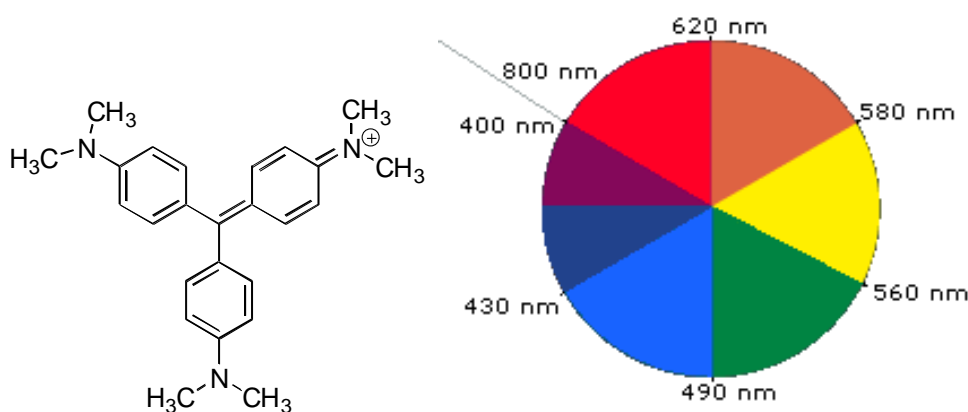


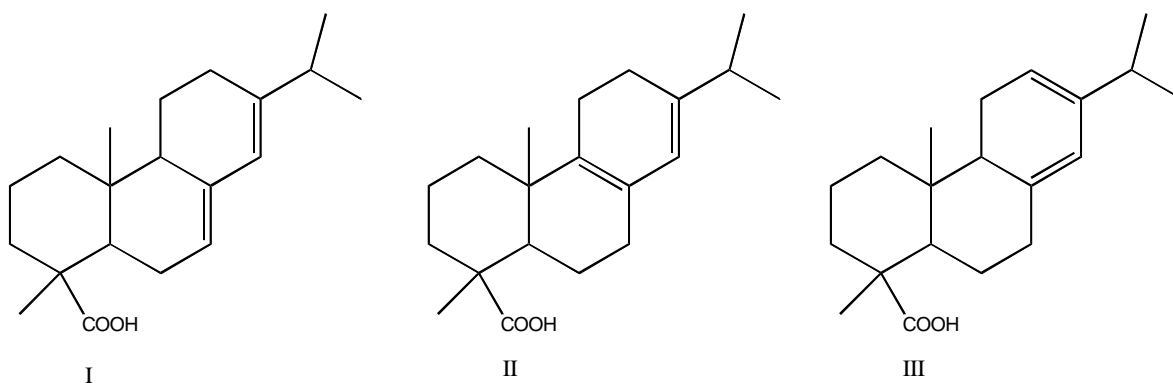
2016

**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  $\lambda_{\max}=591$  nm; que cor ele apresenta nesse pH? Em pH baixo (HCl diluído) possui  $\lambda_{\max}=625$  nm; que cor possui nessa condição? Por quê? Quando se abaixa pH mais intensamente (HCl conc.) o  $\lambda_{\max}$  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  $\lambda_{\max}$  de cada um dos compostos.



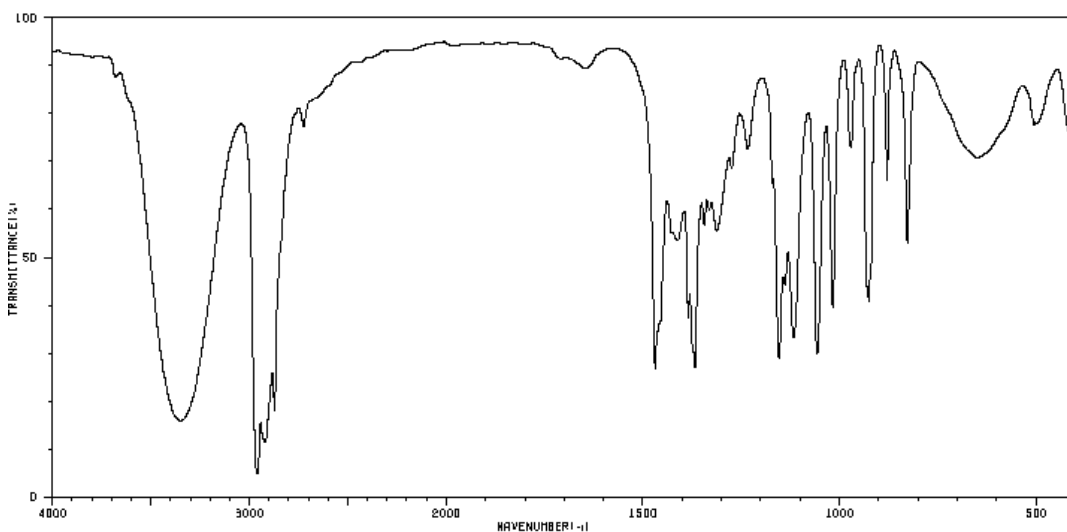
4. Considere as frequências de estiramento da C=O, na região do infravermelho, para as seguintes cetonas cíclicas: ciclopropanona 1813  $\text{cm}^{-1}$ , ciclobutanona 1791  $\text{cm}^{-1}$ , ciclopentanona 1740  $\text{cm}^{-1}$ . Considerando os dados apresentados, responda as perguntas a seguir **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  $\text{R}_2\text{C}=\text{C}=\text{O}$

