

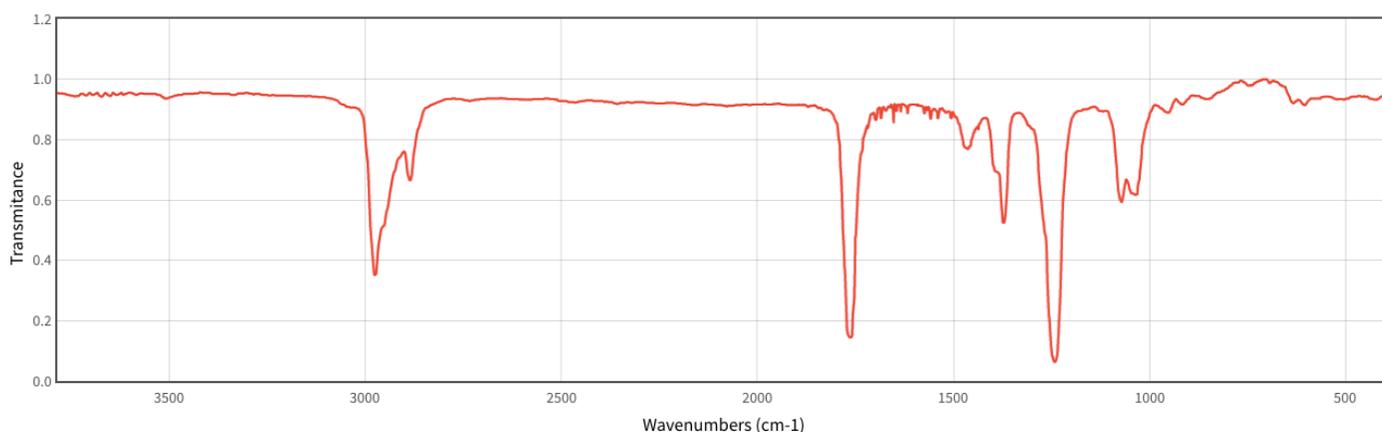
Lista de Exercícios 2 - Espectroscopia IV

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

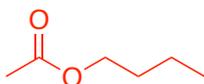
1. Relacione os espectros abaixo com as seguintes moléculas:

- (a) *n*-butil acetato
- (b) Butilamida
- (c) Isobutilamina
- (d) Ácido decanóico
- (e) Propionato de sódio

(I)



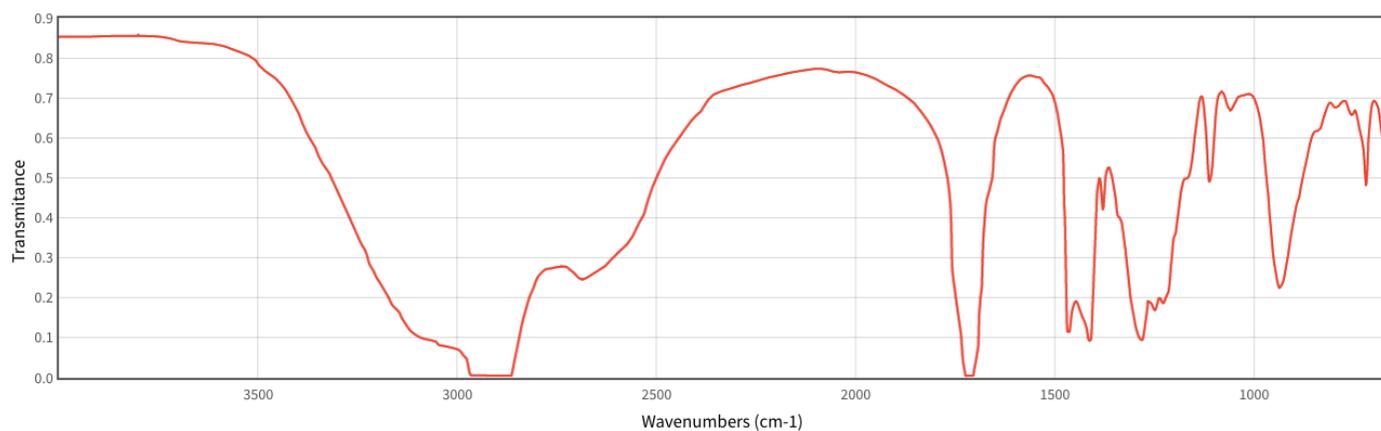
composto (a) *n*-Butil acetato (Éster)



ν C=O 1735 =C-O 1200 -C-O 1300 -CO-O 1050

-C-H antes de 3000 (indicando algum grupo conjugado)

(II)



Composto (d) Ácido decanoico



ν OH antes de 3000 (banda alargada quase engolindo a C-H)

