

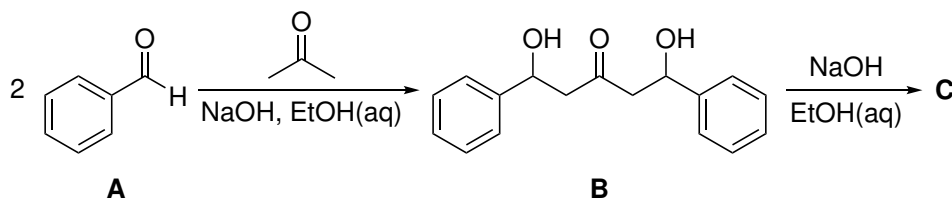
QUI070 - Métodos Físicos de Análise: P3 (Módulos 1 a 4)			Pontuação ↓
Data: 04/07/2025	Questões: 2	Pontos totais: 5	
Matrícula:	Nome:		

<i>Questão</i>	<i>Pontos</i>	<i>Nota</i>
1	4	
2	1	
Total:	5	

Instruções:

1. Justifique todas as suas respostas.
2. Entregue as repostas manuscritas e materiais de consulta com essa folha anexa.

1. (4 pontos) O benzaldeído (**A**), na presença de uma solução etanol:água de acetona e NaOH, produz o intermediário de síntese **B**, que não é isolado. Ainda na presença de base, o intermediário **B** produz o produto final **C**, cuja fórmula molecular é $C_{17}H_{14}O$. Os espectros na região do infravermelho, de massas e de ressonância magnética nuclear de 1H e ^{13}C , estão mostrados nas **Figuras 1 a 4**.



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 **C** 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
188,6	0	0	0
142,2	(+)	(+)	(+)
135,2	0	0	0
128,6	(+)	0	(-)
128,5	(+)	0	(-)
127,9	(+)	(+)	(+)
123,3	(+)	(+)	(+)