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):

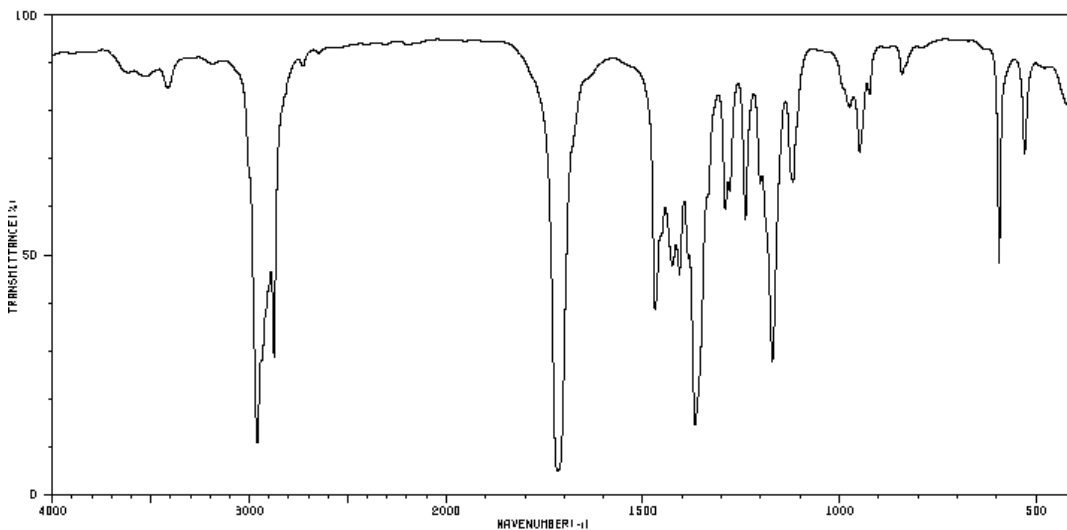
- Qual composto contém um anel aromático?
- Qual composto pode ser reduzido com  $\text{NaBH}_4$  (em Etanol/ $\text{NaOH}$ )?
- Qual composto poderia ser o produto de uma redução com  $\text{NaBH}_4$ ?
- Qual desses compostos é a 2-metil-propanonitrila?
- Qual desses compostos é uma amina primária?

Justifique cada uma de suas respostas

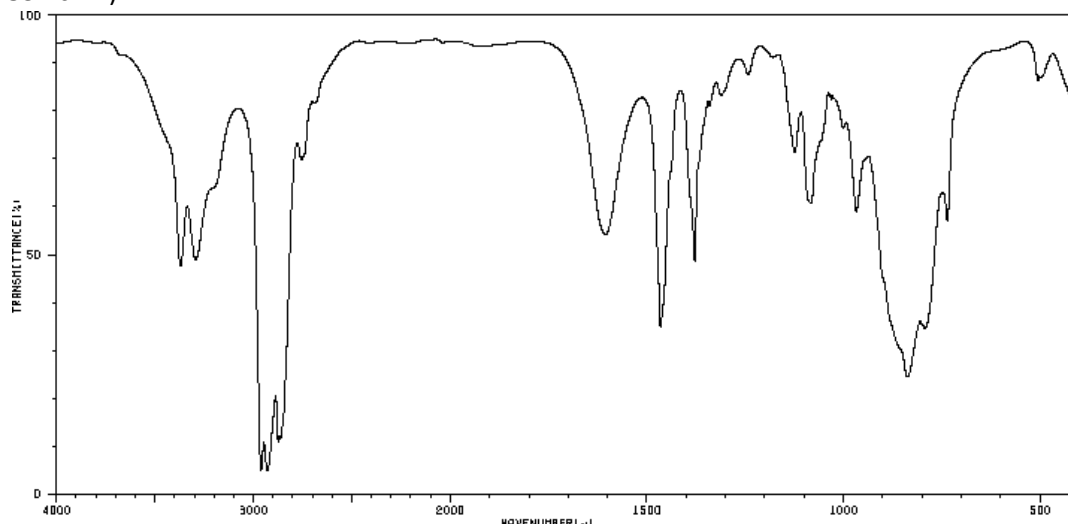
Composto 1 (IV resumo: 3348, 2960, 1426, 1368, 1164, 1139, 1116, 1067, 1017, 921, 827, 649  $\text{cm}^{-1}$ )



