

# Módulo 2: Espectroscopia na Região do Infravermelho

## *Análise de espectros*

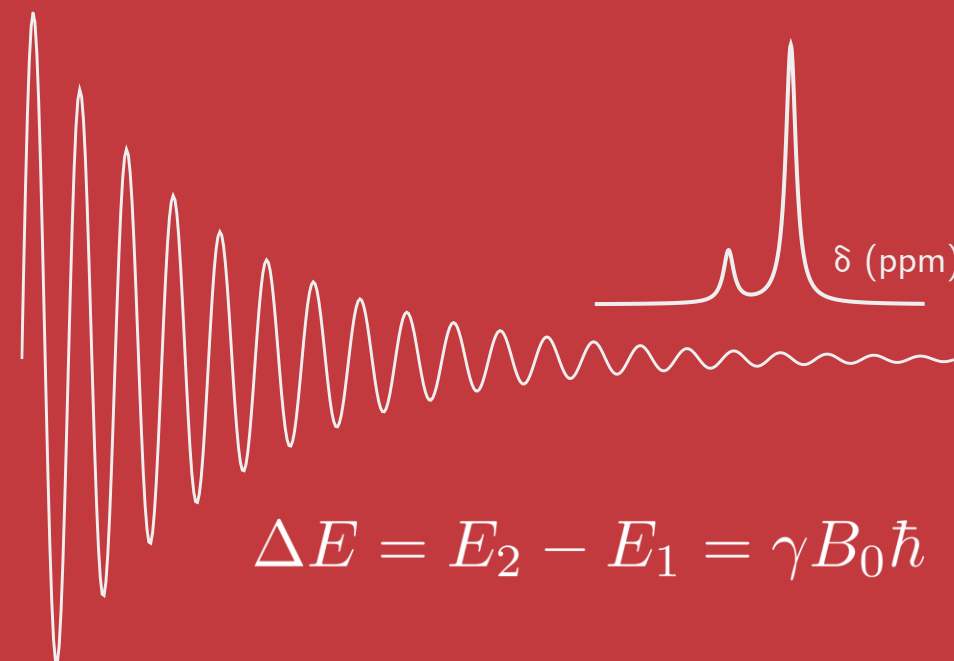
Lucas Raposo Carvalho

E-mail: lraposo@ufs.br

*Departamento de Ciências Naturais – DCNAT*  
*Métodos Físicos em Química Orgânica, 2025.2*

