

PRIMEIRA LISTA DE EXERCÍCIOS SOBRE RMN DE H

1) Os seguintes sinais foram observados nos espectros de RMN de H. Esses espectros foram obtidos com um espectrômetro de 400 MHz. Converta esses sinais para a escala de ppm .

1a) CHCl_3 1451 Hz $\delta =$ ppm

1b) CH_3OH 693 Hz $\delta =$ ppm

2) O espectro da butanona-2 foi obtido com um espectrômetro de 300 MHz. Nesse espectro, havia um sinal em cerca de 2,1 ppm.

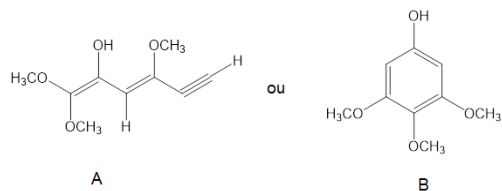
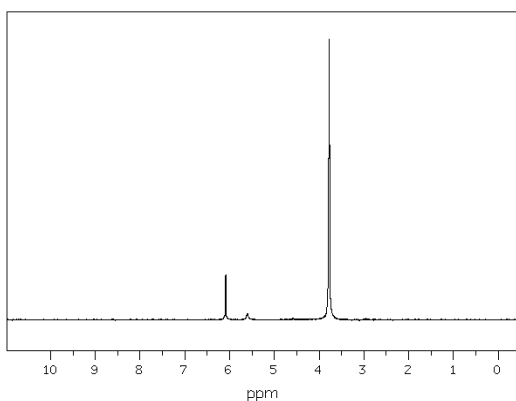
a) Qual a distância, em Hz, desse sinal com relação à referência TMS (tetrametilsilano) ?

b) Se tivesse sido utilizado um espectrômetro de 400 MHz, seria observado um deslocamento químico diferente em Hertz ?

c) Se tivesse sido utilizado um espectrômetro de 400 MHz, seria observado um deslocamento químico diferente em ppm?

Para confirmar suas respostas para os exercícios 3 e 4, utilize as tabelas de efeito de substituintes, apresentadas no 3º. vídeo sobre RMN.

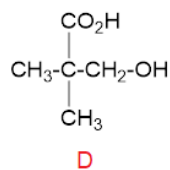
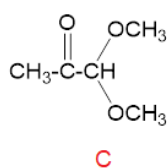
3) Um estudante deve decidir, com base no espectro RMN de H de um determinado composto, entre as seguintes fórmulas estruturais:



???????

Você pode ajudá-lo a decidir? Qual é a letra da estrutura correta?

- 4) Os espectros que se seguem correspondem, não necessariamente na ordem da apresentação, a dois compostos isoméricos, de fórmula $C_5H_{10}O_3$. Estes compostos são:



- Simule, utilizando cálculos de deslocamento químico, o espectro de RMN de H para cada um desses compostos.
- Associe, a cada fórmula, os espectros de infravermelho e de massas reproduzidos abaixo.
- Indique o fragmento que corresponde ao pico base do espectro de massas de cada um dos dois compostos.