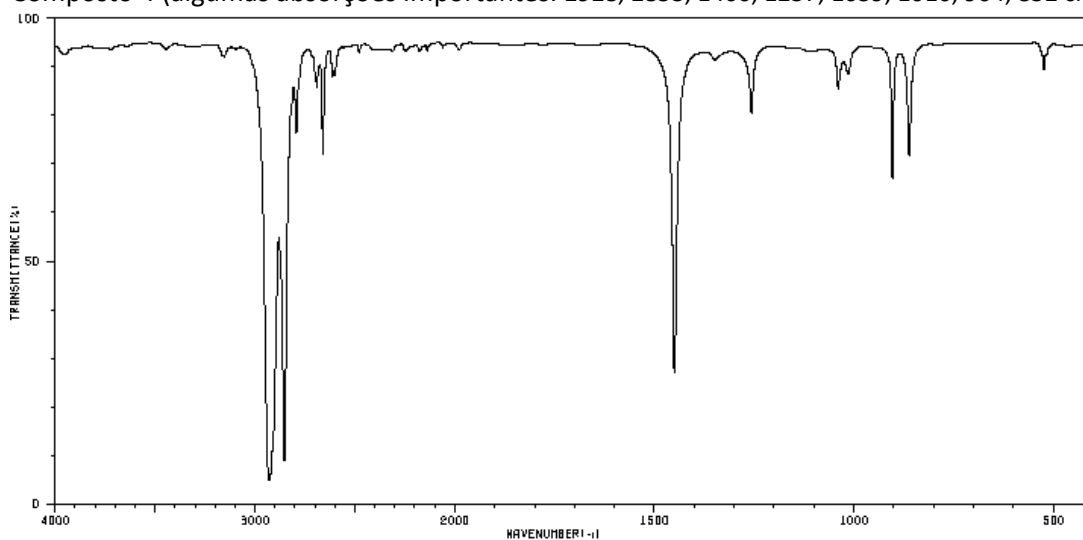
Composto 2 (algumas absorções importantes: 2960, 1716, 1426, 1407, 1367, 1171, 594  $\text{cm}^{-1}$ )



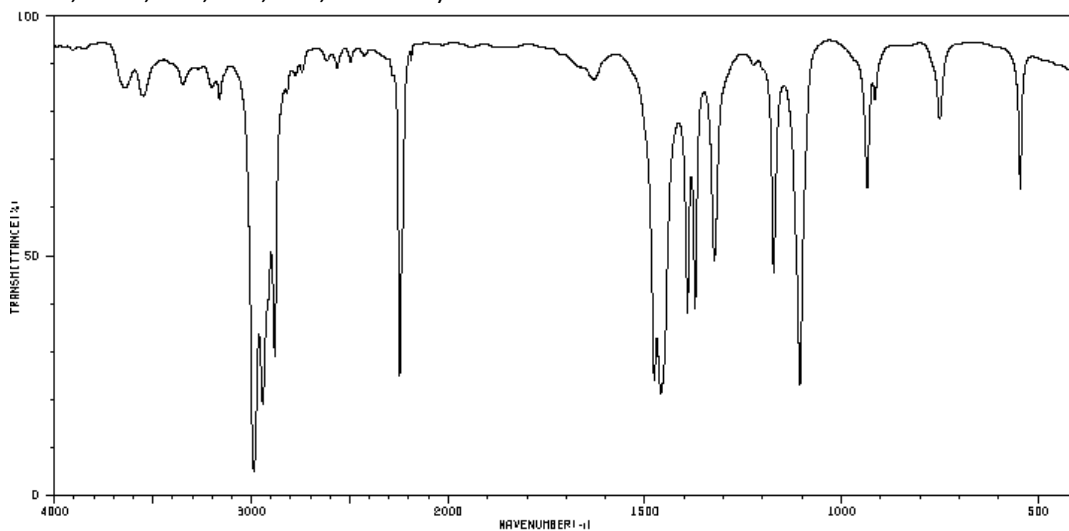
Composto 3 (algumas absorções importantes: 3369, 3293, 2960, 2928, 1606, 1465, 1379, 837  $\text{cm}^{-1}$ )



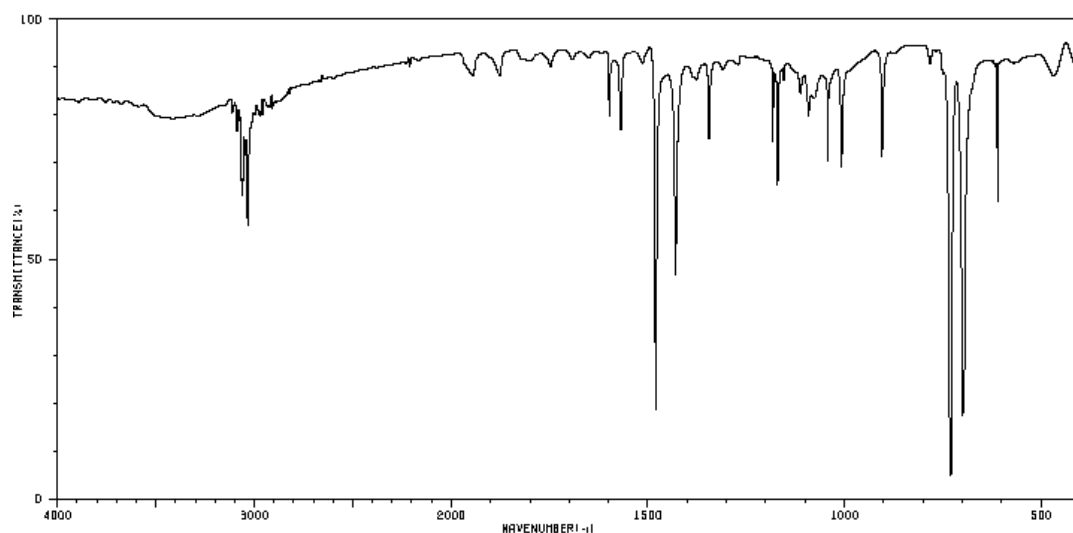
Composto 4 (algumas absorções importantes: 2928, 2853, 1460, 1257, 1039, 1016, 904, 852  $\text{cm}^{-1}$ )



