

MFQO - Métodos Físicos em Química Orgânica: P1 (Módulo 1)			
Data: 18/09/2025	Questões: 2	Pontos totais: 3,0	
Matrícula:		Nome:	

<i>Questão</i>	1	2
<i>Pontuação</i>		

Instruções para a realização da prova:

- Justifique **todas** as suas respostas e entregue essa folha com a folha de respostas anexa;
- Equações e relações relevantes:
 - Índice de deficiência de hidrogênio (IDH): $IDH = C - (H/2) + (5A/2) - (7X/2) + 1$
 - Regra dos treze: $(M/13) = n + (r/13) \Rightarrow C_nH_{n+r}$
- Tabela de abundâncias isotópicas de elementos comuns:

Z	Nome	Símbolo	Massa atômica (uma)	Abundância (%)
1	Hidrogênio	1H	1,007825	99,9885
	Deutério	2H	2,014102	0,0115
6	Carbono	^{12}C	12,000000	98,93
		^{13}C	13,003355	1,07
17	Cloro	^{35}Cl	34,968853	75,78
		^{37}Cl	36,965903	24,22
35	Bromo	^{79}Br	78,918338	50,69
		^{81}Br	80,916291	49,31

- É permitido o uso de calculadora científica;
- Há uma tabela periódica dos elementos ao final da prova.

- (1,5 pontos) Ao reagir o (1-hidroxietil)benzeno com ácido clorídrico (HCl) à temperatura ambiente (25 °C) durante 3 h, planejou-se obter o (1-cloroetil)benzeno, conforme mostra a **Figura 1**.

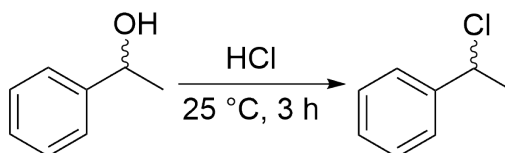


Figura 1. Esquema geral da reação entre o (1-hidroxietil)benzeno e HCl à 25 °C durante 3 h para formar o (1-cloroetil)benzeno.

- Ao realizar a análise de espectrometria de massas do produto majoritário, obteve-se o espectro mostrado na **Figura 2**. Considerando o resultado da análise, o produto esperado foi obtido com sucesso?

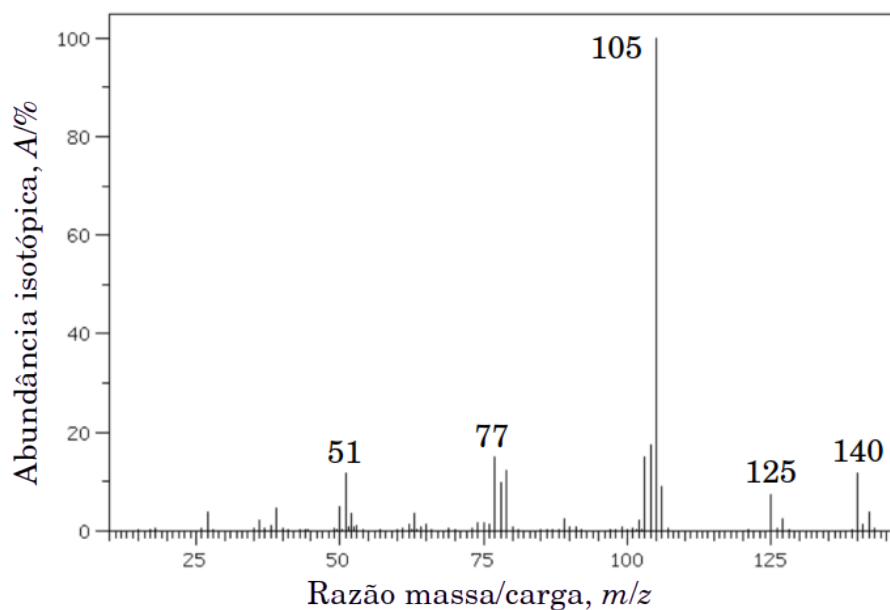


Figura 2. Espectro de massas do produto bruto majoritário pela reação entre o (1-hidroxietil)benzeno e HCl à 25 °C por 3 h. A análise foi feita com ionização por impacto de elétrons (70 eV).

