



Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI)
Instituto de Física e Química (IFQ)

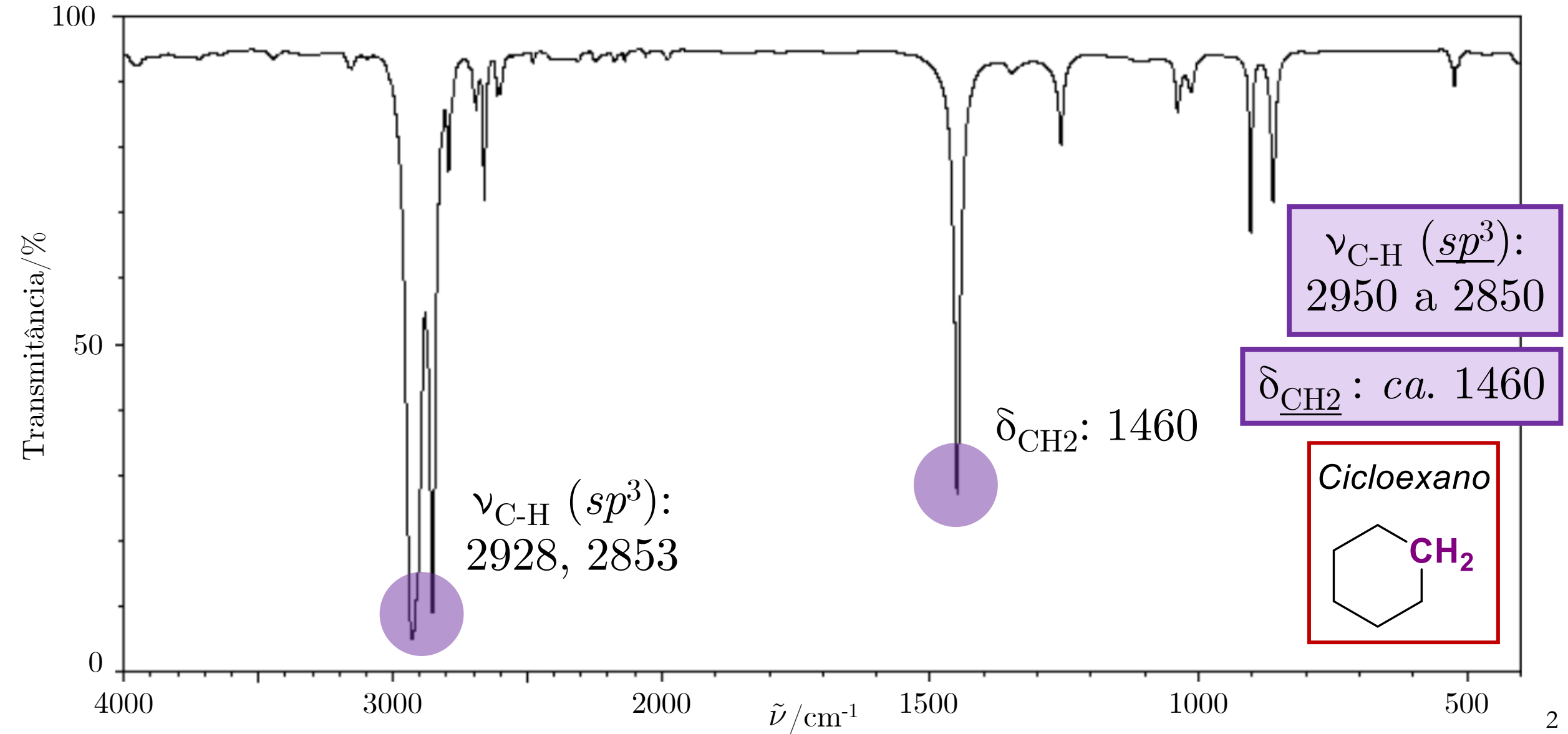


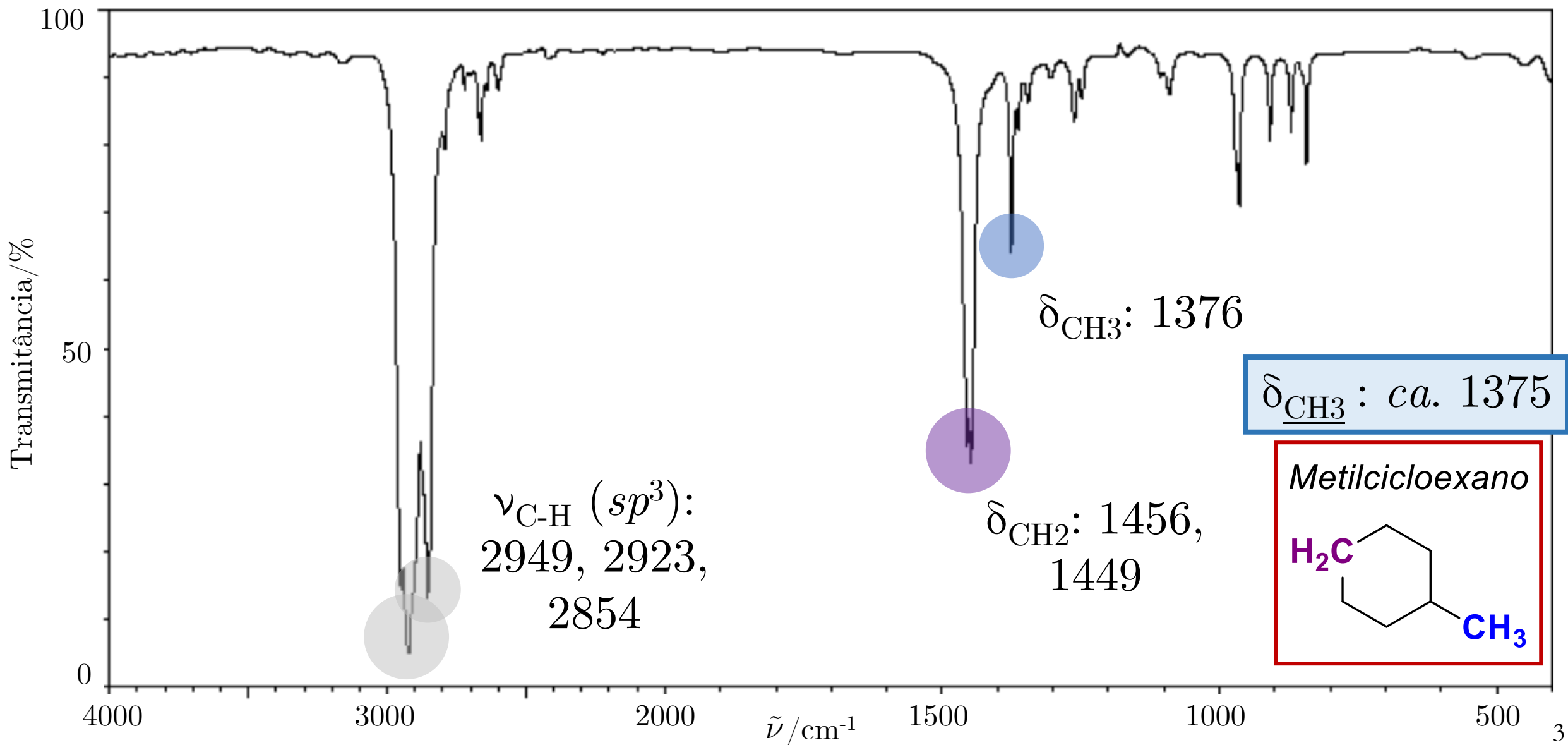
Análise de espectros no infravermelho

Lucas Raposo Carvalho

Disciplina: Métodos Físicos de Análise (QUI070)

2025.1

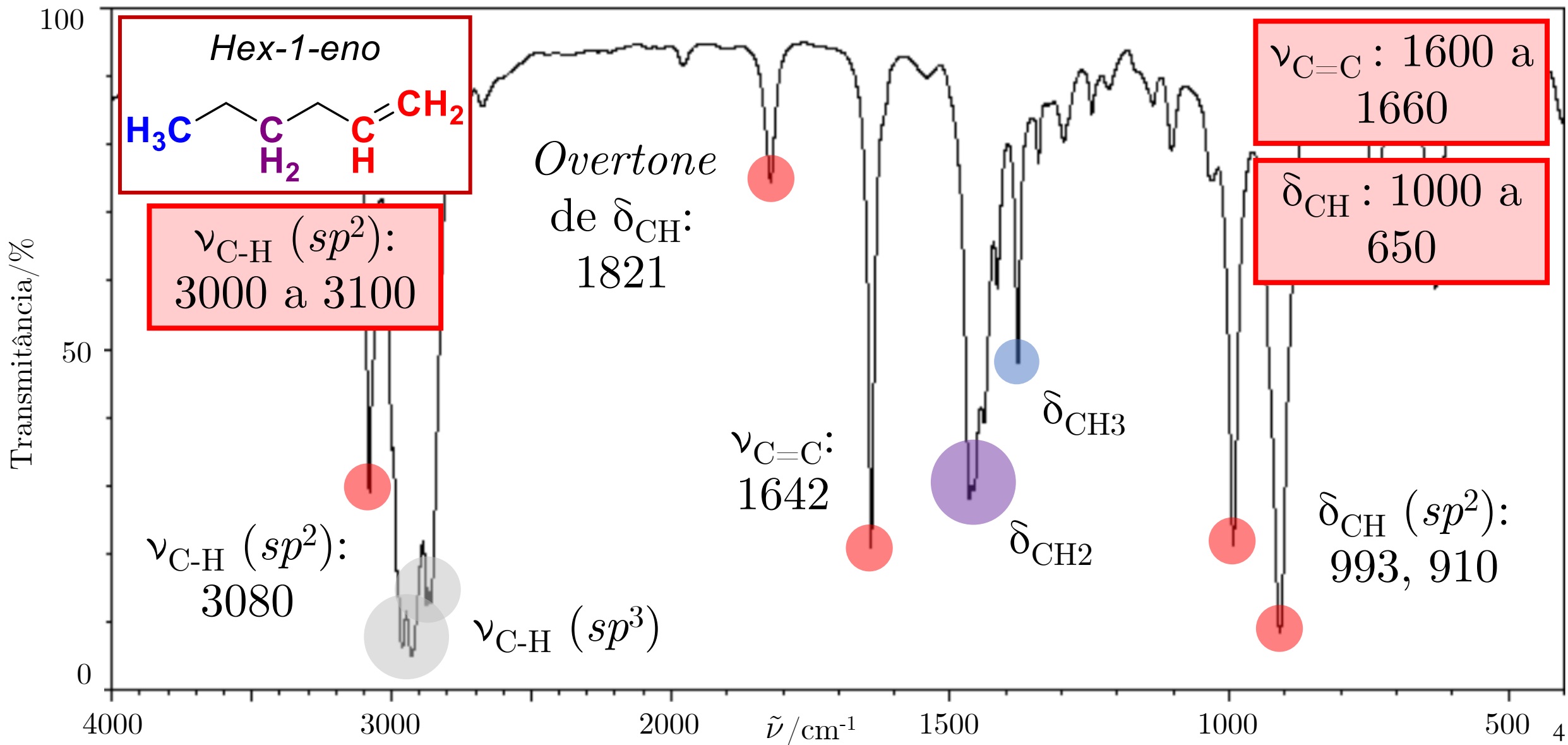






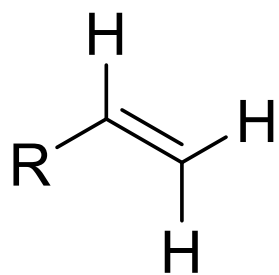
Espectroscopia no IV - Alcenos

Módulo 2

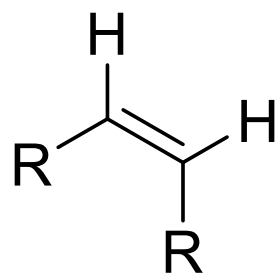




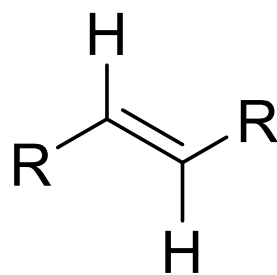
Padrão de substituição da ligação dupla – δ_{CH} (fora do plano, oop)