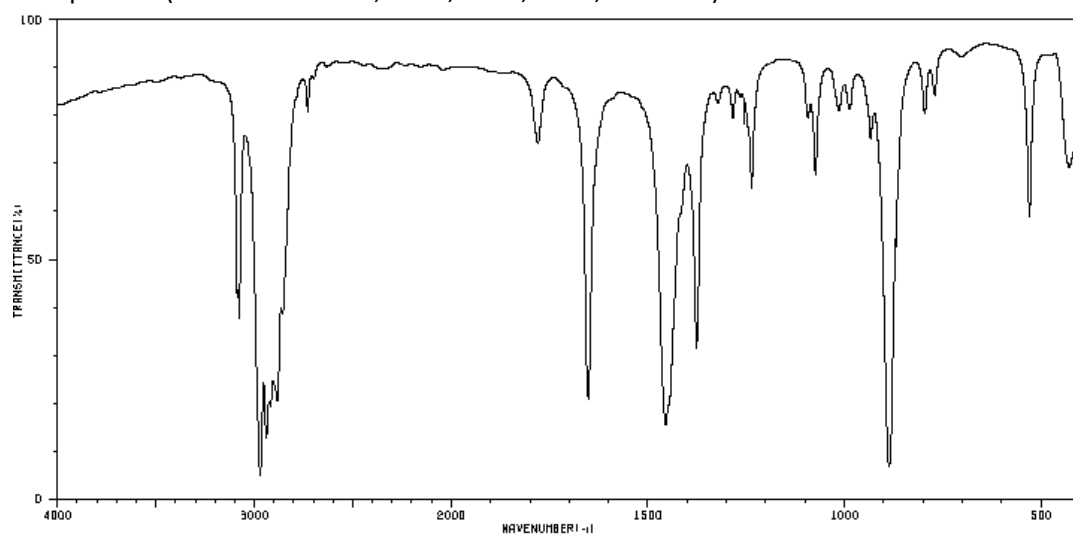
Composto 5 (algumas absorções importantes: 2986, 2246, 1476, 1460, 1392, 1372, 1323, 1173, 1106, 934, 916, 751, 545  $\text{cm}^{-1}$ )



