

Módulo 2: Espectroscopia na Região do Infravermelho

Análise de espectros



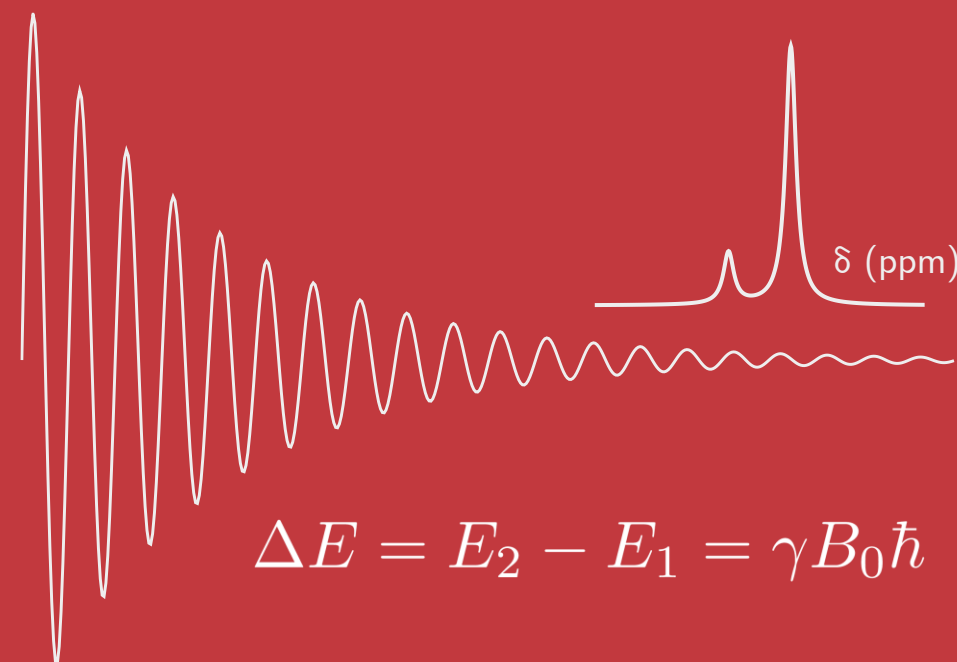
Universidade Federal
de São João del-Rei

Lucas Raposo Carvalho

E-mail: lraposo@ufsj.edu.br

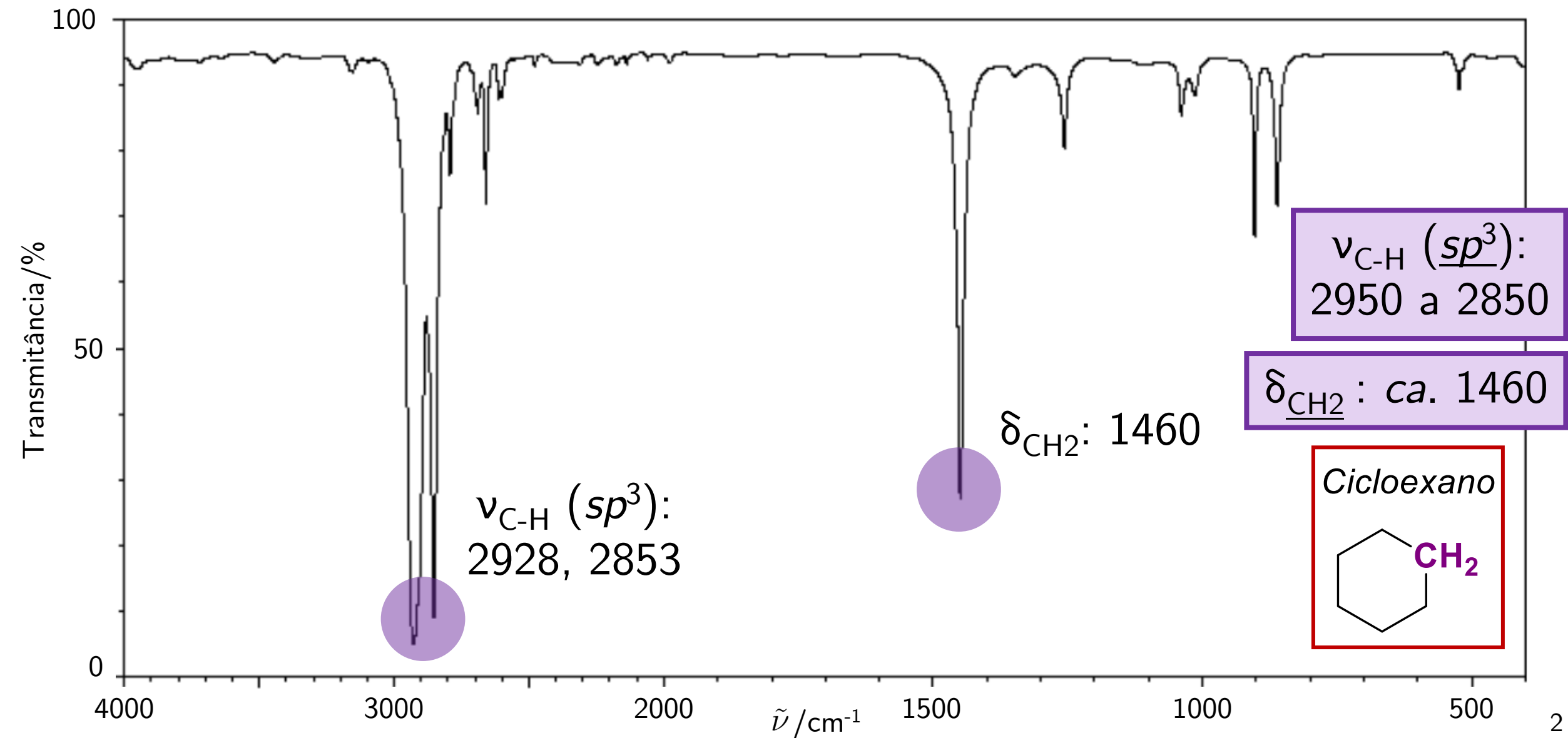
Departamento de Ciências Naturais – DCNAT

