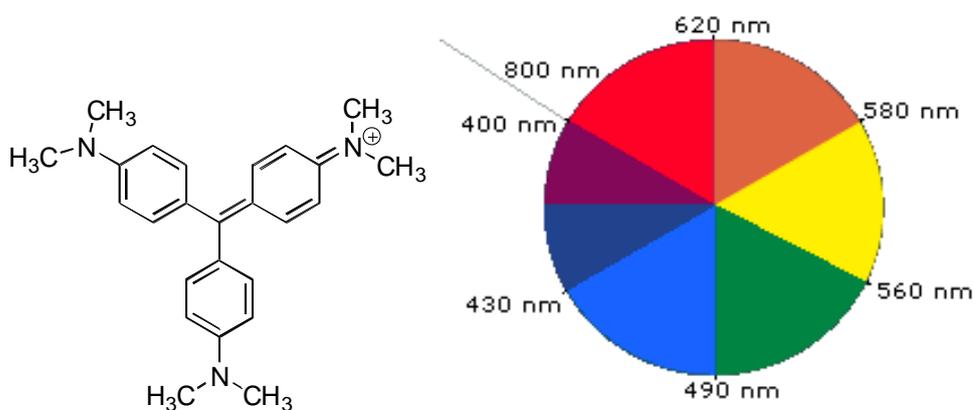


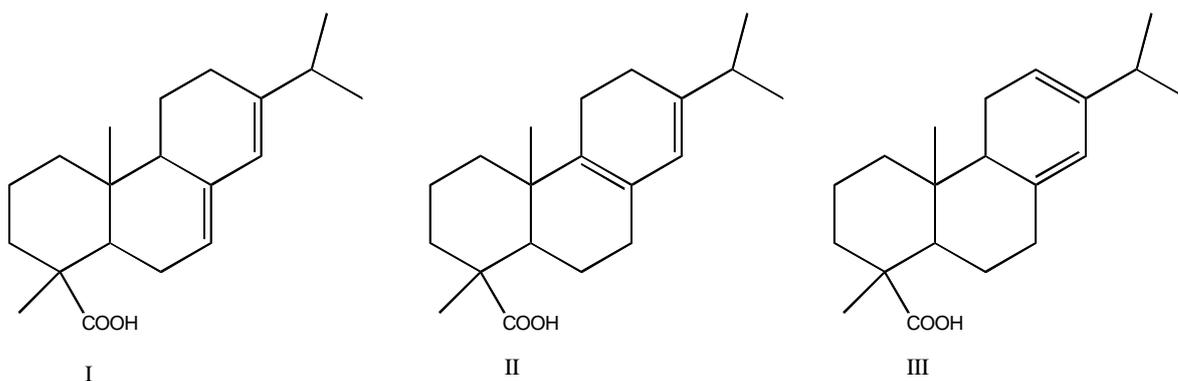
2016

QFL4030- MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS DE ANÁLISE
EXERCÍCIOS COMPLEMENTARES

1. Dependendo de sua localização (interna ou terminal), os valores observados nos espectros para as frequências de absorção devidas ao estiramento da ligação tripla de alcinos são diferentes. Explique *de forma clara* qual desses tipos de alcinos deveria apresentar o maior valor para a frequência de absorção **justificando** sua resposta.
2. O Cristal violeta em pH 7 apresenta um λ_{\max} =591 nm; que cor ele apresenta nesse pH? Em pH baixo (HCl diluído) possui λ_{\max} =625 nm; que cor possui nessa condição? Por quê? Quando se abaixa pH mais intensamente (HCl conc.) o λ_{\max} muda para 420 nm; Qual sua coloração nessas condições? Por quê?



3. Você seria capaz de distinguir os ácidos orgânicos apresentados abaixo pela espectroscopia na região do UV? Use as regras Woodward-Fieser para prever o λ_{\max} de cada um dos compostos.



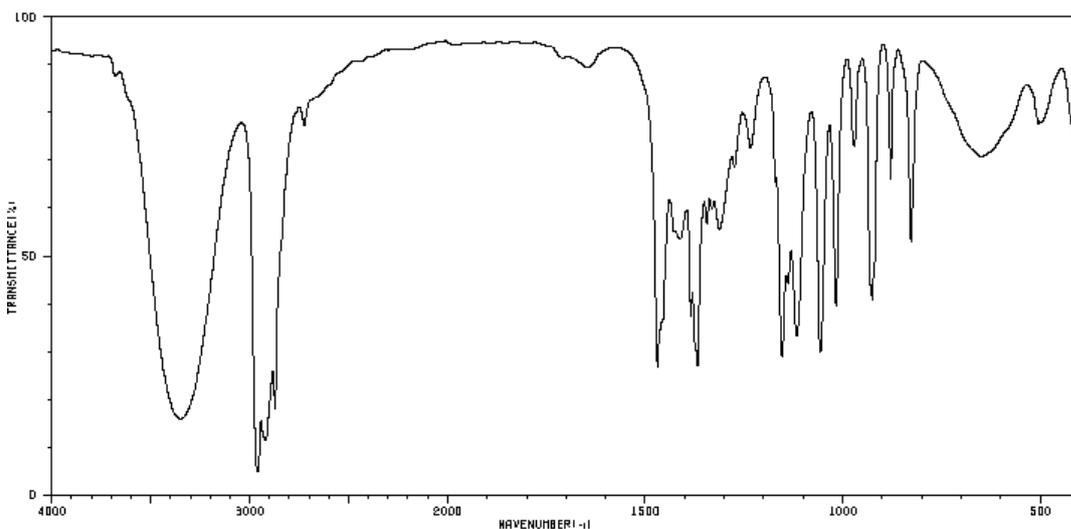
4. Considere as frequências de estiramento da C=O, na região do infravermelho, para as seguintes cetonas cíclicas: ciclopropanona 1813 cm⁻¹, ciclobutanona 1791 cm⁻¹, ciclopentanona 1740 cm⁻¹. Considerando os dados apresentados, responda as perguntas a seguir **justificando sua resposta**.
 - a) Qual das cetonas possui a ligação C=O mais forte?
 - b) Em que lugar da série acima seria esperada a banda de estiramento da C=O da ciclopropanona?
 - c) Onde seria esperado o estiramento da C=O de R₂C=C=O

