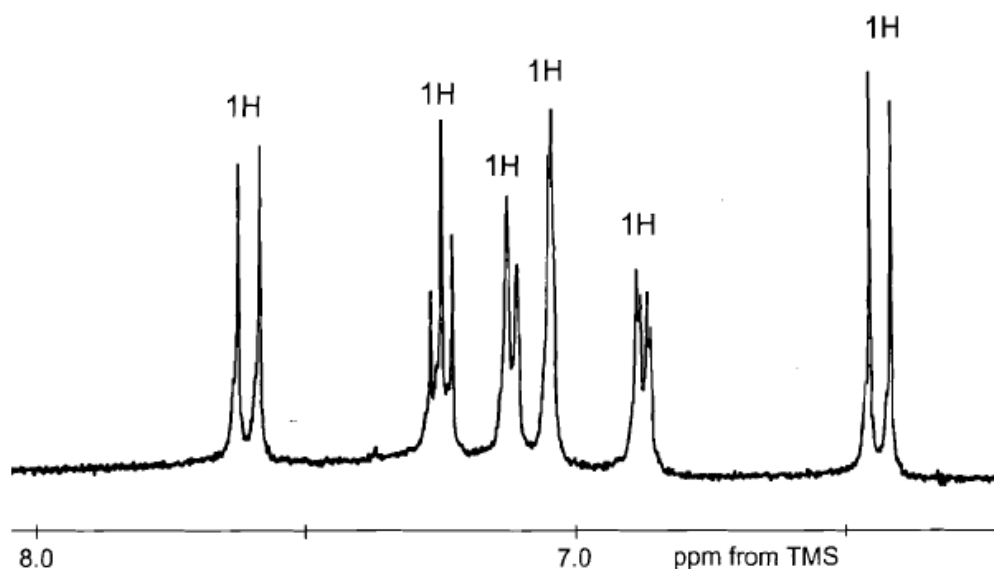


QFL4030- QFL4030- Métodos Espectroscópicos de Análise  
Prova 2 -2016

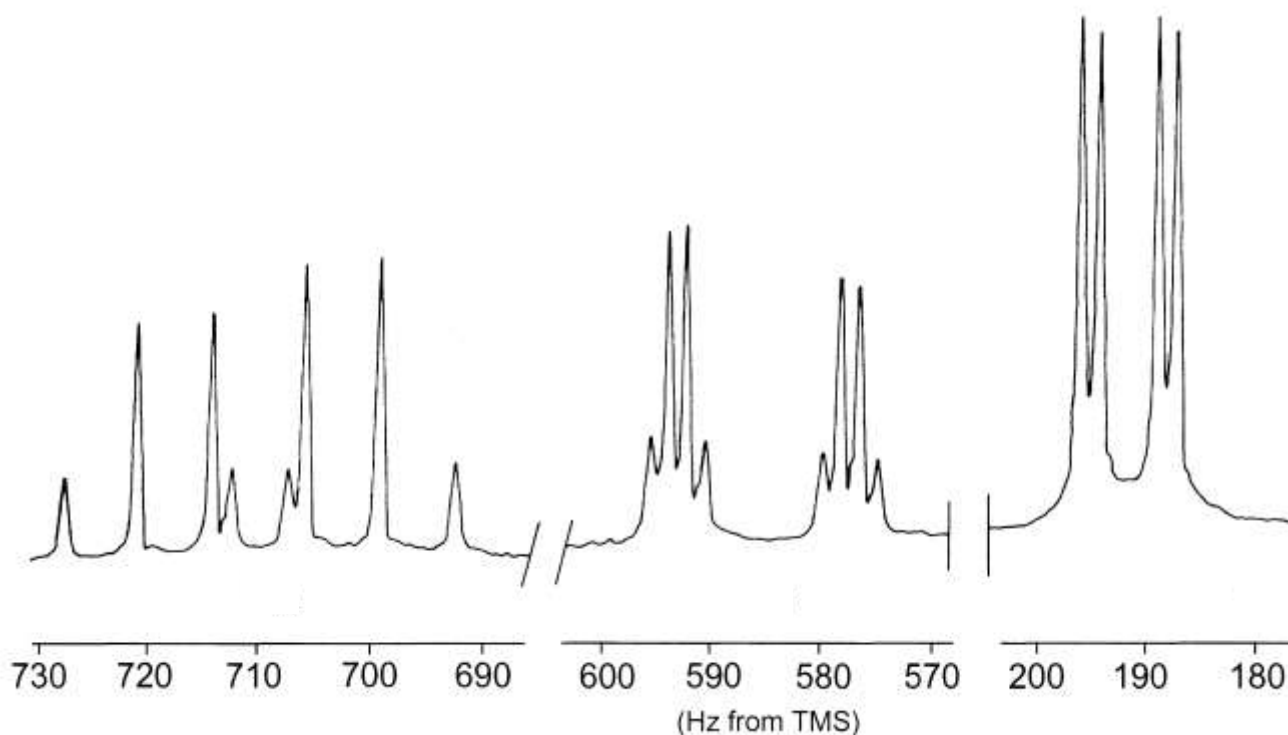
Nome:

No.USP:

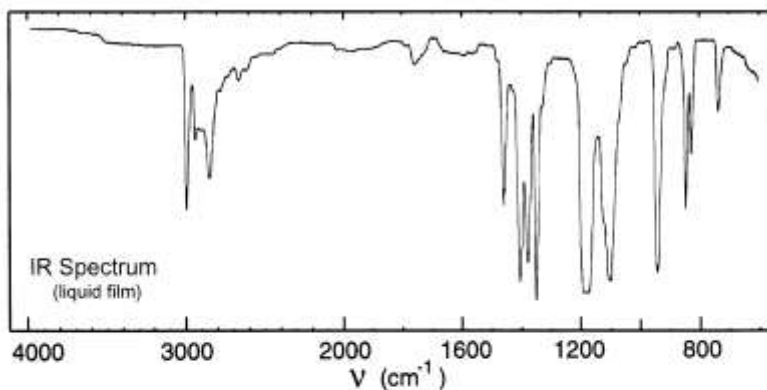
1. O espectro de  $^1\text{H}$  RMN a 400 MHz (5% em  $\text{CDCl}_3$  após a adição de  $\text{D}_2\text{O}$ ) de um dos seis isômeros possíveis para o ácido hidróxi-cinâmico é apresentado abaixo. Determine qual é a estrutura correta para o composto que deu origem ao espectro usando argumentos baseados na simetria na magnitude das constantes de acoplamentos spin-spin.



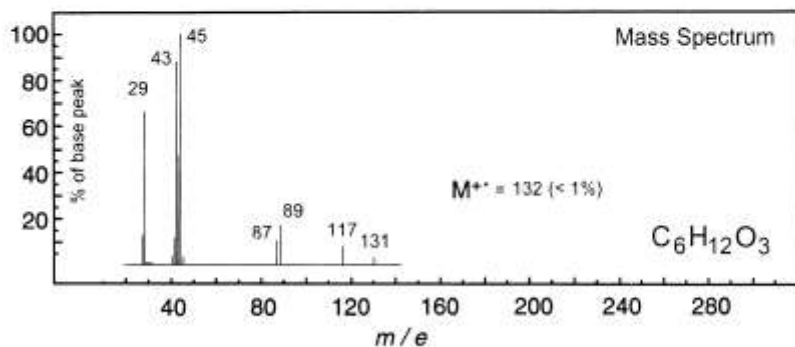
2. Uma parte do espectro de  $^1\text{H}$  RMN a 100 MHz de um ácido monocarboxílico insaturado de fórmula molecular  $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$ , registrado em  $\text{CDCl}_3$ , encontra-se abaixo com exceção do hidrogênio ácido. A parte em campo alto do espectro se encontra menos ampliada para caber na página.
- (a) Desenhe o diagrama de desdobramento dos sinais e analise o espectro através dos métodos de primeira ordem, isto é, extraia todas as constantes de acoplamento ( $J$  em Hz) e os deslocamentos químicos ( $\delta$  em ppm) por medida direta. Justifique o uso da análise de primeira ordem.
- (b) Qual a estrutura compatível com os dados obtidos para esse ácido carboxílico?