Química Orgânica III, 2026.1

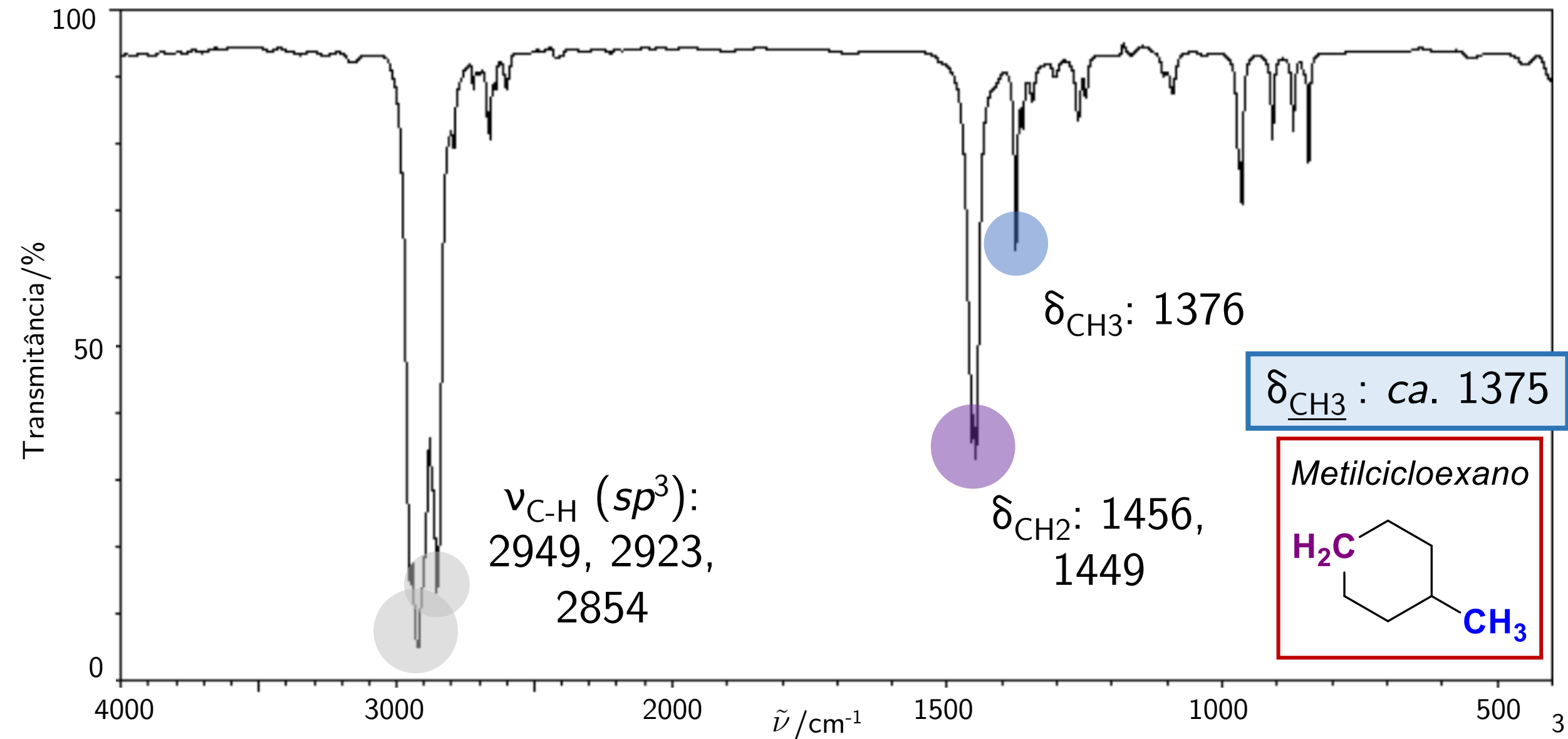


$$\Delta E = E_2 - E_1 = \gamma B_0 \hbar$$

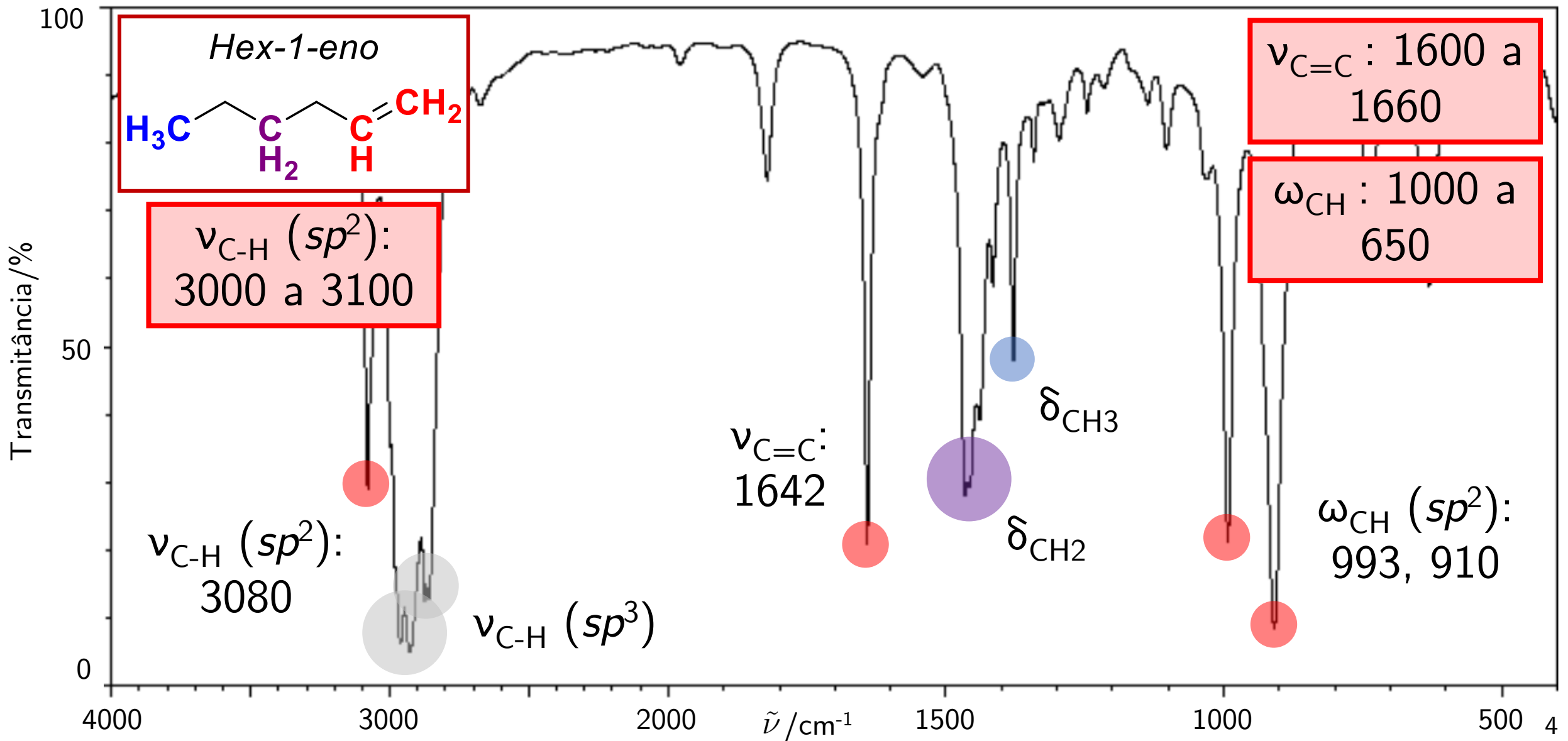
1. Espectro no IV de alcanos



1. Espectro no IV de alcanos

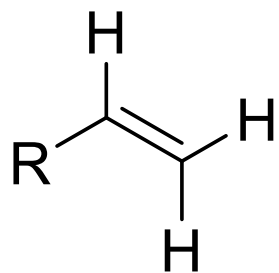


2. Espectro no IV de alcenos

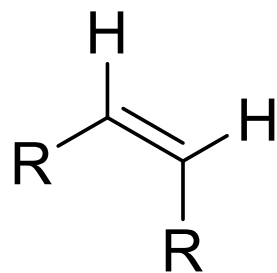


2. Espectro no IV de alcenos

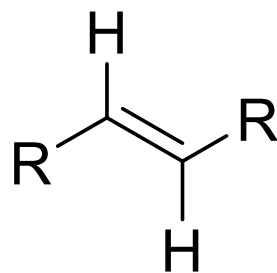
Padrão de substituição da C=C – ω_{CH} (fora do plano, oop)



