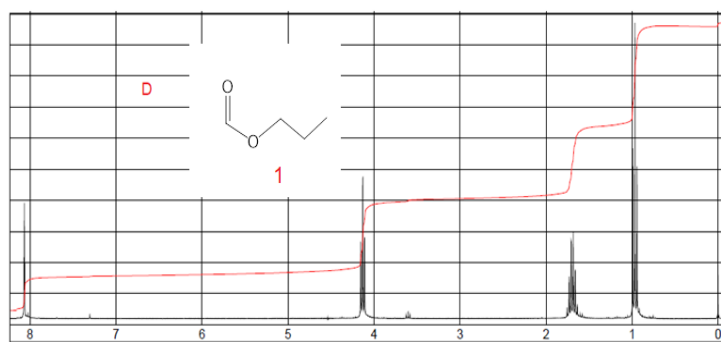
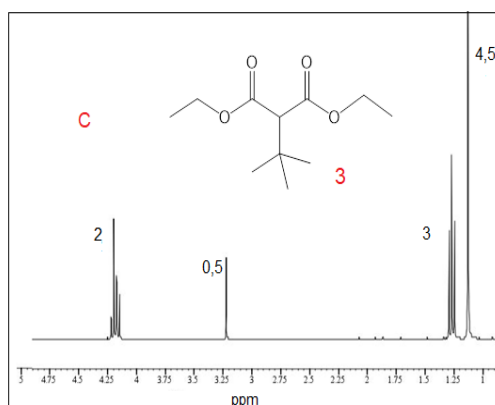
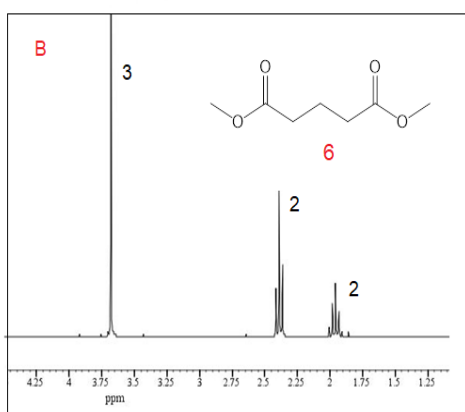
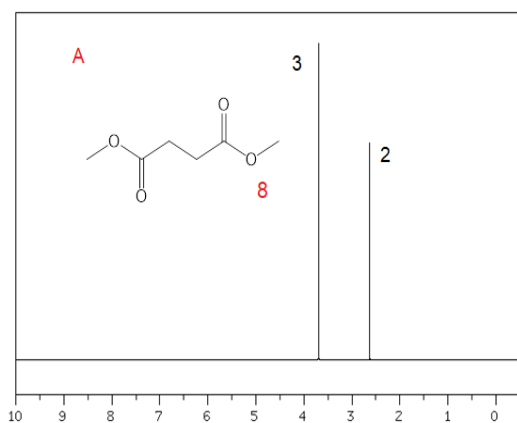
b2) para um quinteto, o deslocamento químico é o deslocamento químico do pico central.

b3) para um duplete de dupletos, devemos assinalar o deslocamento químico de cada duplete em separado. Para cada duplete, o deslocamento químico será no meio do duplete.

