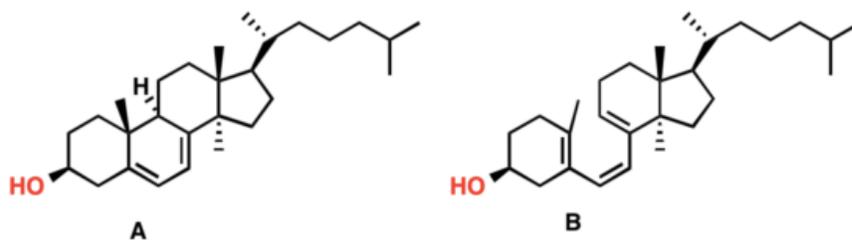


Lista de Exercícios 1 - Espectroscopia UV-Visível

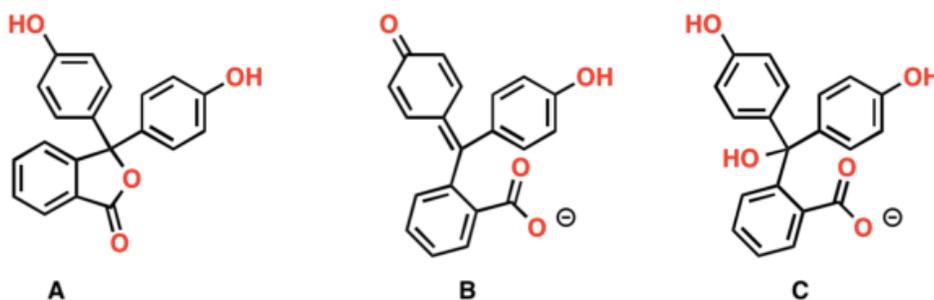
Prof^a. Dr^a. Patrícia B. Brondani
(@patyqmc)

1. Qual das moléculas abaixo absorve no maior comprimento de onda?



Resposta: (B), com 3 ligações conjugadas, absorve em um comprimento de onda máximo maior que (A). A molécula (A) (Ergosterol) absorve luz UV sendo transformada na molécula (B) (Ergocalciferol). Essa é a primeira etapa de biossíntese da Vitamina D. Essa é a razão de precisarmos da luz do sol para produzir Vitamina D.

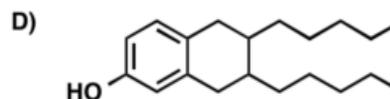
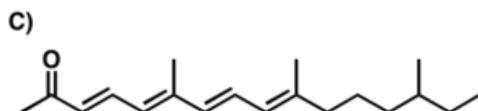
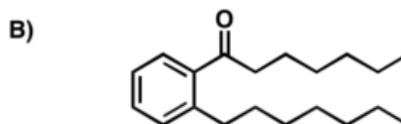
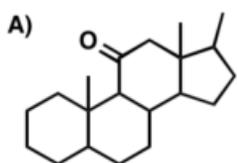
2. Qual dessas 3 formas do indicador de pH fenolftaleína é responsável pela cor rosa? Relacione as faixas de pH com a forma correspondente: pH abaixo de 8,2, pH entre 10 e 13 e pH acima de 13.



Somente em (B) existe conjugação entre os 3 anéis aromáticos (olhe para o átomo de carbono central). Como tem o sistema com maior conjugação, absorverá em comprimento de onda maior e

será o mais colorido. A estrutura (A) é a forma neutra, presente abaixo de pH 8,2. Sob condições altamente básicas (pH acima de 13) o íon hidróxido reage com (B) no carbono central e leva a (C).

3. Um composto tem a fórmula $C_{20}H_{32}O$ e um espectro com o $\lambda_{max} = 275$ nm. Submetendo esse composto a uma hidrogenação catalítica com Pd/C e H_2 o λ_{max} não muda. Tratando o composto inicial com $NaBH_4$ ou $LiAlH_4$, novamente não há alteração no λ_{max} . Qual é a provável estrutura?

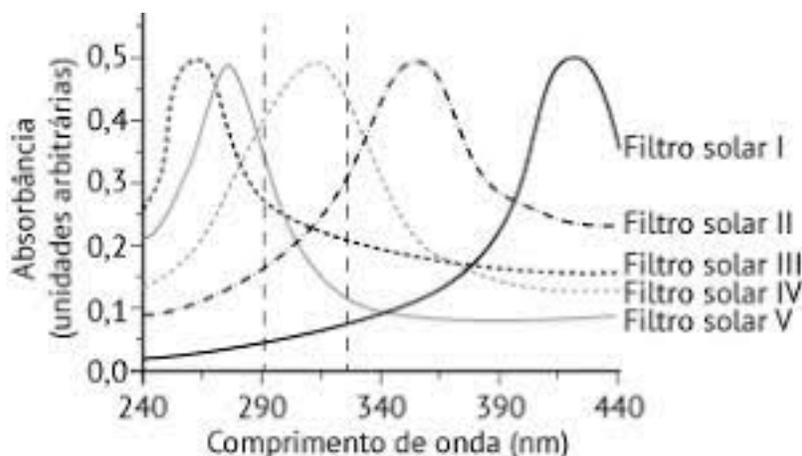


A estrutura $C_{20}H_{32}O$ possui IDH = 5 (IDH = índice de deficiência de hidrogênio):

$$* \text{IDH} = \frac{[\text{número de C} \times 2] + 2 - \text{número de H}}{2}$$

A estrutura (A) poderia absorver (tem carbonila), mas ela seria reduzida até o álcool por reação com o $NaBH_4$. Como a questão fala que após reação com o $NaBH_4$ não houve mudança do comprimento de onda, essa opção pode ser descartada. O mesmo raciocínio pode ser feito para a cetona (B), conjugada com o anel aromático, mas que seria afetada por reação com o agente redutor. A molécula (C) se tratada com $NaBH_4$ ou com metodologia de hidrogenação, seria afetada alterando seu comprimento de onda de máxima absorção. A resposta certa é (D), as duplas do anel benzênico não são afetadas pela hidrogenação catalítica, não há carbonila que seria reduzida por agente redutor e possui IDH = 5 (dois ciclos mais 3 ligações duplas).