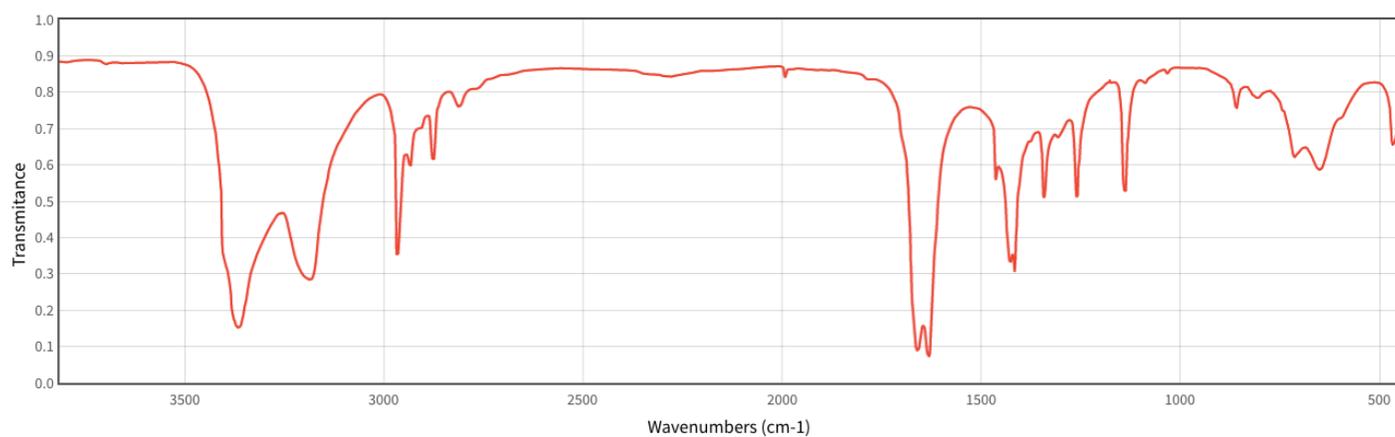
=C-O 1200-1300

C=O 1710-1780

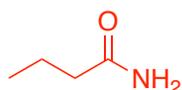
δ OH (fora do plano) 920

COO- 1400-1500

(III)



Composto (b) Butil amida (amida)



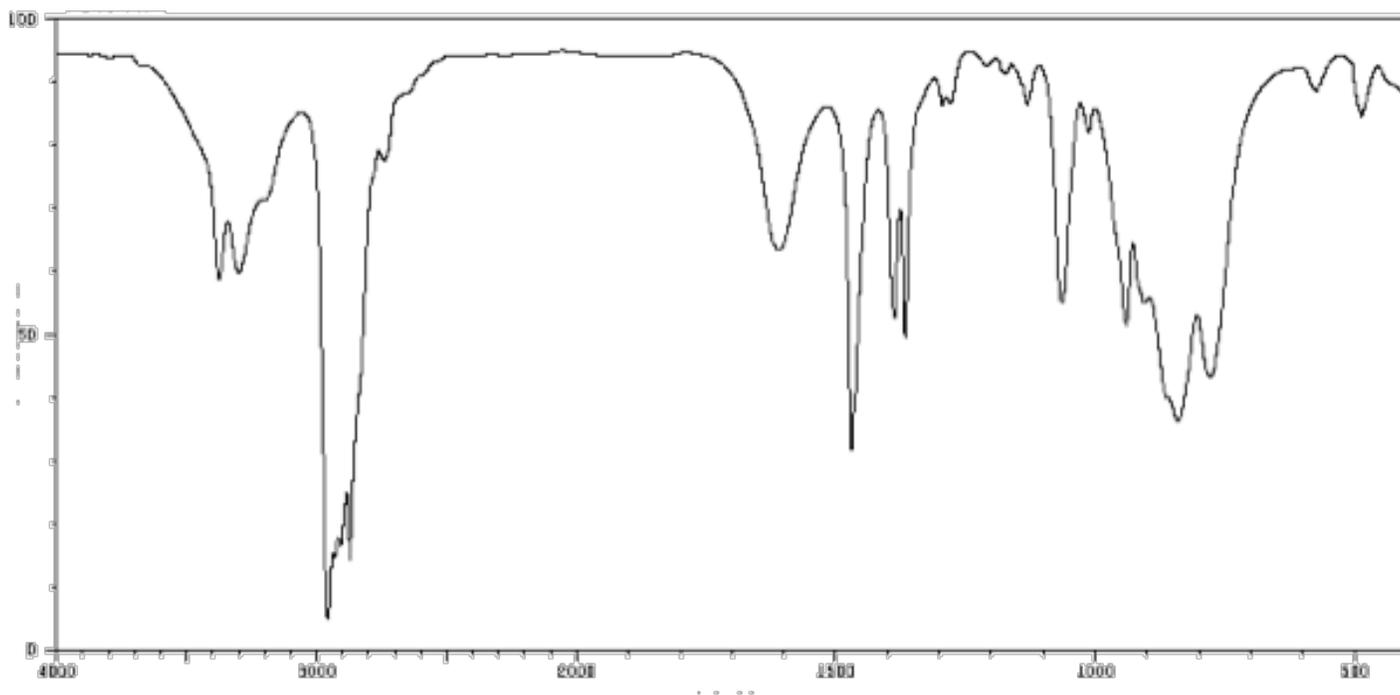
A banda de N-H de amida é mais intensa que de amina, além disso tem a presença do sinal da C=O.