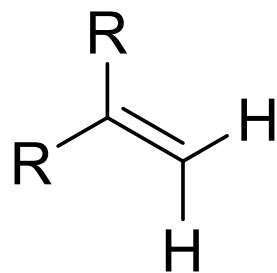
Vinil



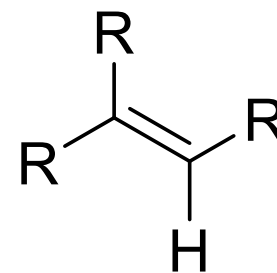
cis



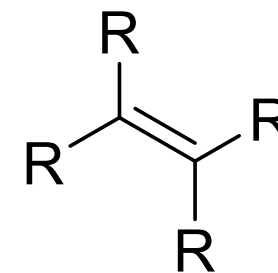
trans



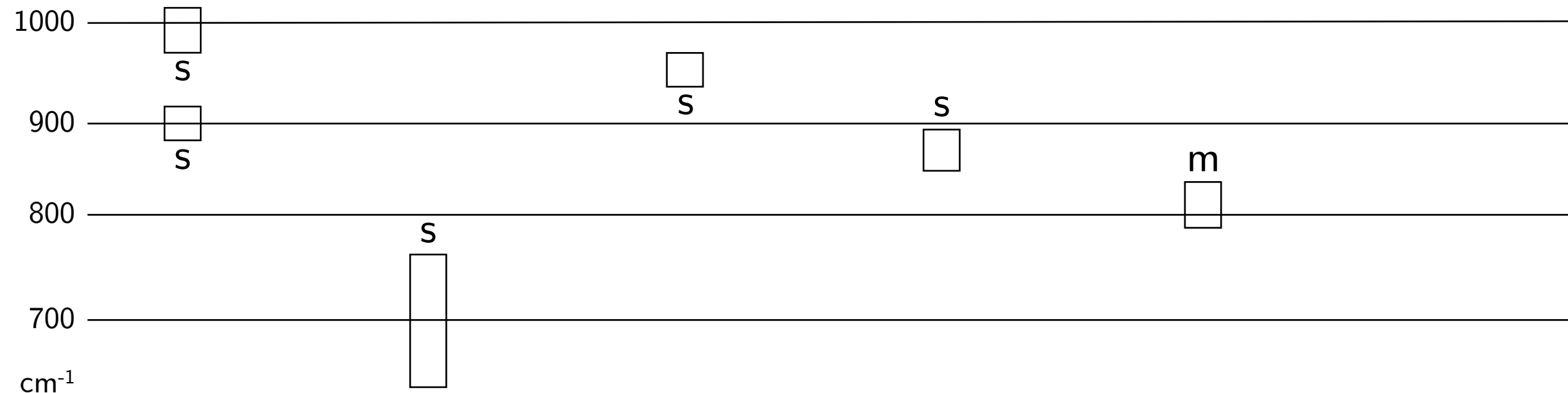
gem



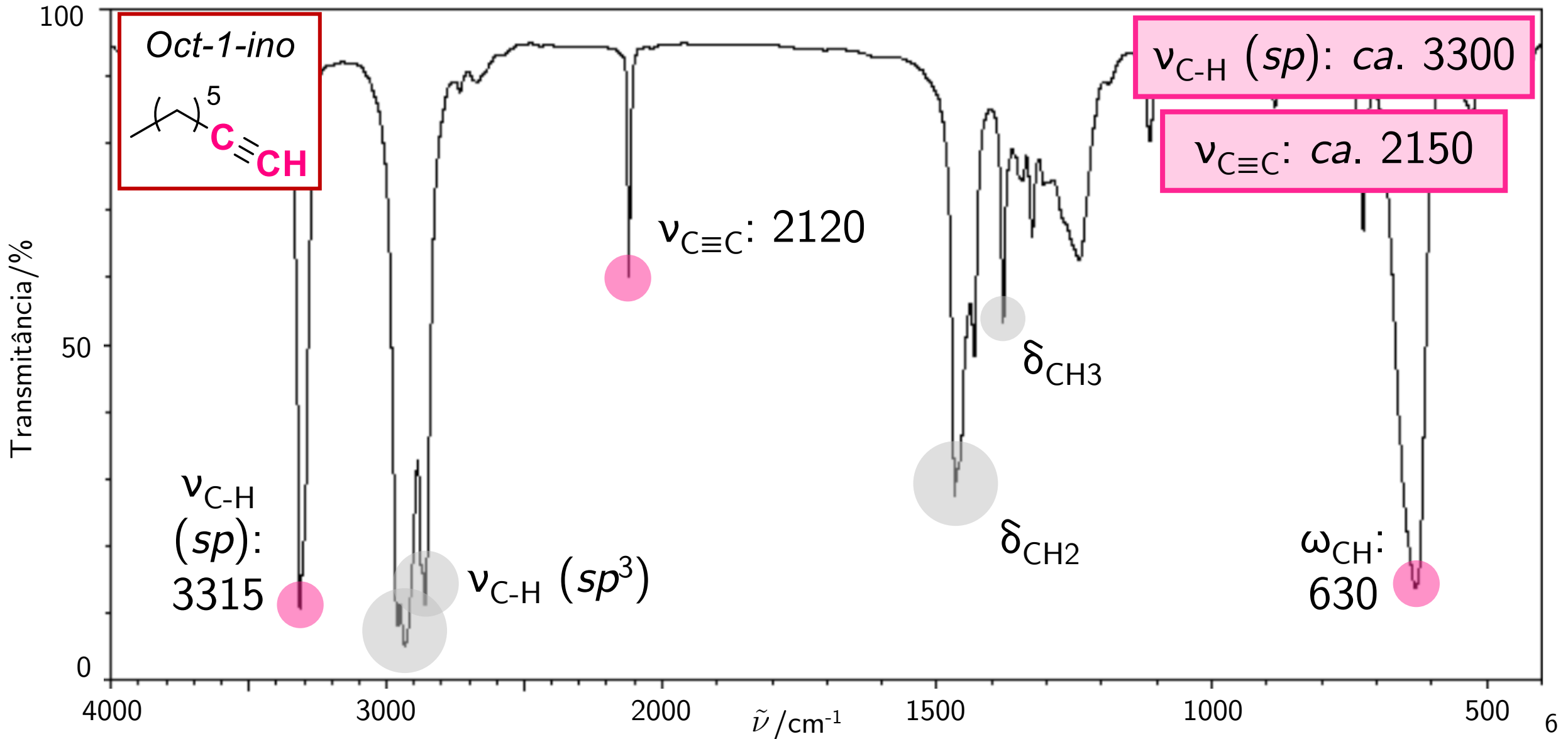
Trisubs.