5. Abaixo são apresentados sete espectros de absorção na região do infravermelho. Usando as informações obtidas nesses espectros sobre os grupos funcionais presentes em cada molécula, responda as questões a seguir (um composto pode ser usado mais de uma vez ou não estar presente nas respostas, algumas questões podem ter mais de uma resposta correta):

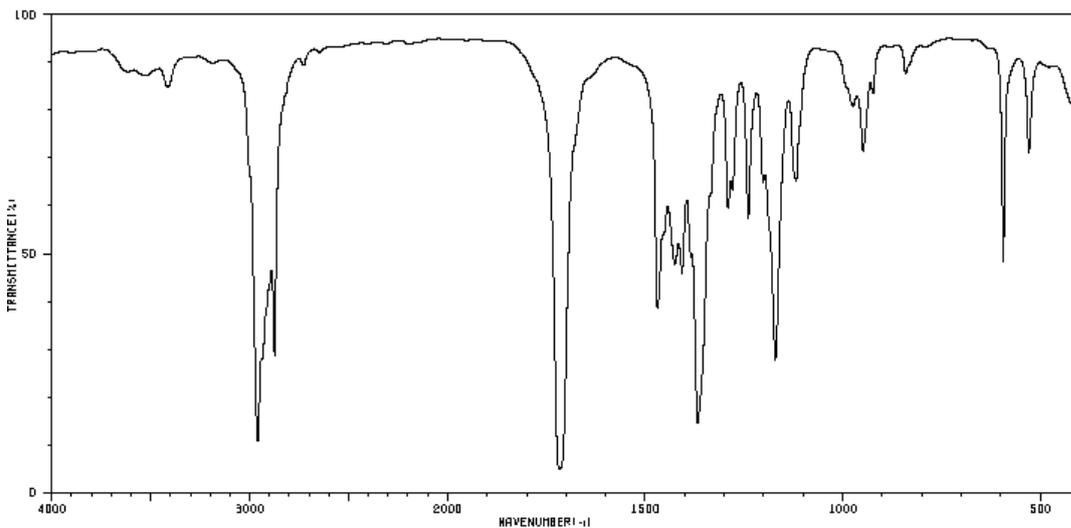
- Qual composto contém um anel aromático?
- Qual composto pode ser reduzido com NaBH_4 (em Etanol/ NaOH)?
- Qual composto poderia ser o produto de uma redução com NaBH_4 ?
- Qual desses compostos é a 2-metil-propanonitrila?
- Qual desses compostos é uma amina primária?

Justifique cada uma de suas respostas

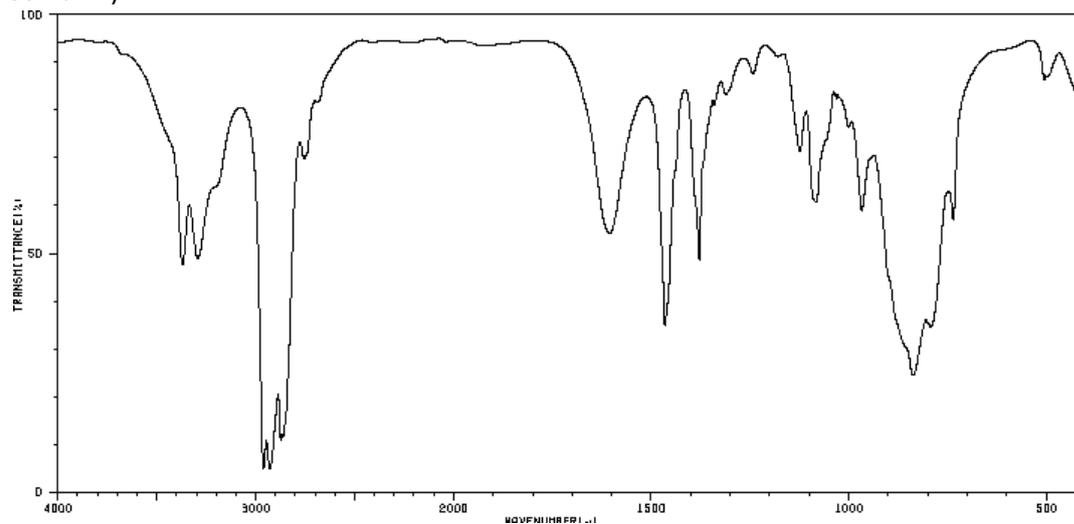
Composto 1 (IV resumo: 3348, 2960, 1426, 1368, 1164, 1139, 1116, 1067, 1017, 921, 827, 649 cm^{-1})