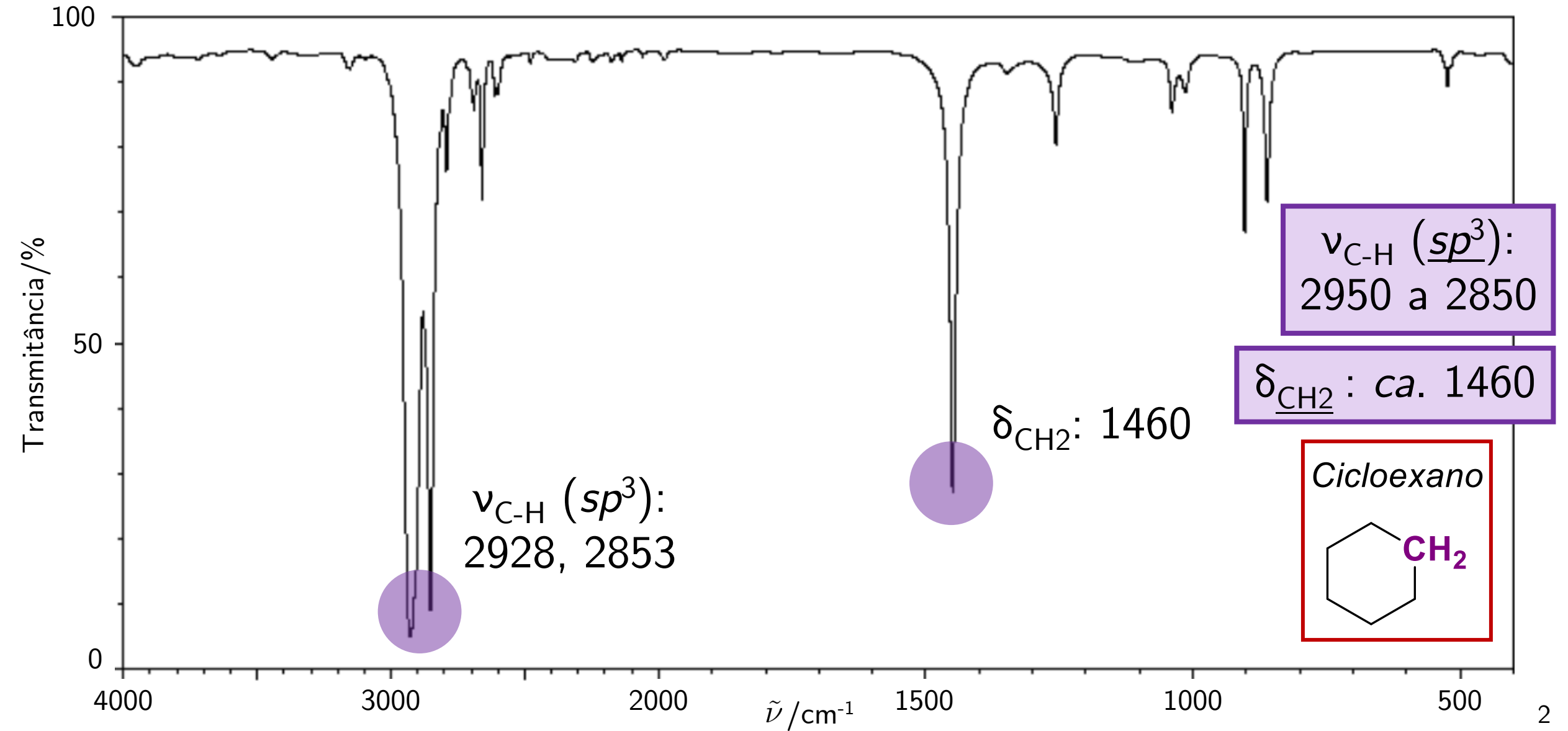


Universidade Federal  
de São João del-Rei

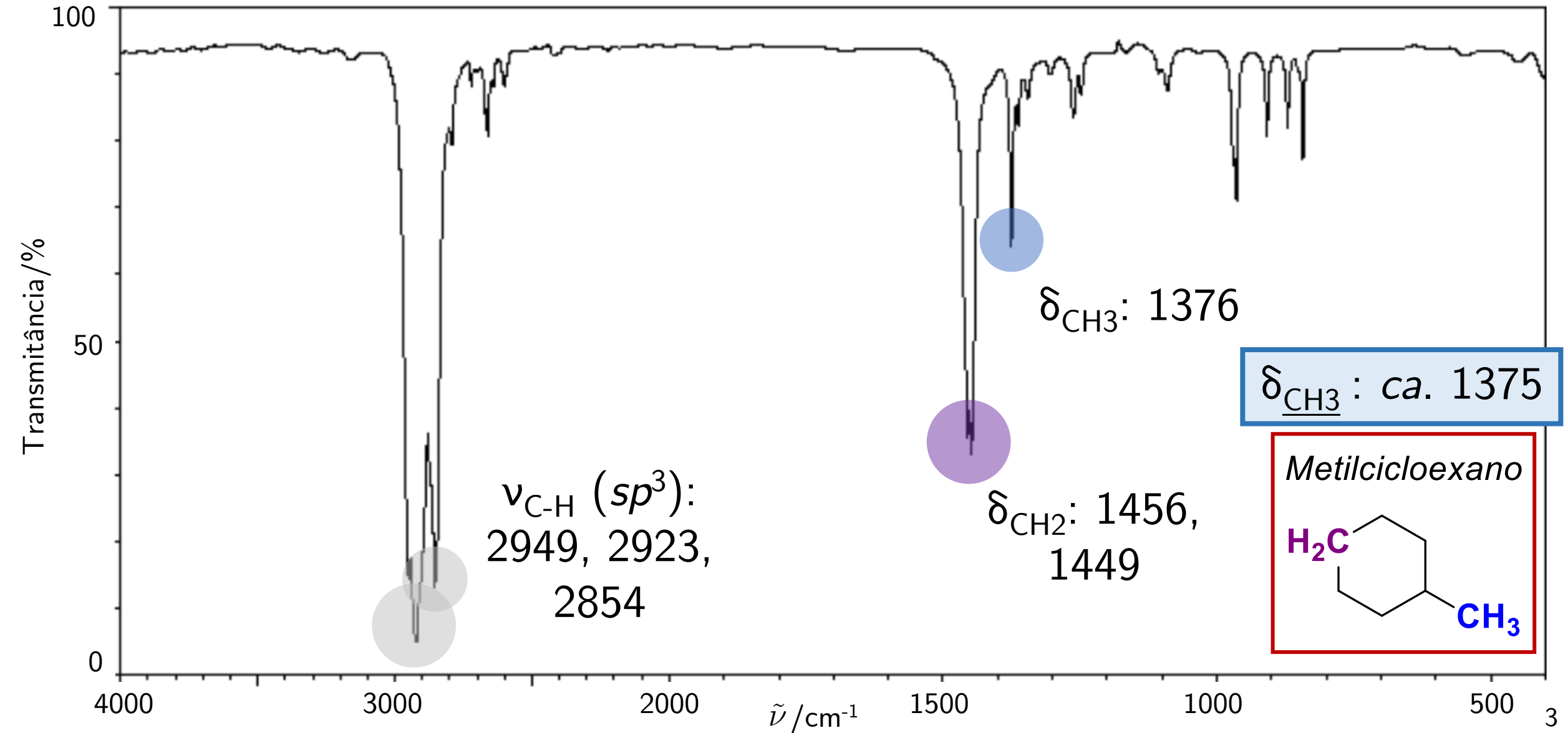


$$\Delta E = E_2 - E_1 = \gamma B_0 \hbar$$

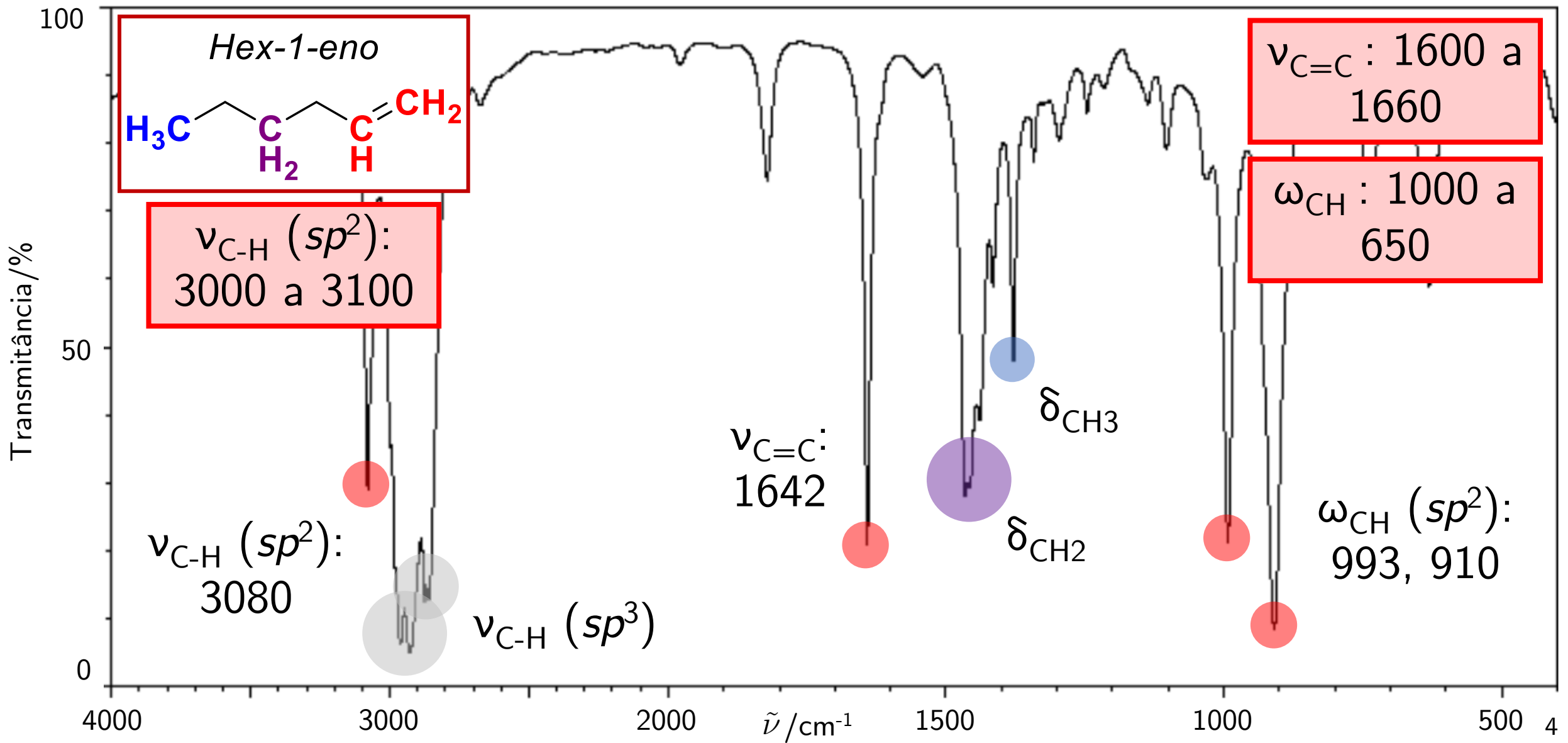
# 1. Espectro no IV de alcanos



# 1. Espectro no IV de alcanos

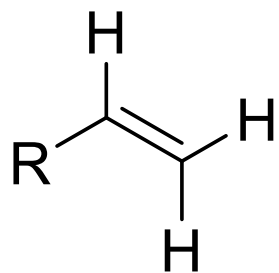


## 2. Espectro no IV de alcenos

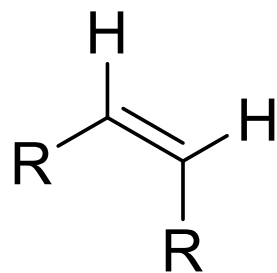


## 2. Espectro no IV de alcenos

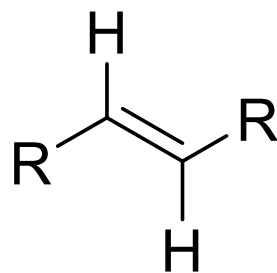
Padrão de substituição da C=C –  $\omega_{CH}$  (fora do plano, oop)



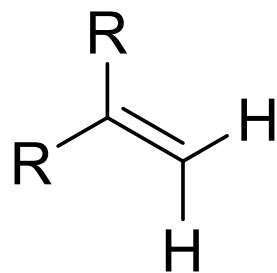
Vinil



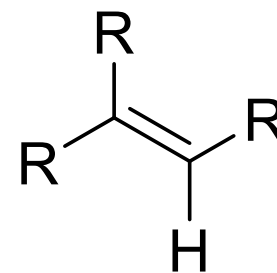
*cis*



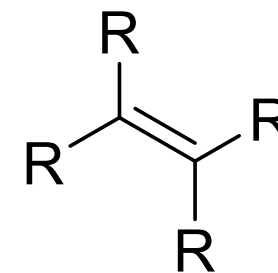
*trans*



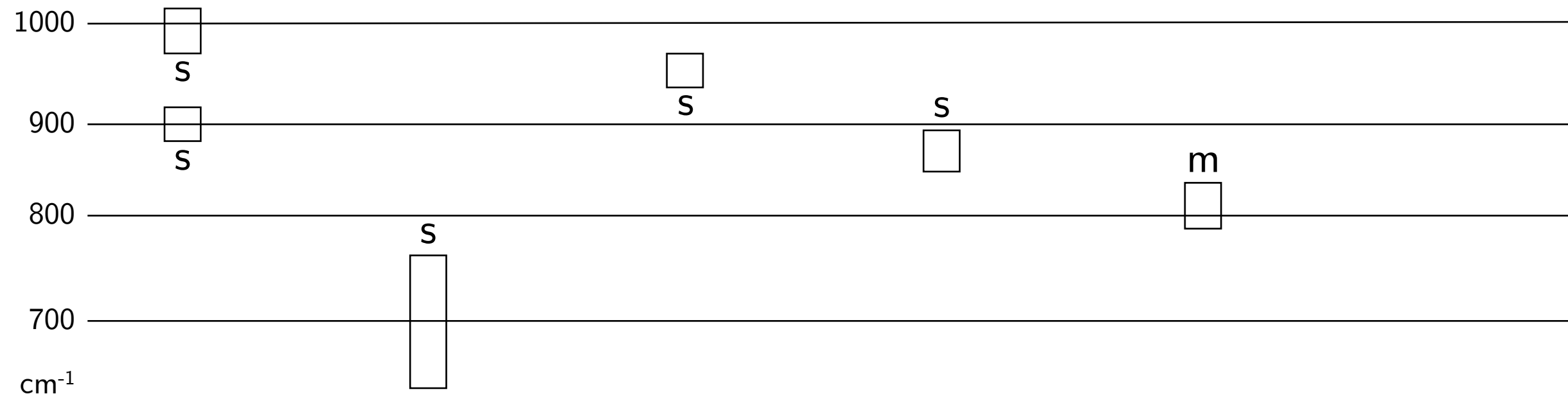
*gem*



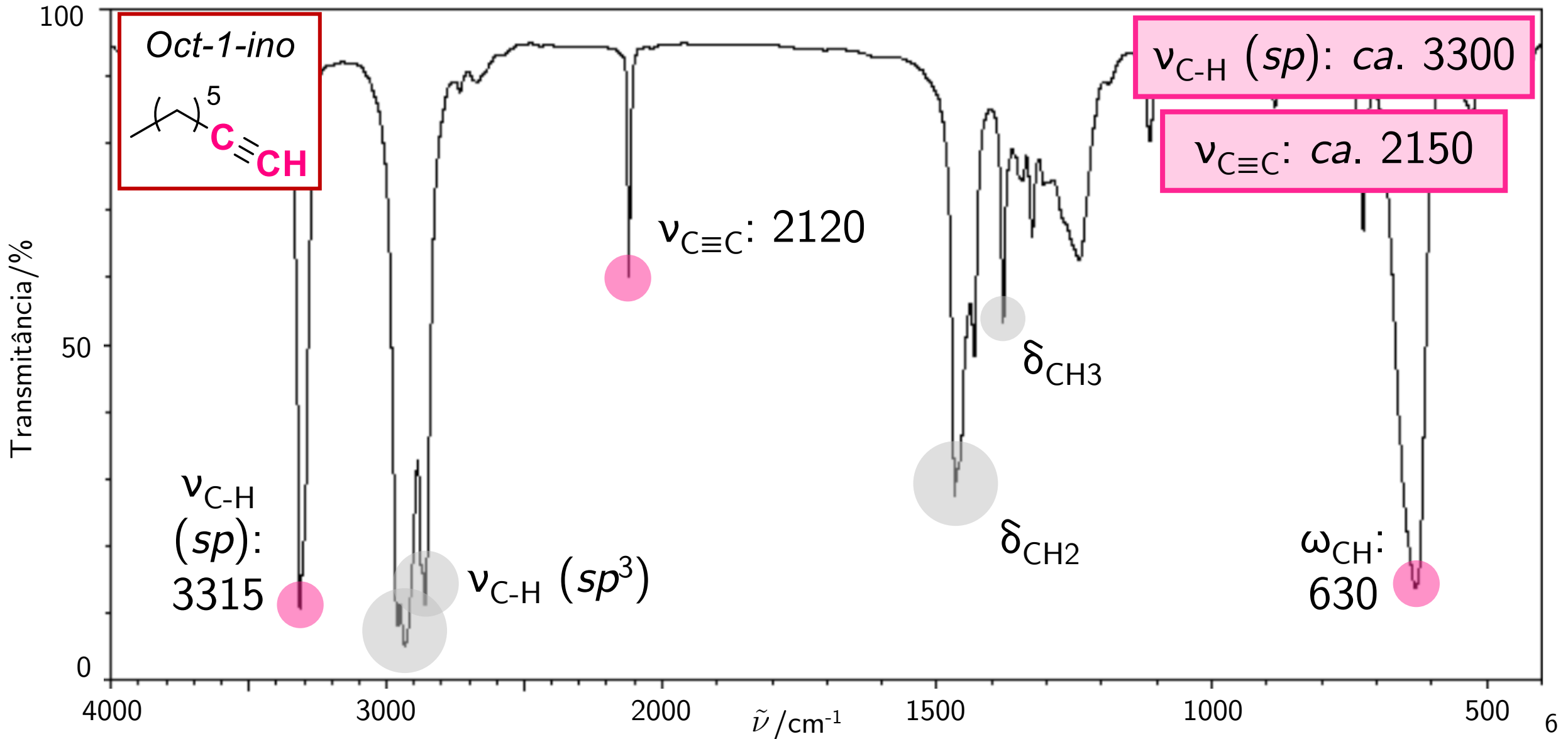
Trisubs.



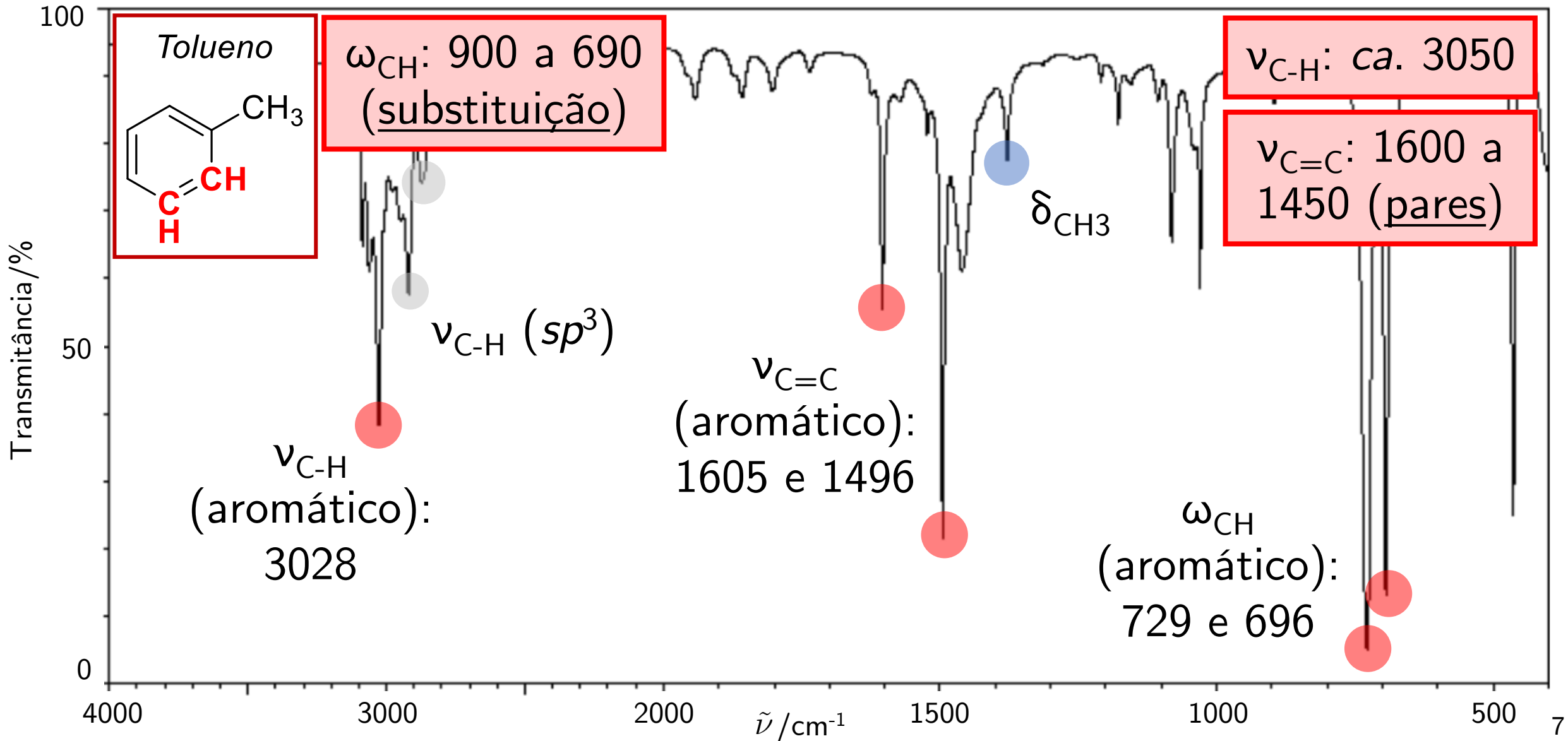
Tetrasubs.