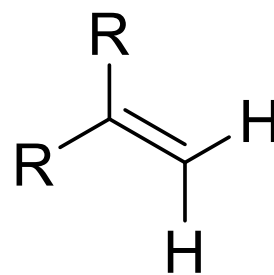
Vinil



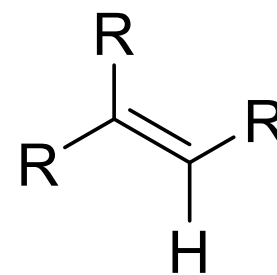
cis



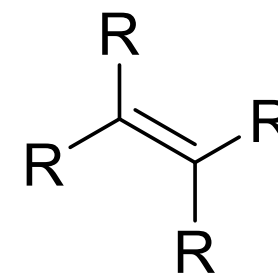
trans



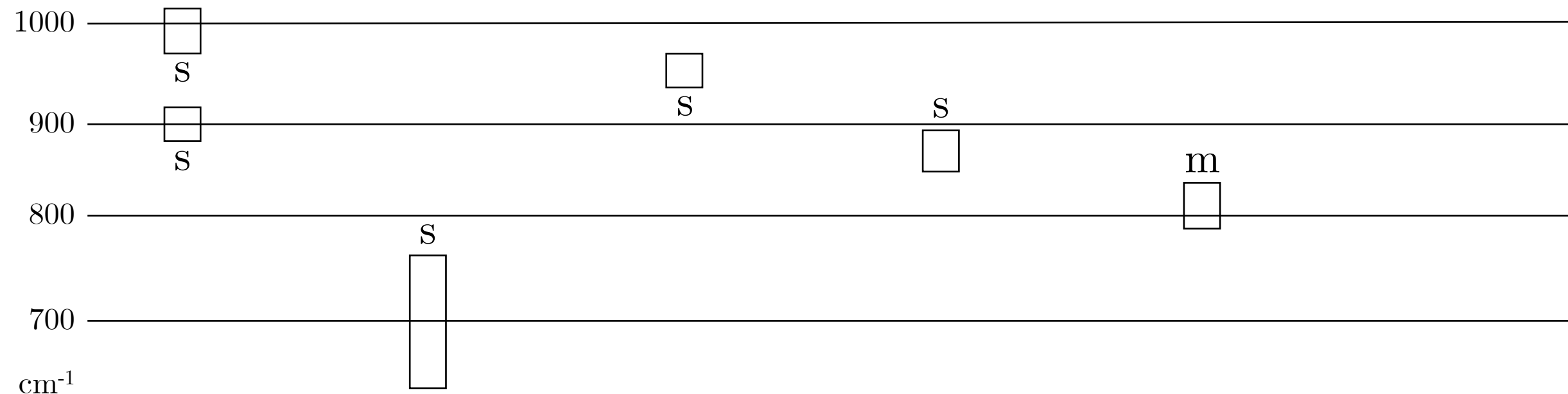
gem

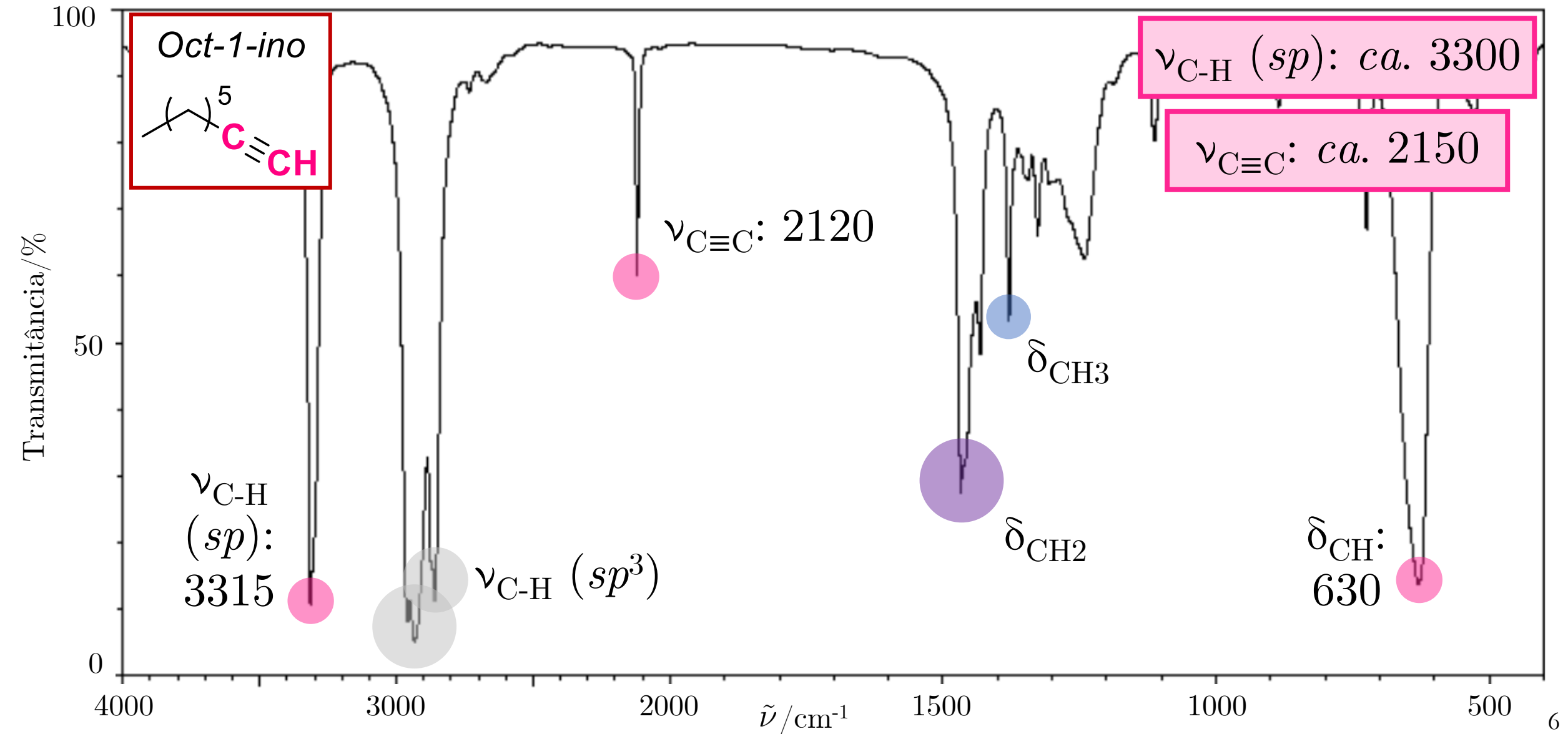


Trisubs.



Tetrasubs.