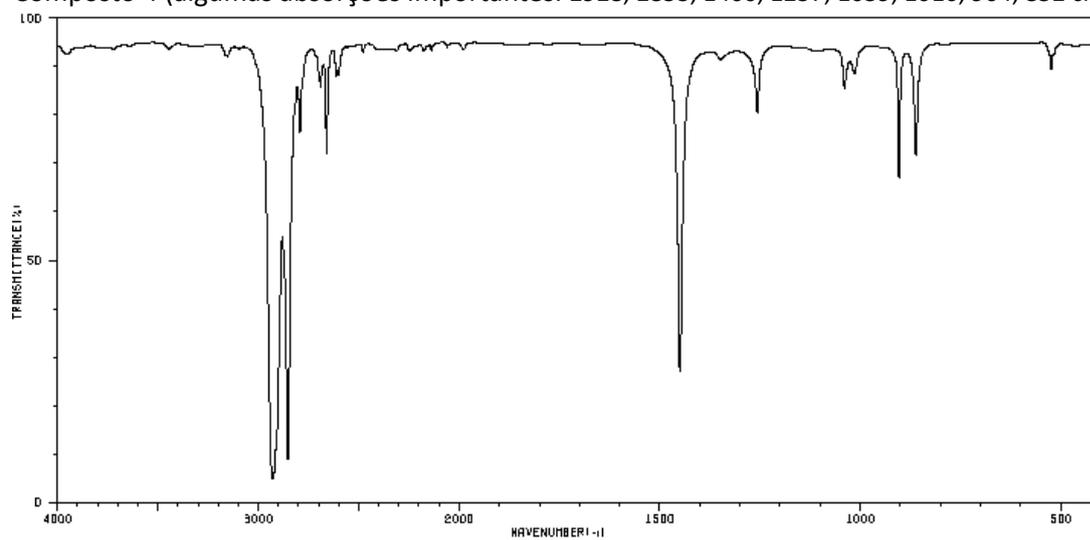
Composto 2 (algumas absorções importantes: 2960, 1716, 1426, 1407, 1367, 1171, 594 cm^{-1})



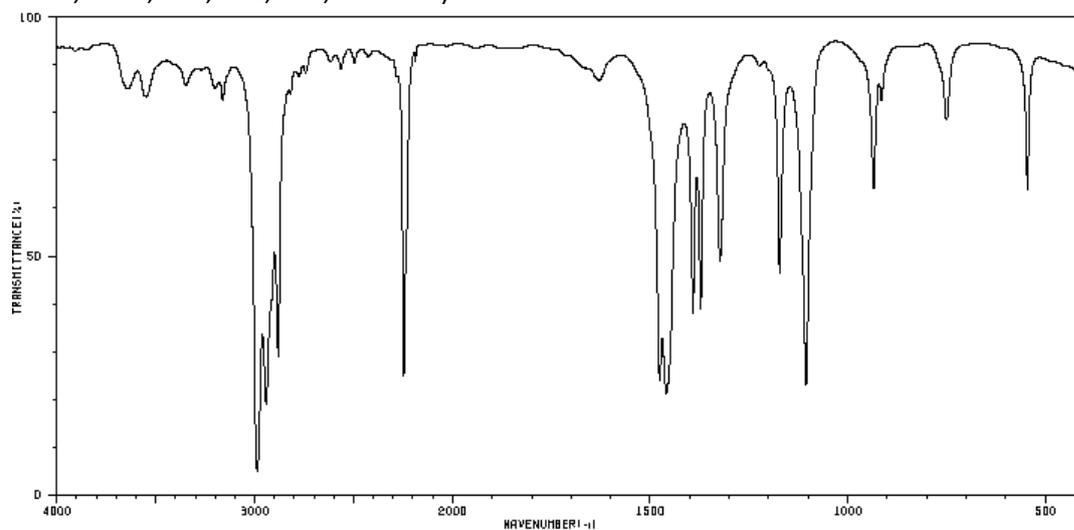
Composto 3 (algumas absorções importantes: 3369, 3293, 2960, 2928, 1606, 1465, 1379, 837 cm^{-1})