### 3. Espectro no IV de alcinos

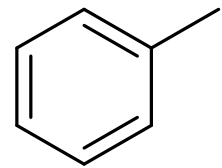


## 4. Espectro no IV de aromáticos

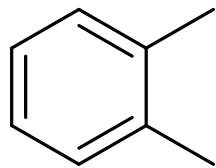


## 4. Espectro no IV de aromáticos

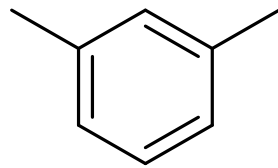
### Padrão de substituição do anel – $\omega_{\text{CH}}$ (fora do plano, oop)



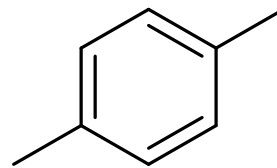
Mono



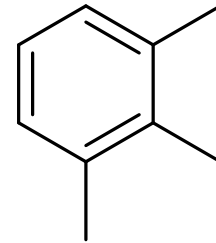
1,2 (*o*)



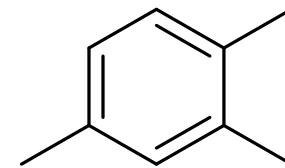
1,3 (*m*)



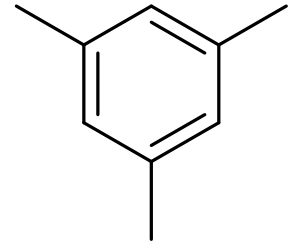
1,4 (*p*)