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

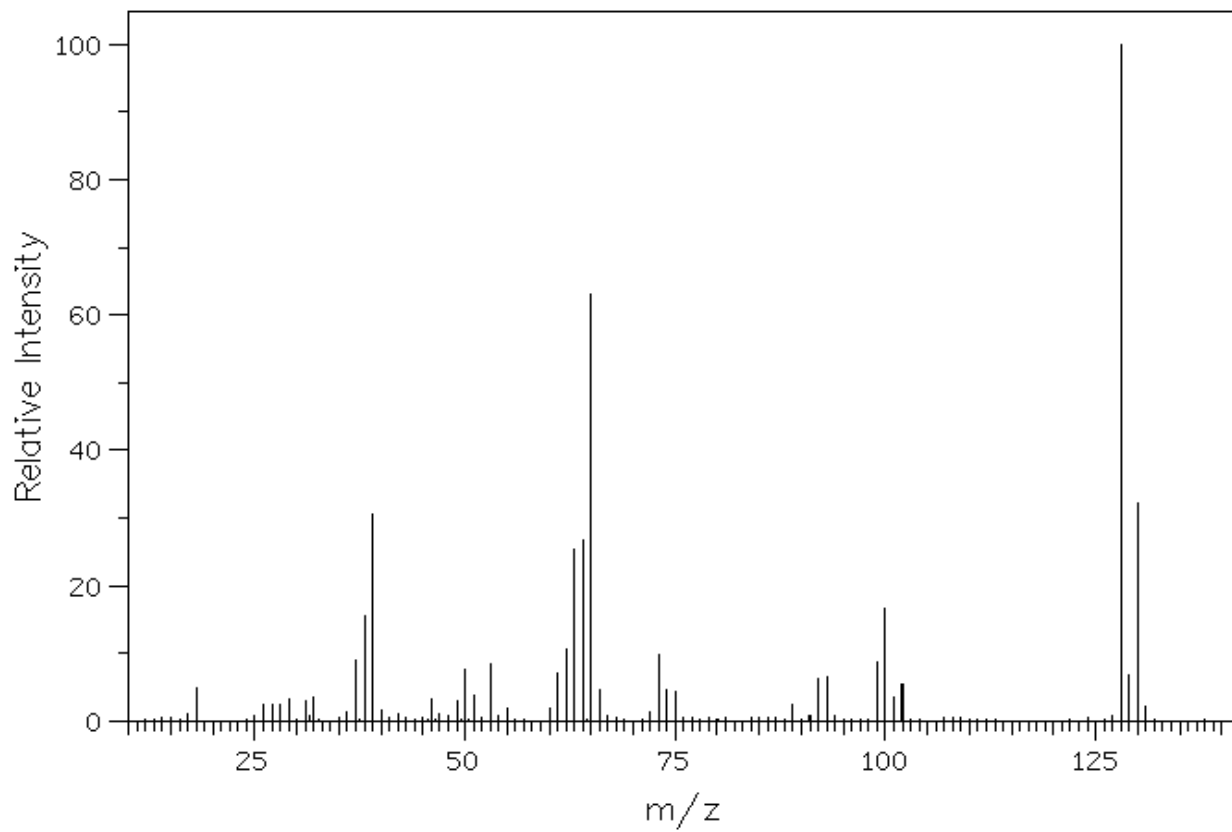
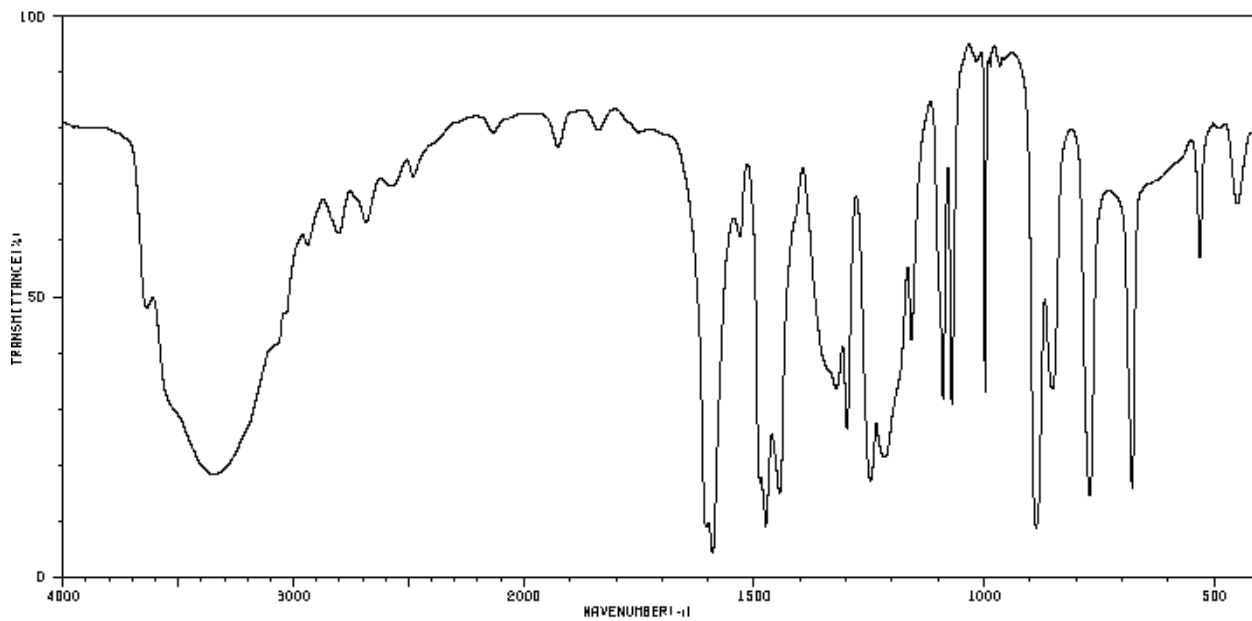


Composto 7 (Resumo IV: 3077, 2970, 1651, 1466, 887  $\text{cm}^{-1}$ )