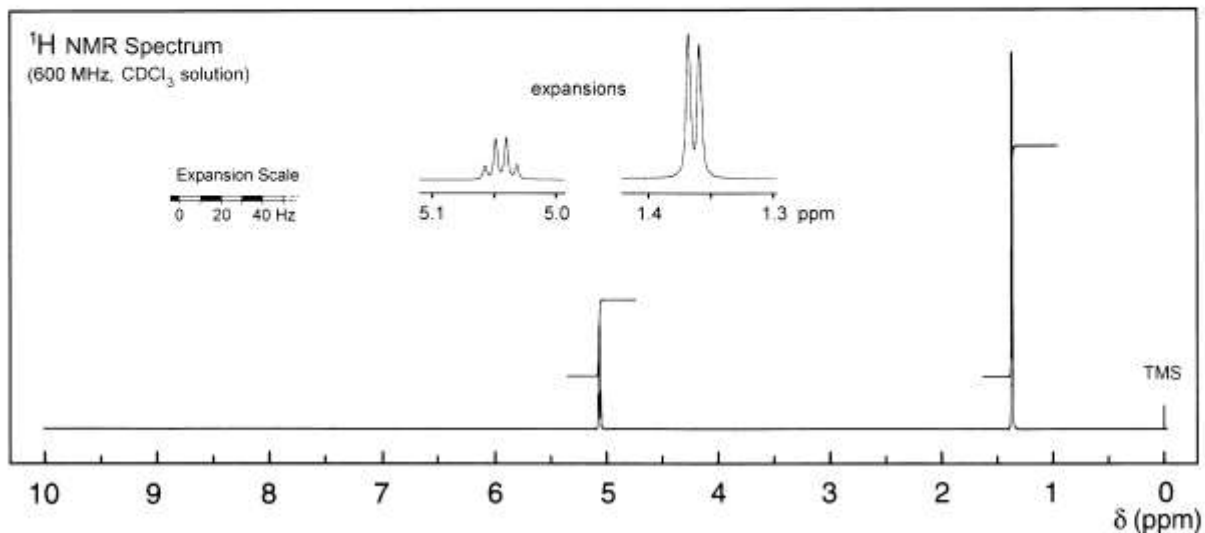
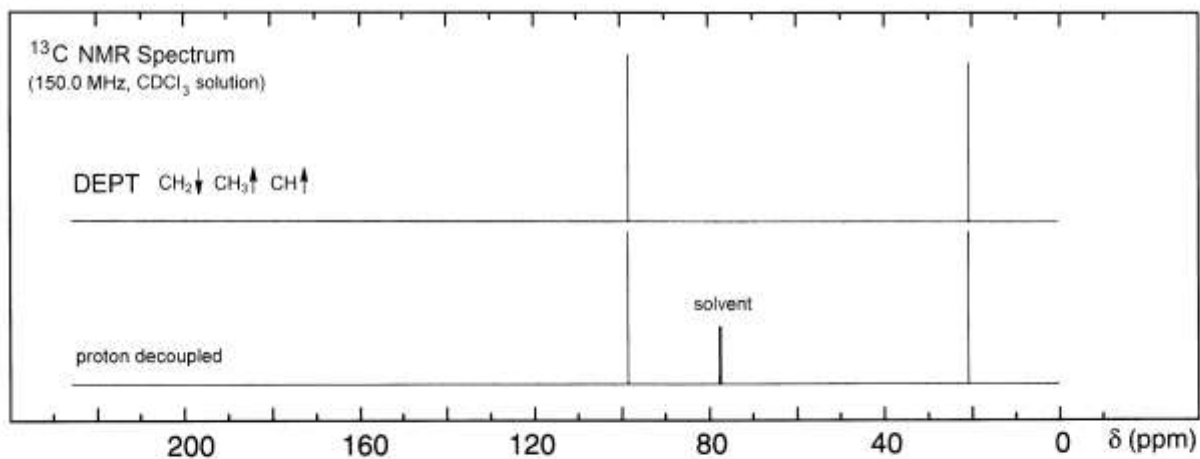
3. Determine a estrutura dos compostos orgânicos, cujos espectros de IV, UV, EM e RMN ( $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ ) são mostrados a seguir. Atribua os sinais relevantes observados nos espectros.