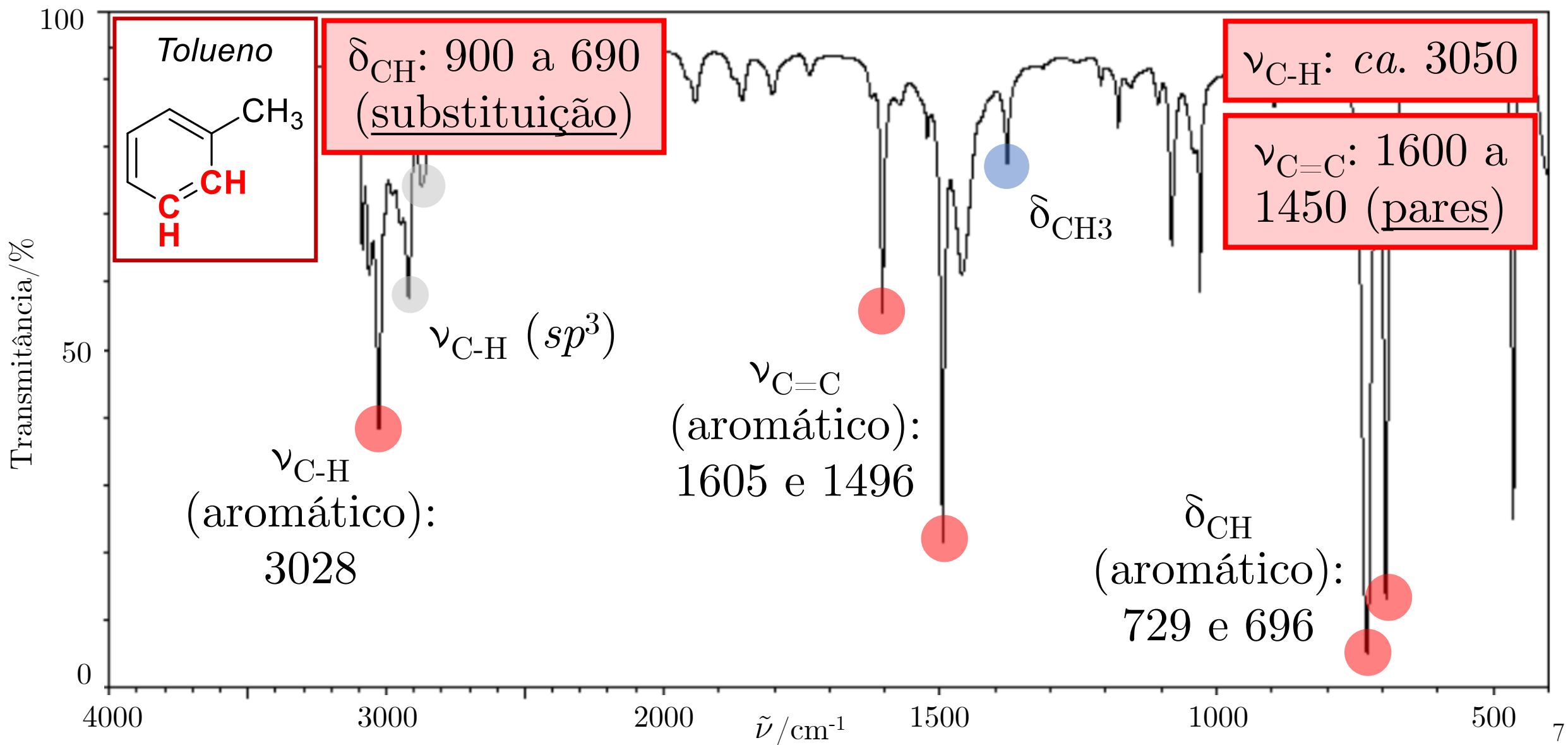






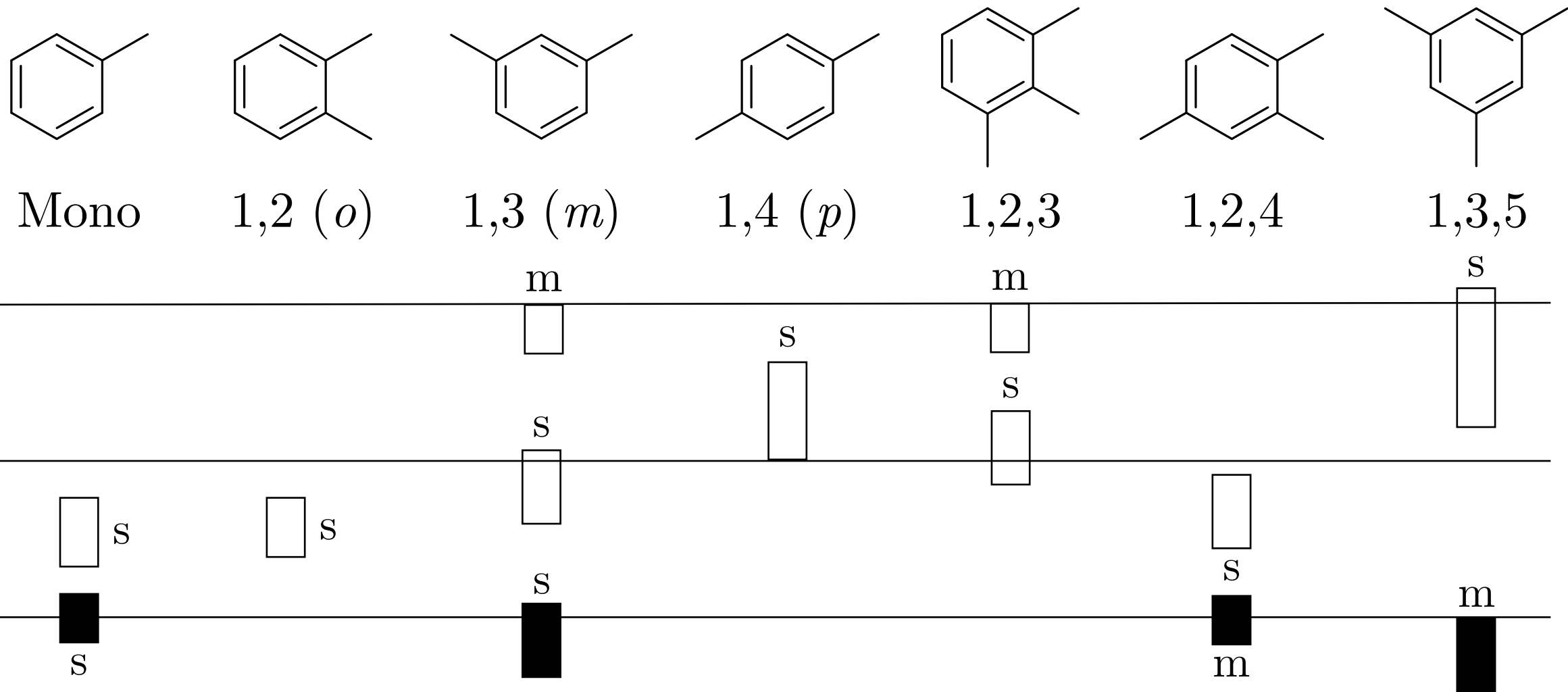
Espectroscopia no IV - Aromáticos

Módulo 2





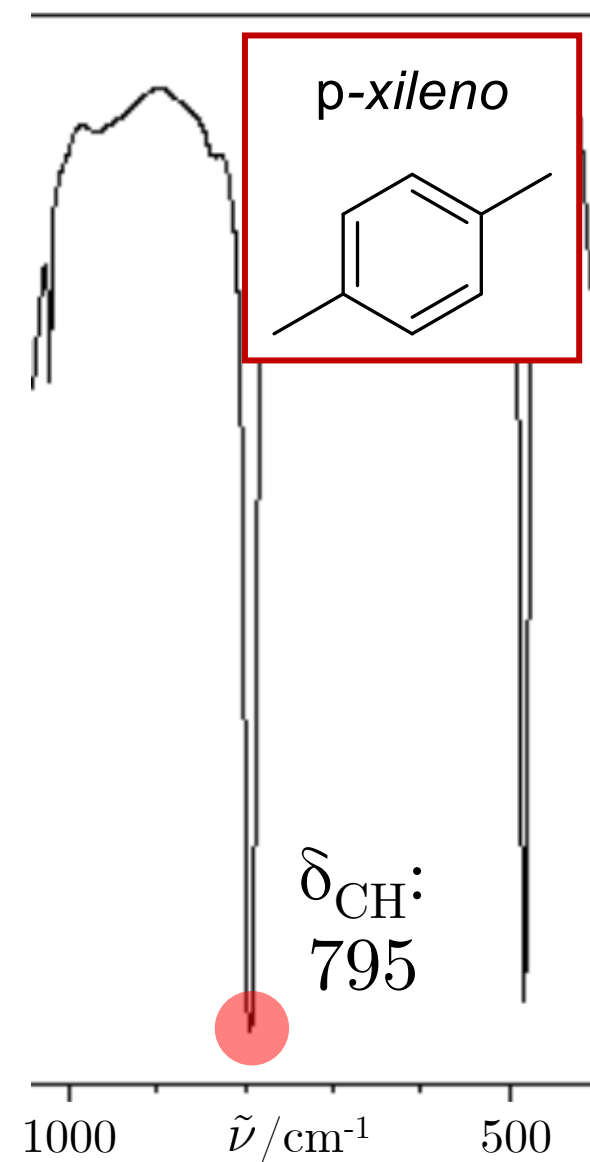
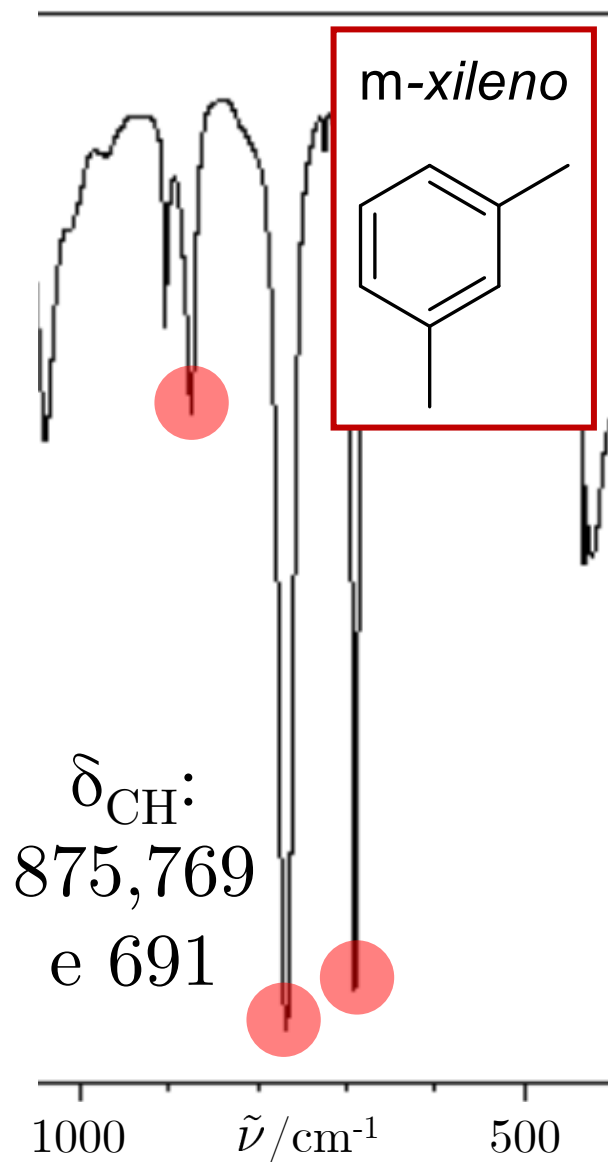
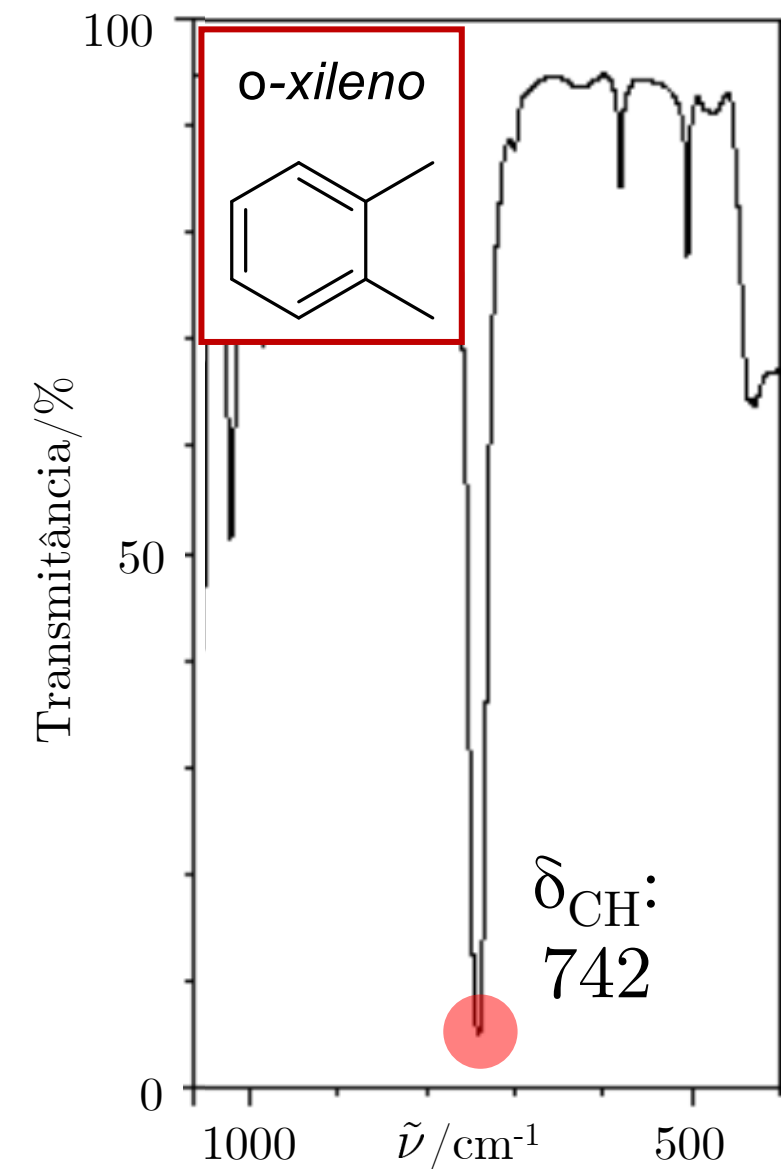
Padrão de substituição do anel aromático – δ_{CH} (fora do plano, oop)