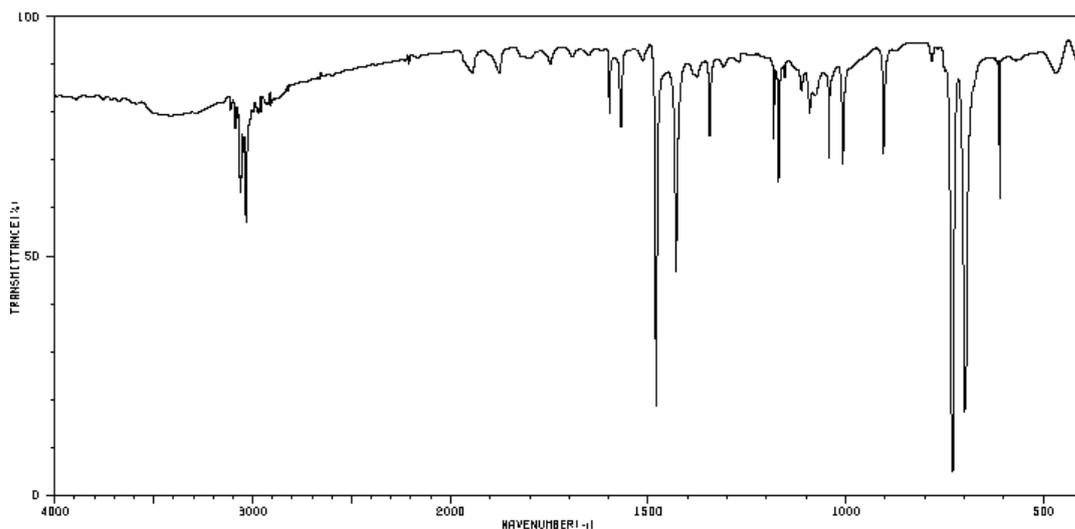
Composto 4 (algumas absorções importantes: 2928, 2853, 1460, 1257, 1039, 1016, 904, 852 cm^{-1})



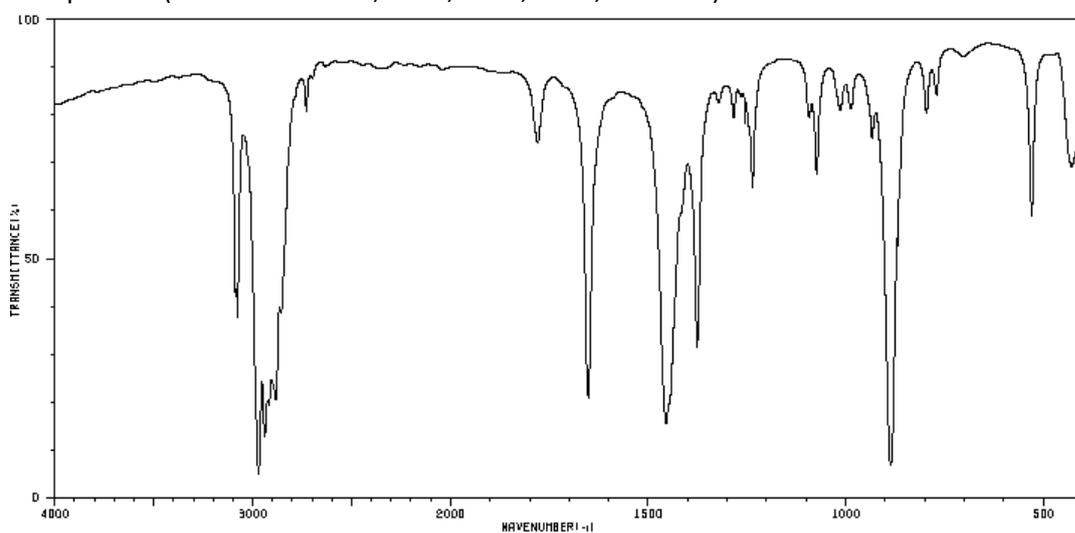
Composto 5 (algumas absorções importantes: 2986, 2246, 1476, 1460, 1392, 1372, 1323, 1173, 1106, 934, 916, 751, 545 cm^{-1})



Composto 6 (algumas absorções importantes: 3046, 3035, 1481, 1430, 730, 700 cm^{-1})