Resposta: Na letra a), o espectro de massas revela que o produto foi obtido com sucesso, pois o pico do íon molecular (M^+) possui $m/z = 140$, correspondente à massa molar do produto de fórmula molecular C_8H_9Cl ($M = 140$). Além disso, pode-se observar picos relativos às fragmentações com perda de Cl (-35) e com perda de CH_3 (-15) a partir do íon molecular.

b) Ao repetir a reação com uma temperatura de 100 °C e um tempo de reação de 6 h, a reação gerou um produto majoritário cujo espectro de massas é mostrado na **Figura 3**. Qual é esse produto? Justifique sua formação preferencial nessas condições reacionais.

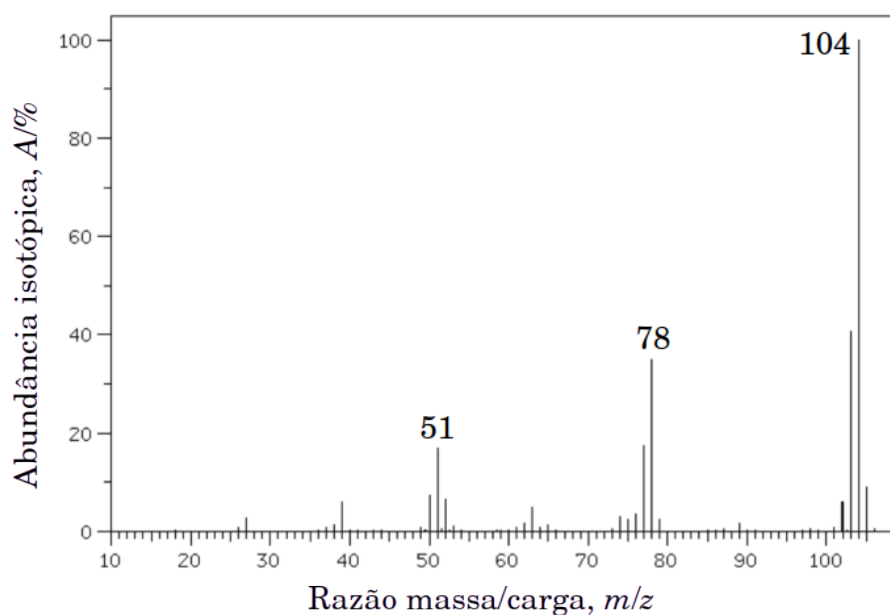


Figura 3. Espectro de massas do produto bruto obtido pela reação entre o (1-hidroxietil)benzeno e HCl à 100 °C por 6 h. A análise foi feita com ionização por impacto de elétrons (70 eV).

Resposta: Na letra b), o enunciado informa que o aquecimento aumentou de 25 °C para 100 °C, enquanto o tempo de reação dobrou. Logo, considerando que o substrato é propenso a formar um carbocátion benzílico, o aquecimento fornecido caracteriza condições para reações de eliminação – especificamente, E₁. O produto de eliminação a partir do (1-hidroxietil)benzeno é o vinilbenzeno, mais conhecido como estireno, cuja fórmula molecular é C₈H₈.

Analisando apenas o espectro de massas, pode-se ver que o pico do íon molecular é relativo a um valor de $m/z = 104$. Aplicando a regra dos 13, a fórmula molecular base gerada é C₈H₈. Esse composto possui IDH igual a 5 e, considerando a reação mostrada, corresponde ao anel aromático e mais uma insaturação ou ciclo.

Considerando todos os argumentos, percebe-se que o espectro obtido é correspondente ao estireno e, de fato, as condições usadas na reação favoreceram a formação do produto de desidroalogenação por E₁.

2. (1,5 pontos) Ao reagir o benzaldeído com metilamina (H₃CNH₂) na presença de quantidades catalíticas de ácido sulfúrico (H₂SO₄) em diclorometano (CH₂Cl₂) durante 2 h, esperava-se obter um produto cuja fórmula molecular é C₈H₉N. A reação de redução do composto C₈H₉N com boroidreto de sódio (NaBH₄) em metanol (MeOH) à 0 °C durante 90 min produz, teoricamente, um composto cuja fórmula molecular é C₈H₁₁N, conforme mostra a **Figura 4**.

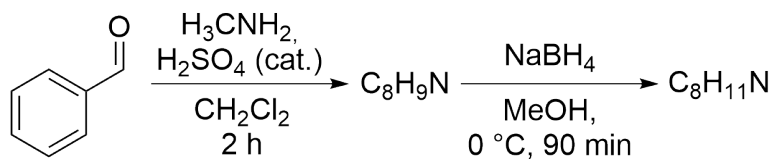


Figura 4. Esquema geral da reação entre o benzaldeído e H₃CNH₂ na presença de H₂SO₄ (cat.) em CH₂Cl₂ por 2 h, seguida da reação com NaBH₄ em MeOH à 0 °C durante 90 min, gerando o C₈H₁₁N.