Espectroscopia no IV - Aromáticos

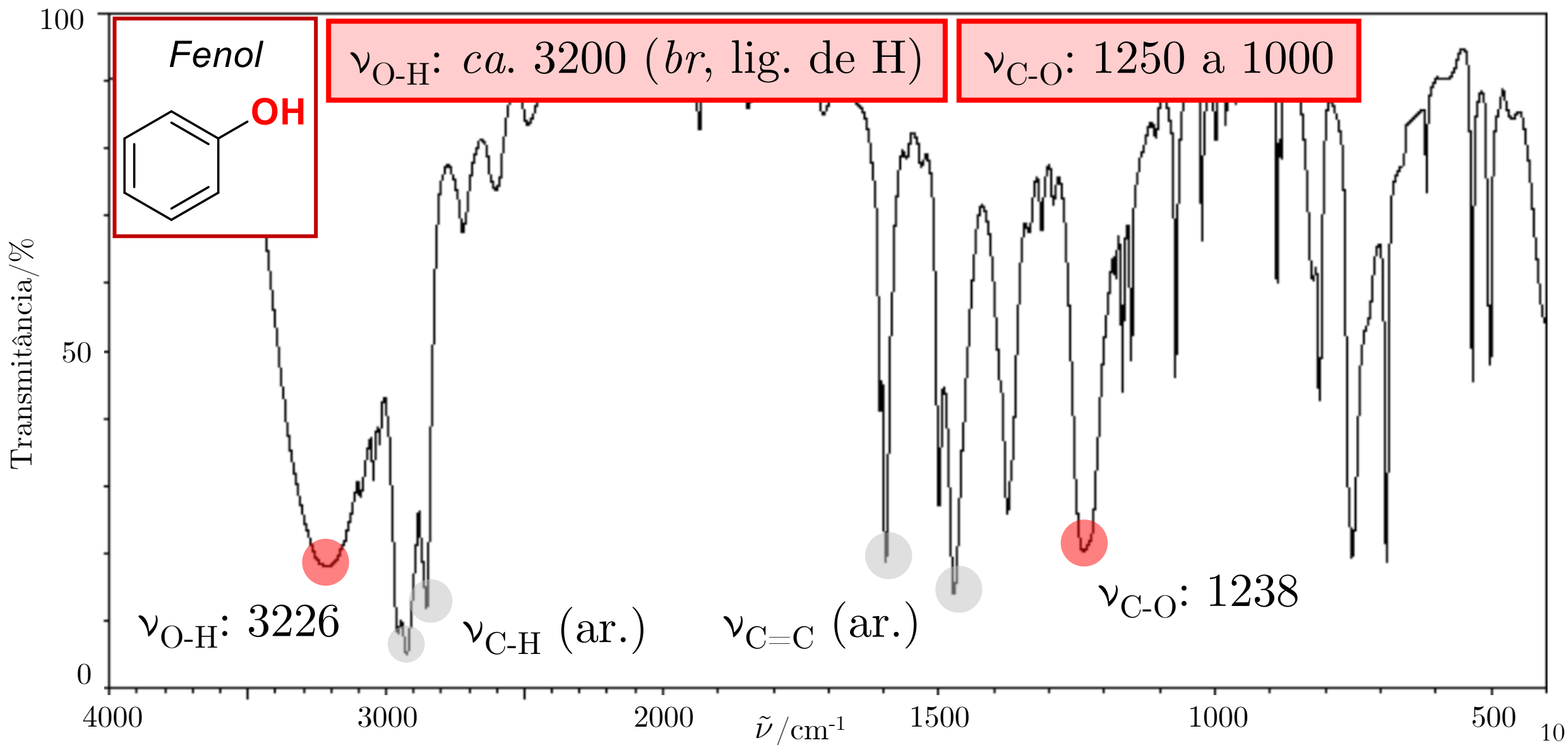
Módulo 2

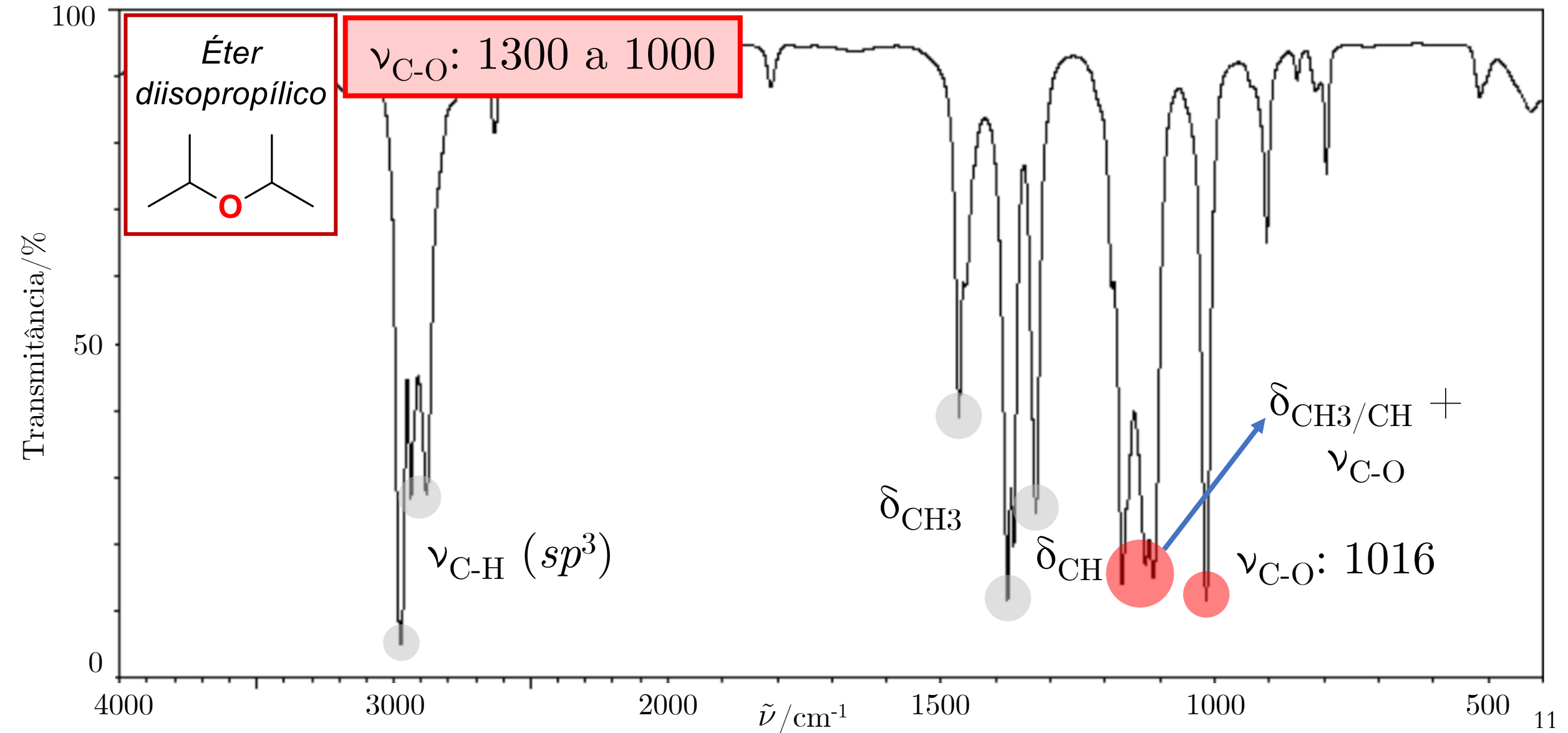




Espectroscopia no IV – Álcoois e fenóis

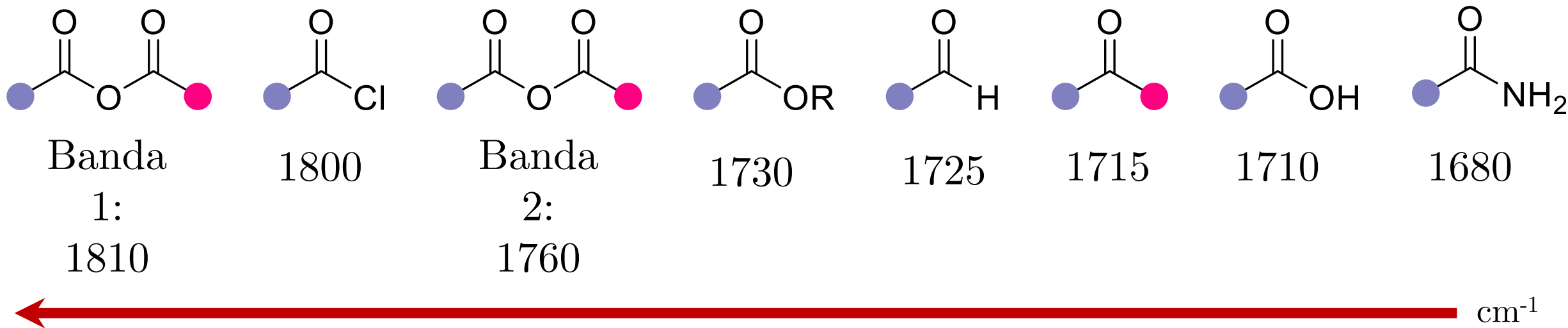
Módulo 2







Frequências de estiramento da ligação C=O ($\nu_{\text{C=O}}$) comuns



Efeito indutivo
na carbonila

Conjugação e
caráter de
ligação

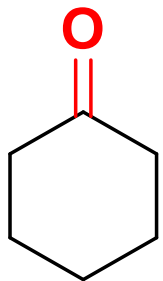
Ligação de
hidrogênio



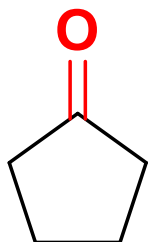
Fatores que afetam a frequência de $\nu_{\text{C=O}}$

1. **Conjugação:** Efeito batocrômico e hipercrômico na frequência de estiramento, pois aumenta o **caráter de ligação simples** da C=O (diminui o K). O efeito contrário é observado para **amidas**;

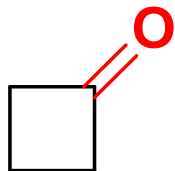
2. **Tamanho de anel:** Tensão de anel provoca um efeito **hipsocrômico**;



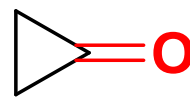
1715
 cm^{-1}



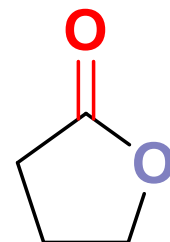
1745
 cm^{-1}



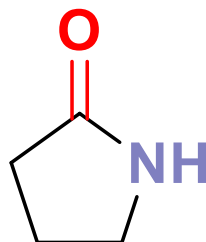
1780
 cm^{-1}



1815
 cm^{-1}



1770
 cm^{-1}

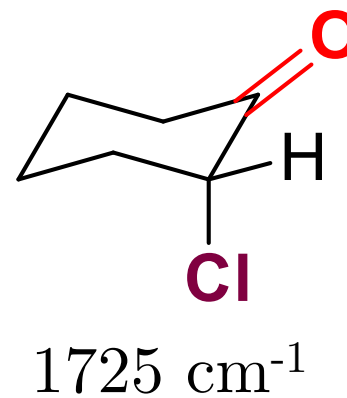
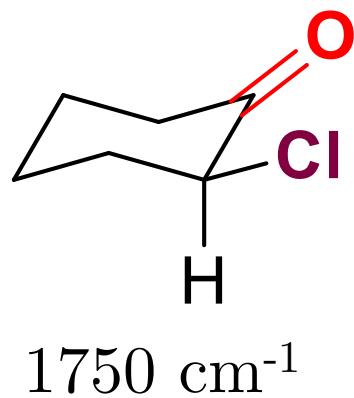


1705
 cm^{-1}



Fatores que afetam a frequência de $\nu_{C=O}$

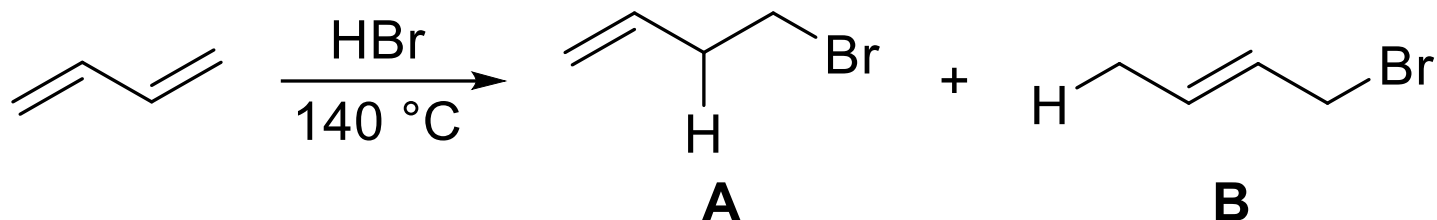
3. **Substituição- α :** Substituintes retiradores (indução ou conjugação) provocam deslocamentos **hipsocrômicos** e doadores (conjugação), **batocrômicos**;





Exercícios

1. Considere a reação abaixo:



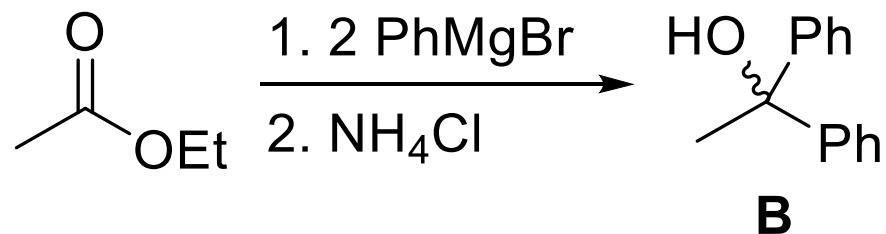
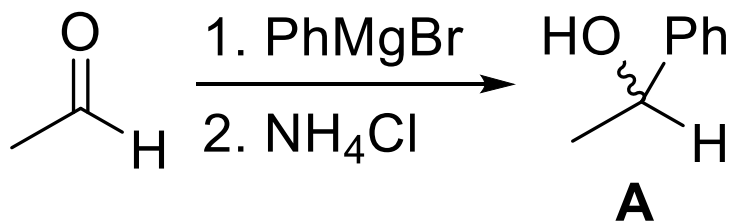
a. O espectro no infravermelho da mistura dos produtos **A** e **B** mostrou bandas com os seguintes números de onda (cm⁻¹): 3031, 2968, 2941, 2919, 1815, 1666, 1450, 1377 e 963. Qual o produto majoritário da reação?

b. Você esperaria o produto majoritário observado para essa reação?