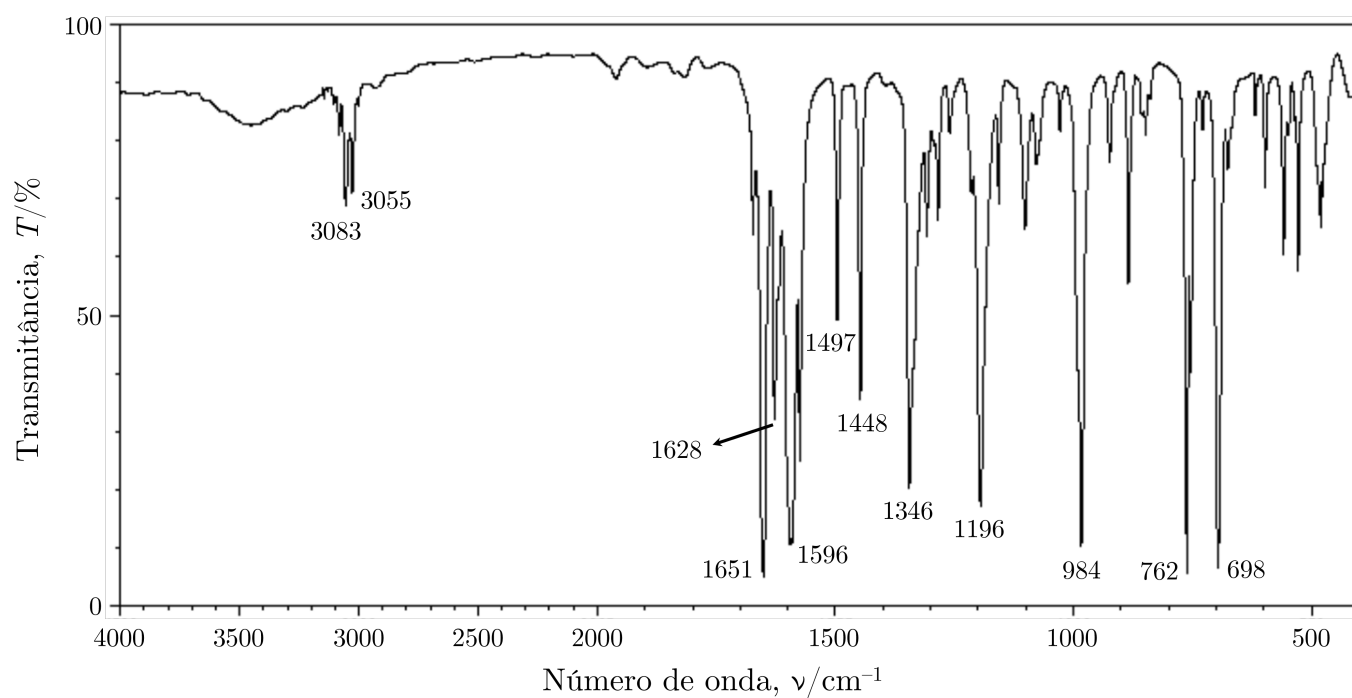


Figura 1: Espectro no infravermelho do produto **C**.

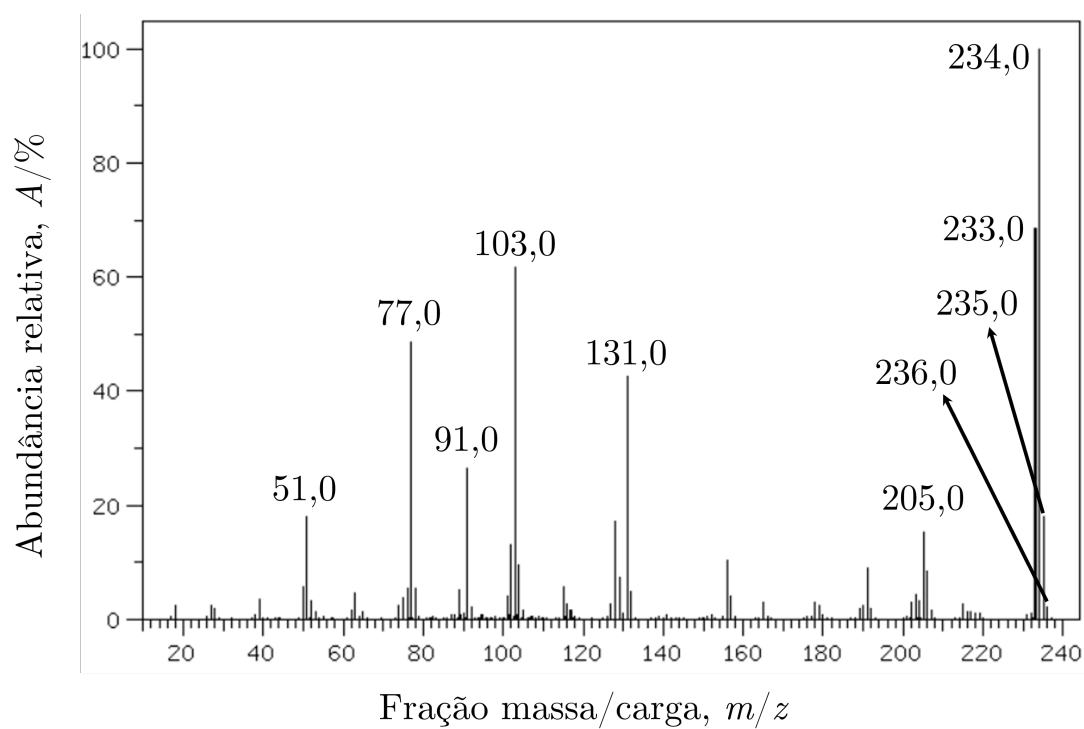


Figura 2: Espectro de massas do produto **C**. O espectro foi adquirido com uma temperatura de fonte igual à 160 °C, de amostra igual à 120 °C e por impacto de elétrons com energia igual à 75 eV.