- a) Ao realizar a análise de espectrometria de massas do produto majoritário da segunda etapa de reação, obteve-se o espectro mostrado na **Figura 5**. Considerando o resultado da análise, o produto foi obtido com sucesso? Considere que os picos em $m/z = 134$ e $m/z = 135$ são artefatos da análise.

Resposta: Na letra a), considerando que o pico do íon molecular é correspondente a um valor de $m/z = 121$ e que a massa molar do produto C₈H₁₁N é igual a 121 g mol⁻¹, tem-se que a reação gerou o produto com sucesso. Outras evidências de que a reação gerou o produto esperado com sucesso envolvem os picos oriundos da perda de um H (-1) e da subsequente perda da unidade HN=CH₂ (-29), gerando o cátion tropílio (C₇H₇), cujo m/z é igual a 91.

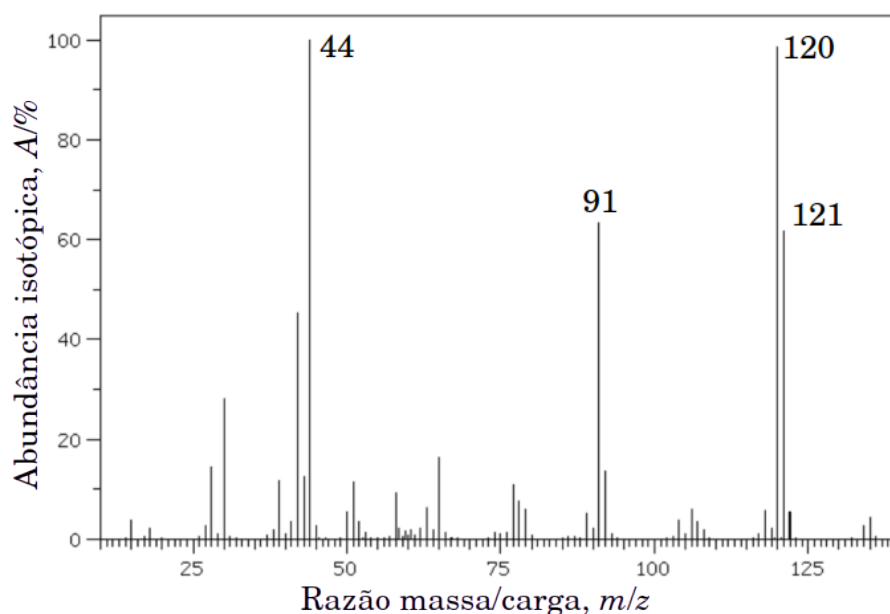


Figura 5. Espectro de massas do produto bruto obtido pela reação entre o C_8H_9N e $NaBH_4$ em metanol à $0\text{ }^{\circ}C$ durante 90 min. A análise foi feita com ionização por impacto de elétrons (70 eV).

b) Se as condições da reação de redução fossem trocadas para hidreto de lítio e alumínio ($LiAlH_4$) na presença de éter etílico (H_3COCH_3) e à $-78\text{ }^{\circ}C$, o espectro do produto obtido seria diferente do mostrado no item anterior? Discuta a respeito das semelhanças e diferenças entre os produtos e seus respectivos espectros.

Resposta: Na letra b), como o hidreto de lítio e alumínio, $LiAlH_4$, é um redutor mais forte que o boroidreto de sódio, $NaBH_4$, e que a função imina é, evidentemente, reduzida pelo segundo, o produto da reação e seu respectivo espectro seriam os mesmos.



Para saber mais,
acesse aqui

TABELA PERIÓDICA DOS ELEMENTOS

1

1,0080(2)

H

hidrogênio

2

3

6,94(6)

Li

lítio

4

9,0122

Be

berílio

11

22,990

Na

sódio

12

24,305(2)

Mg

magnésio

19

39,098

K

potássio

20

40,078(4)

Ca

cálcio

21

44,956

Sc

escândio

22

47,867

Ti

titânio

23

50,942

V

vanádio

24

51,996

Cr

crômio

25

54,938

Mn

manganês

26

55,845(2)

Fe

ferro

27

58,933

Co

cobalto

28

58,693

Ni

níquel

29

63,546(3)

Cu

cobre

30

65,38(2)

Zn

zinco

31

69,723

Ga

gálio

32

72,630(8)

Ge

germânio

33

74,922

As

arsênio

34

78,971(8)