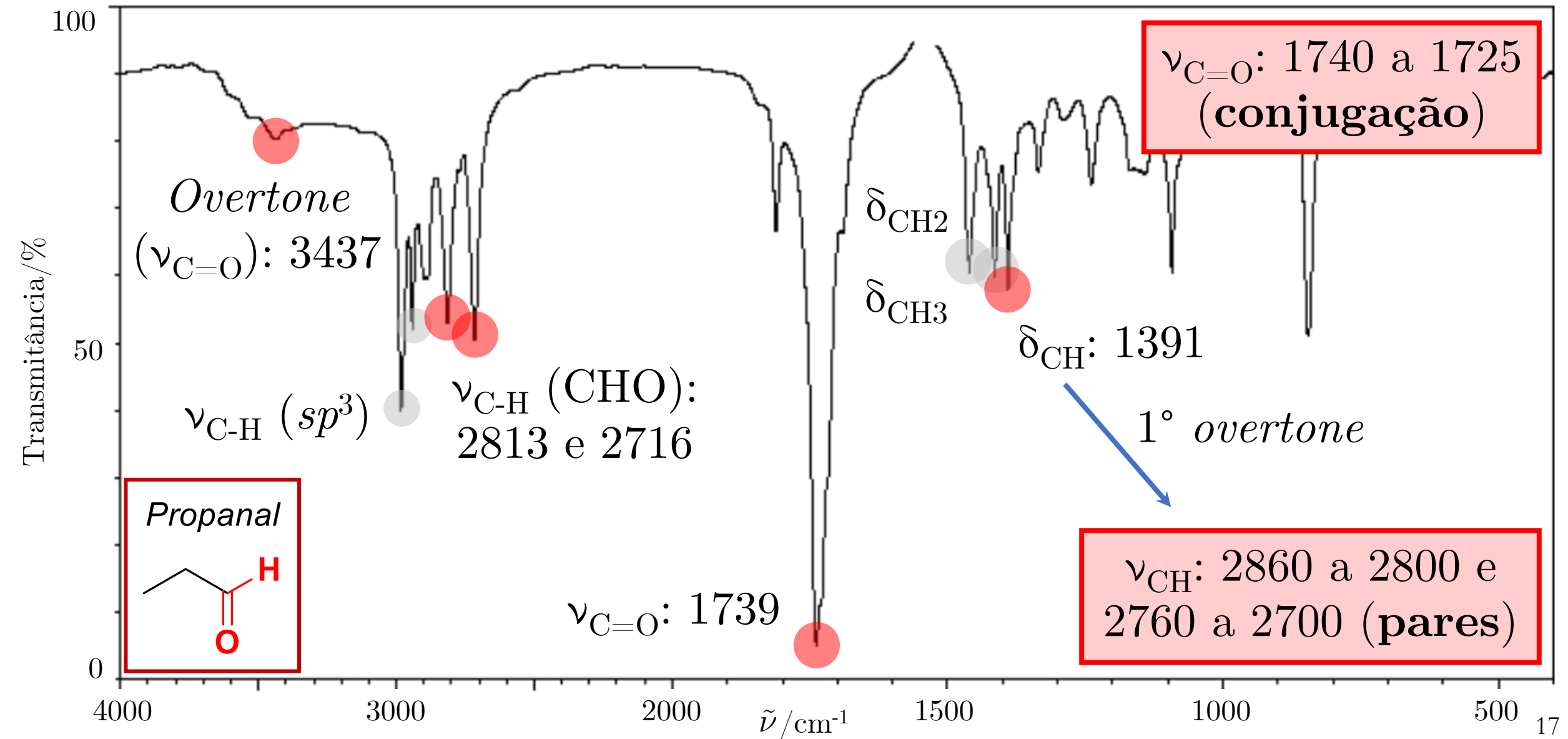


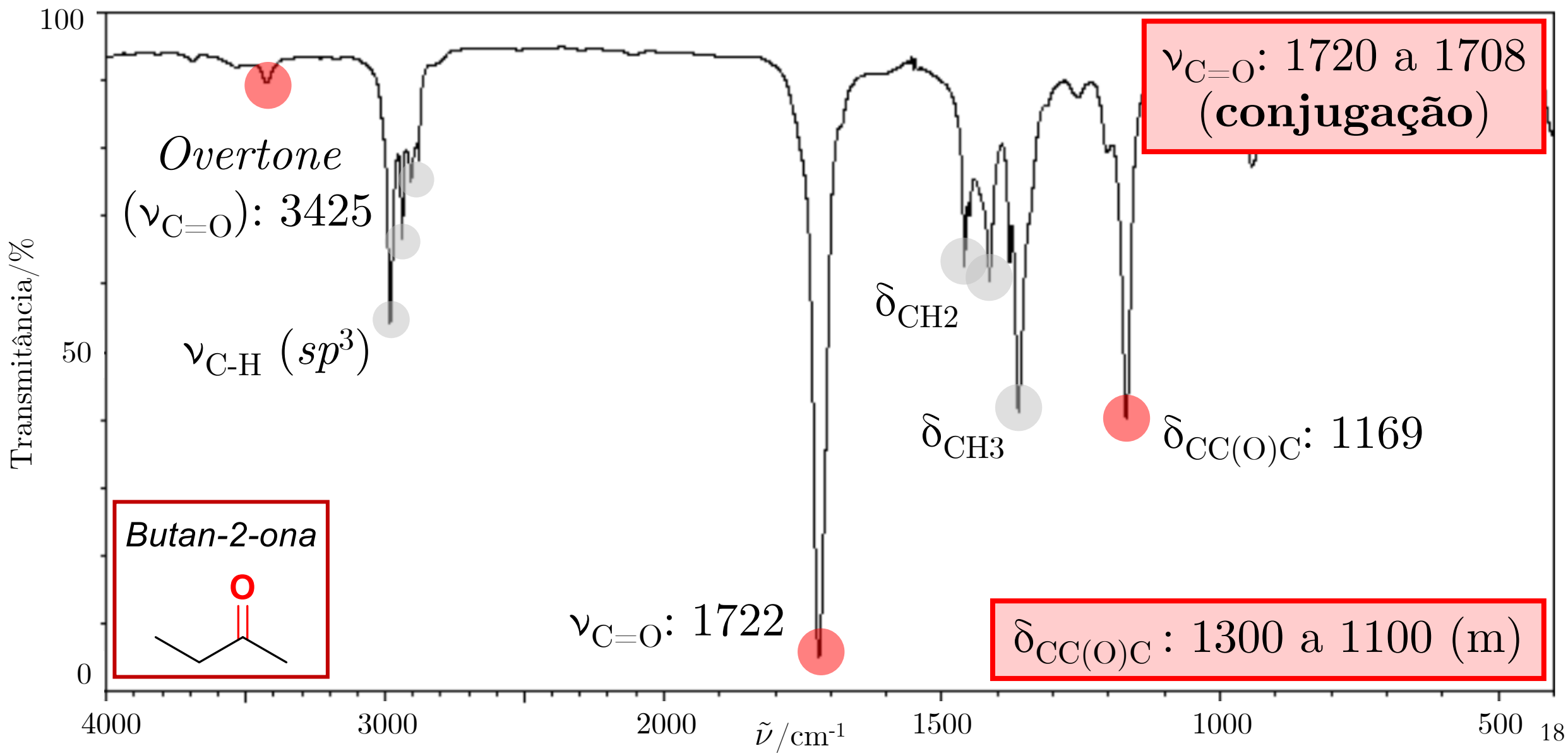
Exercícios

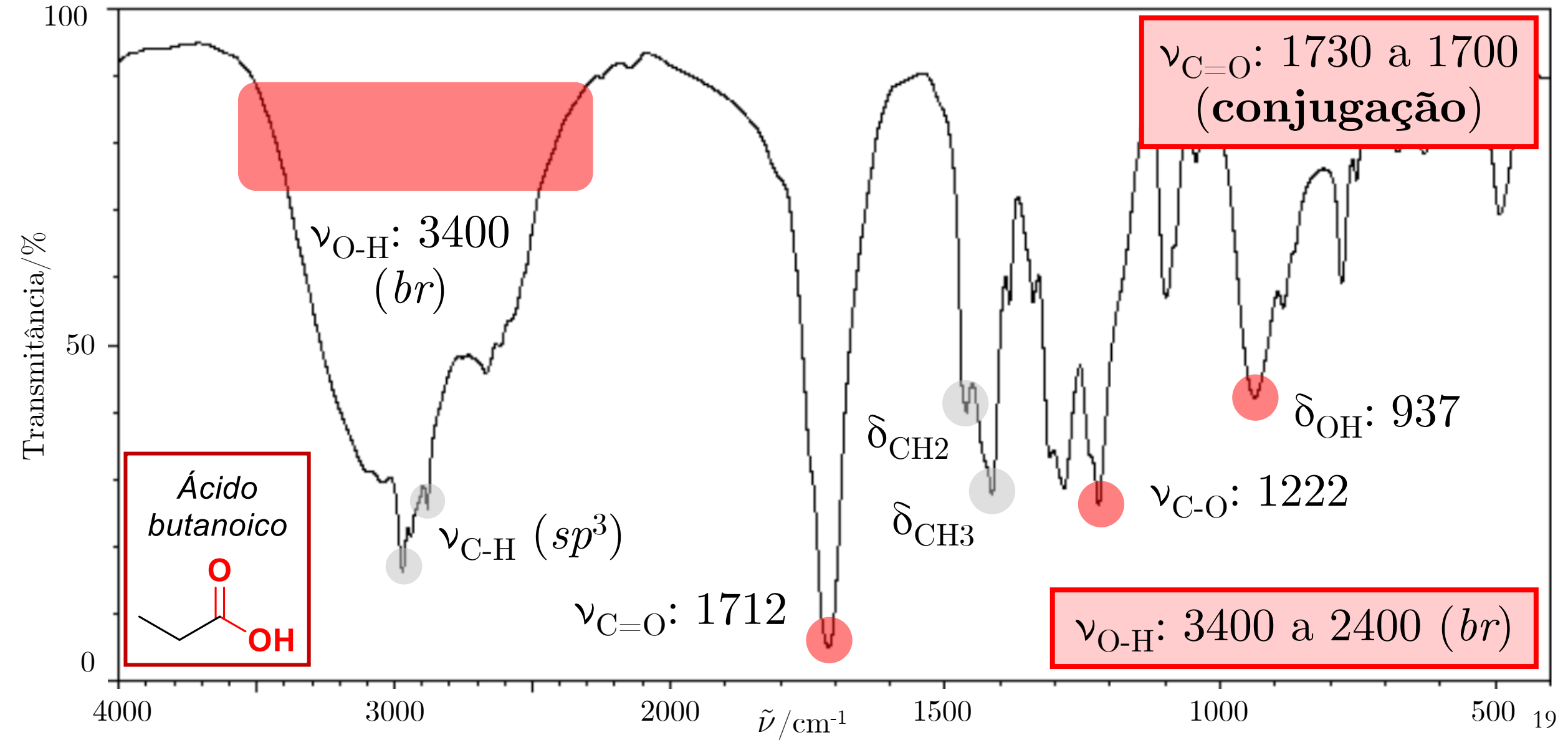
2. Considere o seguinte par de reações:



- a. Para a formação de **A**, quando se substitui o NH_4Cl por H_2SO_4 concentrado e aquecimento, observa-se que o espectro no IV do produto resultante possui bandas com $\tilde{\nu}$ (cm^{-1}): 3082, 3060, 3027, 1630, 1601, 1496, 992, 909, 777 e 698. Qual o produto obtido para essa reação após a mudança da condição reacional?
- b. Caso essa mudança fosse feita na segunda reação, qual produto seria obtido ao invés de **B** e como o espectro no IV seria diferente do obtido no item anterior?