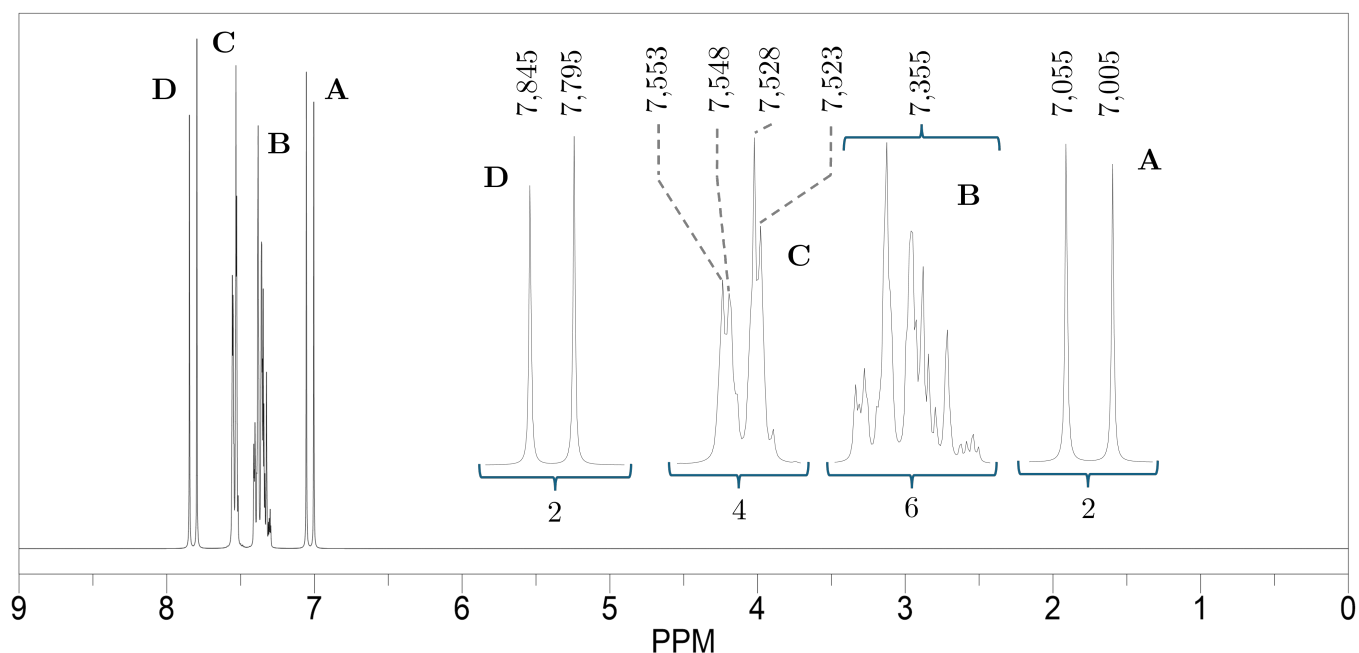


Figura 3: Espectro de RMN de ^1H do produto **C**. O espectro foi adquirido em um espectrômetro de 300 MHz (^1H). As regiões **A**, **B**, **C** e **D** foram expandidas, mostrando os deslocamentos químicos acima dos sinais e as integrais, abaixo. O sinal em 7,355 (região **B**) é um multiplete.

