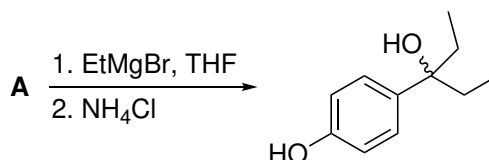


QUI070 - Métodos Físicos de Análise: Prova Substitutiva			Pontuação ↓
Data: 18/07/2025	Questões: 1	Pontos totais: 10	
Matrícula:			Nome:

Questão	Pontos	Nota
1	10	
Total:	10	

Instruções:

1. Justifique todas as suas respostas.
 2. Entregue as repostas manuscritas e materiais de consulta com essa folha anexa.
1. (10 pontos) O composto **A**, ao reagir com brometo de metilmagnésio (EtMgBr) em THF anidro e, depois, cloreto de amônio, gera o 4-(3-hidroxipentan-3-il)fenol, como mostra a reação abaixo.



Os espectro no infravermelho, de massas e de RMN unidimensionais e bidimensionais do composto **A** estão dispostos nas **Figuras 1 a 6**.

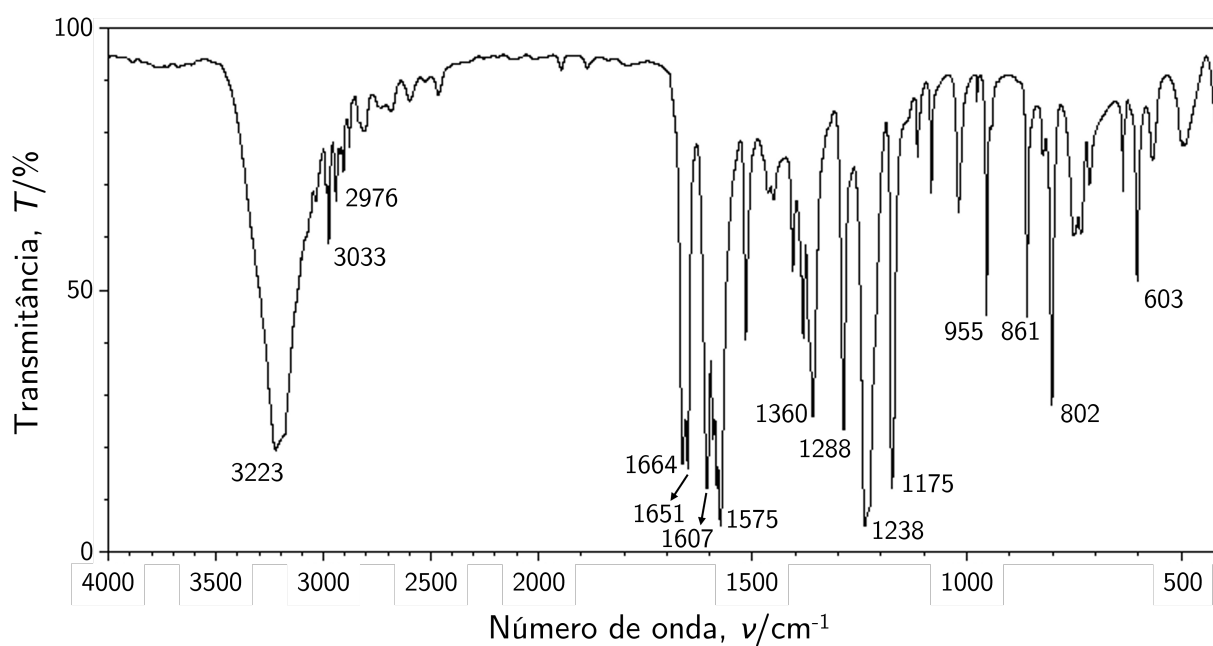


Figura 1: Espectro no infravermelho do composto **A**.