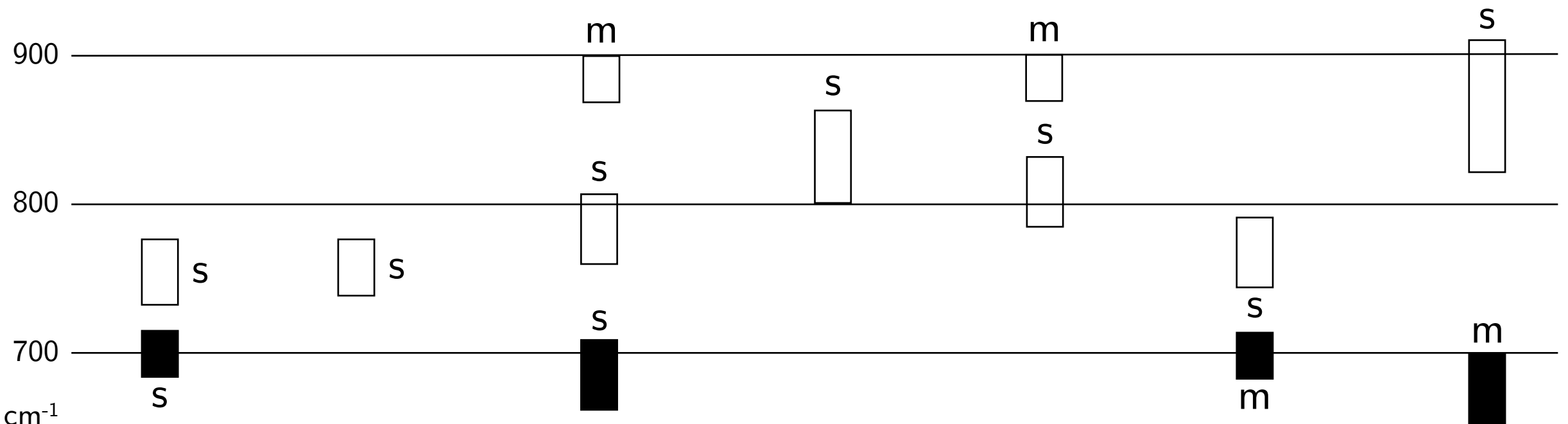
1,2,3



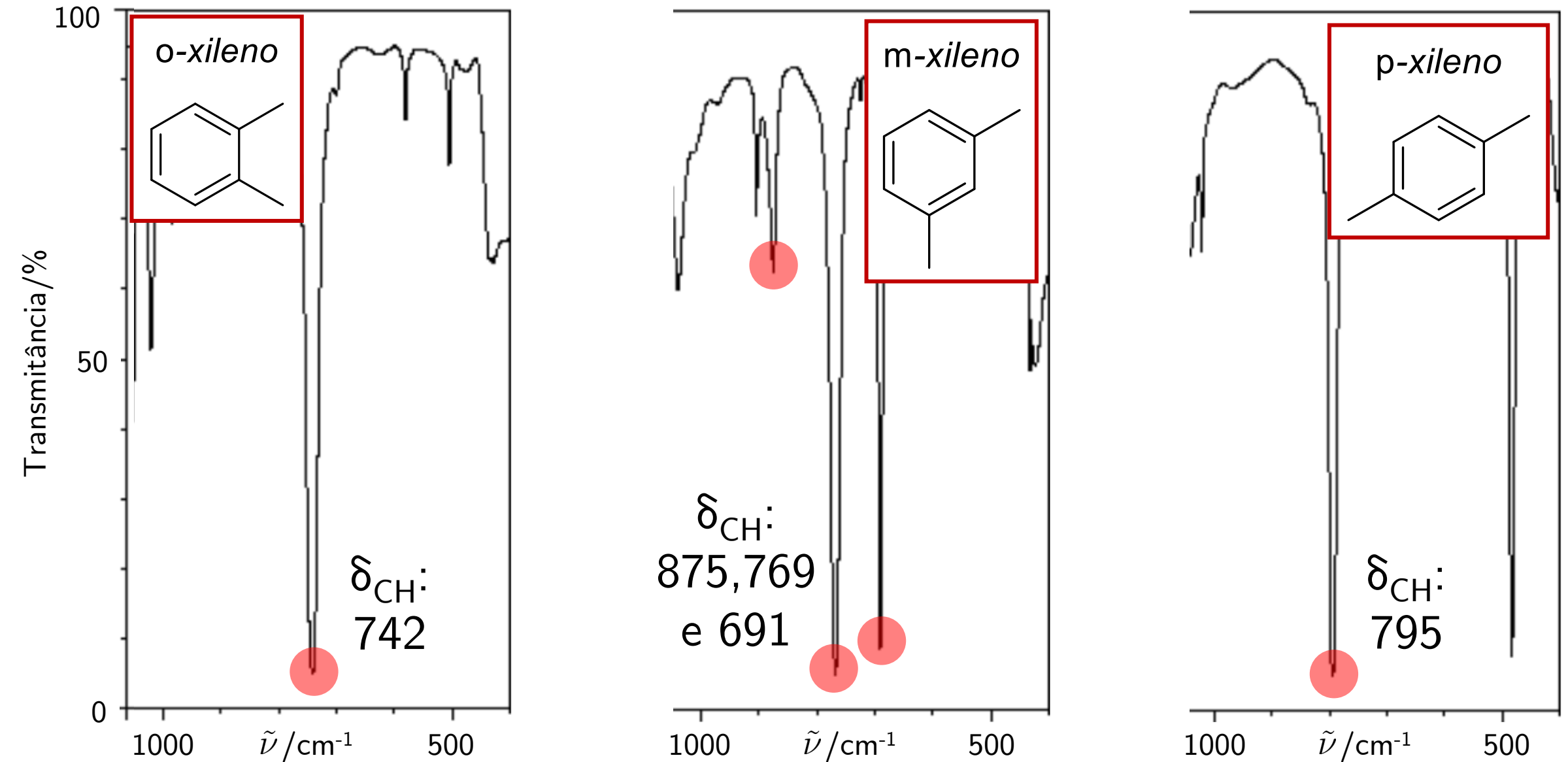
1,2,4



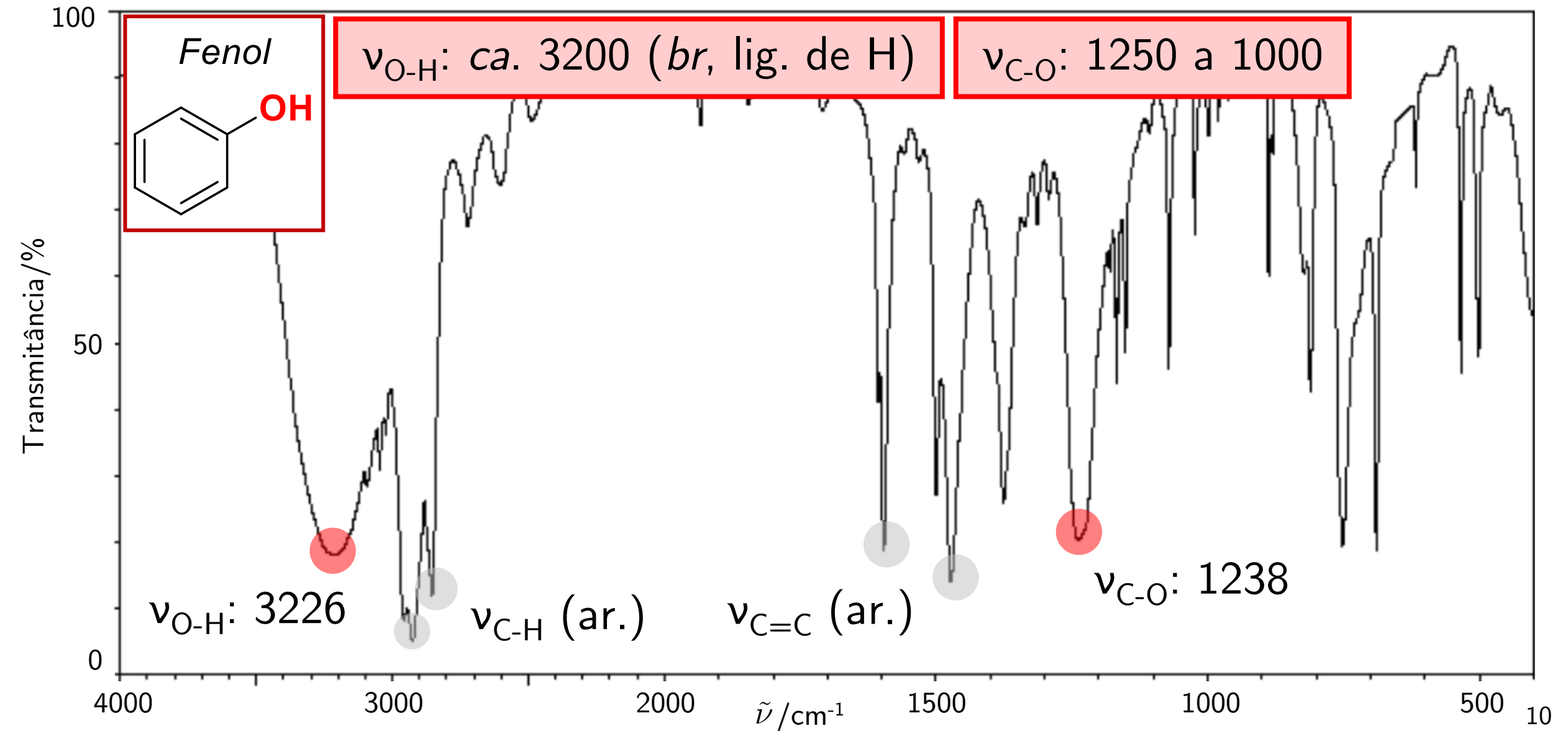
1,3,5



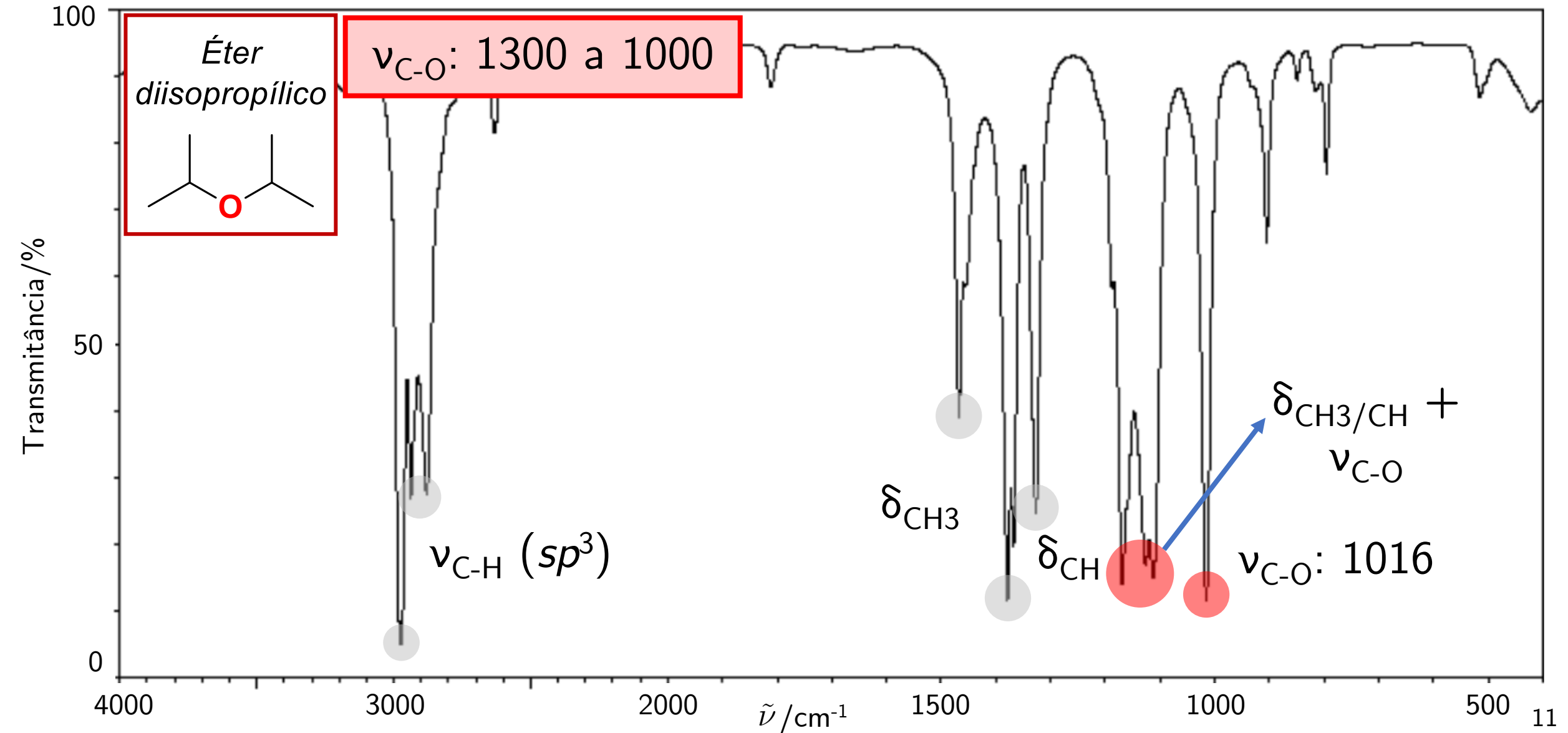
## 4. Espectro no IV de aromáticos



## 5. Espectro no IV de álcoois e fenóis

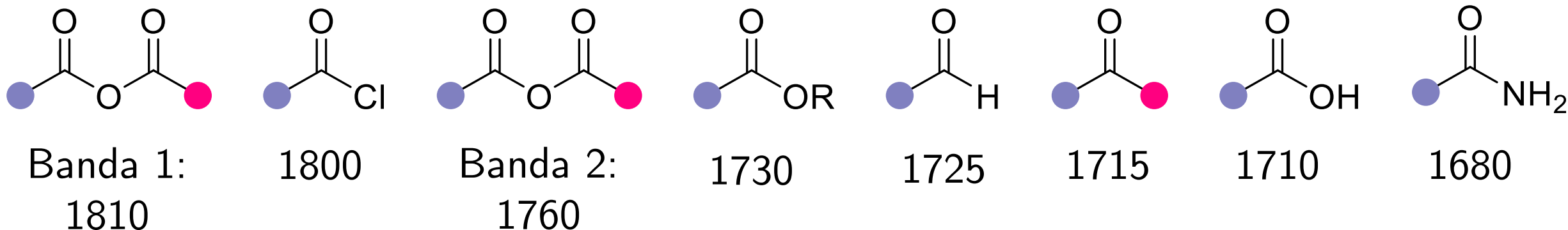


## 6. Espectro no IV de éteres



## 7. Espectro no IV de compostos carbonílicos

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



← cm<sup>-1</sup>

Efeito **indutivo**  
na carbonila

**Conjugação** e  
caráter de  
ligação

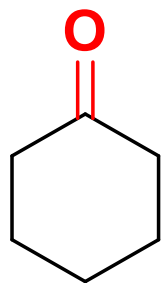
**Ligação de  
hidrogênio**

## 7. Espectro no IV de compostos carbonílicos

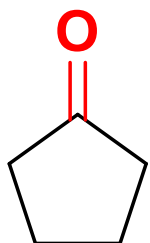
### Fatores que afetam a frequência de $\nu_{C=O}$

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**;

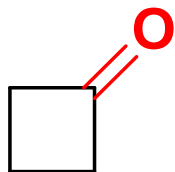
2. **Tamanho de anel:** Tensão de anel provoca um efeito **hipsocrômico**;



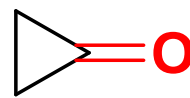
1715  
 $\text{cm}^{-1}$



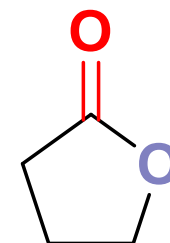
1745  
 $\text{cm}^{-1}$



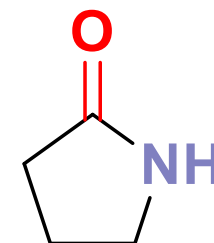
1780  
 $\text{cm}^{-1}$



1815  
 $\text{cm}^{-1}$



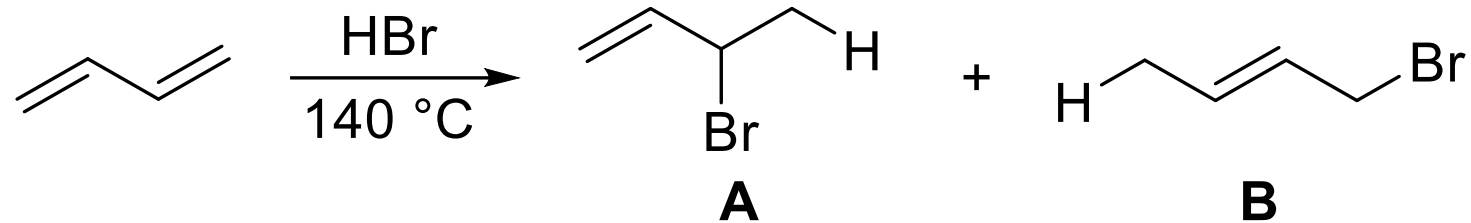
1770  
 $\text{cm}^{-1}$



1705  
 $\text{cm}^{-1}$

# Exercícios

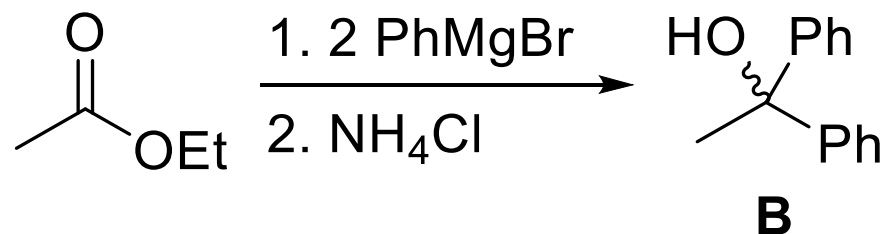
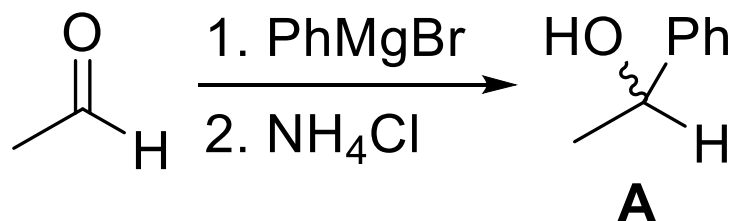
1. Considere a reação abaixo:



- a. O espectro no infravermelho da mistura dos produtos **A** e **B** mostrou bandas com os seguintes números de onda ( $\text{cm}^{-1}$ ): 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

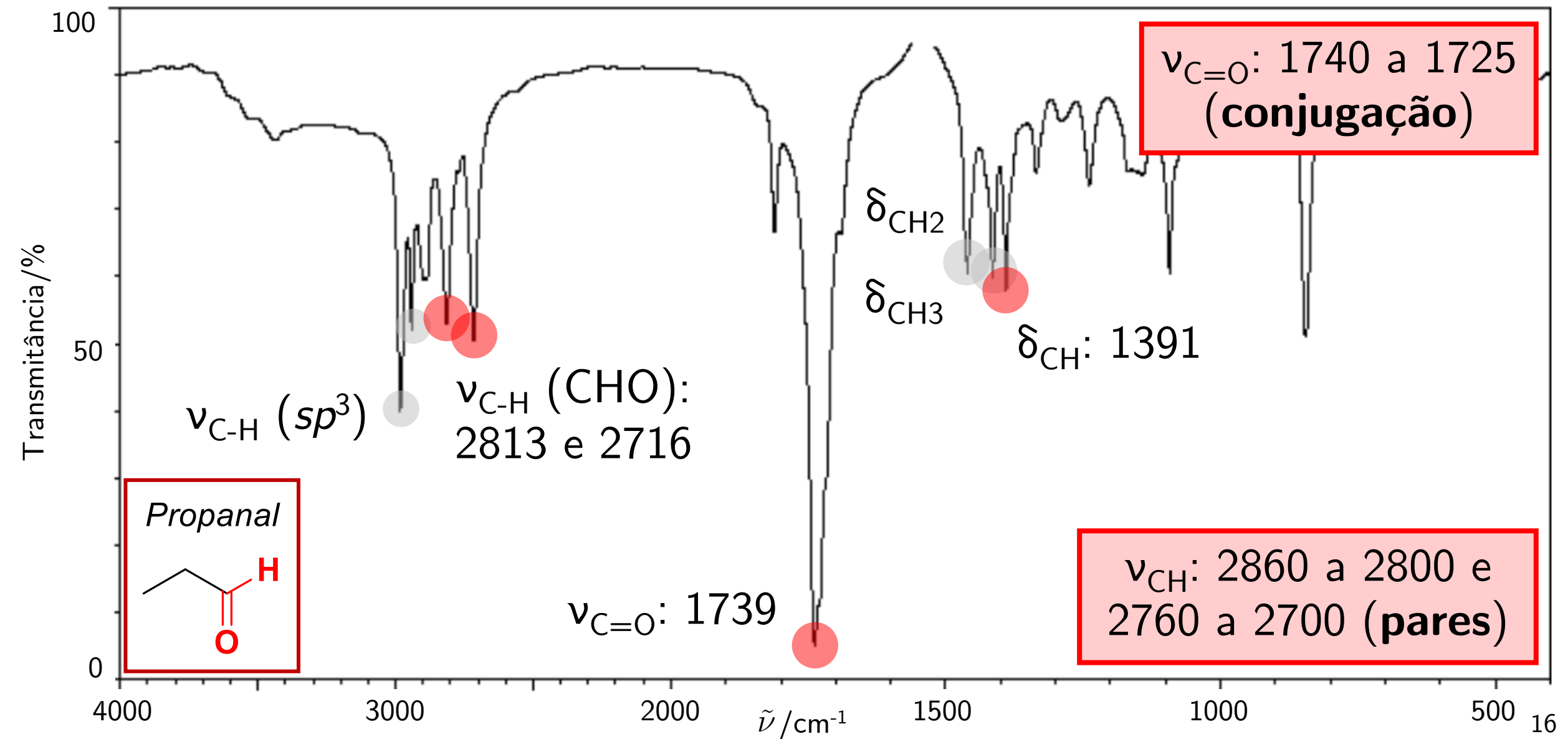
2. Considere o seguinte par de reações:



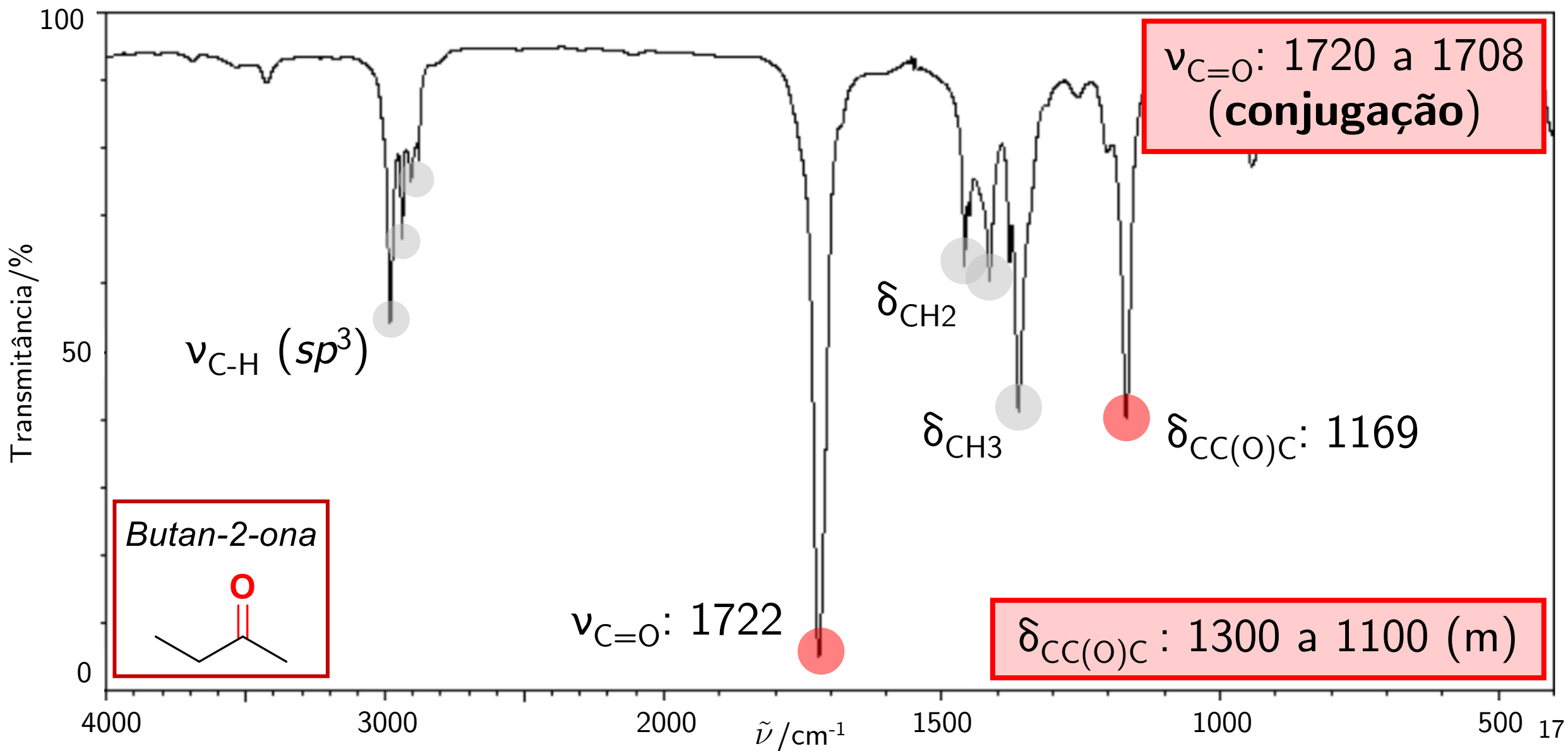
a. Para a formação de **A**, quando se substitui o  $\text{NH}_4\text{Cl}$  por  $\text{H}_2\text{SO}_4$  concentrado e aquecimento, observa-se que o espectro no IV do produto resultante possui bandas com  $\tilde{\nu}$  ( $\text{cm}^{-1}$ ): 3082, 3060, 3027, 1630, 1601, 1496, 992, 909, 777 e 698. Qual 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?

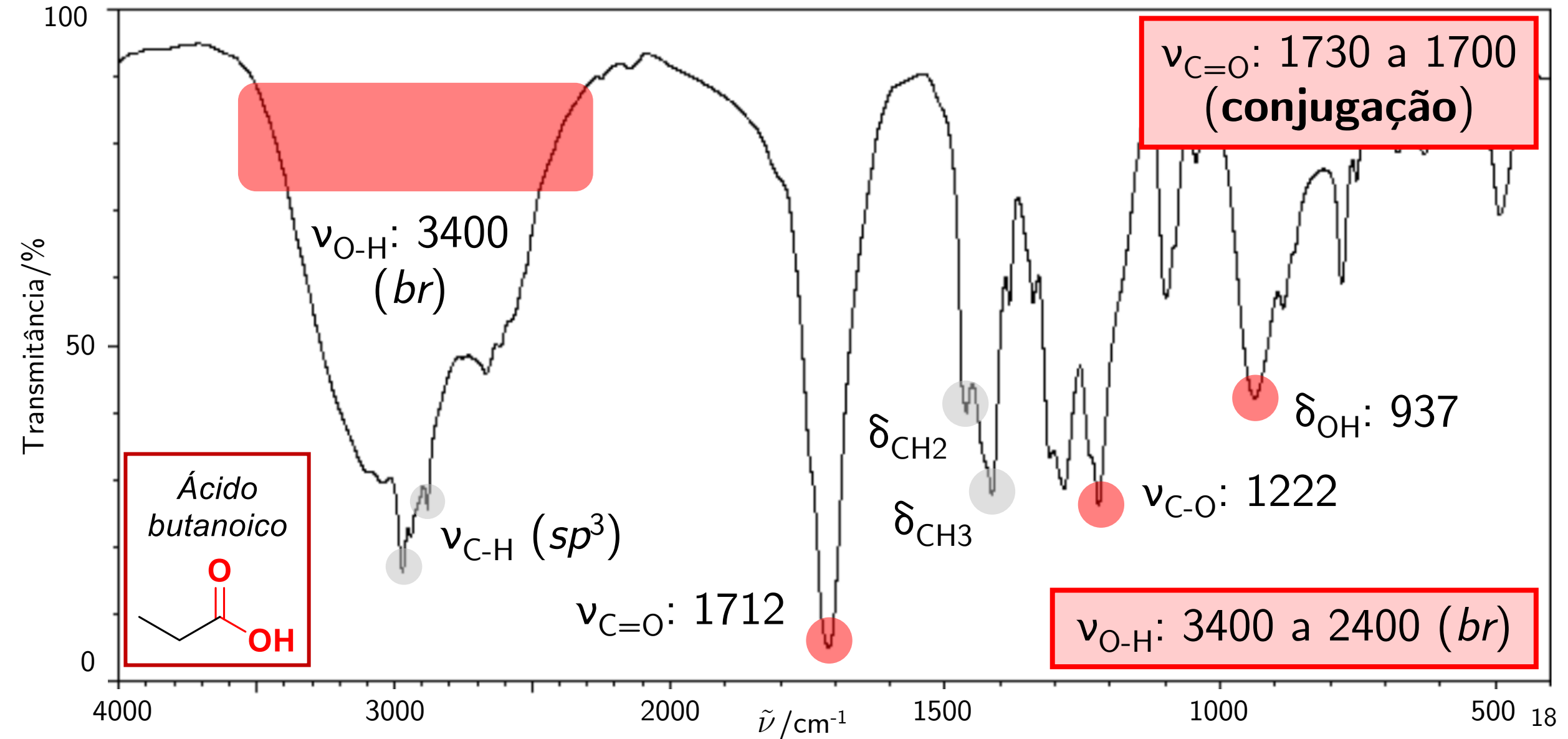
## 7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



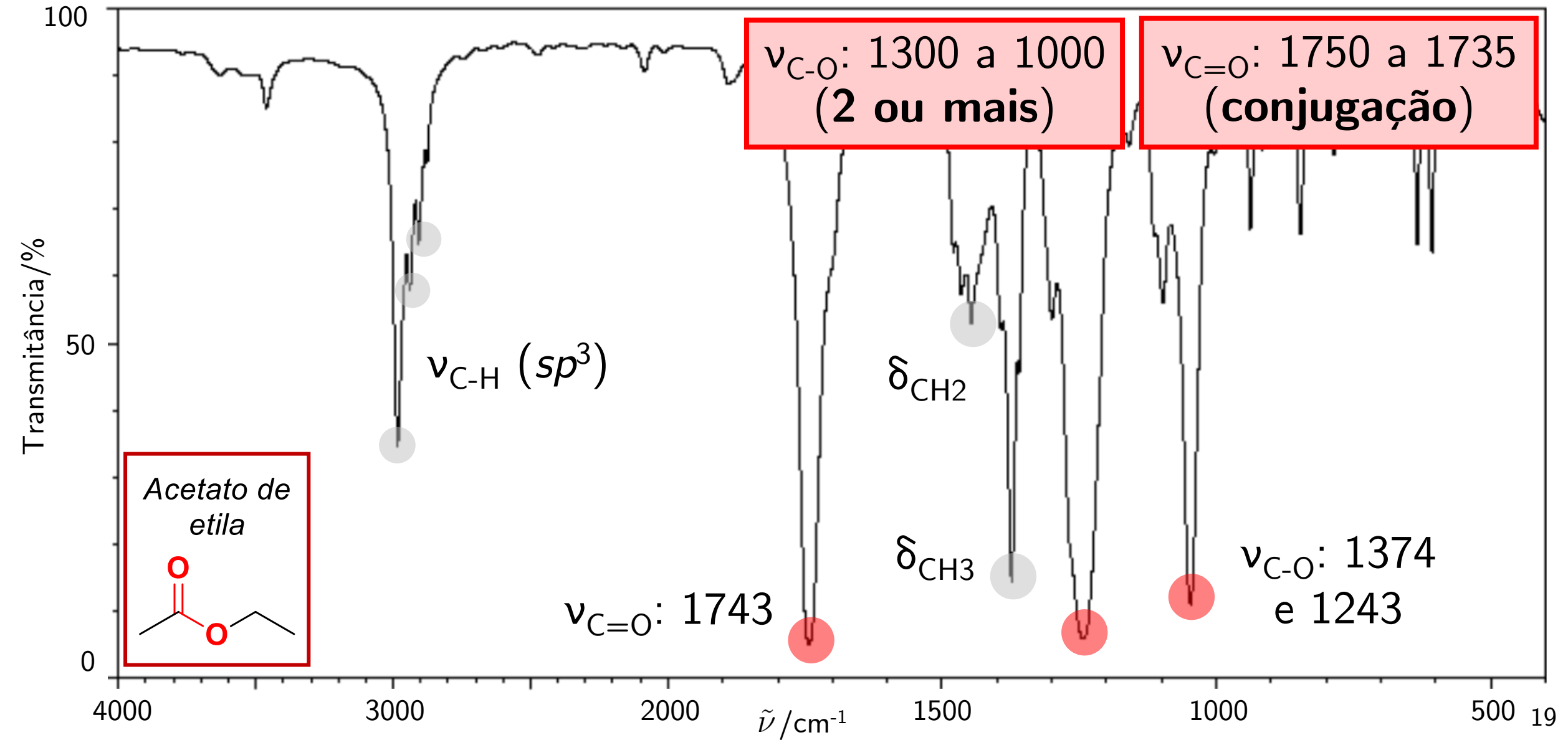
## 7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



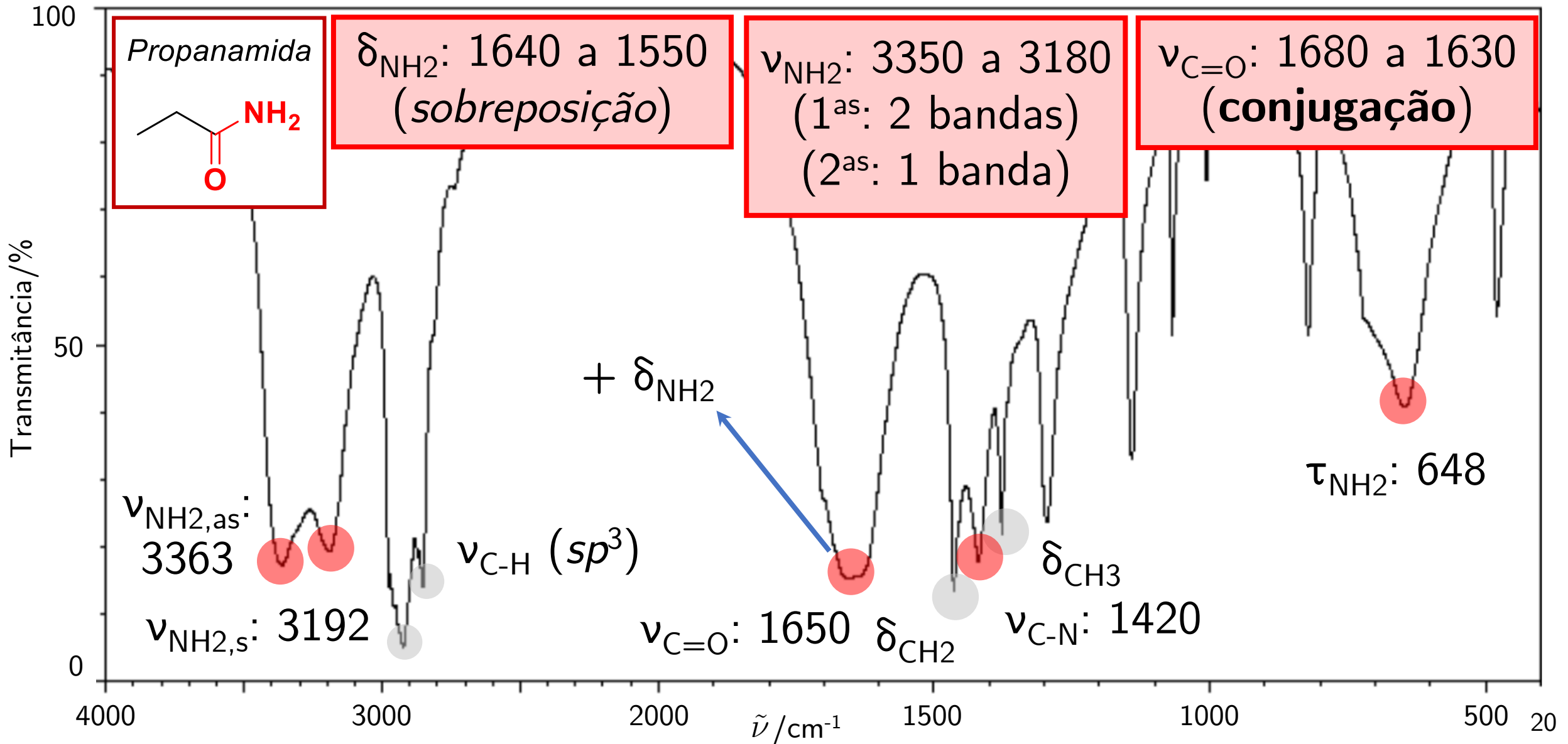
## 7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