ν -CONH₂ 3500-3300 (dois sinais, pois tem 2 H)

C=O 1630-1690

C-N 1400

(IV)



Composto (c) Isobutil amina



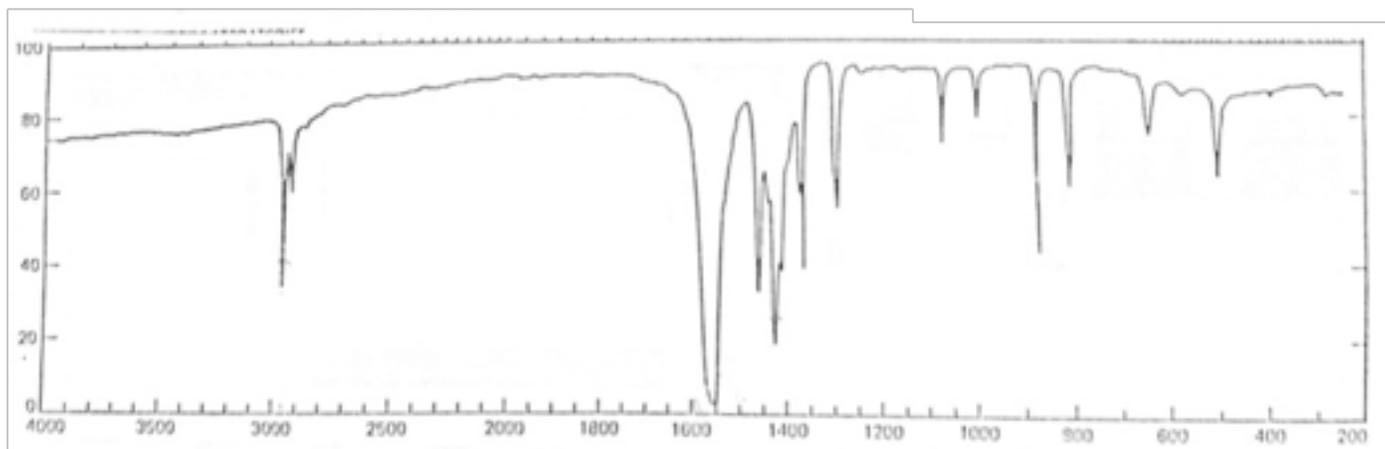
ν N-H 3300-3500 (2 sinais, pois é um NH₂)

C-H antes de 3000

δ NH₂ 1640

C-N 1400

(V)



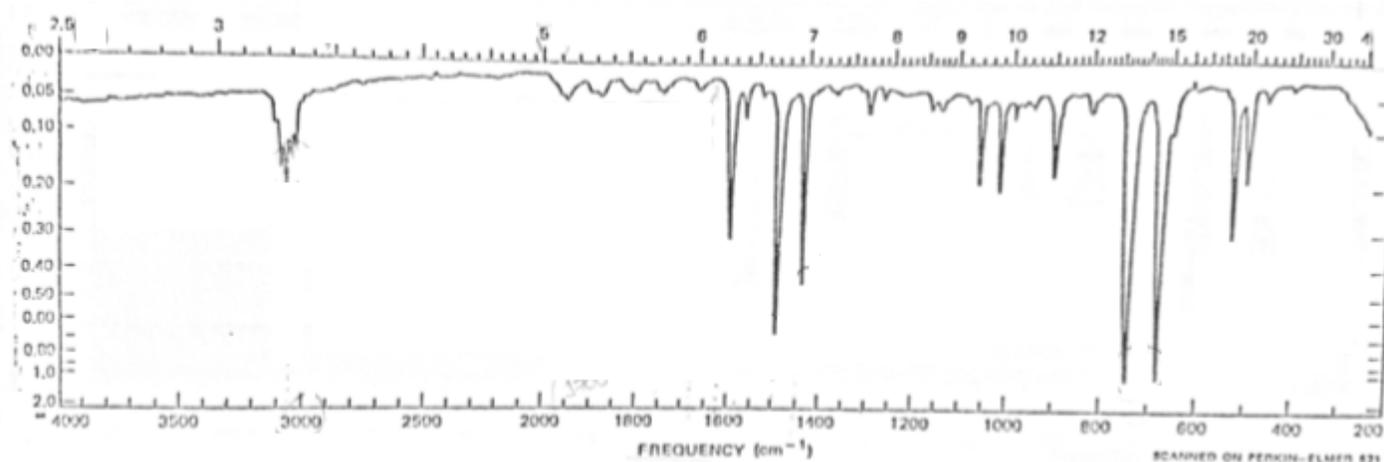
Composto (e) propionato de sódio (sal de ácido carboxílico)

Possui C=O (1550, frequência baixa, abaixo de 1600!), mas não sinal de OH. Possui ainda sinal de COO em 1400.

2. Relacione os espectros abaixo com as seguintes moléculas:

- (a) 1,3-ciclohexadieno
- (b) Difenilacetileno
- (c) 1-Octeno
- (d) *Trans*-2-Penteno

(I)



Composto (b), difenilacetileno (alquino simétrico).