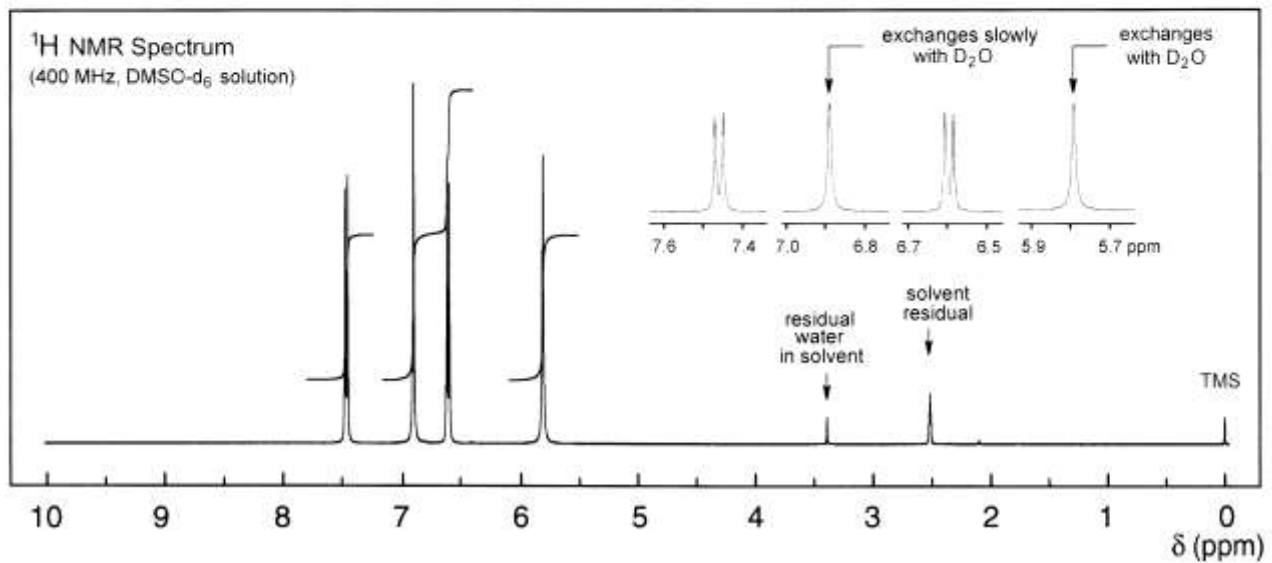
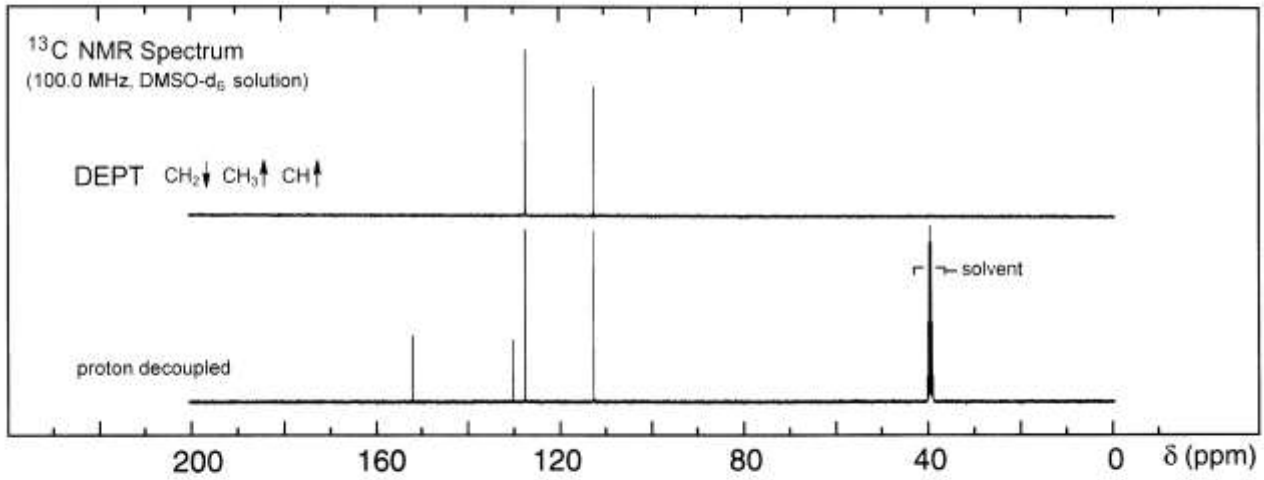
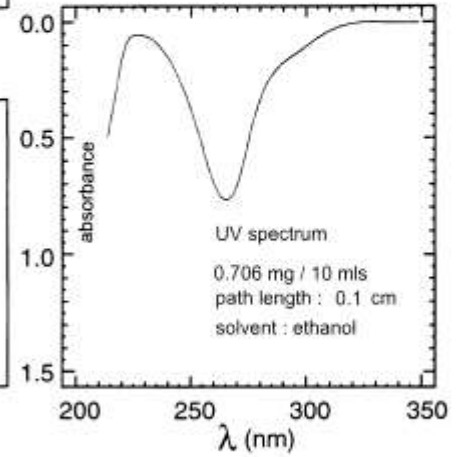
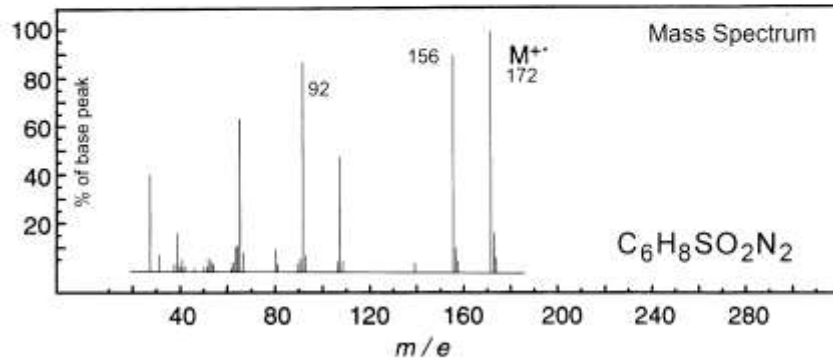
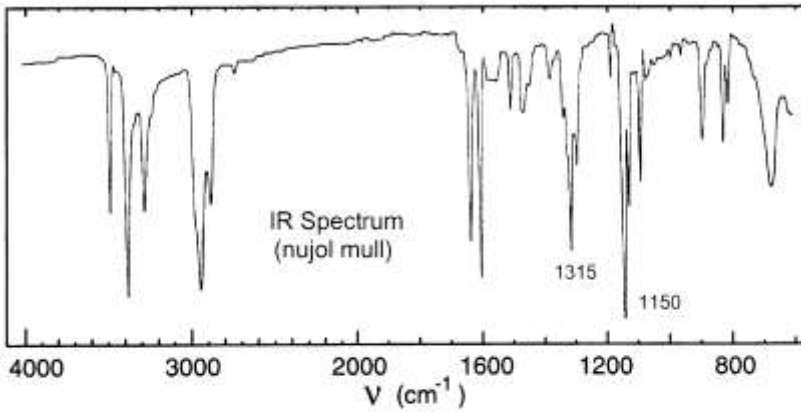
3A