Se

selênio

35

79,904(3)

Br

bromo

36

83,798(2)

Kr

kriptônio

37

85,468

Rb

rubídio

38

87,62

Sr

estrôncio

39

88,906

Y

ítrio

40

91,222(3)

Zr

zircônio

41

92,906

Nb

nióbio

42

95,95

Mo

molibdênio

43

[97]

Tc

tecnécio

44

101,07(2)

Ru

rutênio

45

102,91

Rh

ródio

46

106,42

Pd

paládio

47

107,87

Ag

prata

48

112,41

Cd

cádmio

49

114,82

In

índio

50

118,71

Sn

estanho

51

121,76

Sb

antimônio

52

127,60(3)

Te

telúrio

53

126,90

I

iodo

54

131,29

Xe

xenônio

55

132,91

Cs

césio

56

137,33

Ba

bário

57 - 71

72

178,49

Hf

háfnio

73

180,95

Ta

tântalo

74

183,84

W

tungstênio

75

186,21

Re

rênio

76

190,23(3)

Os

ósio

77

192,22

Ir

irídio

78

195,08(2)

Pt

platina

79

196,97

Au

ouro

80

200,59

Hg

mercúrio

81

204,38

Tl

tálio

82

207,2(1,1)

Pb

chumbo

83

208,98

Bi

bismuto

84

[209]

Po

polônio

85

[210]

At

astato

86

[222]

Rn

radônio

87

[223]

Fr

frâncio

88

[226]

Ra

rádio

89 - 103

104

[267]

Rf

rutherfordio

105

[268]

Db

dúbnio

106

[269]

Sg

seabórgio

107

[270]

Bh

bóhrio

108

[269]

Hs

hássio

109

[277]

Mt

meitnério

110

[281]

Ds

darmstádio

111

[282]

Rg

roentgênio

112

[285]

Cn

copernício

113

[286]

Nh

nihônio

114

[290]

Fl

fleróvio

115

[290]

Mc

moscóvio

116

[293]

Lv

livermório

117

[294]

Ts

tennesso

118

[294]

Og

oganessônio

Para saber mais
acesse aqui

Número atômico

14

28,085

Símbolo

Si

Nome

silício

Peso atômico padrão abreviado[†] (IUPAC, 2024);
incerteza no último dígito é ±1, exceto se indicada
entre parênteses. Mais detalhes: [www.ciaaw.org](#)

[†] Inexistente para alguns elementos (e.g. **Ra** e **Cf**) por não
terem isótopos com uma abundância isotópica
característica em amostras terrestres naturais. Para
esses elementos, consta o número de massa do seu
nuclídeo mais estável, entre colchetes (e.g. [226] e [251])

Zn - sólido

Hg - líquido

Ne - gás

Cf - sintético

TABELA PERIÓDICA DOS ELEMENTOS

Zn - sólido Hg - líquido Ne - gás Cf - sintético

Número atômico — 14 28,085 —
Símbolo — **Si** —
Nome — silício —
Peso atômico padrão abreviado[†] (IUPAC, 2024):
incerteza no último dígito é ± 1 , exceto se indicada
entre parênteses. Mais detalhes: www.ciaaw.org
[†] Inexistente para alguns elementos (e.g. Ra e Cf) por não
terem isótopos com uma abundância isotópica
característica em amostras terrestres naturais. Para
esses elementos, consta o número de massa do seu
nuclídeo mais estável, entre colchetes (e.g. [226] e [251])

Atenção: para saber como obter uma tabela periódica com muitas outras informações adicionais, acesse aqui.



57 138,91 La lantânio	58 140,12 Ce cério	59 140,91 Pr praseodímio	60 144,24 Nd neodímio	61 [145] Pm promécio	62 150,36(2) Sm samário	63 151,96 Eu europio	64 157,25 Gd gadolínio	65 158,93 Tb térbio	66 162,50 Dy disprósio	67 164,93 Ho hólmio	68 167,26 Er érbio	69 168,93 Tm túlio	70 173,05(2) Yb itérbio	71 174,97 Lu lutécio
89 [227] Ac actínio	90 232,04 Th tório	91 231,04 Pa protactínio	92 238,03 U urânio	93 [237] Np neptúnio	94 [244] Pu plutônio	95 [243] Am amerício	96 [247] Cm cúrio	97 [247] Bk berkélio	98 [251] Cf califórnio	99 [252] Es einstênio	100 [257] Fm fémio	101 [258] Md mendelévio	102 [259] No nobélio	103 [262] Lr laurêncio