Há um sinal de anel aromático monosubstituído (overtone 2000-1600 e 700-750)

sp³C-H após 3000 (pequena)

sinal referente a fenila em 1500 e de C=C de anel em 1450

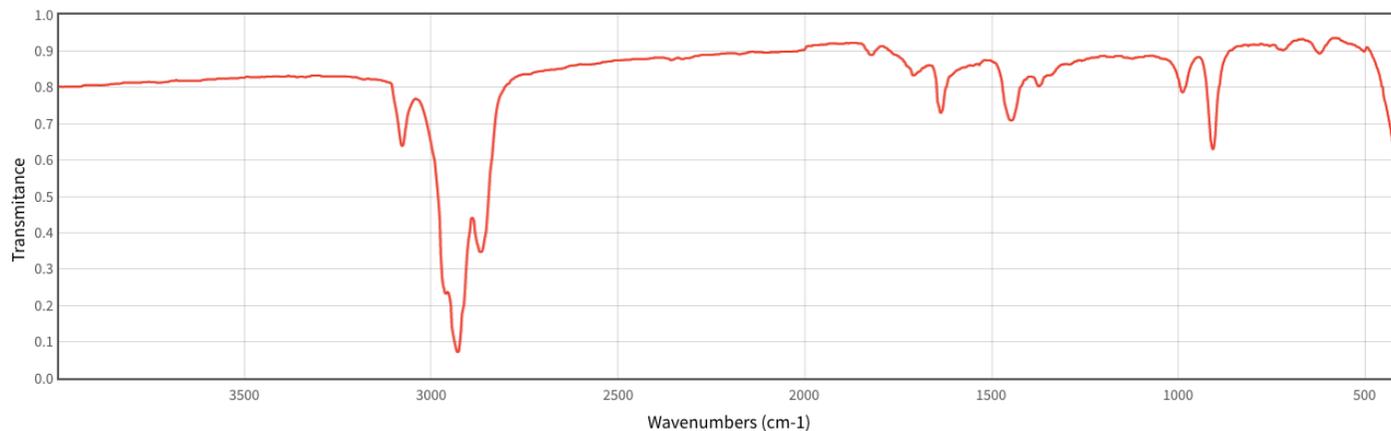
Alquinos podem ter sinal em 2200, mas não há nesse espectro. Esse sinal não aparece em alquinos simétricos, como é o caso.

Os espectros que faltam, são todos de compostos contendo dupla como grupo funcional principal.

O composto (a)- Ciclohexadieno- possui 4 =C-H e 4 –C-H (em uma relação 1:1). O composto (c) – 1-octeno- possui 3 =C-H e 13 –C-H (relação 1:4, sinal de sp³C-H bem maior). O composto (d) – 2-penteno- possui 2 =C-H e 8 –C-H (relação 1: 4 também). Os espectros (II) e (III) mostram um sinal bem maior de sp³C-H do que sp²C-H.

O que pode ser utilizado para diferenciar é que o 2-penteno possui uma dupla interna e o o 1-octeno, uma dupla terminal.

(II)

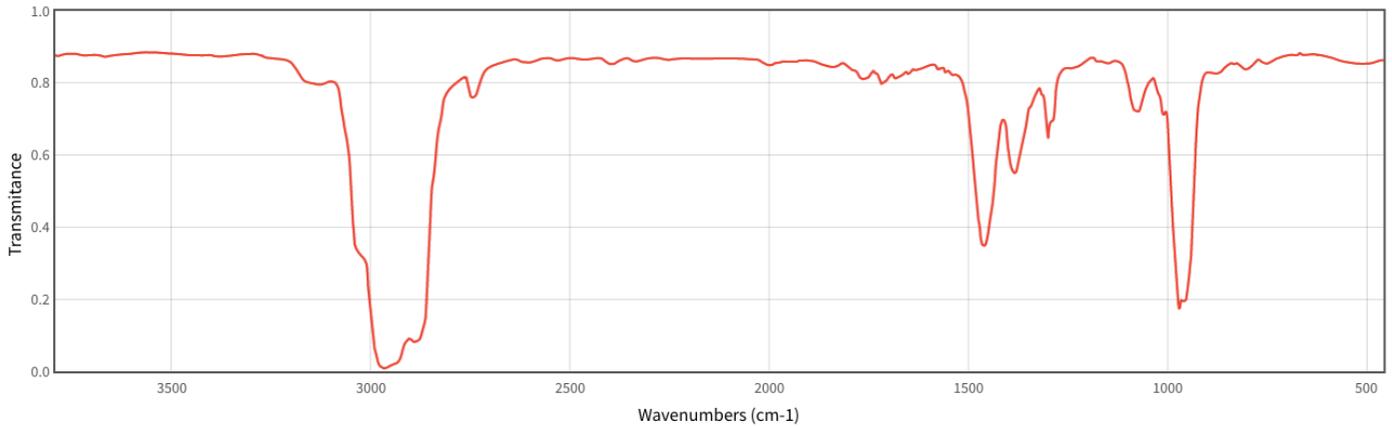


Composto (c) 1-Octeno.