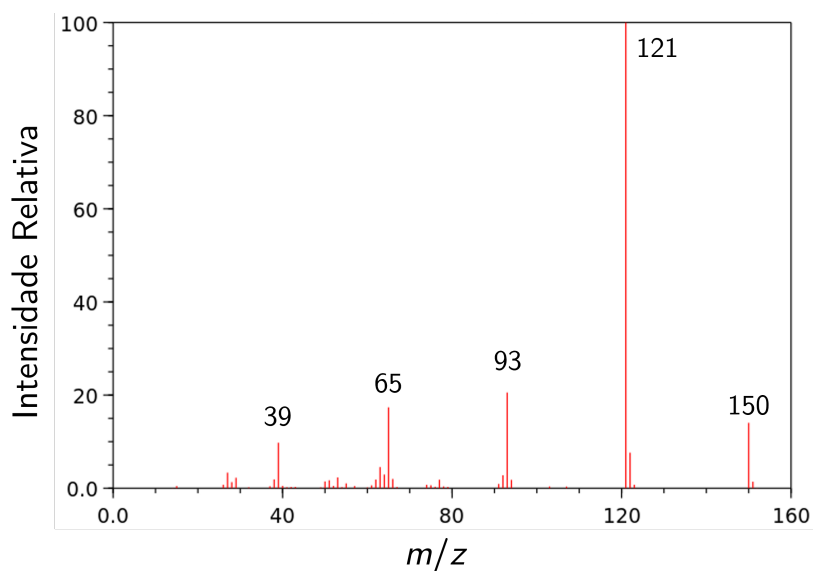


Figura 2: Espectro de massas do composto **A**, adquirido no modo positivo com ionização por impacto de elétrons.

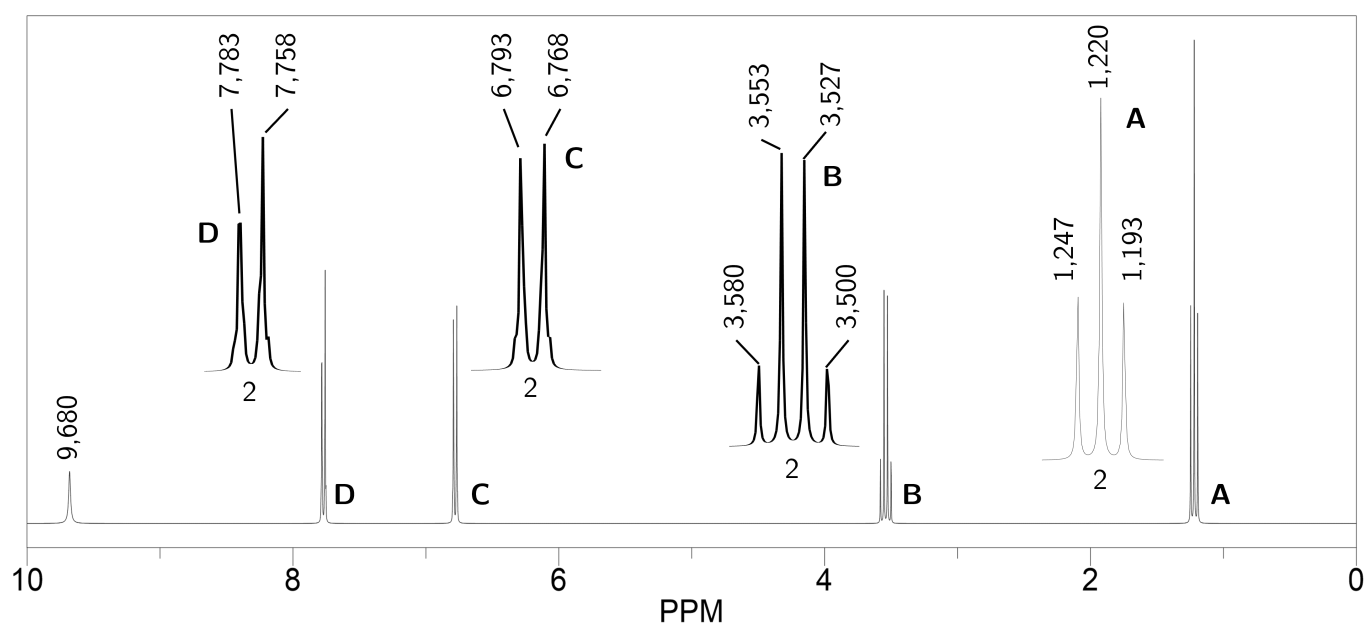


Figura 3: Espectro de RMN ^1H do composto **A**, adquirido em um espectrômetro com frequência de 300 MHz. As regiões A a D estão expandidas, mostrando os deslocamentos químicos e integrais.