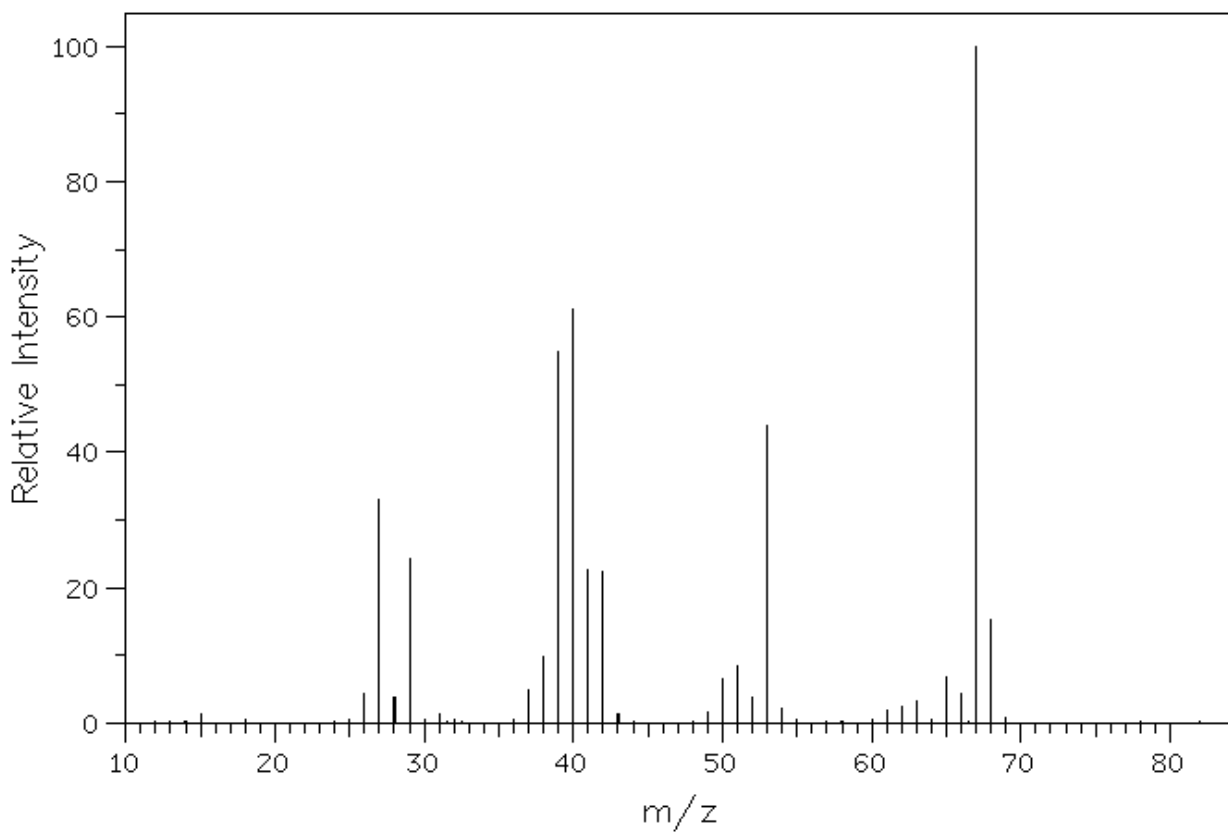
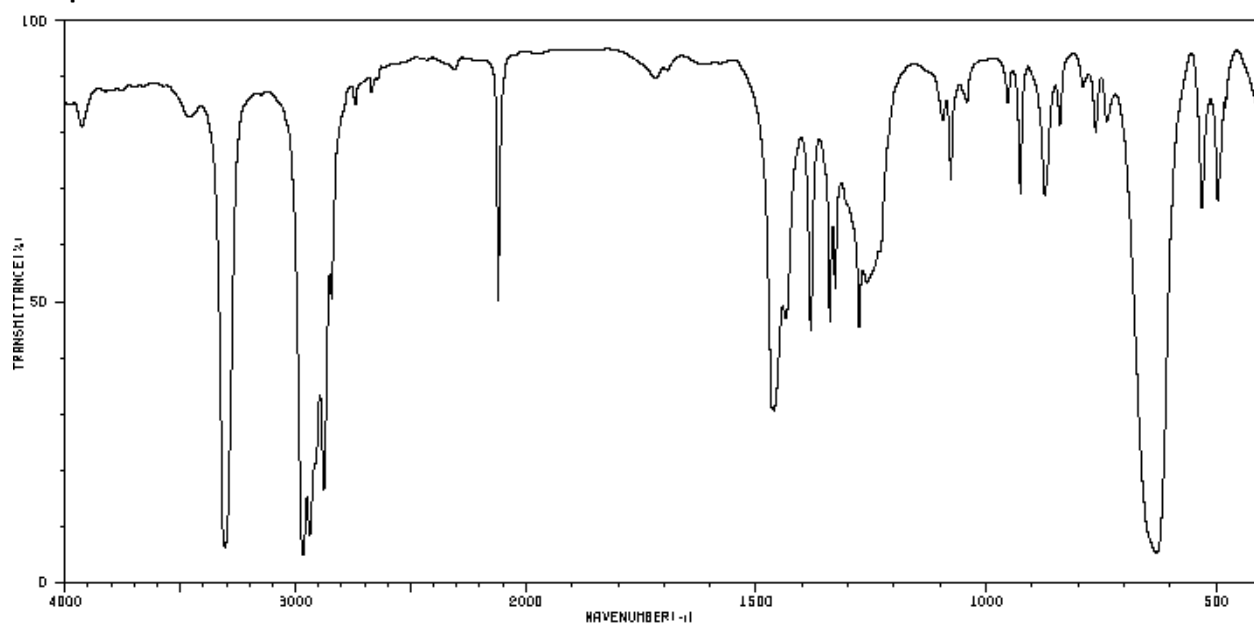


6. Determine a formula molecular, o índice de insaturação e as estruturas possíveis para cada um dos compostos a seguir com base nos dados espectrais fornecidos. Use a tabela de correlações na região do infravermelho e justifique sua resposta.