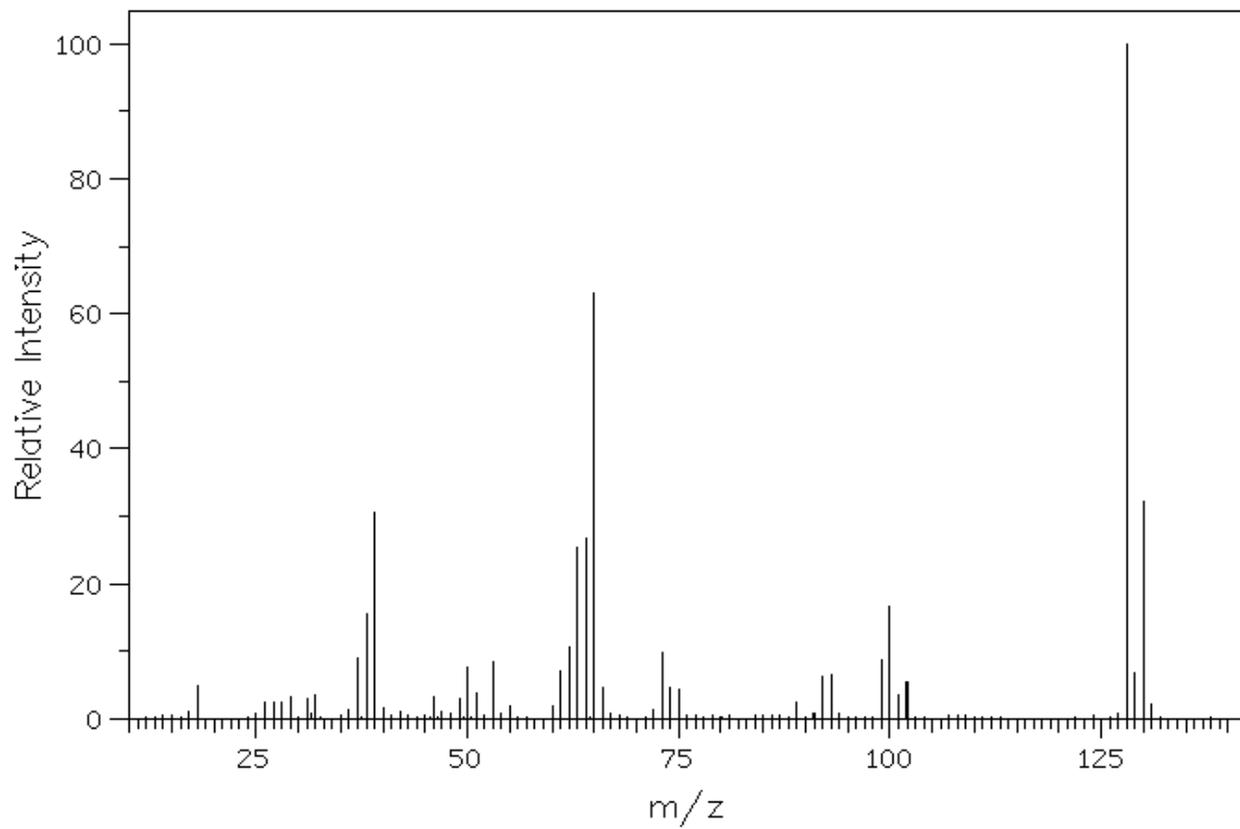
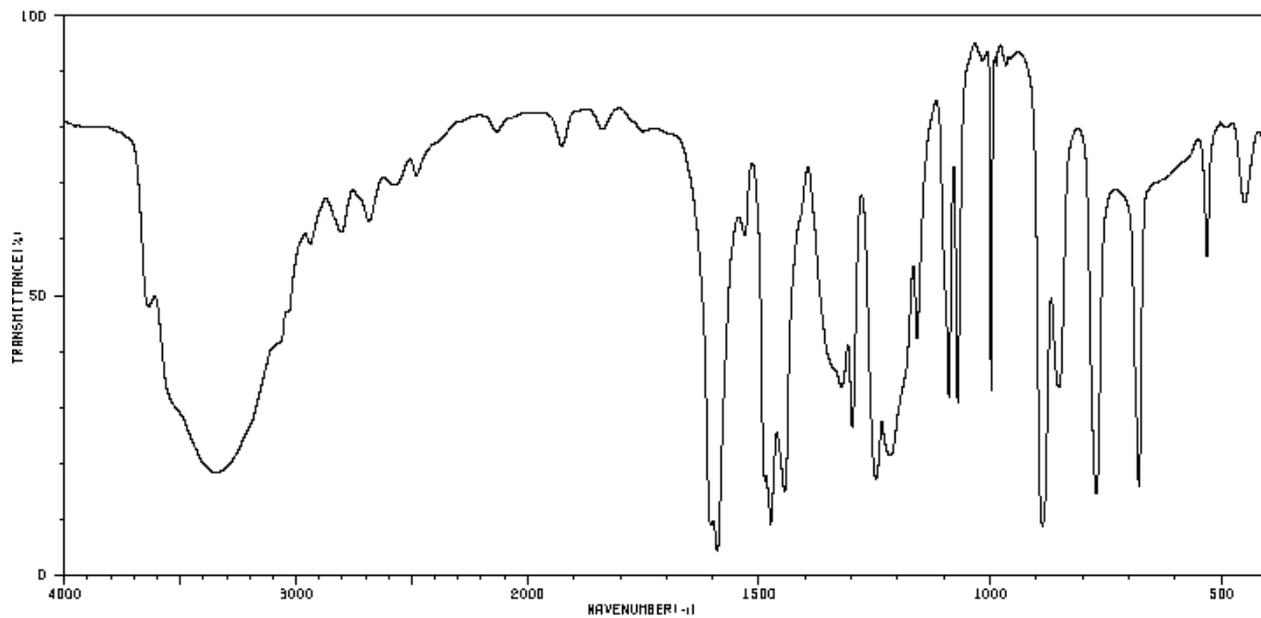


Composto 7 (Resumo IV: 3077, 2970, 1651, 1466, 887 cm^{-1})