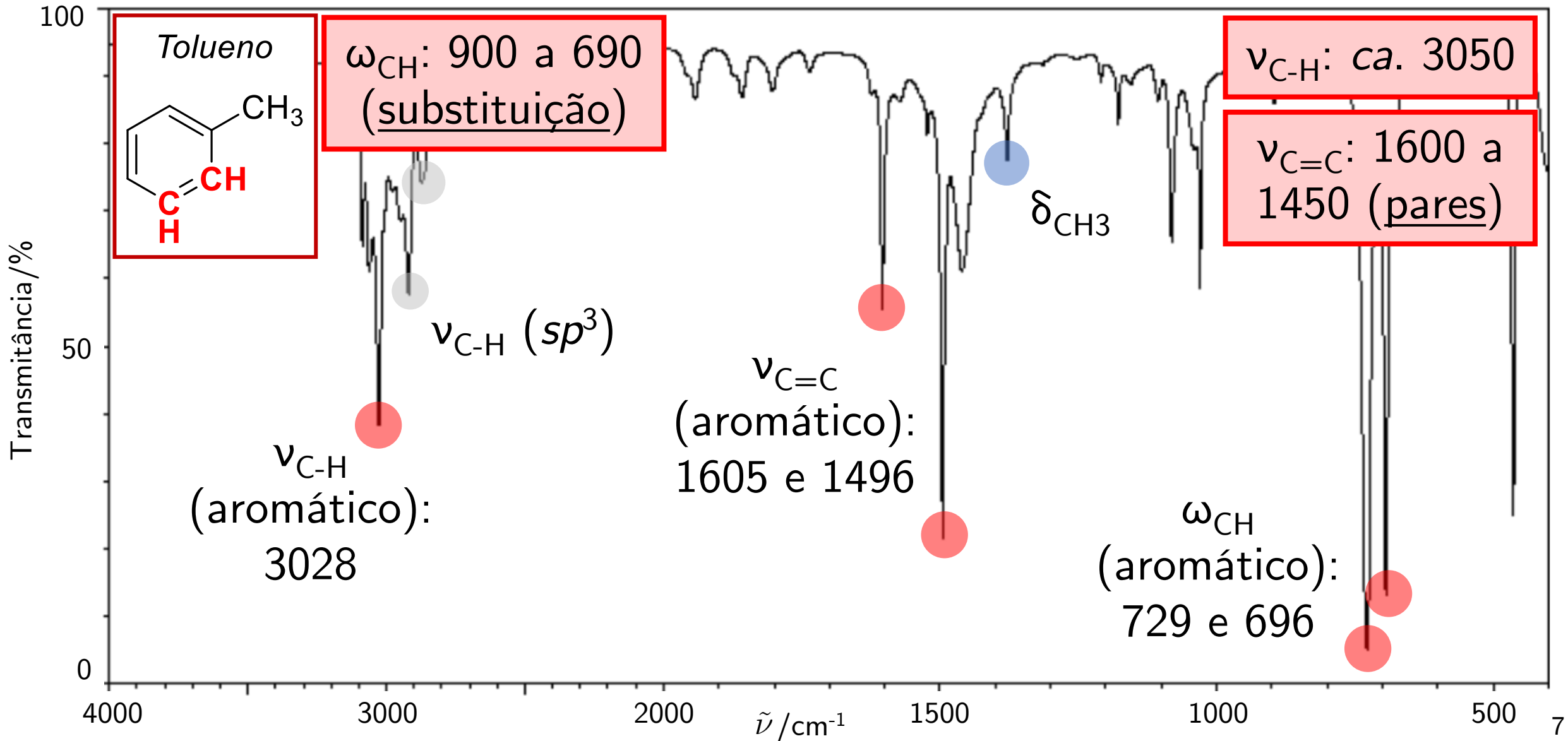
Tetrasubs.



3. Espectro no IV de alcinos

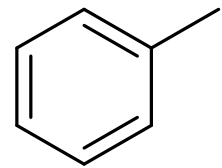


4. Espectro no IV de aromáticos

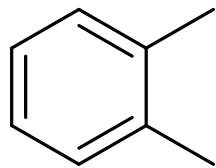


4. Espectro no IV de aromáticos

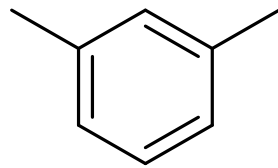
Padrão de substituição do anel – ω_{CH} (fora do plano, oop)



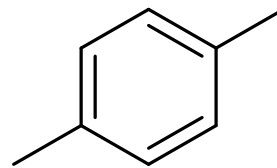
Mono



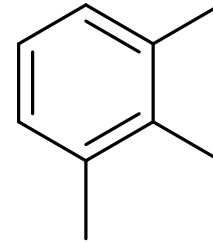
1,2 (*o*)



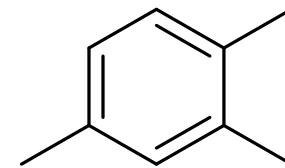
1,3 (*m*)



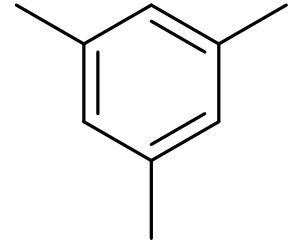
1,4 (*p*)