C=C terminal ~1645 (média)

C=C=H fora do plano: Terminal 990-910

(III)

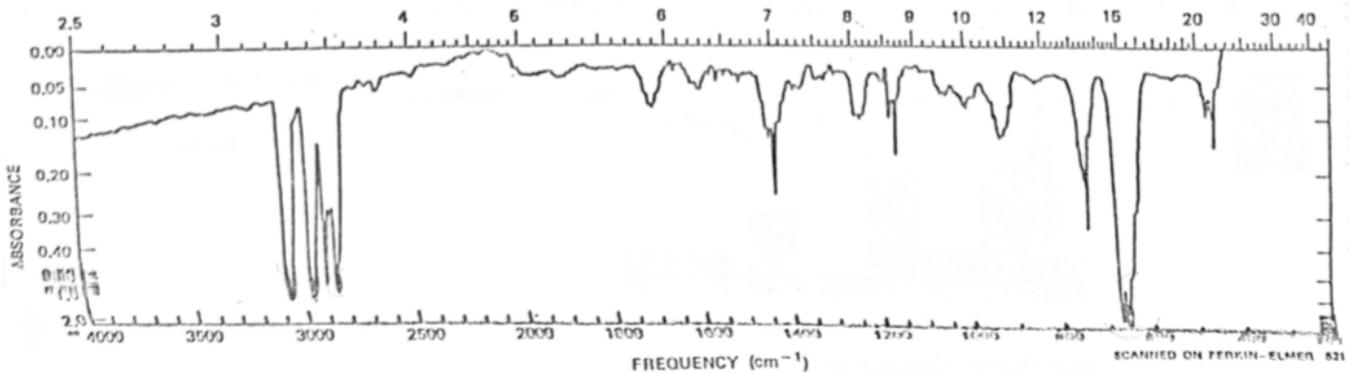


Composto (d), *Trans*-2-penteno.

C=C interna: *trans* 1675 (fraca) (*cis* seria 1660, média)

C=C-H fora do plano: *Trans* 965 (forte) (*cis* teria 730-675, média).

(IV)

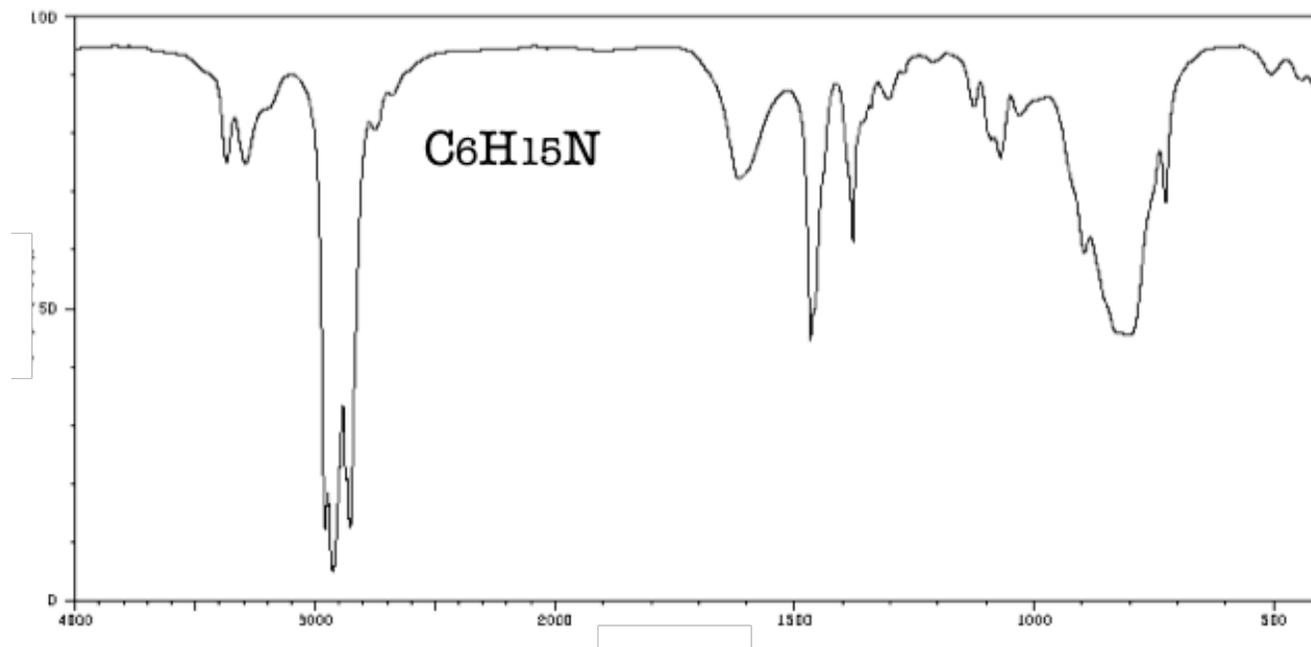


Composto (a), ciclohexadieno.

Na região de 3100 a 2800 possui vários sinais de intensidade similar. Indicando que sp²C-H e sp³C-H estão em proporções similares.