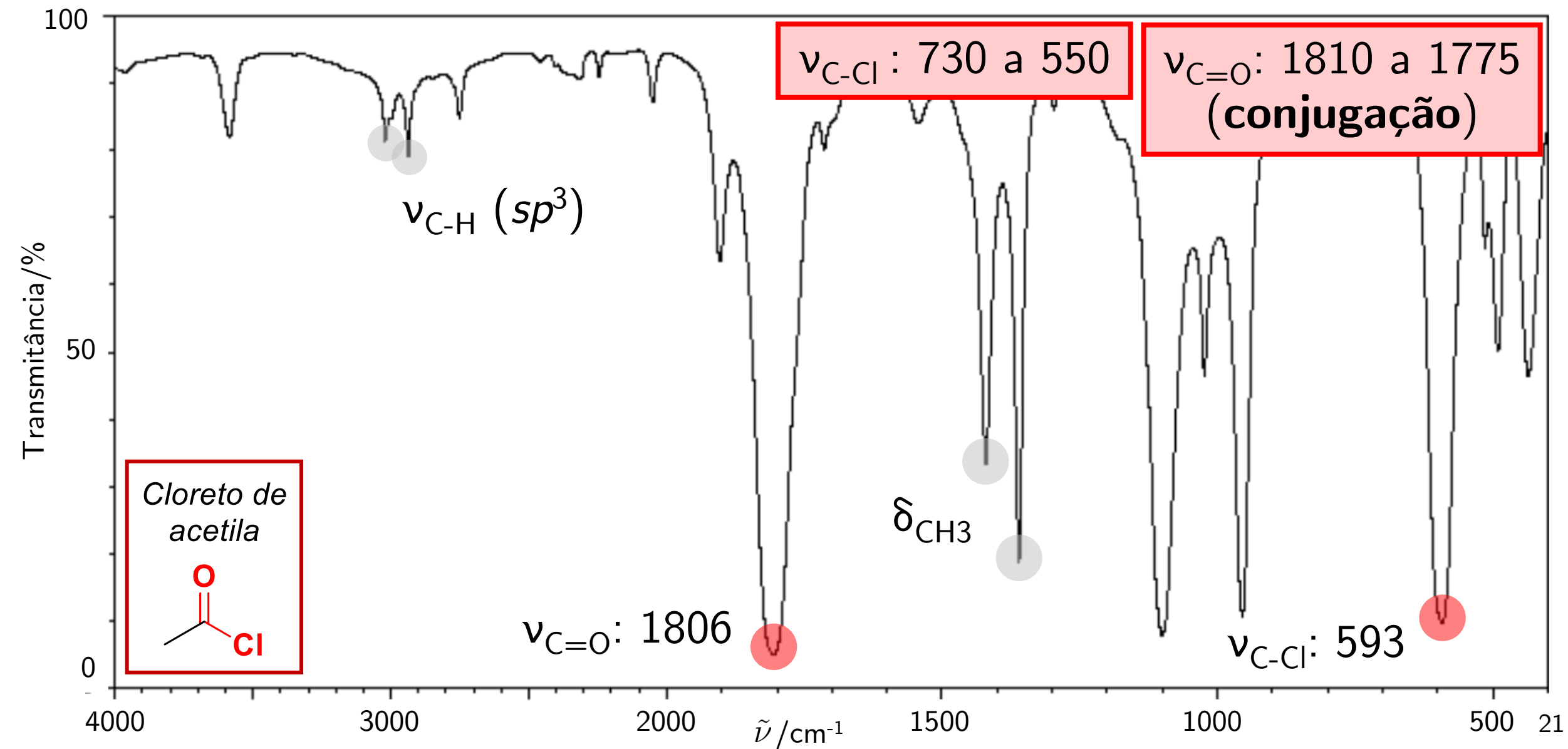
## 7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



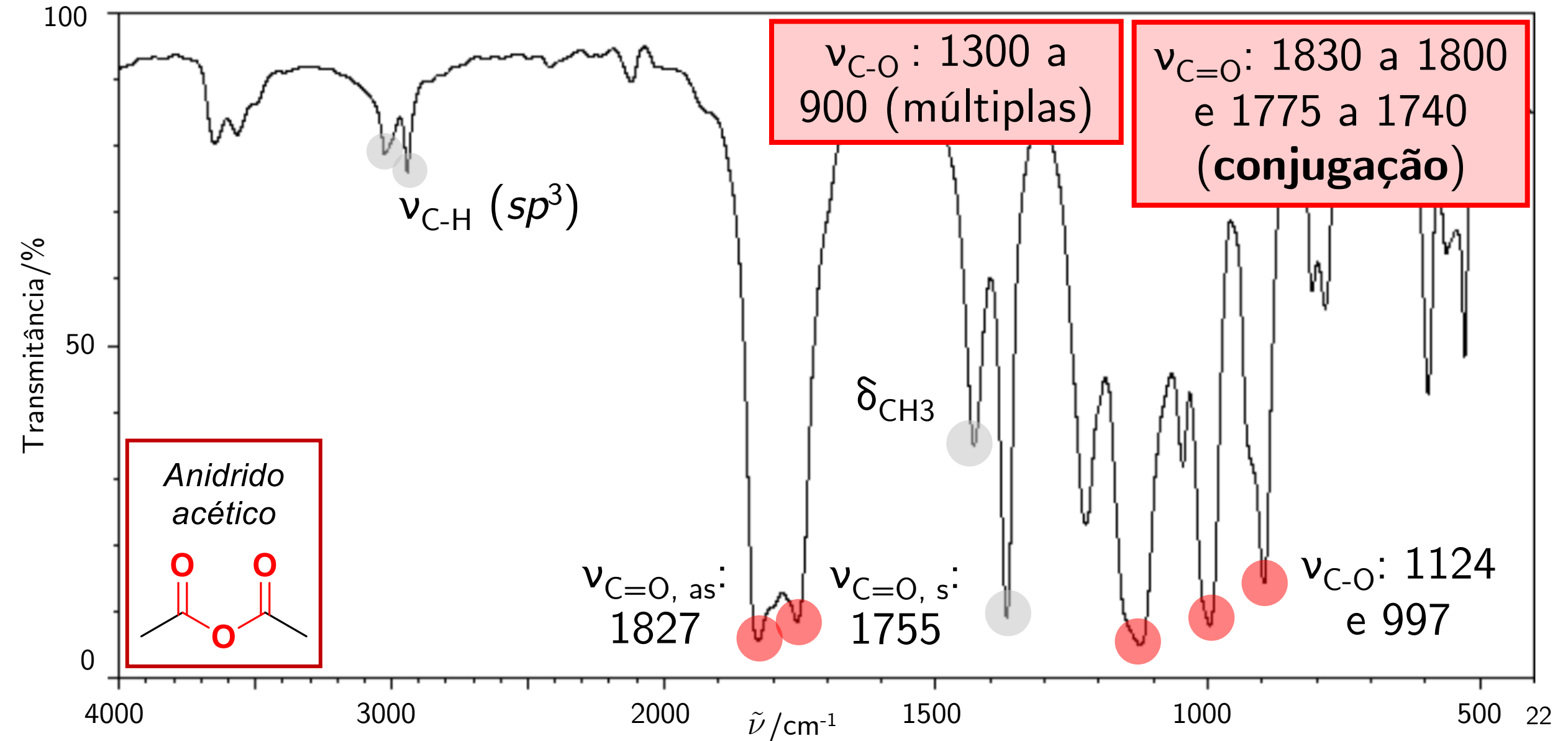
## 7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



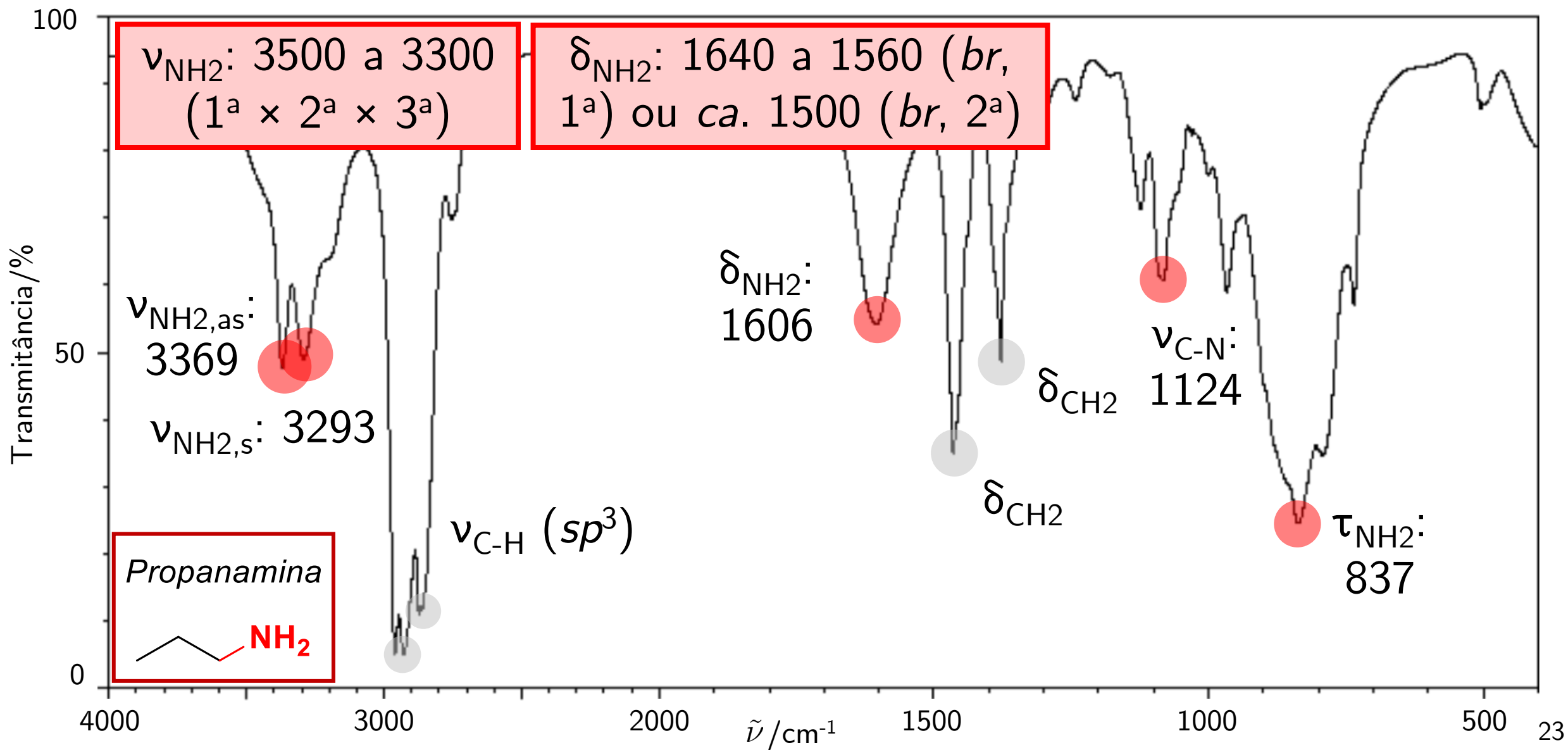
## 7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