4. Analisando os espectros de absorção da radiação UV de cinco filtros solares. Qual dos filtros solares apresenta absorção máxima na faixa UV-B?



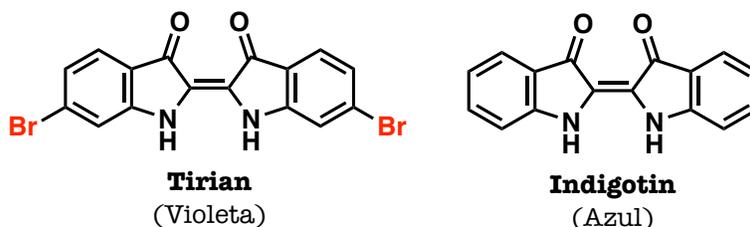
O UV-B ocorre na faixa de 280 a 315 nm, portanto o composto IV.

5. O espectro de UV da benzonitrila mostra uma absorção primária em 224 nm. Usando uma solução de benzonitrila em água, com concentração 1×10^{-4} mol/L, e examinando ela no comprimento de onda 224 nm, observou-se uma absorvância de 1,30. A cubeta utilizada possui 1 cm. Qual a absorvidade molar em 224 nm para esse composto?

$$A = \epsilon C \cdot l$$

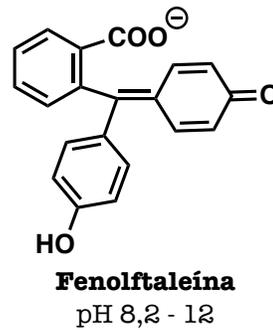
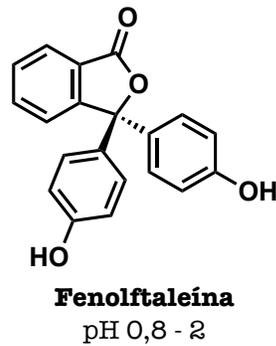
$$\epsilon = A / C \cdot l = 1,30 / (1 \times 10^{-4}) \times 1 = 1,34 \times 10^4$$

6. Abaixo são mostradas as estruturas de dois corantes. A cor observada para cada um está listada abaixo. Qual é a faixa de comprimento de onda que esses compostos absorvem mais fortemente? A ausência de Bromo, pelo Indigotina causa absorção de luz de maior ou menor energia?



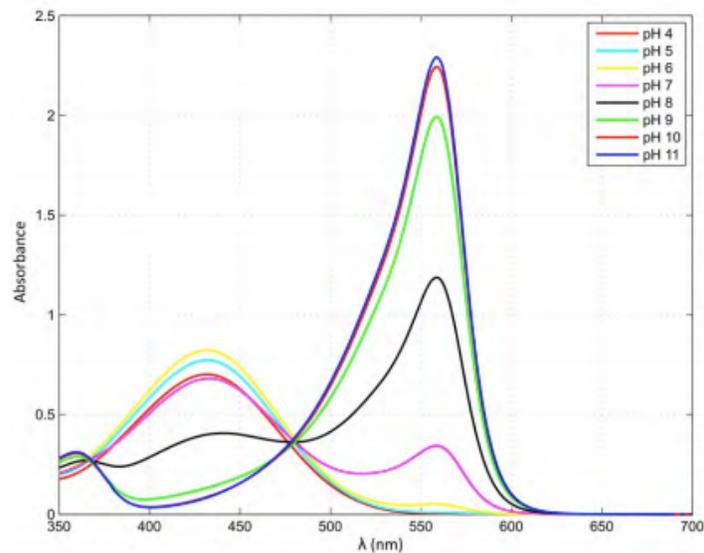
A ausência de bromo no Indigotina causa a absorção em comprimentos de onda maiores (menor energia). O efeito do bromo é, portanto, batocrômico.

7. A fenolftaleína é conhecida como um indicador de pH. Ela é incolor na faixa de pH de zero a 8,2, enquanto é rosa na faixa de pH de 8,2 até 12. Como essa mudança afeta a conjugação da molécula? Em qual região (UV ou visível) cada uma das estruturas absorve?



O aumento do pH resulta em uma estrutura altamente conjugada. Ambas as formas de fenolftaleína absorvem da região UV, mas a estrutura presente na faixa de pH 8,2 a 12 também absorve na região visível (553 nm aproximadamente – verde, aparentando rosa).

8. O Vermelho de fenol apresenta o seguinte comportamento quando submetido a diferentes valores de pH:



Procure a estrutura do vermelho de fenol e proponha o que causa a mudança do $\lambda_{\text{máx}}$.