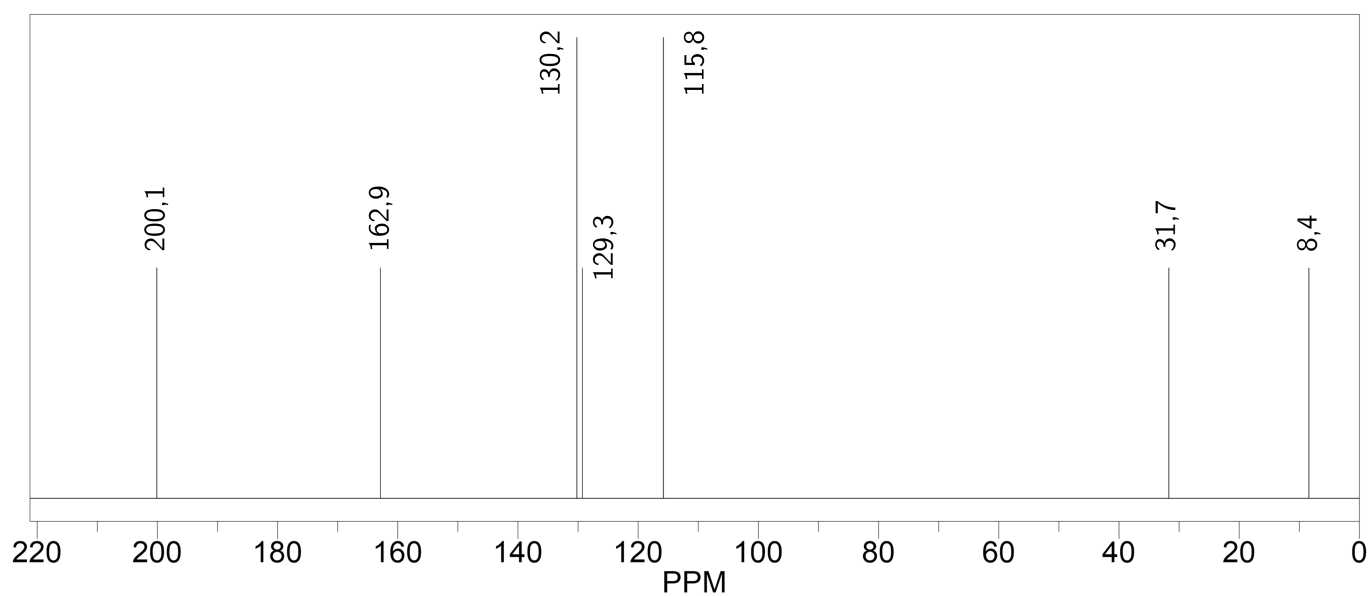


Figura 4: Espectro de RMN de ^{13}C de **A**, adquirido em um aparelho com frequência de 300 MHz.