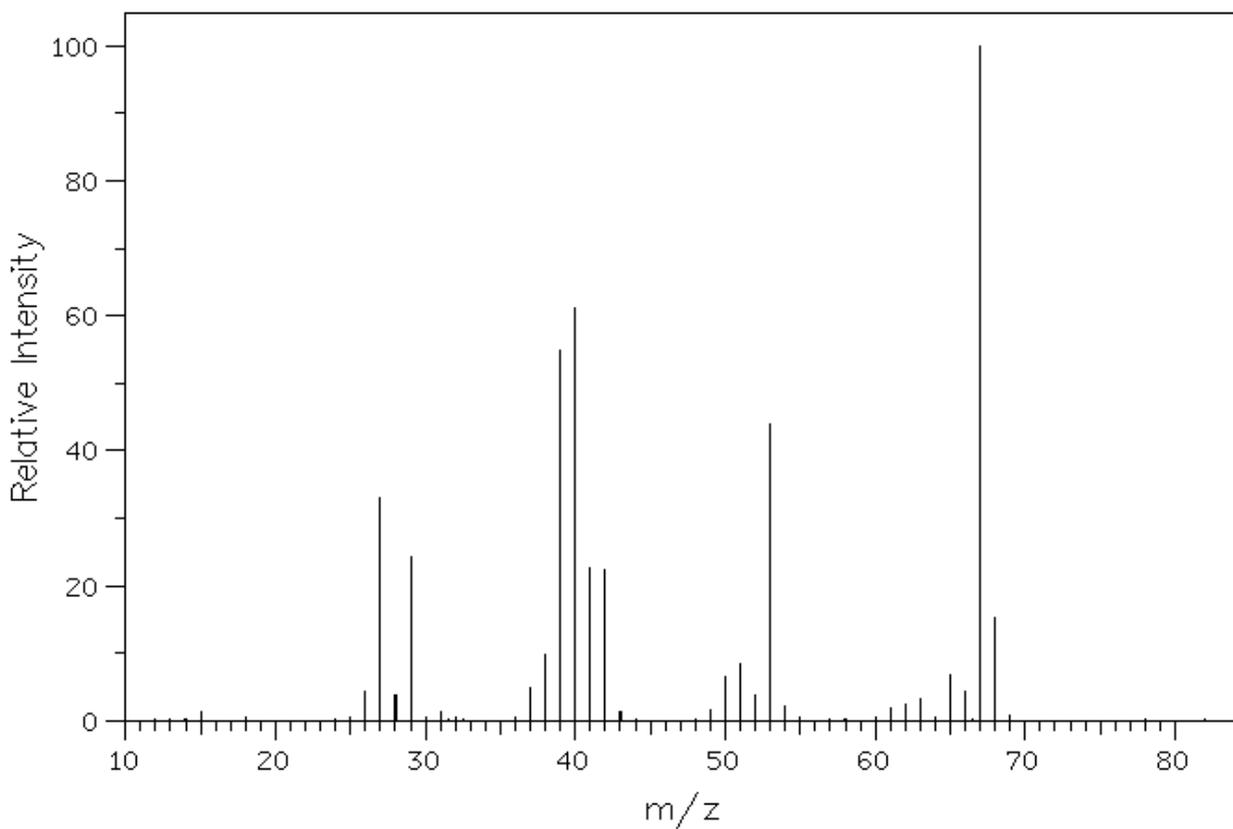
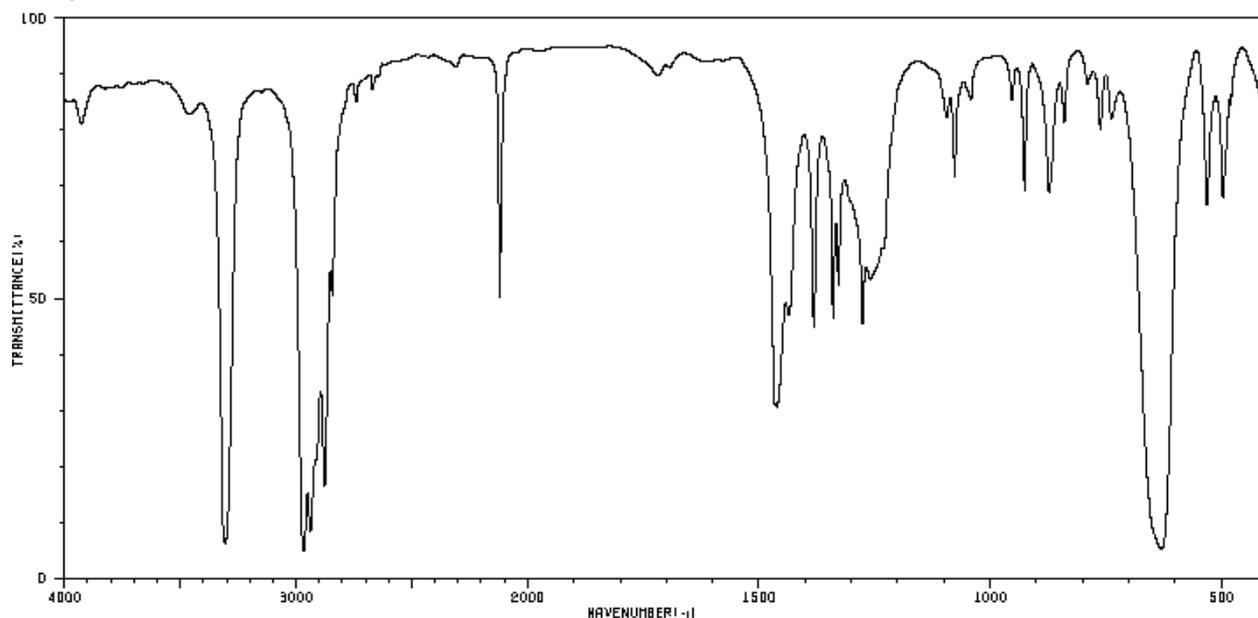


6. Determine a formula molecular, o índice de insaturação e as estruturas possíveis para cada um dos compostos a seguir com base nos dados espectrais fornecidos. Use a tabela de correlações na região do infravermelho e justifique sua resposta.