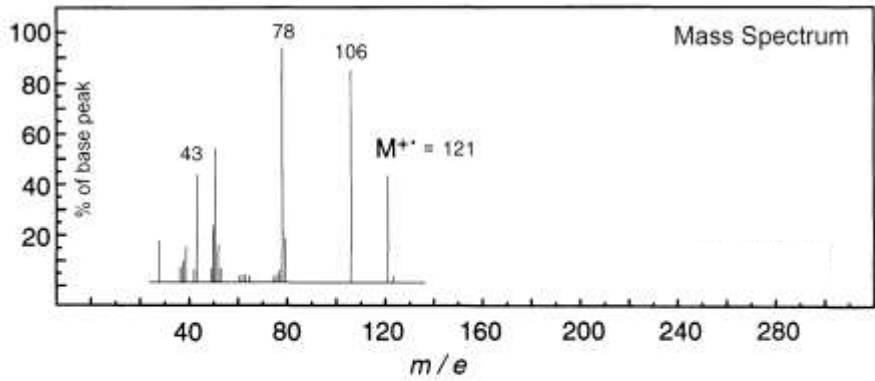
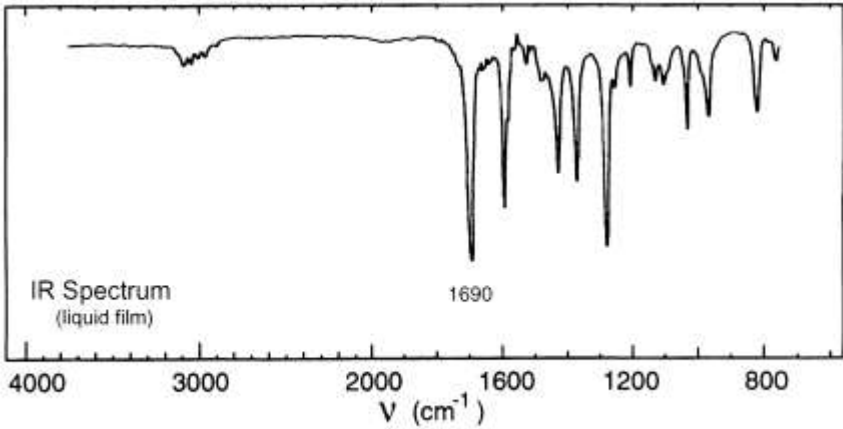
No significant UV  
absorption above 220 nm



3B



3C



UV Spectrum

$\lambda_{\text{max}}$  228 nm ( $\log_{10} \epsilon$  3.9)

$\lambda_{\text{max}}$  267 nm ( $\log_{10} \epsilon$  3.5)

solvent : ethanol