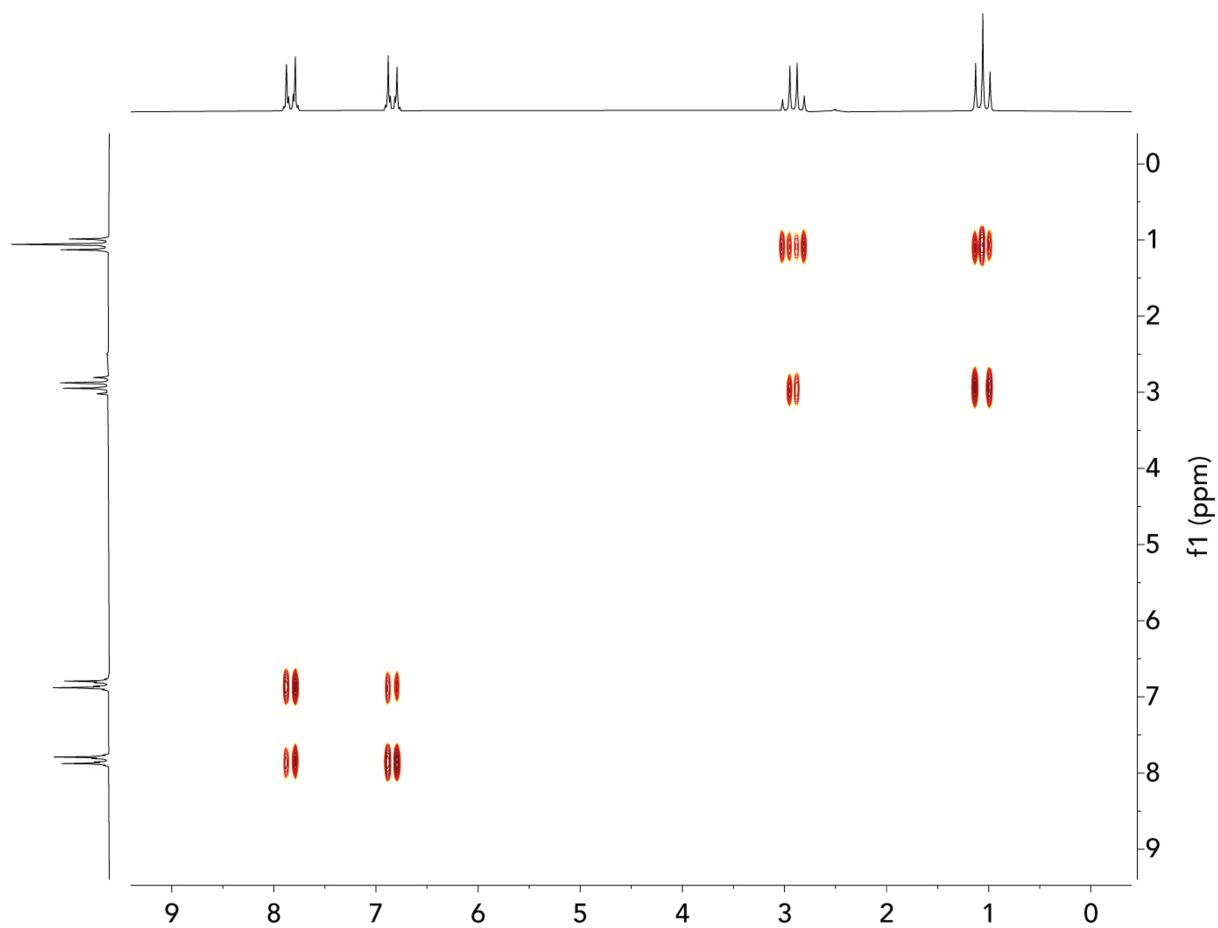


Figura 5: Mapa de contornos COSY do composto **A**, adquirido em um espectrômetro com frequência de 100 MHz e utilizando $\text{DMSO}-d_6$ como solvente.