3. Justificar as principais bandas de IV, sugerir a estrutura provável e o grupo funcional.

(a)



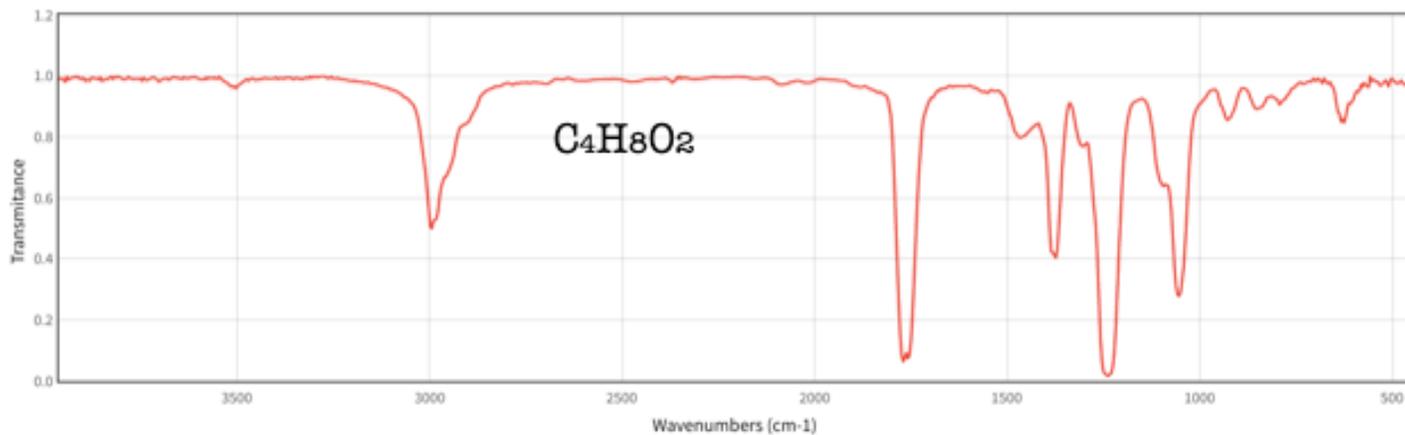
Amina primária, pois tem duas bandas de N-H próximas entre 3200-3300.

Banda C-H próximo a 3000, banda N-H próximo a 1500.

Número de insaturação: $6 - 15/2 + 1/2 + 1 = \text{zero}$

Estrutura sugerida: NCCCCC

(b)



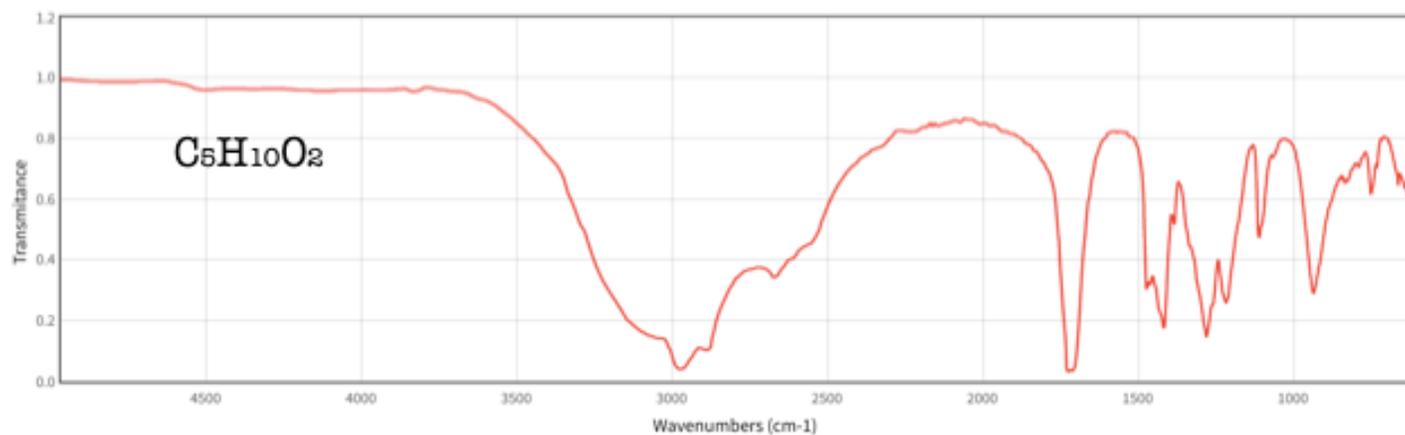
Possui oxigênio, mas não possui O-H. Possui banda de carbonila em aprox. 1730. Outra banda proeminente é próximo a 1240 (CH₃COOR).

Número de insaturações: $4 - 8/2 + 1 = 1$ insaturação (C=O somente).

Parece ser um éster de cadeia saturada.