Composto 6.1

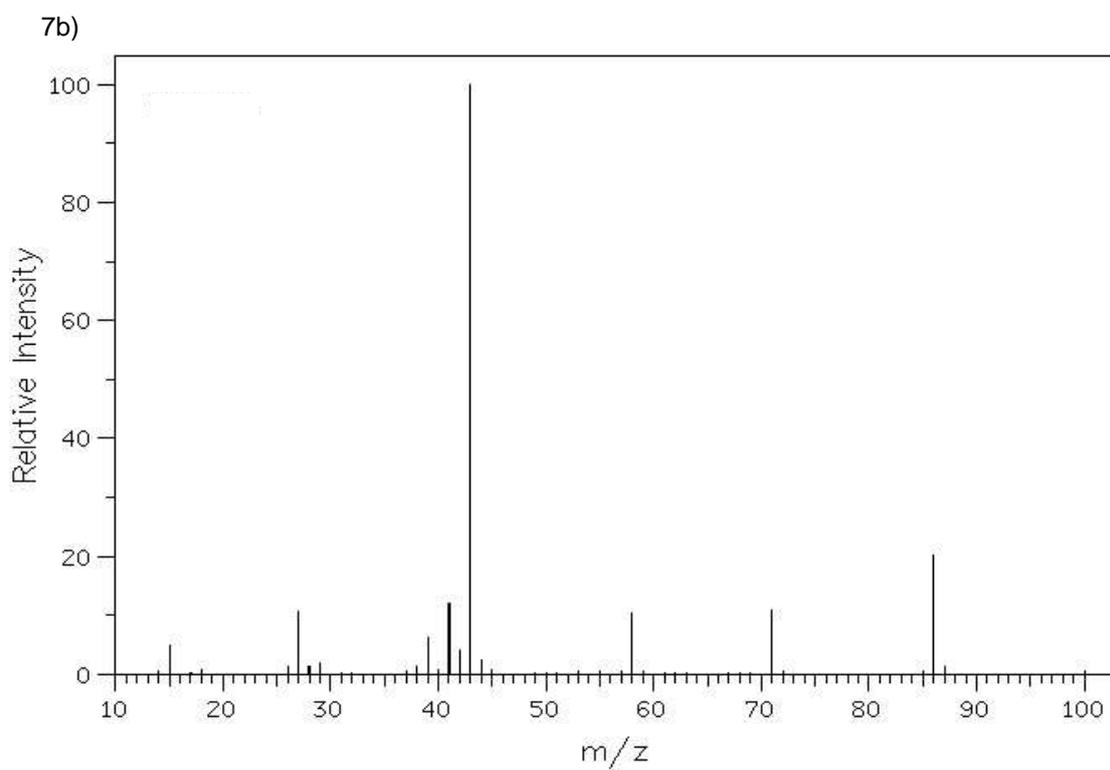
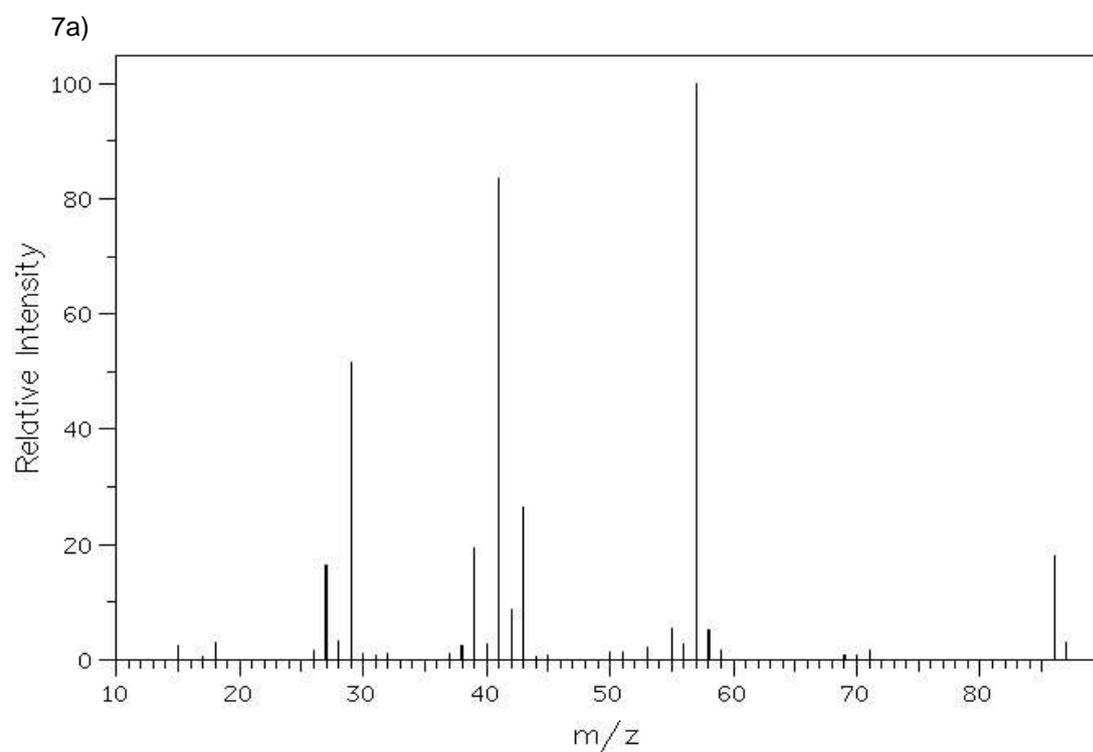
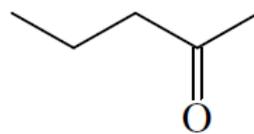
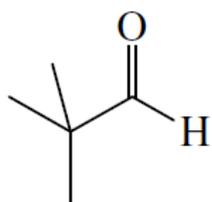
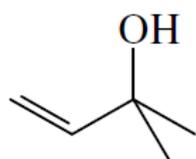