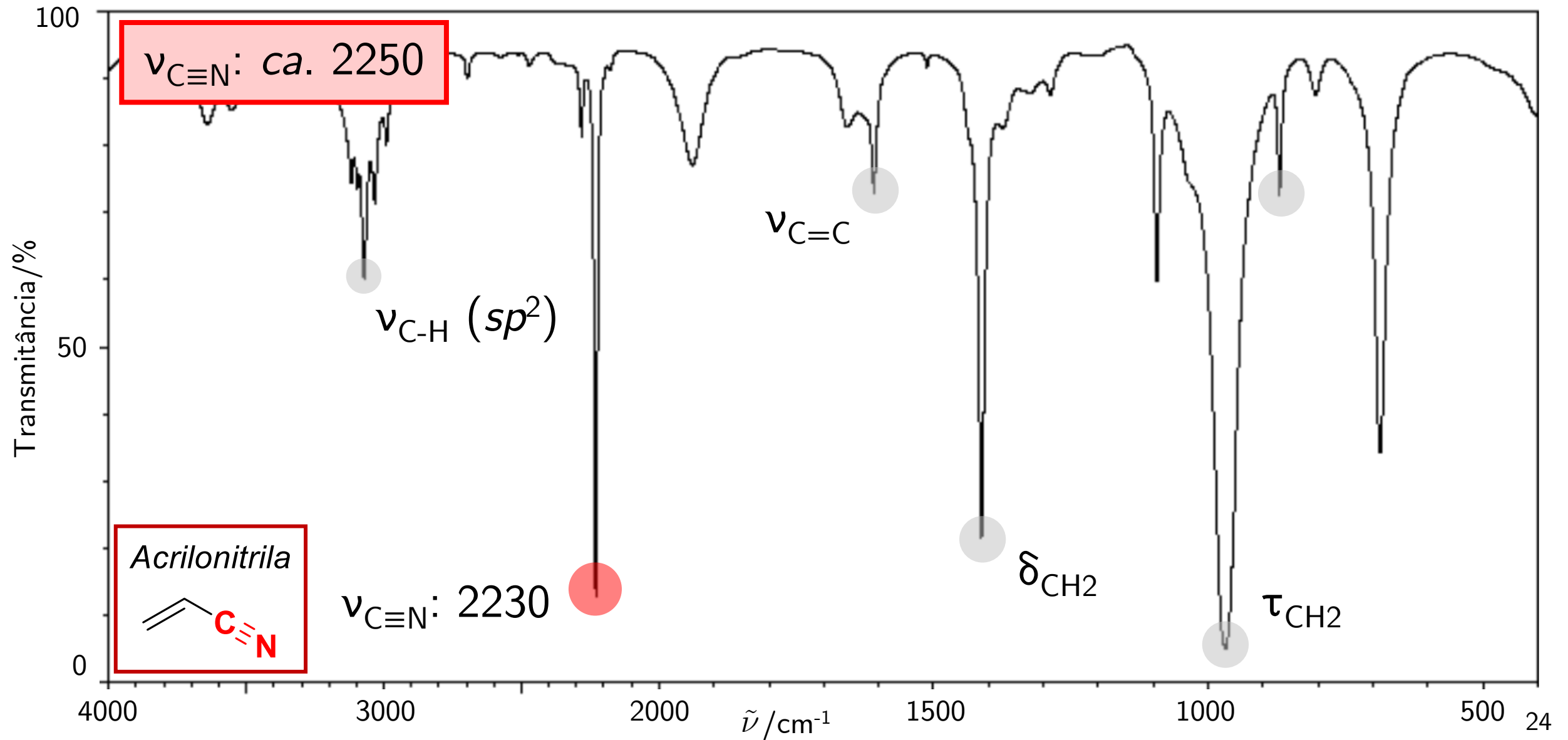
## 7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