(c)



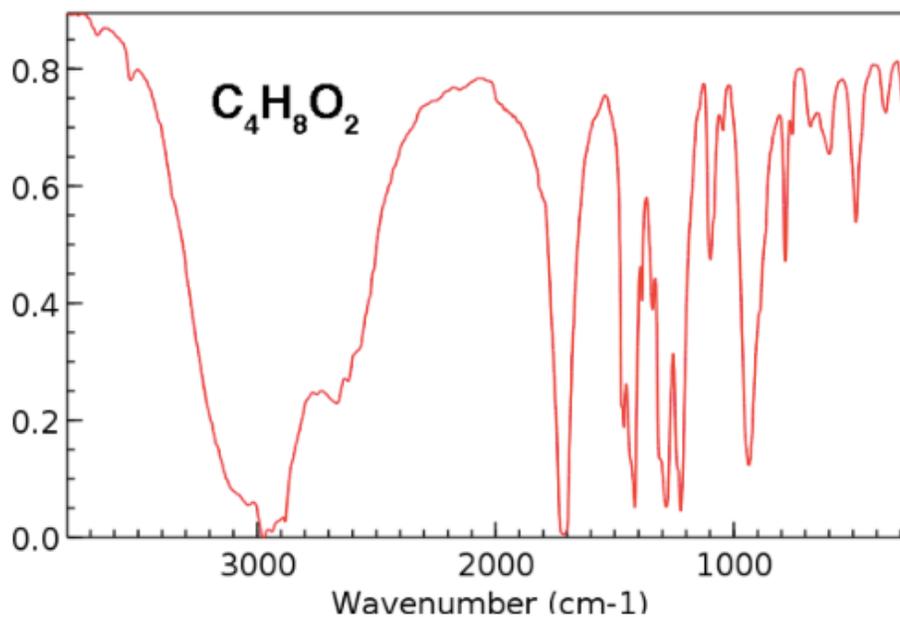
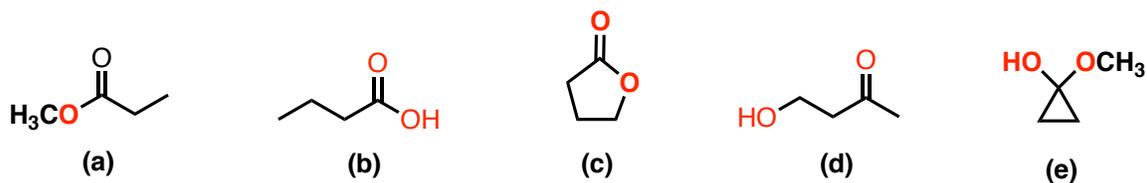
Possui O-H alargada (2500-3000), OH fora do plano (920), banda de carbonila.

Parece ser um ácido carboxílico.

Número de insaturação: $5 - 10/2 + 1 = 1$ insaturação (C=O somente)



4. Relacione o espectro abaixo a uma das moléculas listadas e justifique.



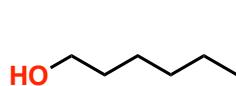
* A fórmula nos dá a informação de 1 ciclo ou uma insaturação.

* Banda de O-H intensa em 3300-2600. Com isso sabemos que não é a molécula (a) nem a (c);

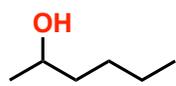
* Tem um sinal de C=O em 1700, isso descarta a molécula (e);

* Pode então ser um ácido carboxílico (b) ou uma cetona que contém um OH na molécula (d). A banda de OH de um ácido é mais alargada, como essa, então é (b).

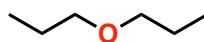
5. Qual das moléculas abaixo é descrita pelo espectro mostrado?



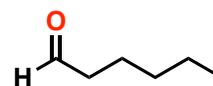
(a)



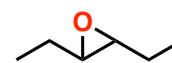
(b)



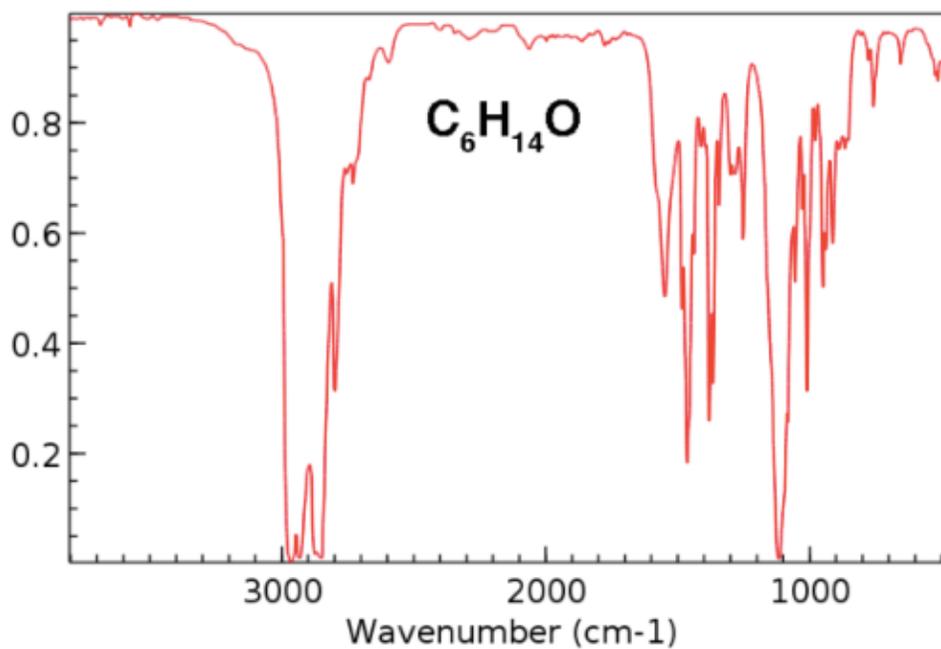
(c)