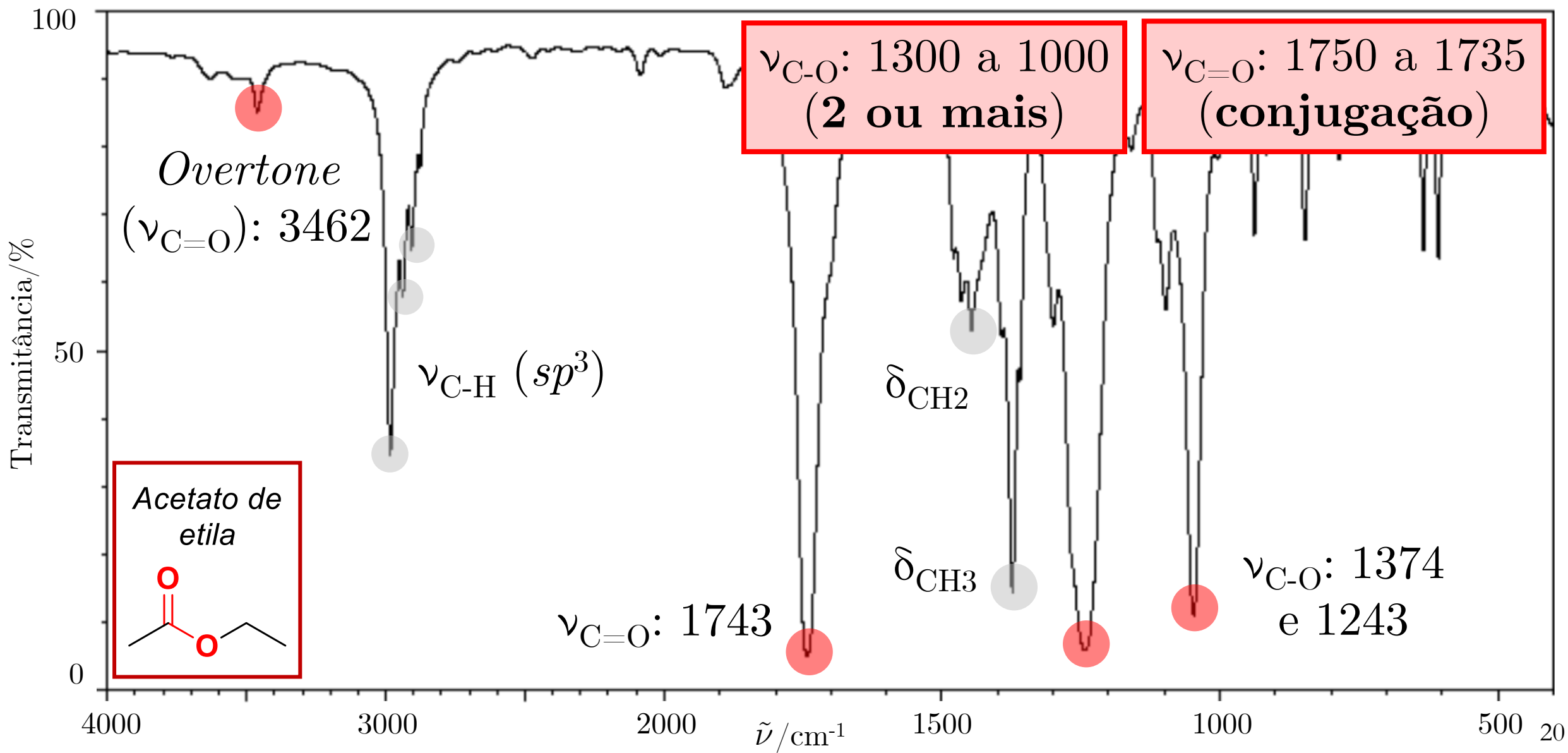






Espectroscopia no IV – Carbonilas

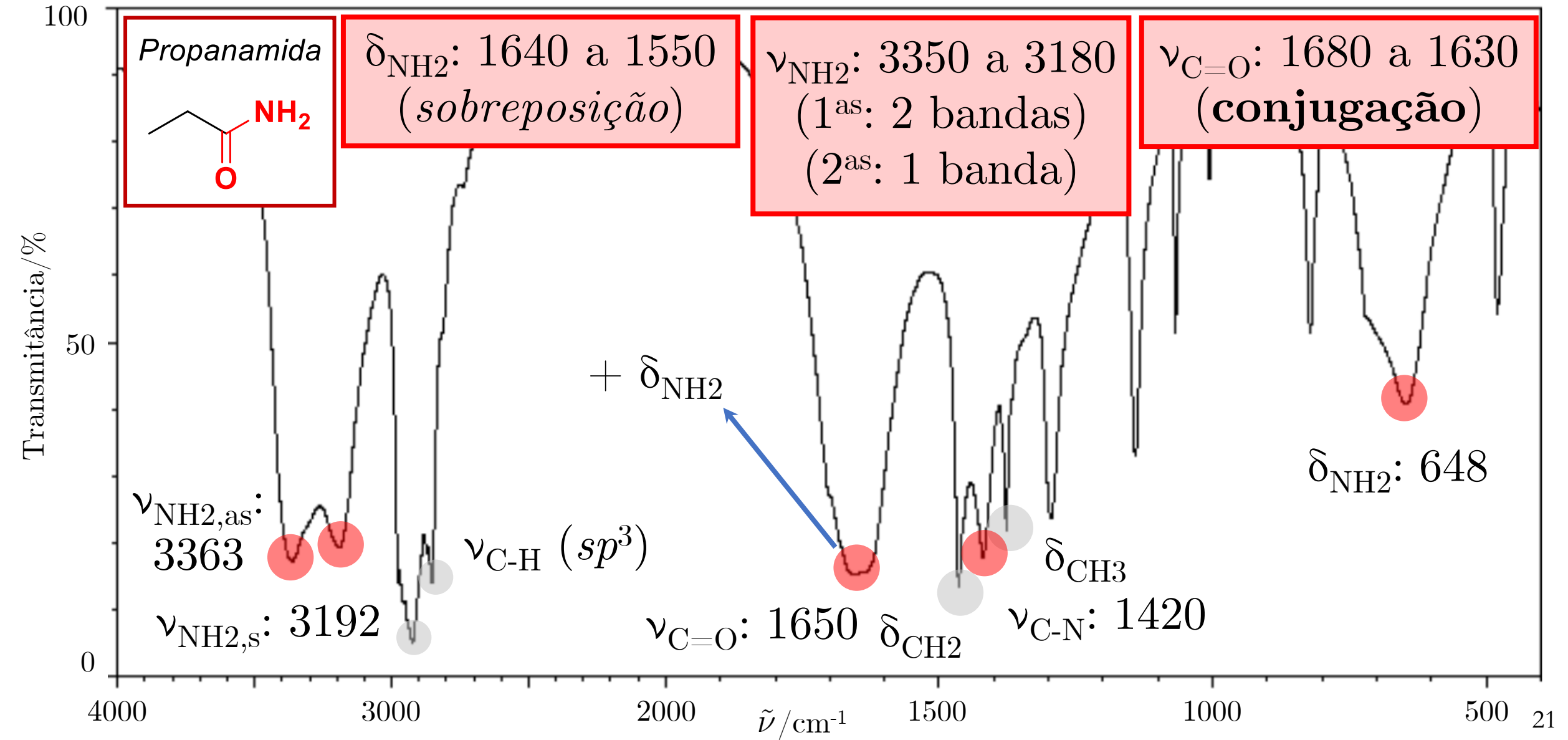
Módulo 2





Espectroscopia no IV – Carbonilas

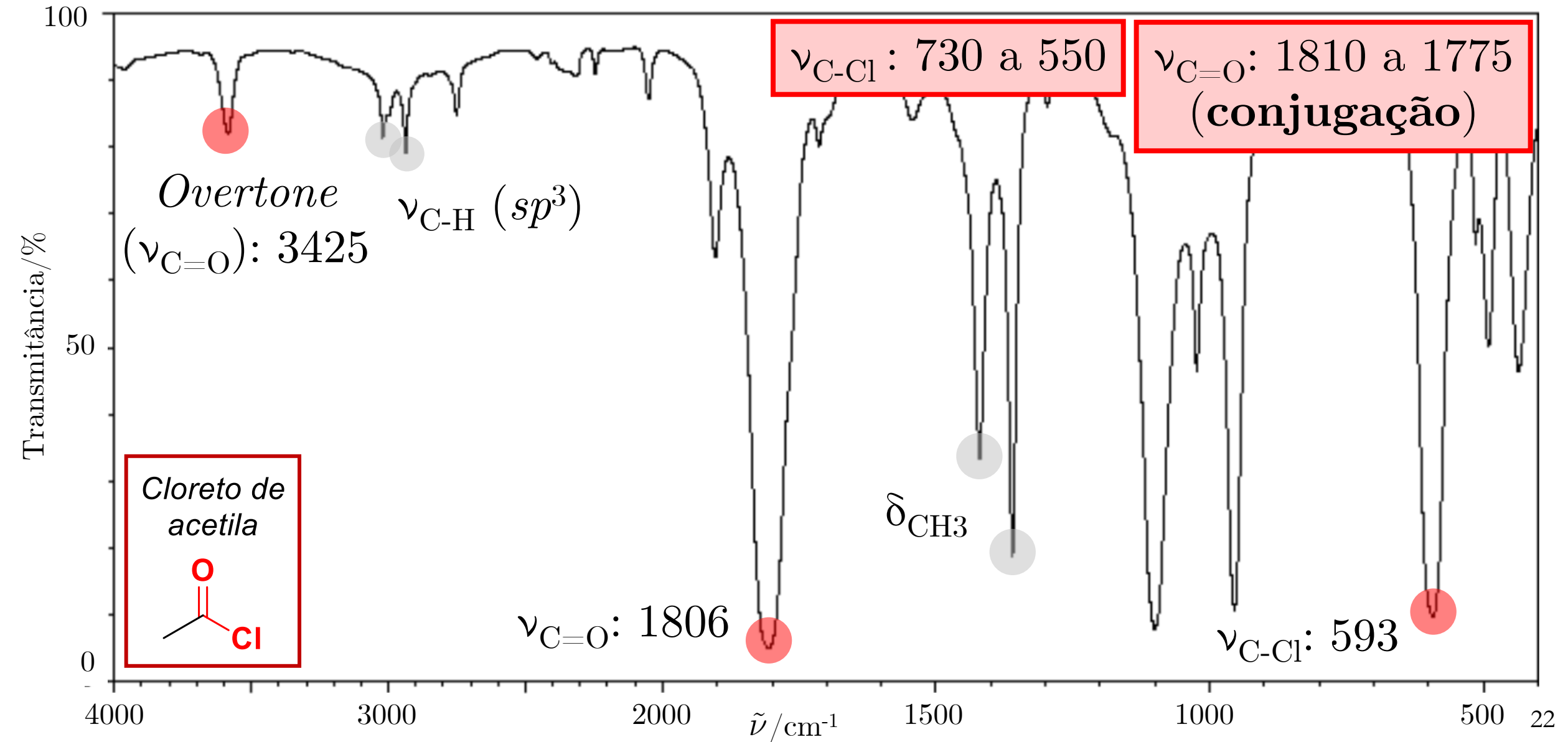
Módulo 2

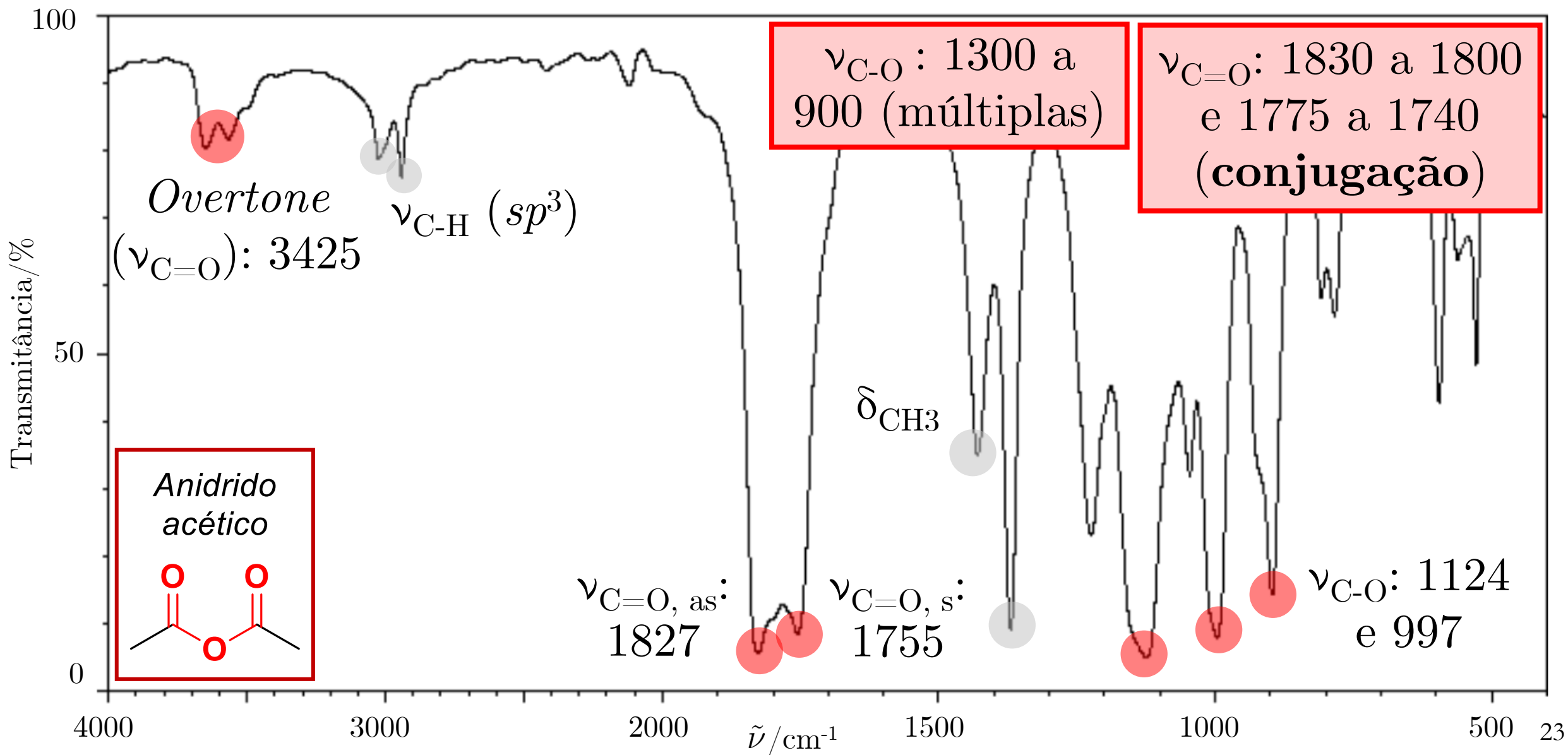




Espectroscopia no IV – Carbonilas

Módulo 2

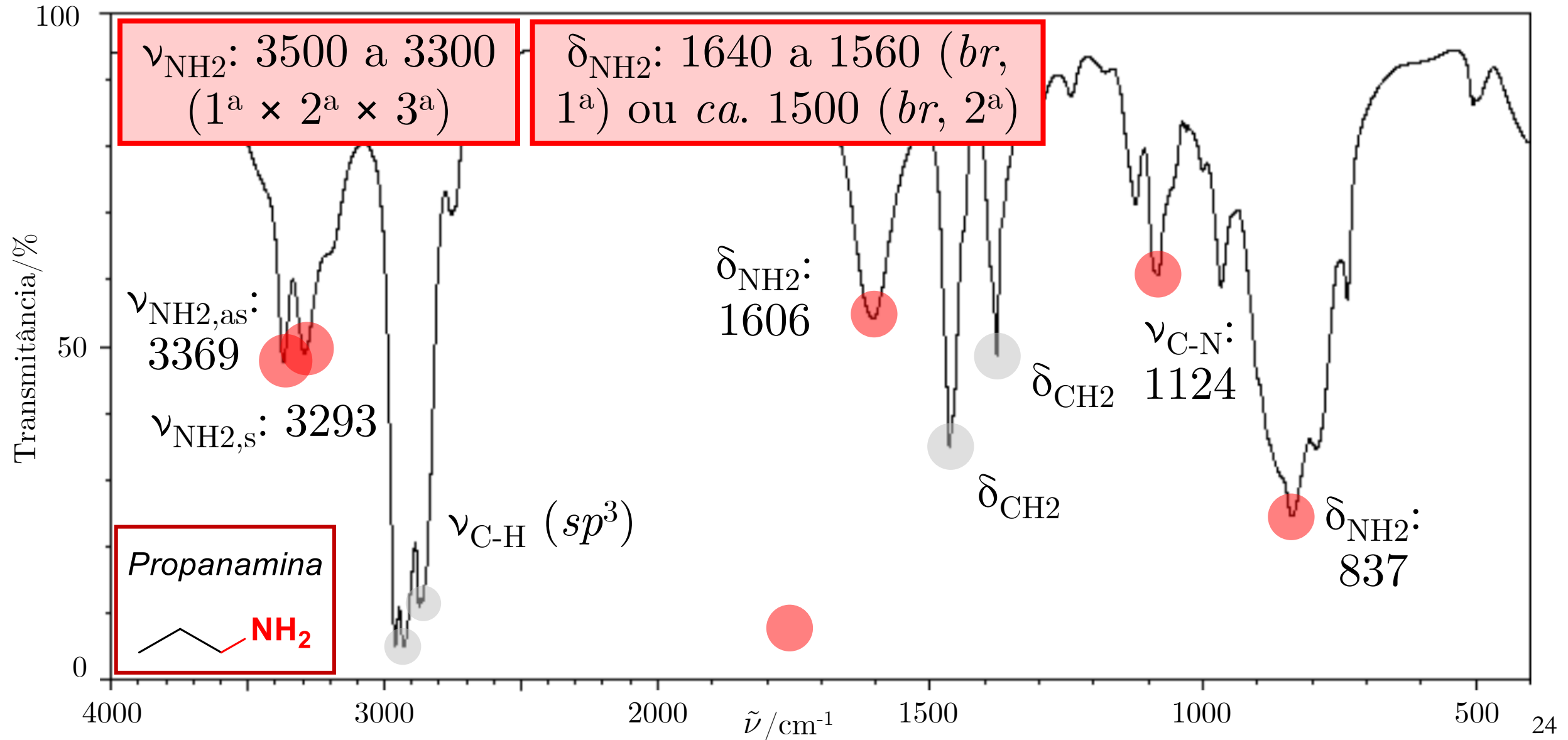






Espectroscopia no IV – Aminas

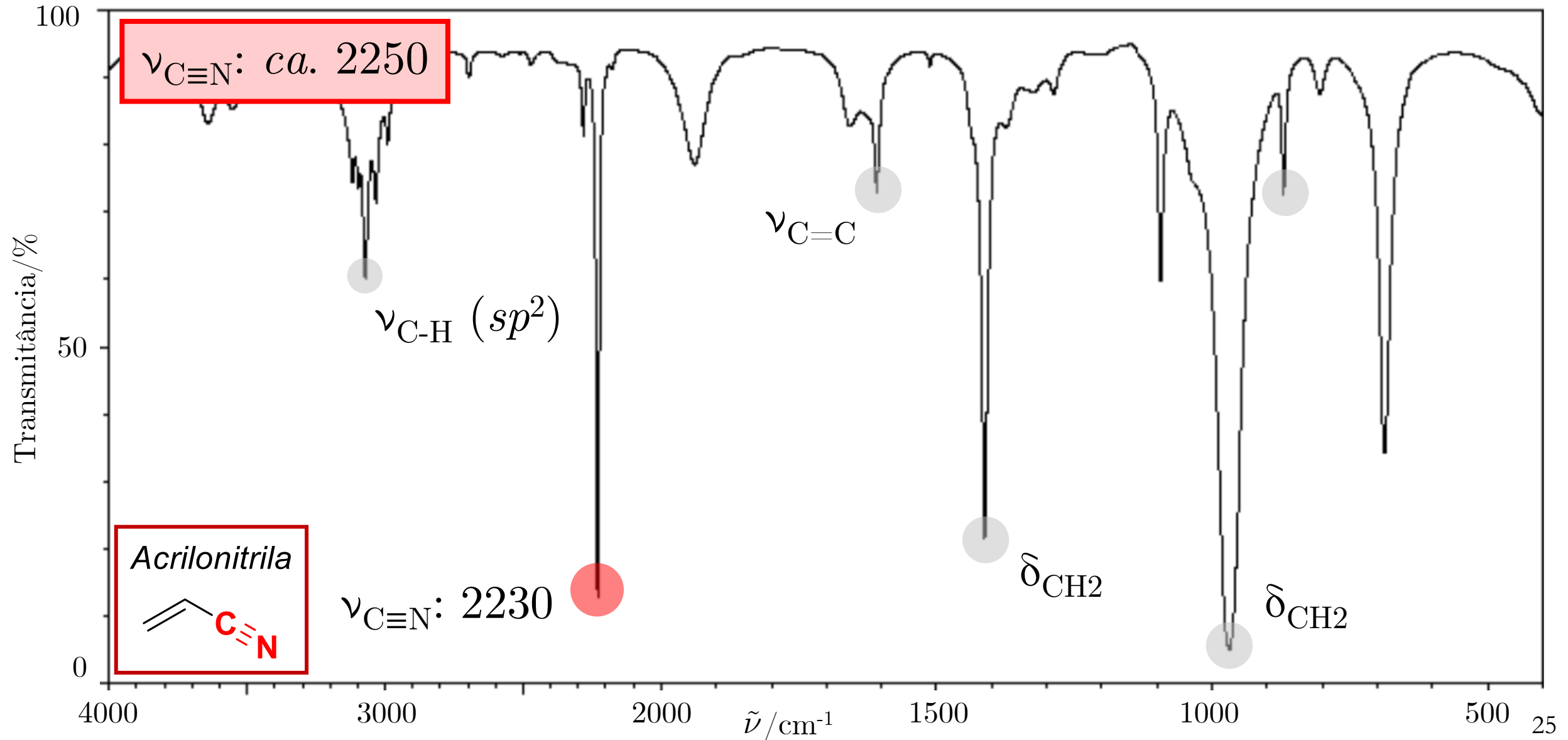
Módulo 2





Espectroscopia no IV – Nitrilas

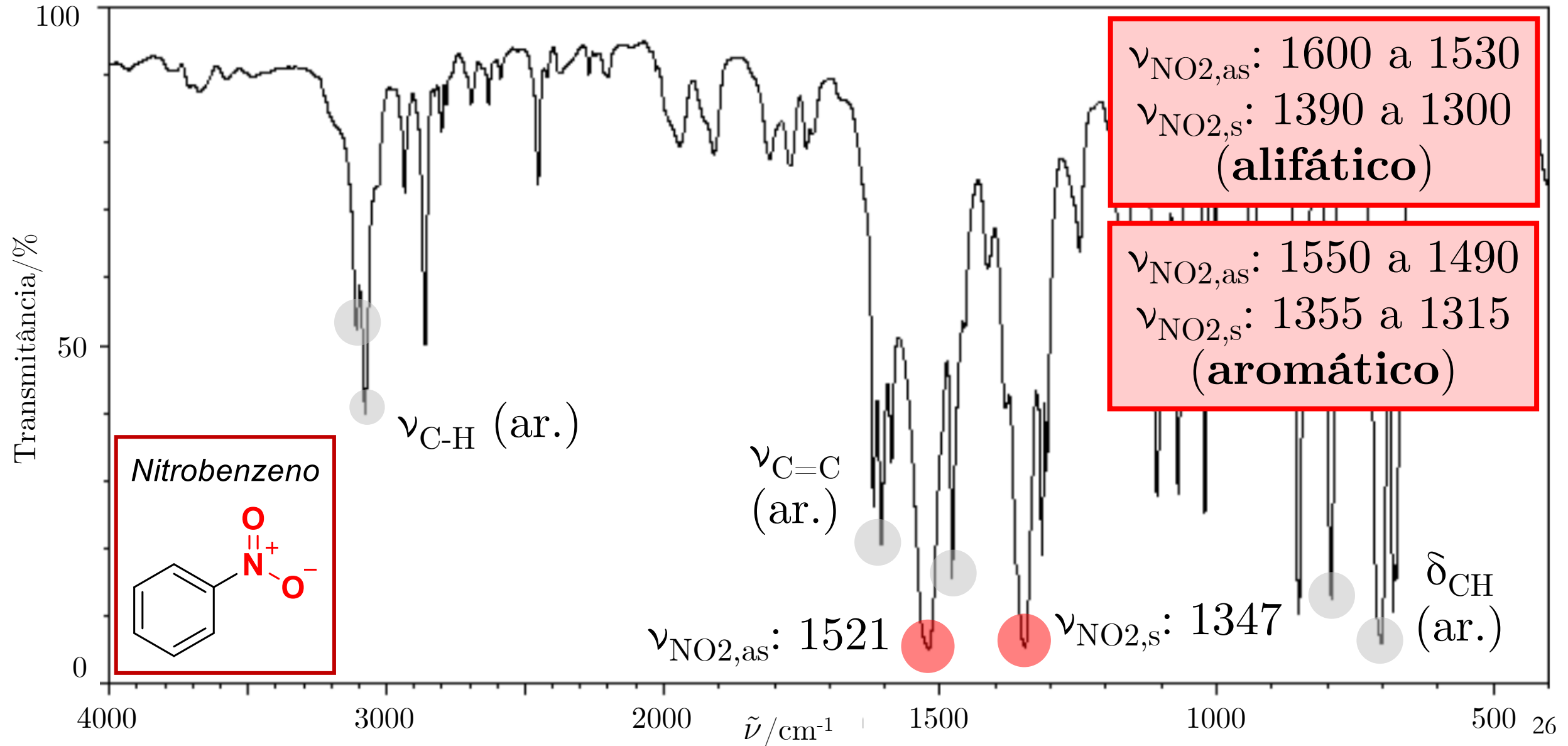
Módulo 2

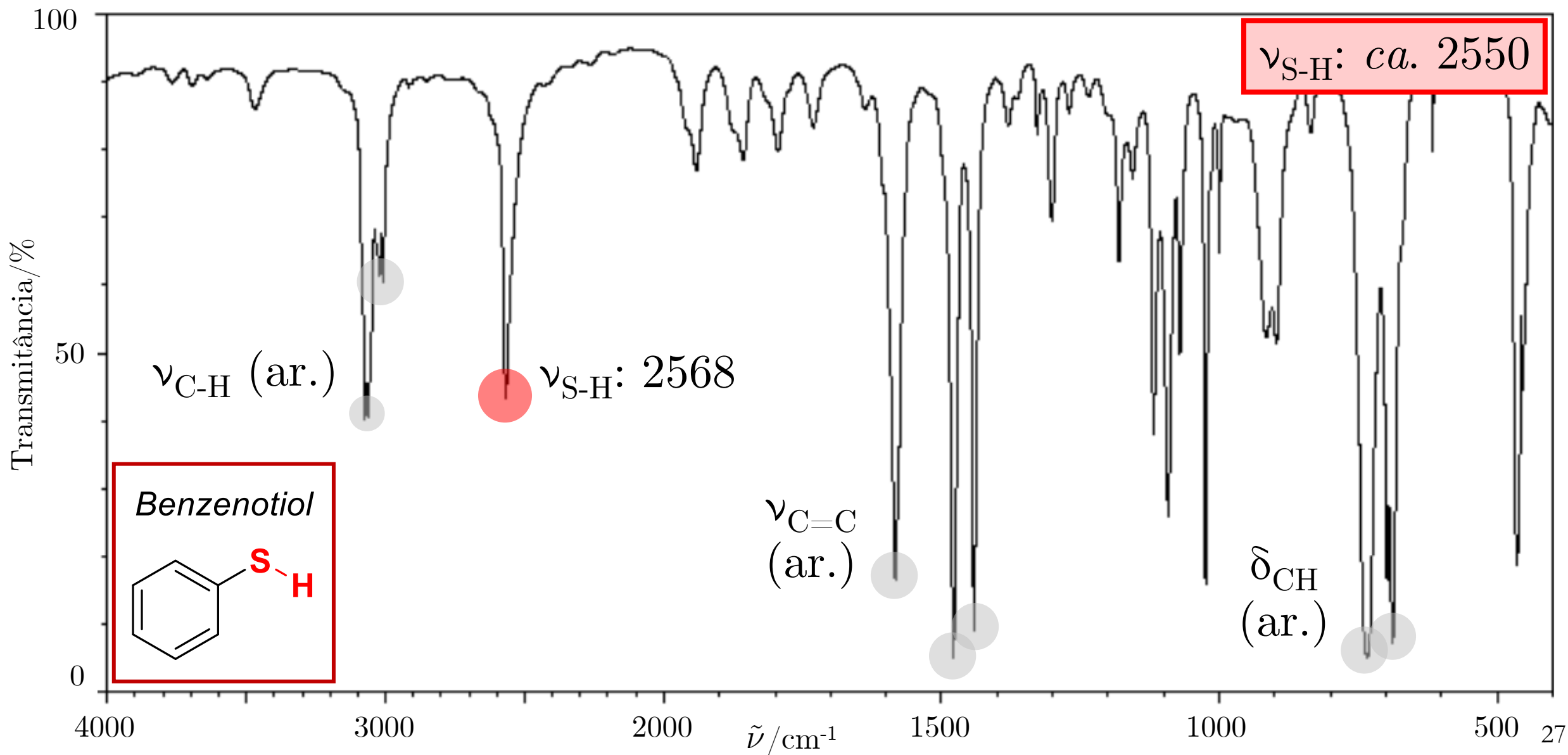




Espectroscopia no IV – Nitrocompostos

Módulo 2

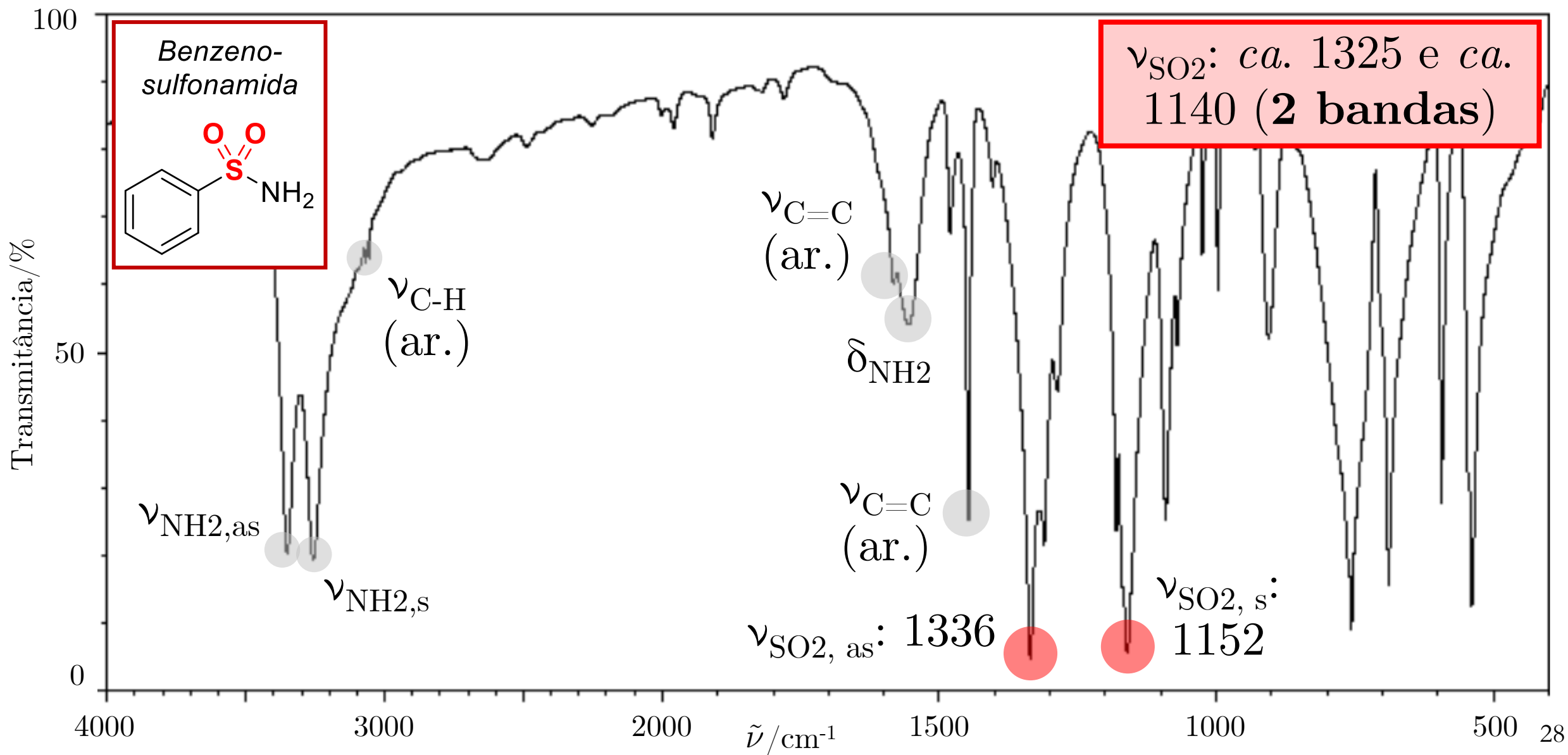






Espectroscopia no IV – Compostos sulfurados

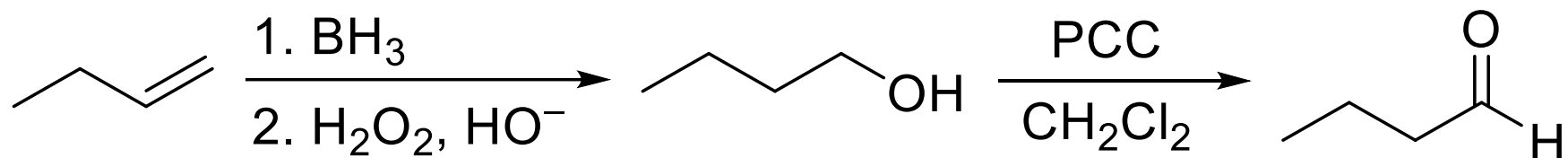
Módulo 2





Exercícios

3. Considere as duas reações mostradas abaixo:

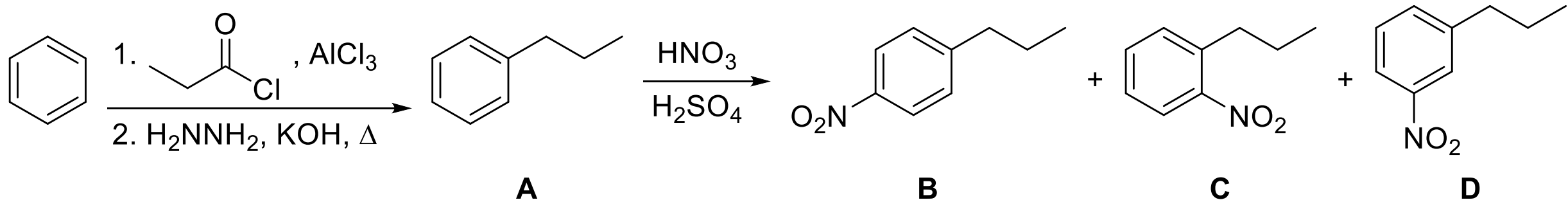