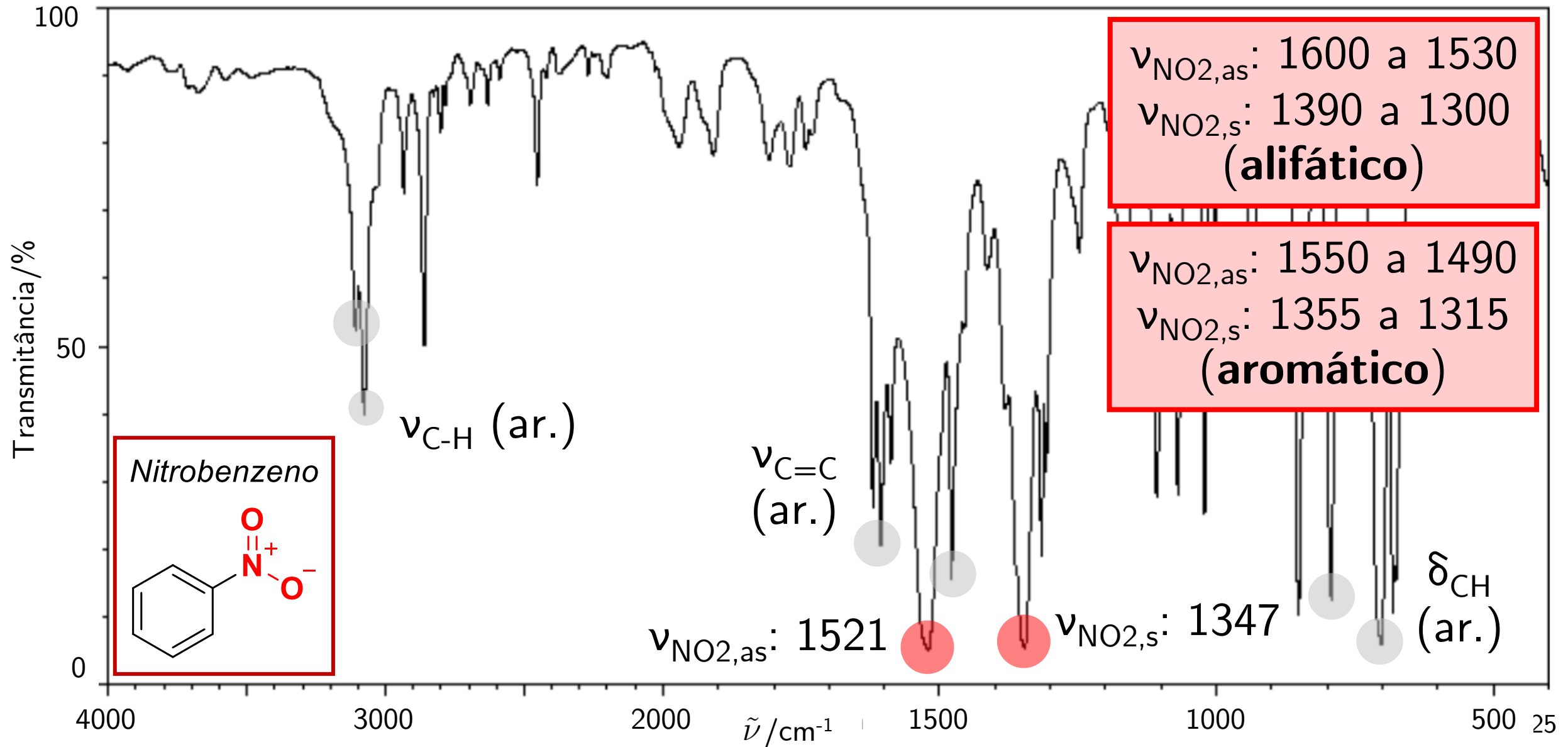
## 8. Espectro no IV de aminas



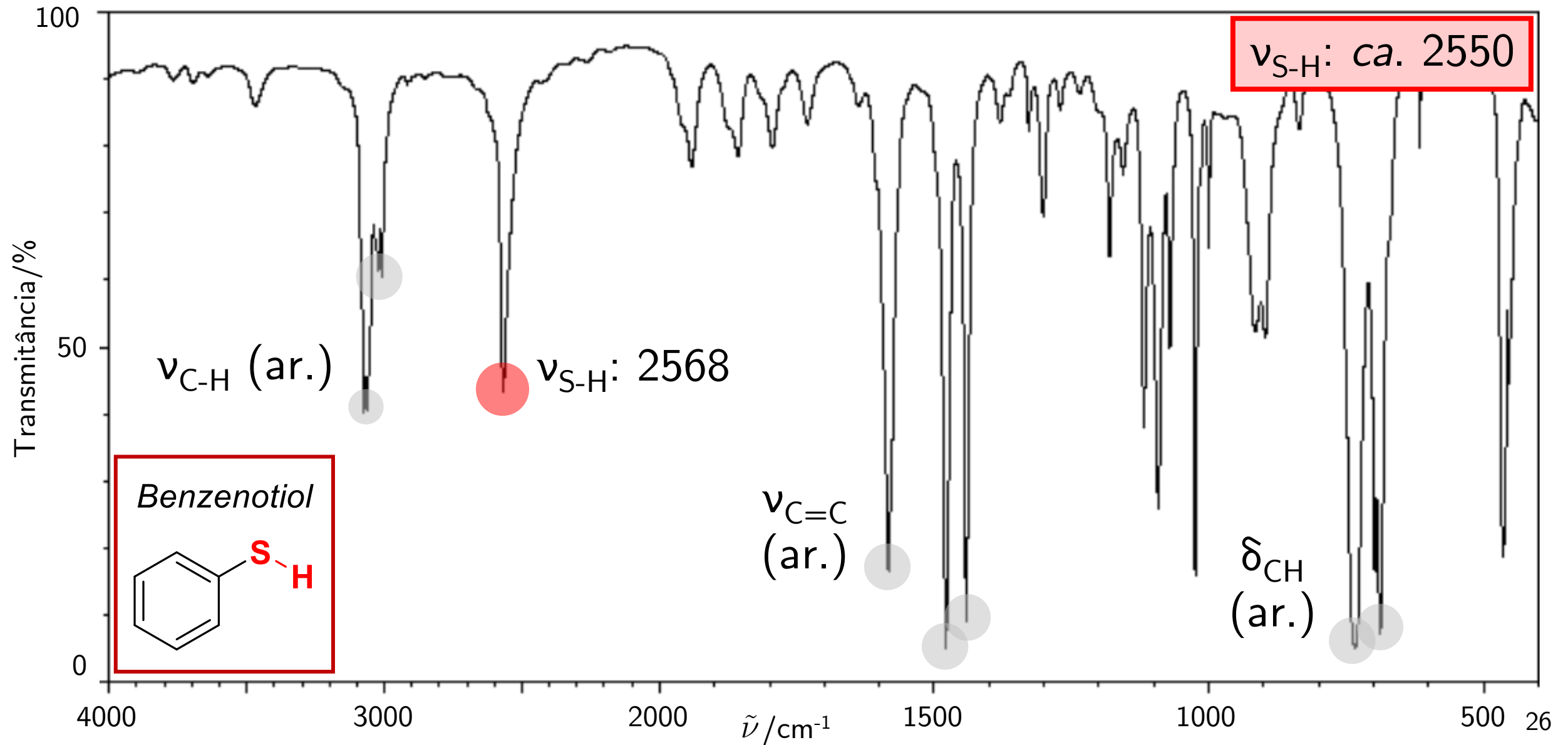
## 9. Espectro no IV de nitrilas



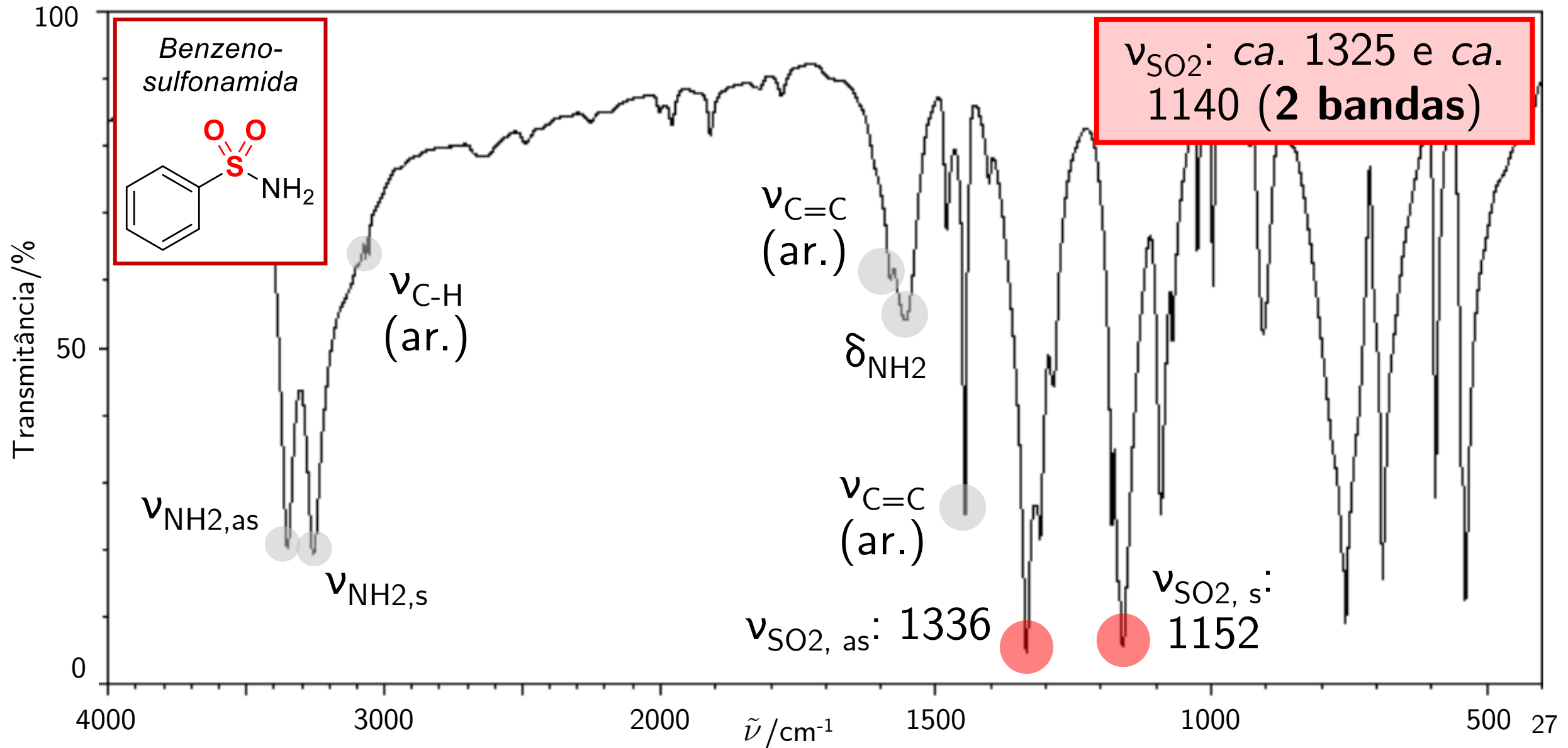
# 10. Espectro no IV de nitrocompostos



# 11. Espectro no IV de compostos sulfurados

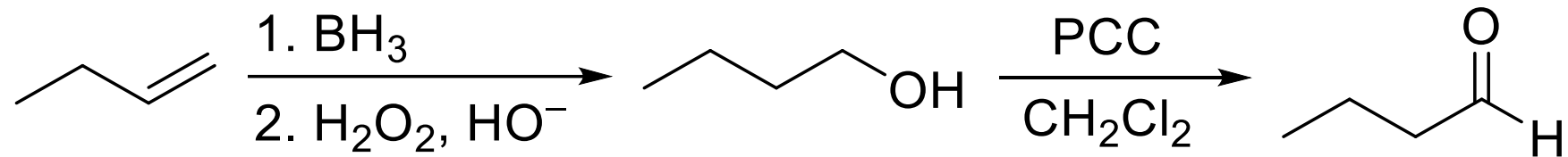


# 11. Espectro no IV de compostos sulfurados



# Exercícios

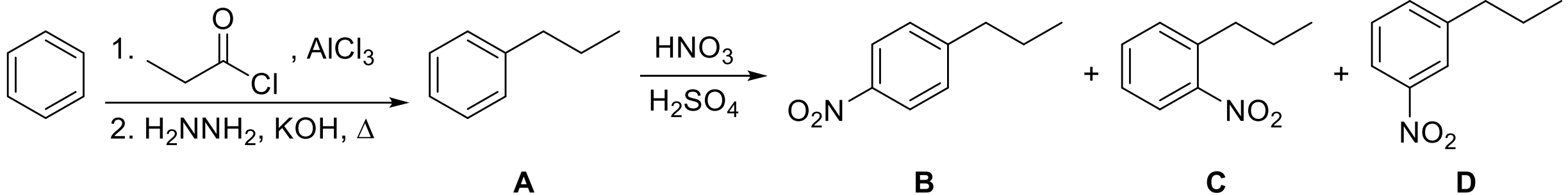
3. Considere as duas reações mostradas abaixo:



Quando a reação oxidação utilizando o PCC é feita na presença de água, o espectro obtido no infravermelho possui bandas com os seguintes  $\tilde{\nu}$  ( $\text{cm}^{-1}$ ): 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:

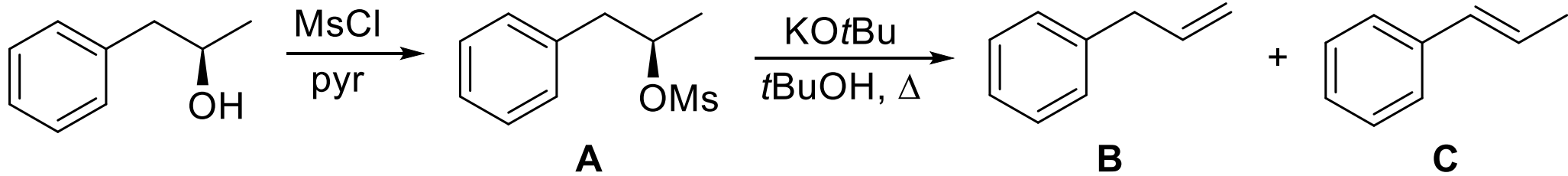


a. Quando as condições reacionais 1. e 2. são substituídas por cloreto de propila e  $\text{AlCl}_3$ , o espectro no IV resultante tem as bandas ( $\tilde{\nu}$ ,  $\text{cm}^{-1}$ ): 3133, 3086, 3019, 2960, 2930, 2870, 1509, 1460, 1382, 1363 e 829. Qual é o produto formado?

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

# Exercícios

5. Considere as duas reações mostradas abaixo:

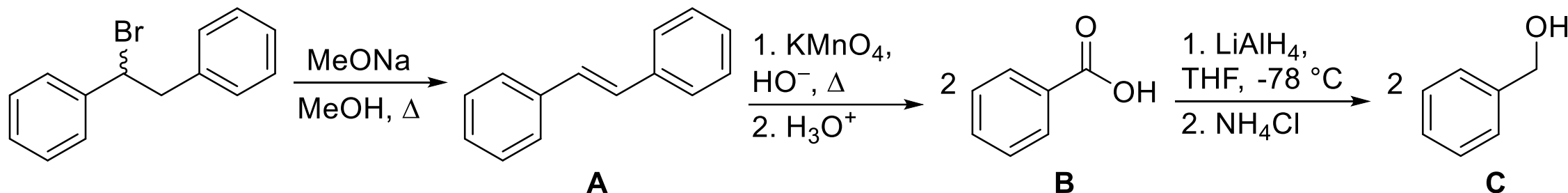


a. Qual(is) mudança(s) no espectro de infravermelho seria(m) capaz(es) de comprovar a proteção do álcool com o grupo mesilato em **A**?

b. O espectro da mistura reacional **B** + **C** possui as bandas ( $\tilde{\nu}$ ,  $\text{cm}^{-1}$ ): 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:

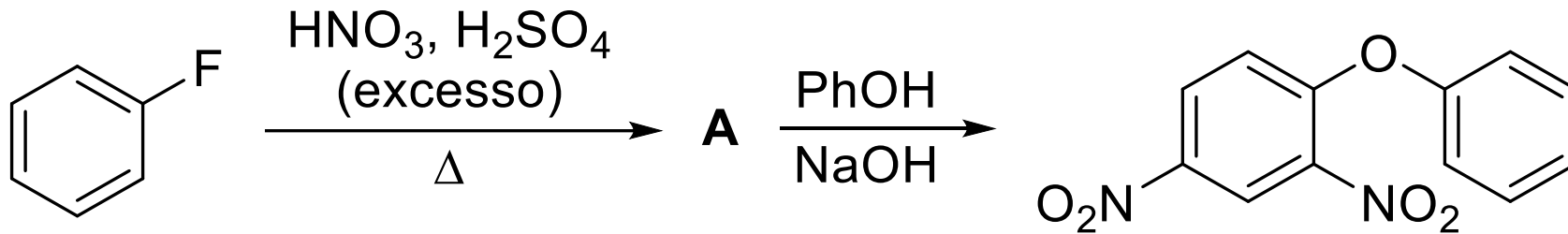


a. Durante a formação de **B**, caso  $\text{O}_3$  e dimetilsulfeto fossem utilizados ao invés de 1 e 2, o IV resultante teria as bandas ( $\tilde{\nu}$ ,  $\text{cm}^{-1}$ ): 3086, 3065, 3031, 2820, 2738, 1703, 1664, 1456, 1391, 746 e 688. Qual produto seria formado nesse caso?

b. Caso  $\text{NaBH}_4$  fosse usado na formação de **C** ao invés de 1 e 2, o espectro no IV resultante teria as bandas ( $\tilde{\nu}$ ,  $\text{cm}^{-1}$ ): 3642, 3071, 3030, 2886, 1696, 1608, 1452, 1319 e 1288 (bandas 3642 a 2886 são br). Qual produto é formado?

# Exercícios

7. Considere as duas reações abaixo:

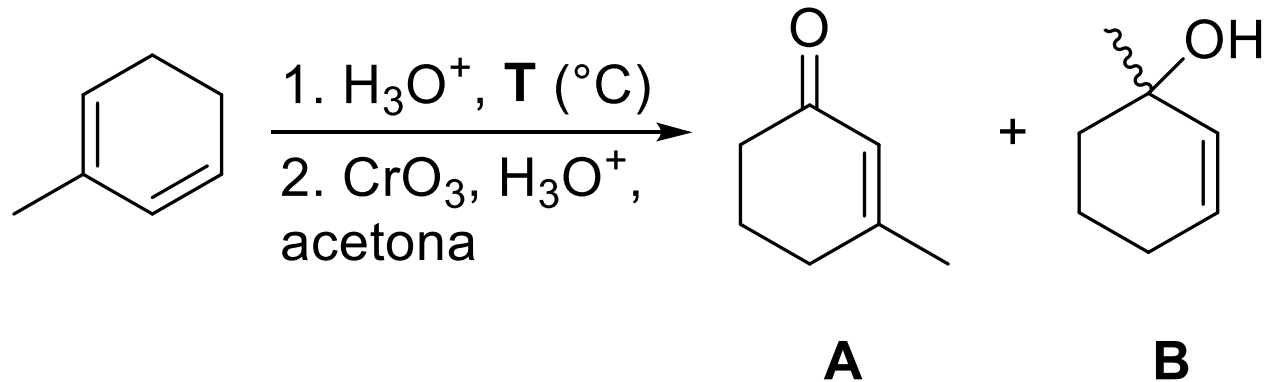


a. O espectro no infravermelho do composto **A** revelou as bandas ( $\tilde{\nu}$ ,  $\text{cm}^{-1}$ ): 3119, 3091, 1616, 1544, 1488, 1349, 741, 709. Qual é o produto formado? Considere que a reação usou excesso considerável de reagentes e foi feita à  $200\text{ }^\circ\text{C}$ .

b. Quais outras transformações no fluorobenzeno resultariam em um padrão de reatividade similar ao observado na formação do 1-fenoxi-2,4-dinitrobenzeno na presença de fenol e  $\text{NaOH}$ ?

# Exercícios

8. Considere o seguinte conjunto de reações:



a. Quando  $\text{T} = 150 ^{\circ}\text{C}$ , o espectro no IV apresenta as bandas ( $\tilde{\nu}$ ,  $\text{cm}^{-1}$ ): 3031, 2941, 2869, 1667, 1632, 1429, 1379, 1324, 1249, 1193, 808. Qual produto é formado? Por quê?

b. Quais condições reacionais poderiam favorecer a formação de **B**? Quais as principais mudanças no espectro do IV capazes de diferenciar entre **A** e **B**?