(d)

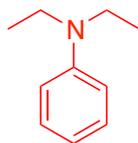
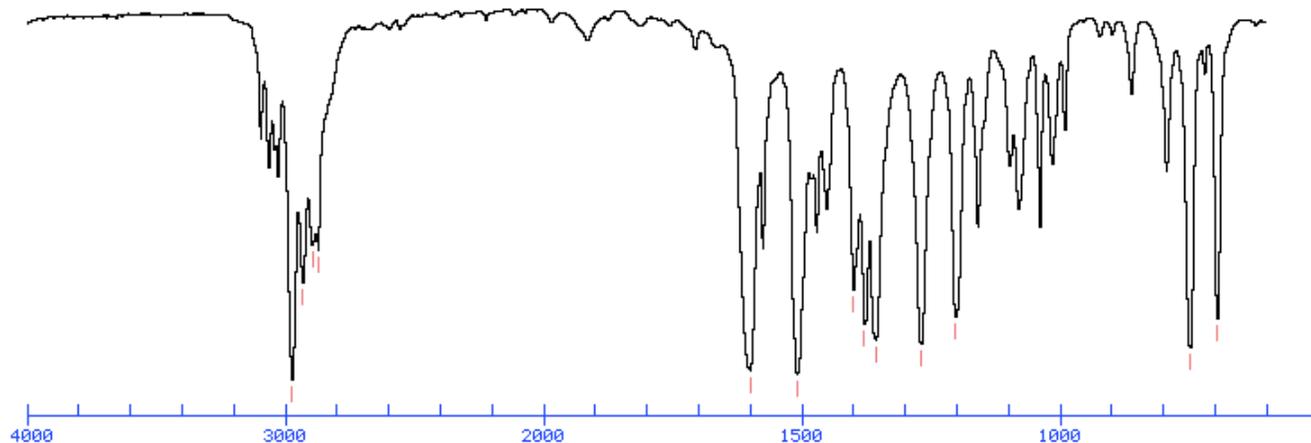


(e)



- * O índice de insaturação é zero, sem ligações duplas ou ciclos, descartando (d) e (e);
- * Não há banda de OH entre 3200-3400, com isso não pode ser (a) nem (b);
- * Sobra somente (c) que é um éter. Éter é um grupo funcional silencioso e melhor determinado por exclusão (não tem OH, nem C=O,...).

6. Qual a estrutura provável do composto cujo espectro de IV encontra-se abaixo? A fórmula molecular é C₁₀H₁₅N.



Estrutura:

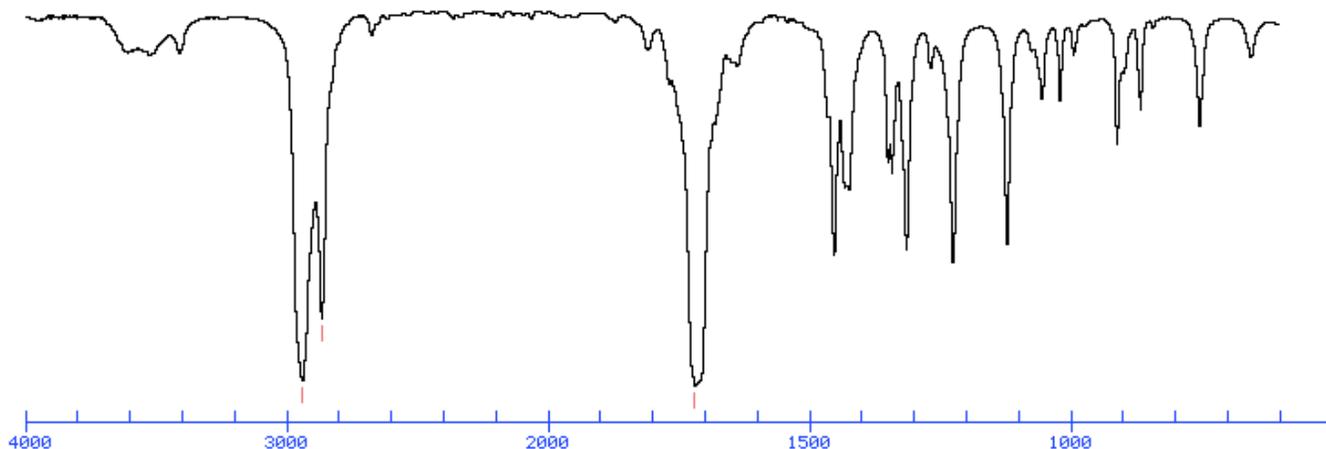
IDH = 4

Csp²-H 3100-300

C=C 1600-1450

Anel monosubstituído: harmônica em 2000-1667 não está clara, mas deformação angular entre 900-690 está (2 sinais intensos).

7. Sabendo que a fórmula molecular é $C_6H_{10}O$, qual a estrutura provável do composto cuja espectro de IV está abaixo?



Estrutura:

IDH = 2

C=O 1710

Sp³C-H 2900 e sp²C-H 2800

C(O)C 1200-1100