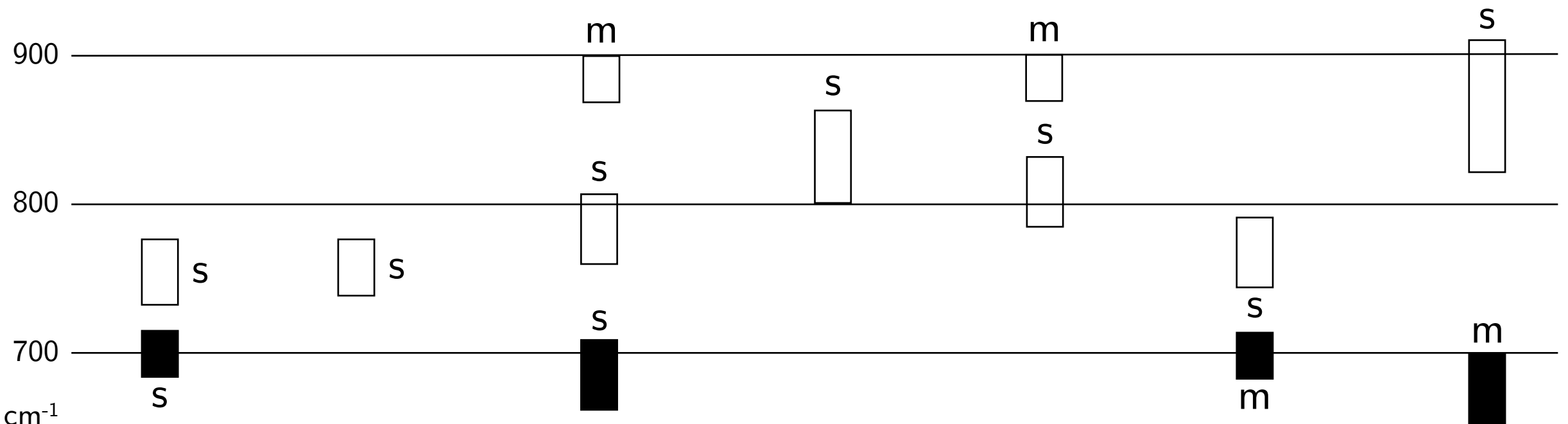
1,2,3



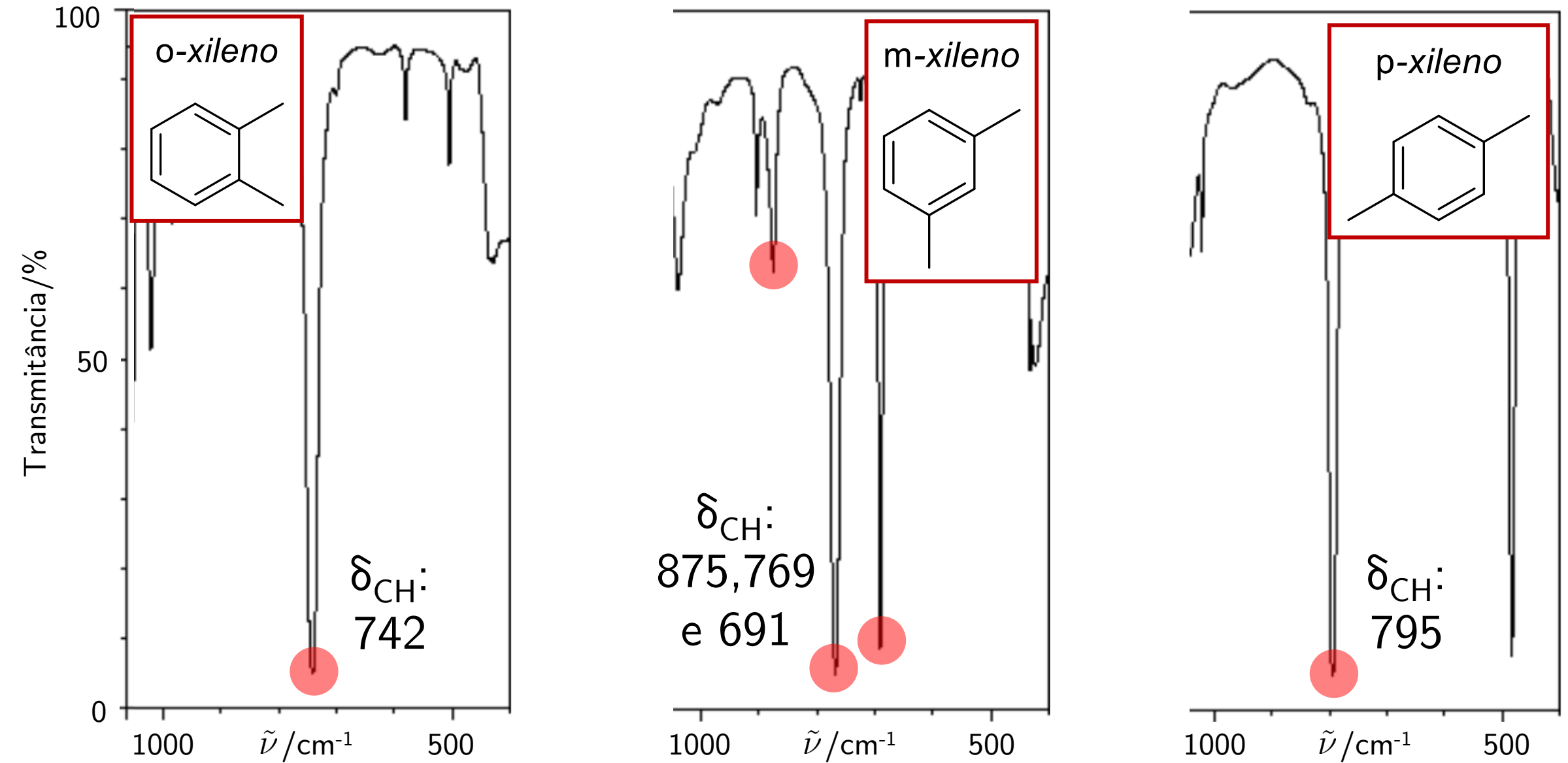
1,2,4



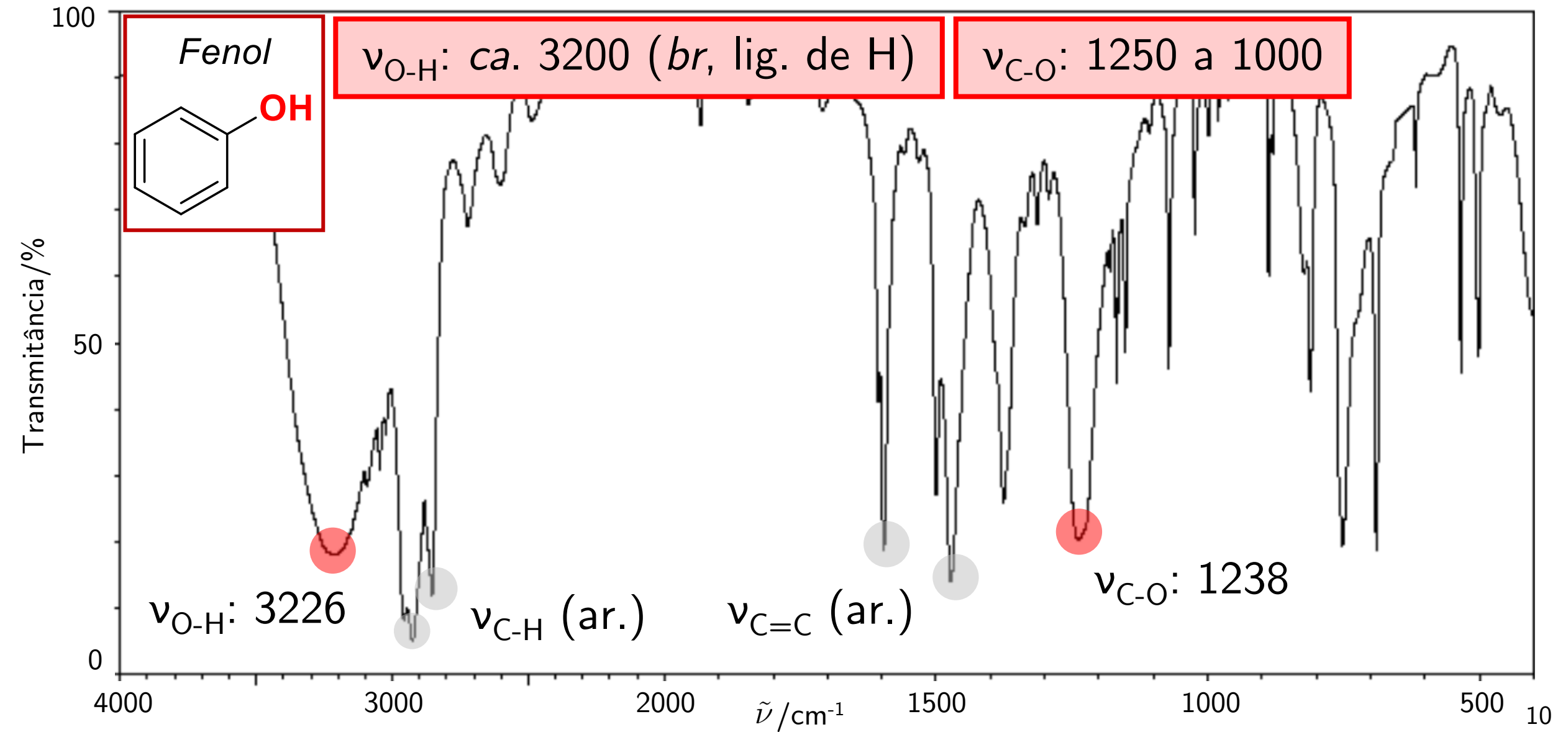
1,3,5



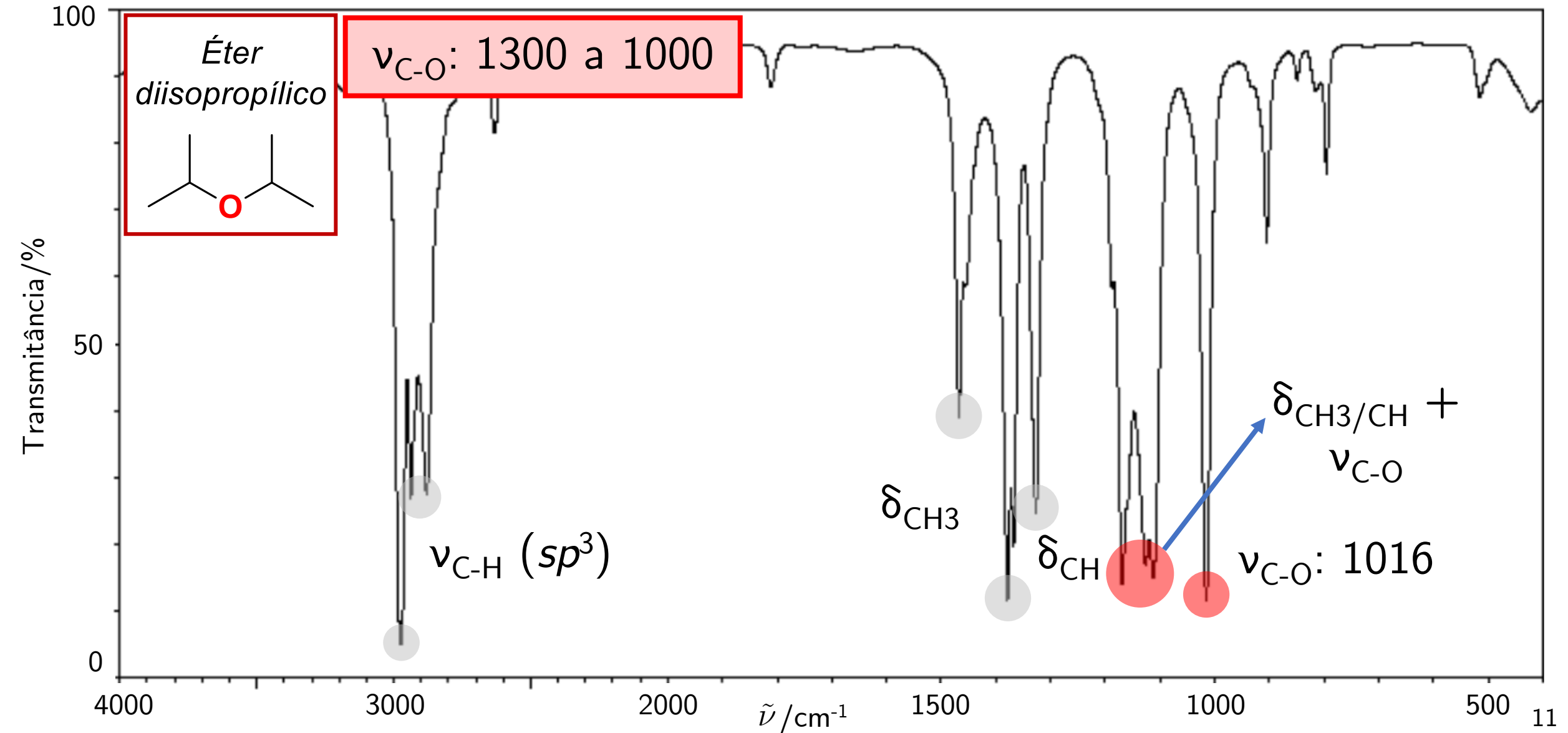
4. Espectro no IV de aromáticos



5. Espectro no IV de álcoois e fenóis

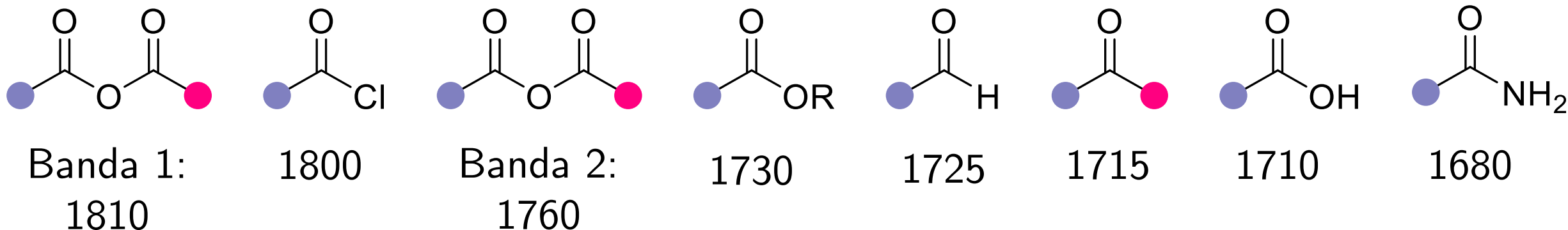


6. Espectro no IV de éteres



7. Espectro no IV de compostos carbonílicos

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



← cm⁻¹

Efeito **indutivo**
na carbonila