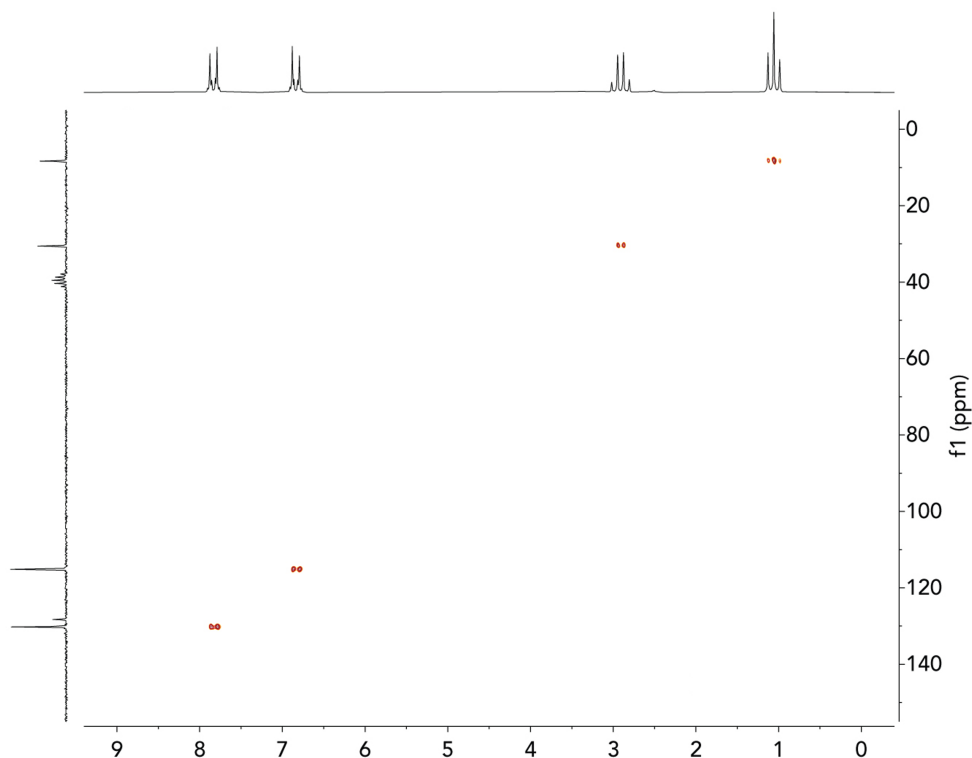


Figura 6: Mapa de contornos HSQC de ^1H - ^{13}C do composto **A**, adquirido em um espectrômetro com frequência de 100 MHz e utilizando $\text{DMSO-}d_6$ como solvente.

Para o espectro de RMN de ^{13}C , considere que as análises de DEPT-45, DEPT-90 e DEPT-135 geraram os resultados expostos na **Tabela 1**.

Tabela 1: Fases dos sinais de ^{13}C de **A** observados nos experimentos de DEPT-45, DEPT-90 e DEPT-135. Fases indicadas como “0” representam sinais não observados no respectivo espectro.

Sinal (δ , ppm)	Fase do sinal		
	DEPT-45	DEPT-90	DEPT-135
200,1	0	0	0
162,9	0	0	0
130,2	(+)	(+)	(+)
129,3	0	0	0
115,8	(+)	(+)	(+)
31,7	(+)	0	(-)
8,4	(+)	0	(+)

Considerando o conjunto de informações, forneça:

- (i) A estrutura do composto **A**;
- (ii) O assinalamento completo das ressonâncias do espectro de RMN de ^1H e de ^{13}C e;
- (iii) A identificação das frequências relativas aos grupos funcionais de **A** no espectro no IV;
- (iv) O mecanismo da principal fragmentação no espectro de massas.

Tabela Periódica dos Elementos

1 IA	2	13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA
1	2	5	6	7	8	9	10
H	He	B	C	N	O	F	Ne
Hidrogénio	Hélio	Boro	Carbono	Nitrogénio	Oxigénio	Fluór	Neónio
2	3	11	12	19	20	37	38
Li	Be	Na	Mg	K	Ca	Sc	Ti
Lítio	Berílio	Sódio	Magnésio	Potássio	Cálcio	Estrôncio	Rúbio
3	4	12	13	21	22	39	40
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
Sódio	Magnésio	Alumínio	Silício	Fósforo	Enxofre	Cloro	Argénio
4	5	13	14	15	16	17	18
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe
Potássio	Cálcio	Estrôncio	Rúbio	Ítrio	Índio	Estanho	Antimónio
5	6	37	38	55	56	81	82
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru
Rúbio	Estrôncio	Ítrio	Zinco	Cádmio	Mercurio	Chumbo	Bismuto
6	7	55	56	81	82	117	118
Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm
Césio	Bário	Lantânidos	Célio	Praseodímio	Neodímio	Promécio	Samaríio
7	8	87	88	105	106	121	122
Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu
Frâncio	Rádio	Actínidos	Tório	Protactínio	Urânio	Neptúnio	Plutónio
8	9	101	102	103	104	105	106
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
9	10	83	84	115	116	117	118
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
10	11	119	120	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
11	12	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
12	13	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
13	14	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
14	15	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
15	16	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
16	17	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
17	18	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
18	19	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
19	20	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
20	21	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
21	22	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
22	23	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
23	24	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
24	25	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
25	26	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
26	27	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
27	28	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
28	29	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
29	30	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
30	31	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
31	32	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
32	33	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
33	34	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
34	35	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
35	36	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
36	37	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
37	38	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
38	39	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
39	40	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
40	41	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
41	42	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
42	43	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
43	44	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
44	45	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
45	46	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
46	47	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
47	48	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
48	49	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
49	50	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
50	51	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
51	52	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
52	53	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
53	54	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
54	55	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
55	56	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
56	57	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
57	58	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
58	59	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi	Pb	Bi	Po	At	Rn
Astato	Polónio	Bismuto	Chumbo	Estanho	Antimónio	Iodo	Xenónio
59	60	121	122	137	138	153	154
At	Po	Bi					