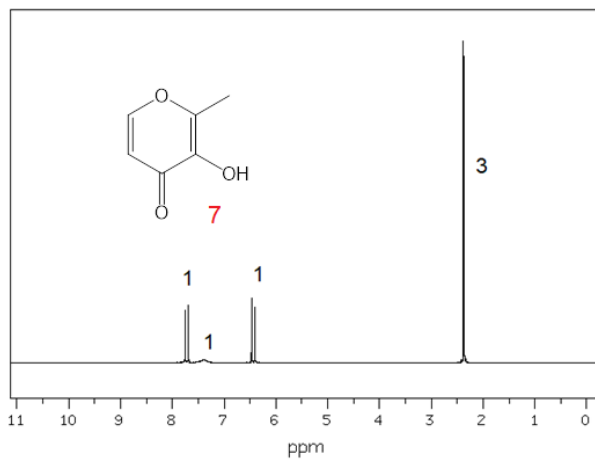
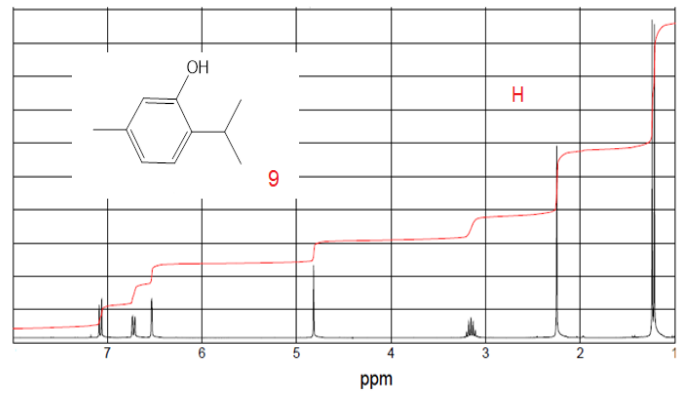
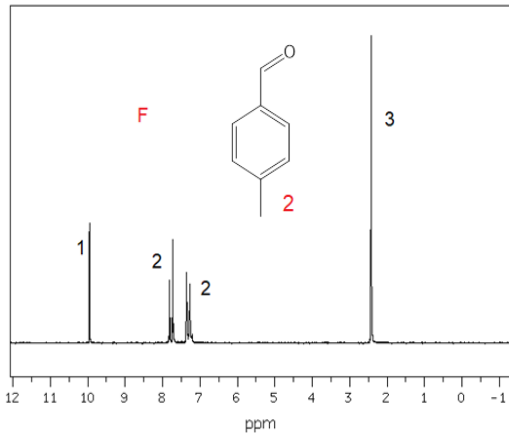
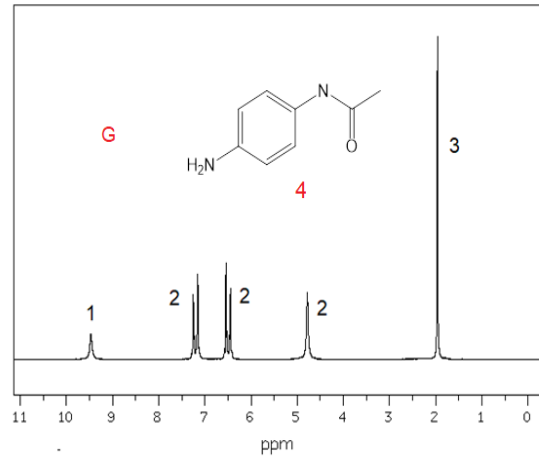
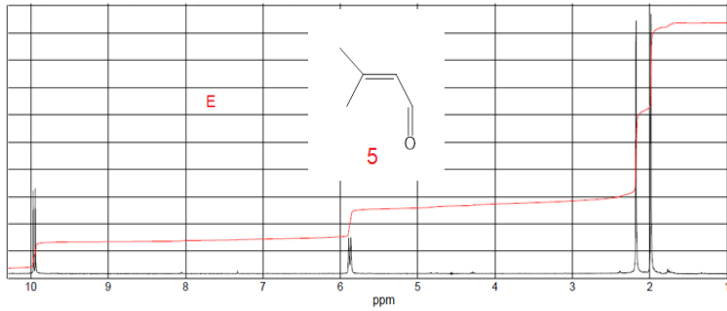
PS. Um espectro de RMN de H deve ser relatado da seguinte forma:

(δ ppm, solvente) : (multiplicidade do sinal, número de prótons, J em Hz) , ...

6)



Continua.....



7)

a) 0,89 = dubleto 1,49 = dubleto 3,55 = quarteto

b) resposta correta, b2. Observe que os espectros dos enantiômeros separados e o da mistura racêmica devem ser idênticos.

Quanto à intensidade dos sinais, na mistura a concentração é a mesma das soluções separadas. Dobrou o volume mas dobrou, também, o número de mols.

Continua.....