# Composto 6.1

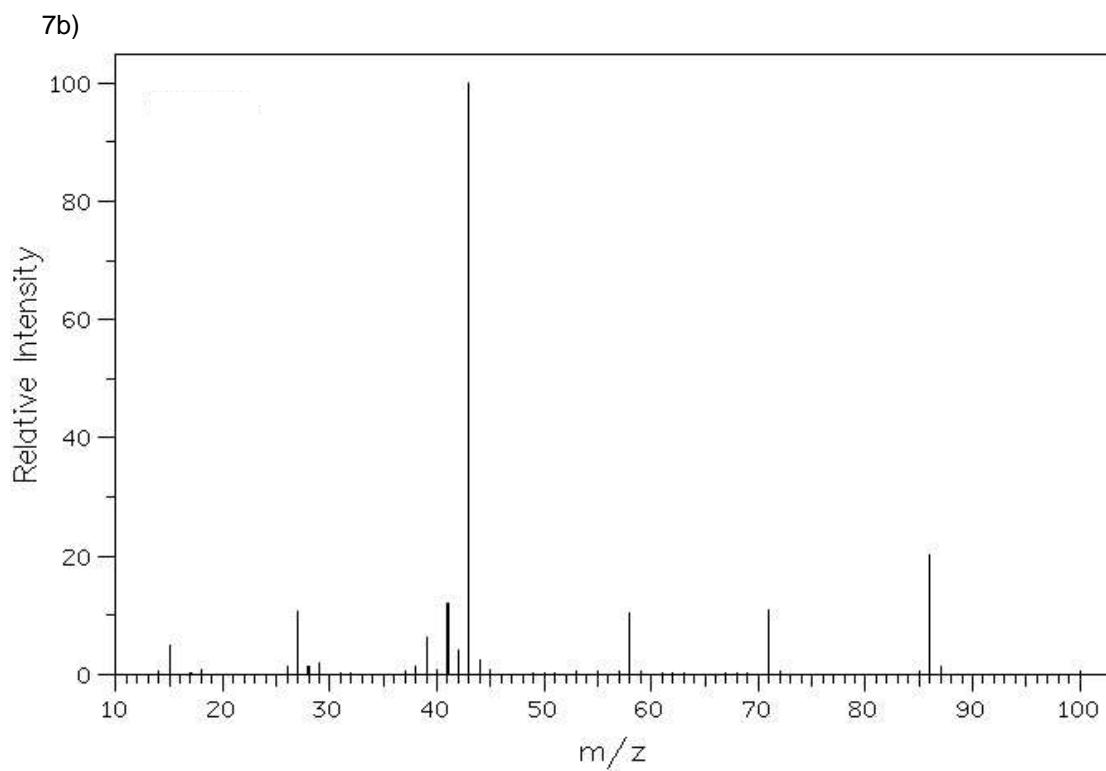
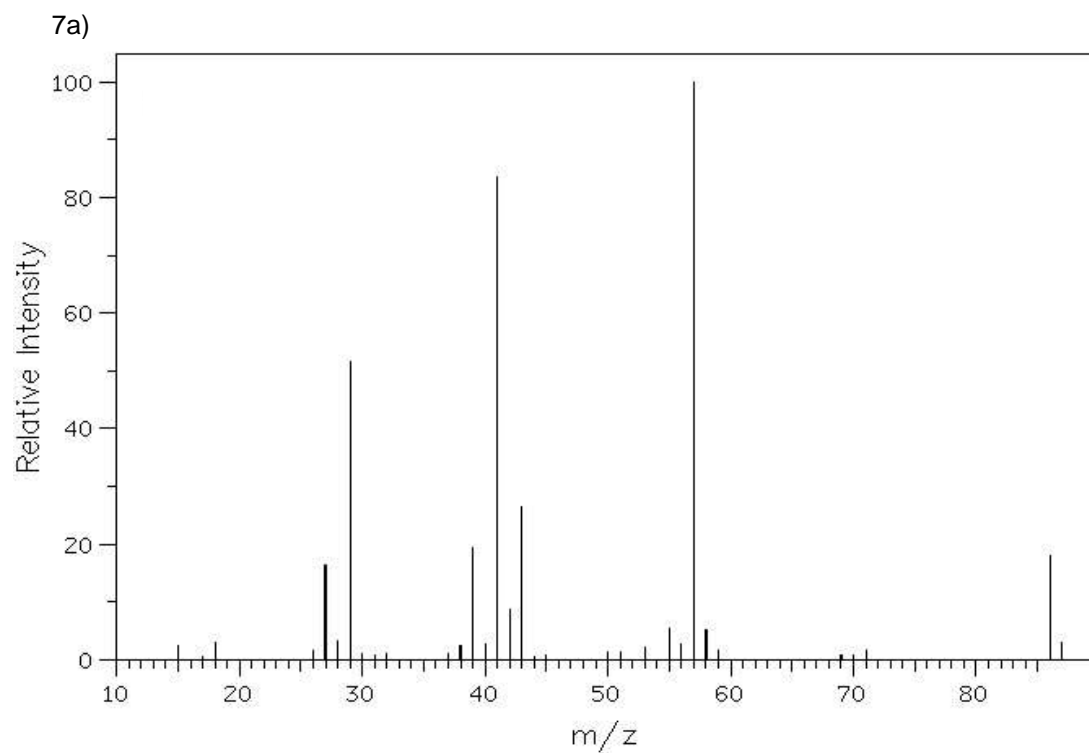
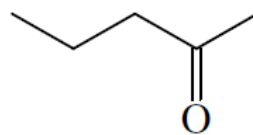
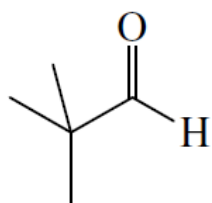
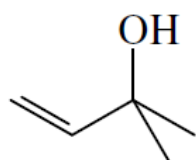