Quando a reação oxidação utilizando o PCC é feita na presença de água, o espectro resultado no infravermelho possui bandas com os seguintes $\tilde{\nu}$ (cm^{-1}): 2971, 2880, 1712, 1467, 1384, 1235 e 1222. O produto obtido é o pentanal? Caso não seja, qual produto é obtido? Justifique sua resposta.



Exercícios

4. Considere as duas reações mostradas abaixo:



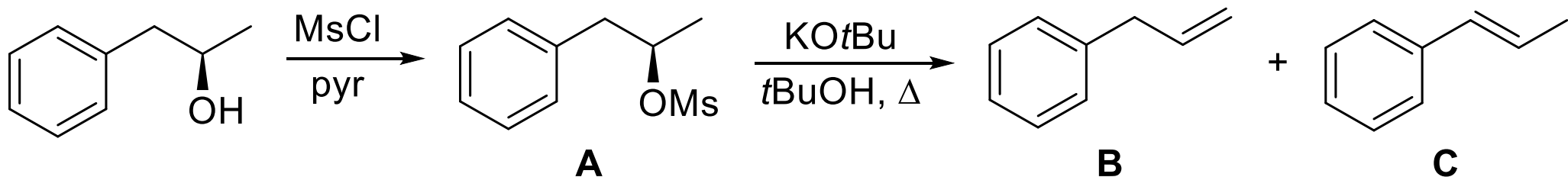
a. Quando as condições reacionais 1. e 2. são substituídas por cloreto de propila e AlCl_3 , o espectro no IV resultante tem as bandas ($\tilde{\nu}$, cm^{-1}): 3133, 3086, 3019, 2960, 2930, 2870, 1509, 1460, 1382, 1363 e 829. Qual é o produto formado?

b. O espectro da mistura reacional **B** + **C** + **D** possui as bandas ($\tilde{\nu}$, cm^{-1}): 3080, 2967, 2932, 2873, 1605, 1519, 1464, 1386, 1347 e 855. Qual é o produto majoritário?



Exercícios

5. Considere as duas reações mostradas abaixo:

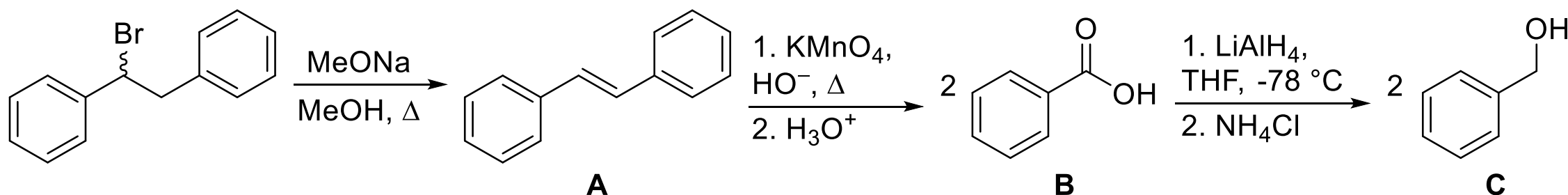


- Qual(is) mudança(s) no espectro de infravermelho seria(m) capaz(es) de comprovar a proteção do álcool com o grupo mesilato em **A**?
- O espectro da mistura reacional **B** + **C** possui as bandas ($\tilde{\nu}$, cm^{-1}): 3082, 3064, 3029, 2979, 2904, 1639, 1603, 1495, 1463, 994, 914, 741 e 699. Qual é o produto majoritário?



Exercícios

6. Considere o conjunto de reações abaixo:



a. Durante a formação de **B**, caso O_3 e dimetilsulfeto fossem utilizados ao invés de 1 e 2, o IV resultante teria as bandas ($\tilde{\nu}$, cm^{-1}): 3086, 3065, 3031, 2820, 2738, 1703, 1664, 1456, 1391, 746 e 688. Qual produto seria formado nesse caso?

b. Caso NaBH_4 fosse usado na formação de **C** ao invés de 1 e 2, o espectro no IV resultante teria as bandas ($\tilde{\nu}$, cm^{-1}): 3642, 3071, 3030, 2886, 1696, 1608, 1452, 1319 e 1288 (bandas 3642 a 2886 são br). Qual produto é formado?