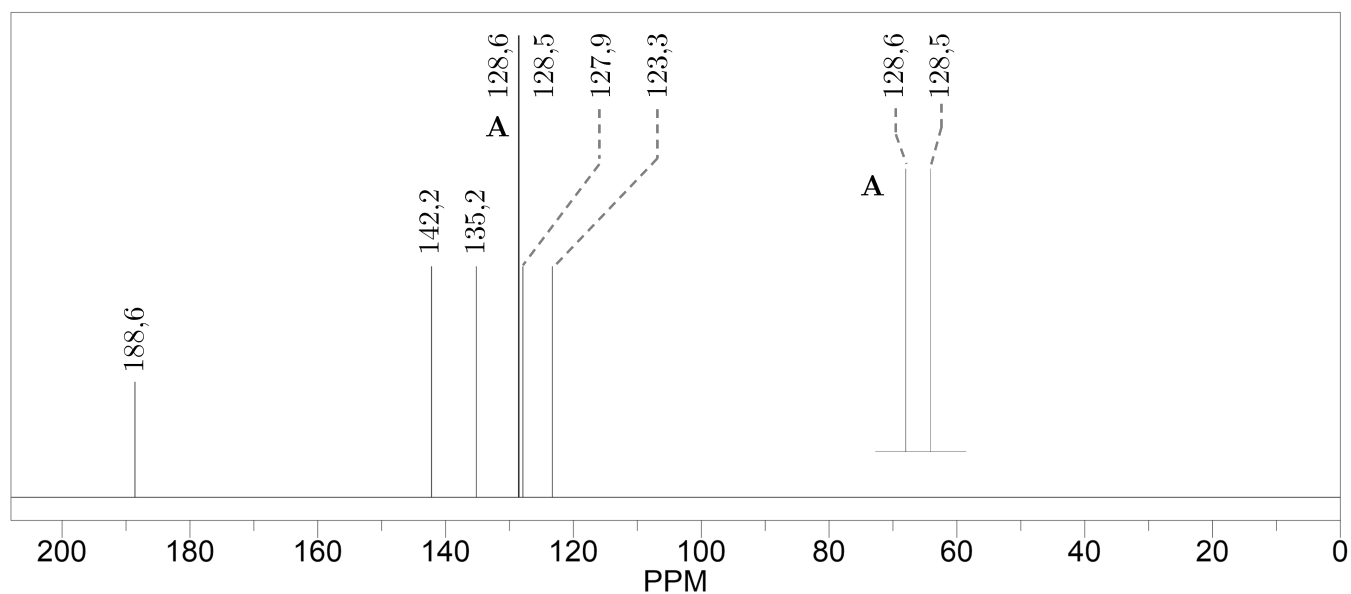
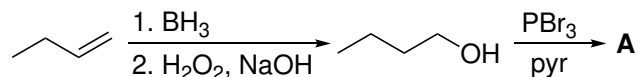


Figura 4: Espectro de RMN de ^{13}C do produto **C**. O espectro foi adquirido em um espectrômetro de 75 MHz (^{13}C). A região **A** foi expandida, mostrando os deslocamentos químicos acima dos sinais.

- Mostre a estrutura do produto **C**. Justifique sua resposta com base em evidências espectroscópicas e espectrométricas.
- O espectro de absorção de **C** no UV-Vis revela uma banda intensa com $\lambda_{\text{máx}} = 332 \text{ nm}$. Qual a natureza da transição eletrônica relativa a essa banda? Considerando essa informação e

fatores estruturais, contextualize o uso de **C** como princípio ativo de algumas formulações de protetor solar.

- (c) A reação para produção de **C** é feita à temperatura ambiente (25 °C) e a formação do produto é observada como um precipitado que forma após 5 minutos de reação. Considerando o mecanismo da reação de formação de **C**, por que sua formação não necessita de aquecimento?
2. (1 ponto) O but-1-eno, quando reagido com BH_3 e, posteriormente, H_2O_2 na presença de NaOH , gera o butan-1-ol. Esse álcool, na presença de PBr_3 e piridina (pyr), gera o produto **A**.



Considerando que o produto **A** possui fórmula molecular $\text{C}_4\text{H}_9\text{Br}$, dê a sua fórmula estrutural e indique qual a evidência mais marcante no espectro de massas, utilizando ionização por impacto de elétrons (70 eV), para confirmar a formação de **A**.