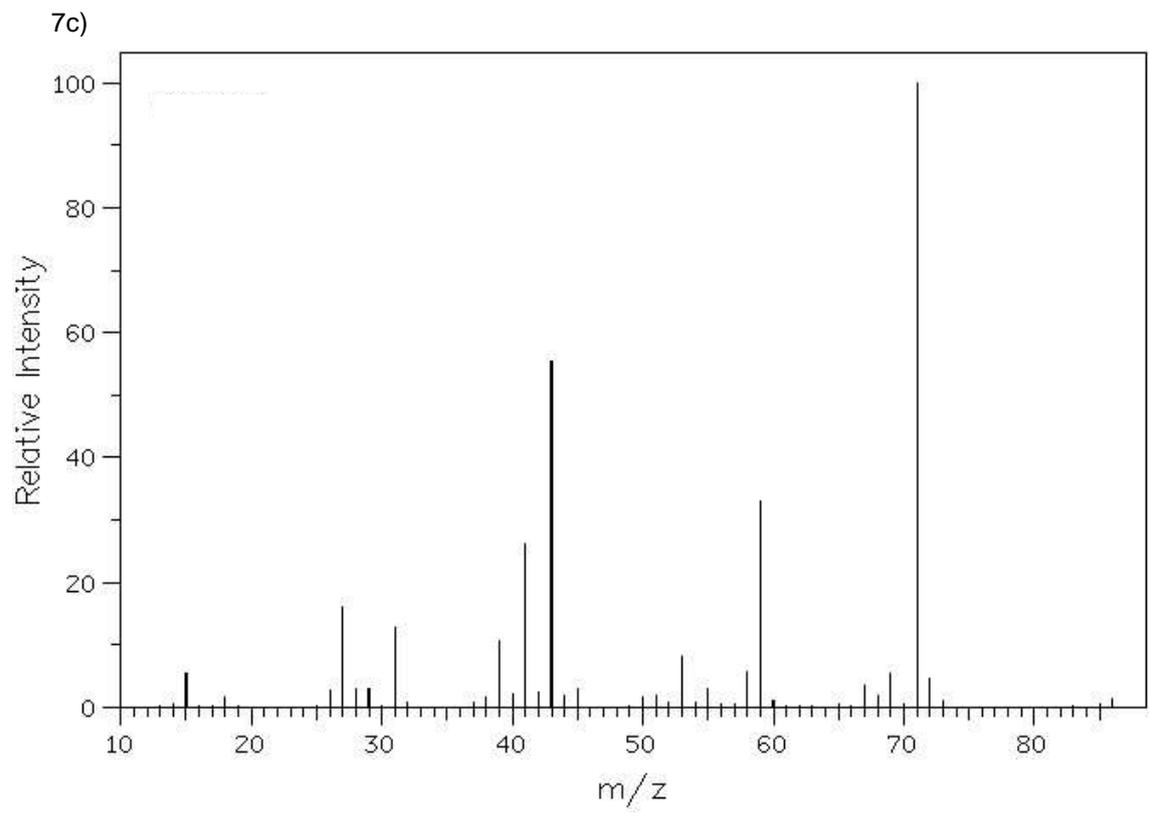
Composto 6.2



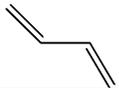
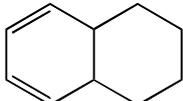
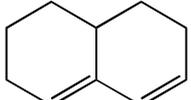
$$M^{+} = 68$$

7. Os três compostos apresentados abaixo são os isômeros estruturais. Relacione cada um desses compostos com o seu espectro de massas correspondente (7a, 7b e 7c) e mostre o mecanismo que levou a formação do pico base em cada espectro, mostrando a estrutura do íon correspondente a esse fragmento.





Regras de **WOODWARD-FIESER** para Dienos

Tipo de dieno	Absorção base (nm)
Alicíclico 	217
Homoanular 	253
Heteroanular 	214

Incrementos:

Grupamentos	Efeito aditivo (nm)
Extensão da conjugação por dupla ligação	+ 30
Substituinte alquila ou resíduo de anel	+ 5
Ligação dupla exocíclica	+ 5
-OC(O)CH ₃	+ 0
-OR	+ 6
-Cl, -Br	+ 5
-NR ₂	+60
-SR	+ 30