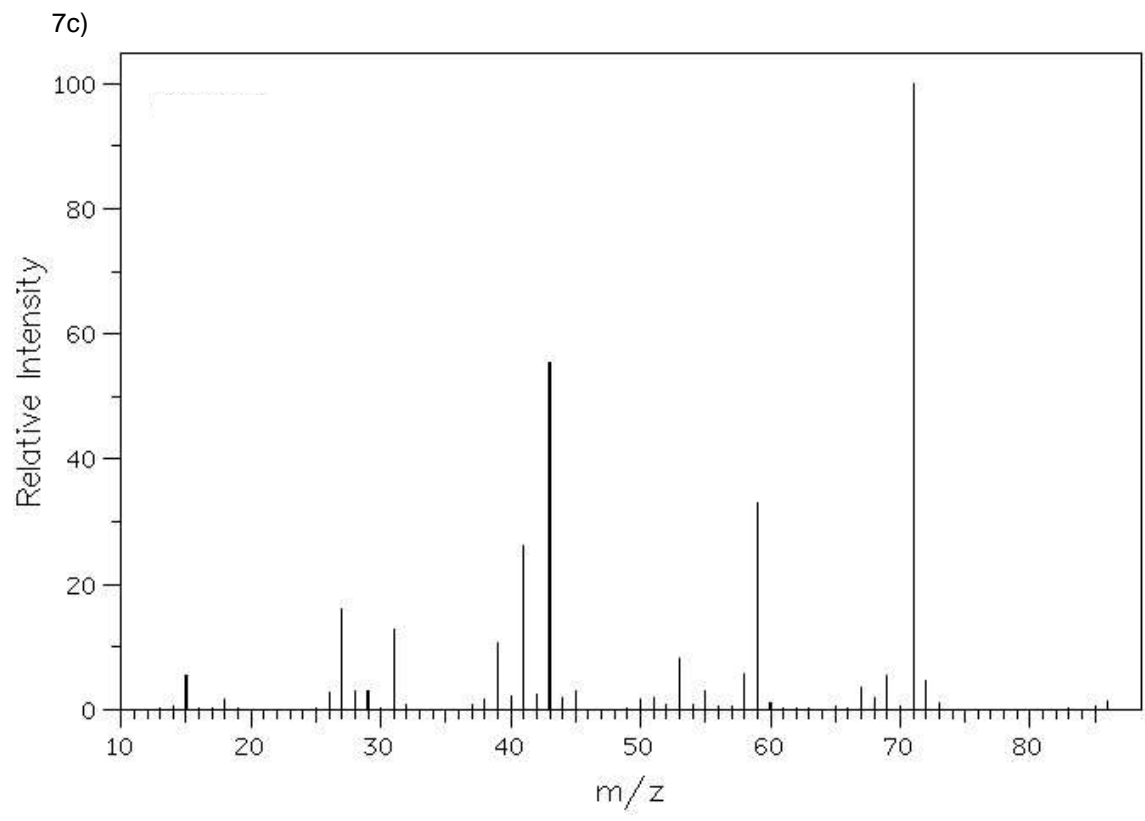
## Composto 6.2



$$M^{+} = 68$$

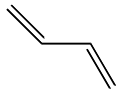
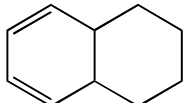
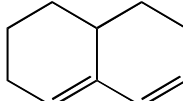
7. Os três compostos apresentados abaixo são os isômeros estruturais. Relacione cada um desses compostos com o seu espectro de massas correspondente (7a, 7b e 7c) e mostre o mecanismo que levou a formação do pico base em cada espectro, mostrando a estrutura do íon correspondente a esse fragmento.







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 <sub>3</sub>	+ 0
-OR	+ 6
-Cl, -Br	+ 5
-NR <sub>2</sub>	+60
-SR	+ 30