Conjugação e
caráter de
ligação

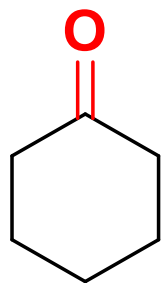
**Ligação de
hidrogênio**

7. Espectro no IV de compostos carbonílicos

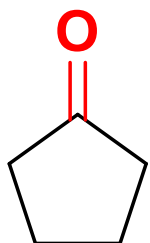
Fatores que afetam a frequência de $\nu_{C=O}$

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**;

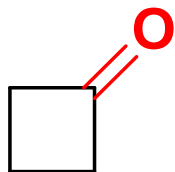
2. **Tamanho de anel:** Tensão de anel provoca um efeito **hipsocrômico**;



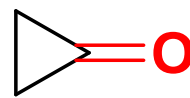
1715
 cm^{-1}



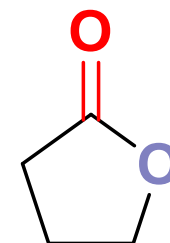
1745
 cm^{-1}



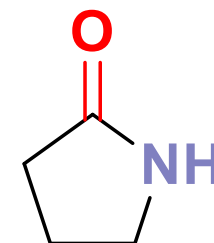
1780
 cm^{-1}



1815
 cm^{-1}



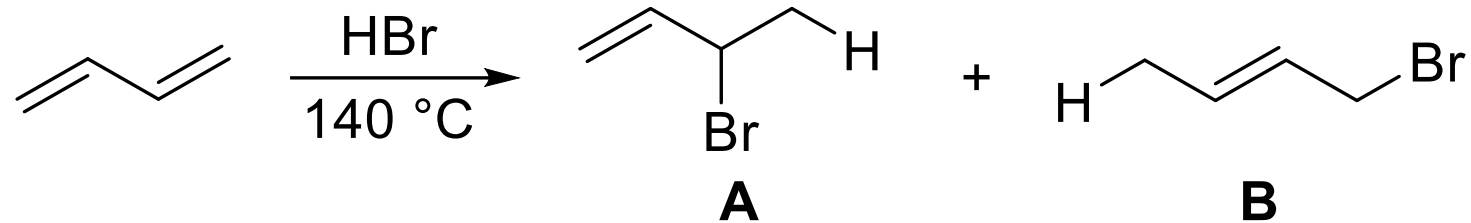
1770
 cm^{-1}



1705
 cm^{-1}

Exercícios

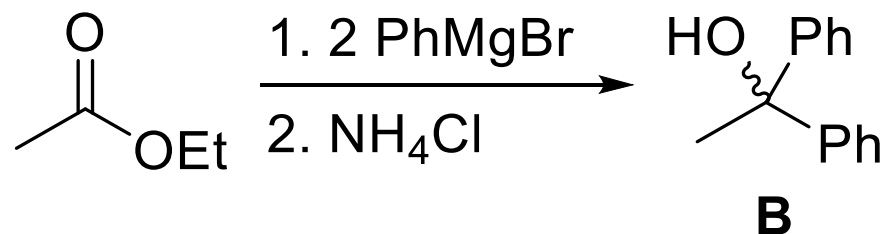
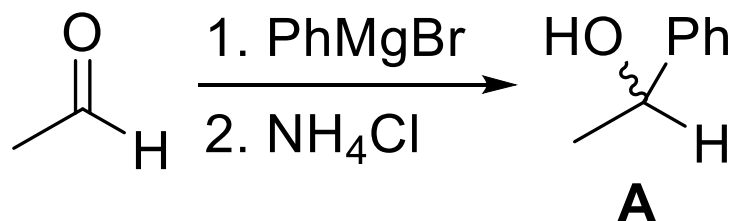
1. Considere a reação abaixo:



- a. O espectro no infravermelho da mistura dos produtos **A** e **B** mostrou bandas com os seguintes números de onda (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

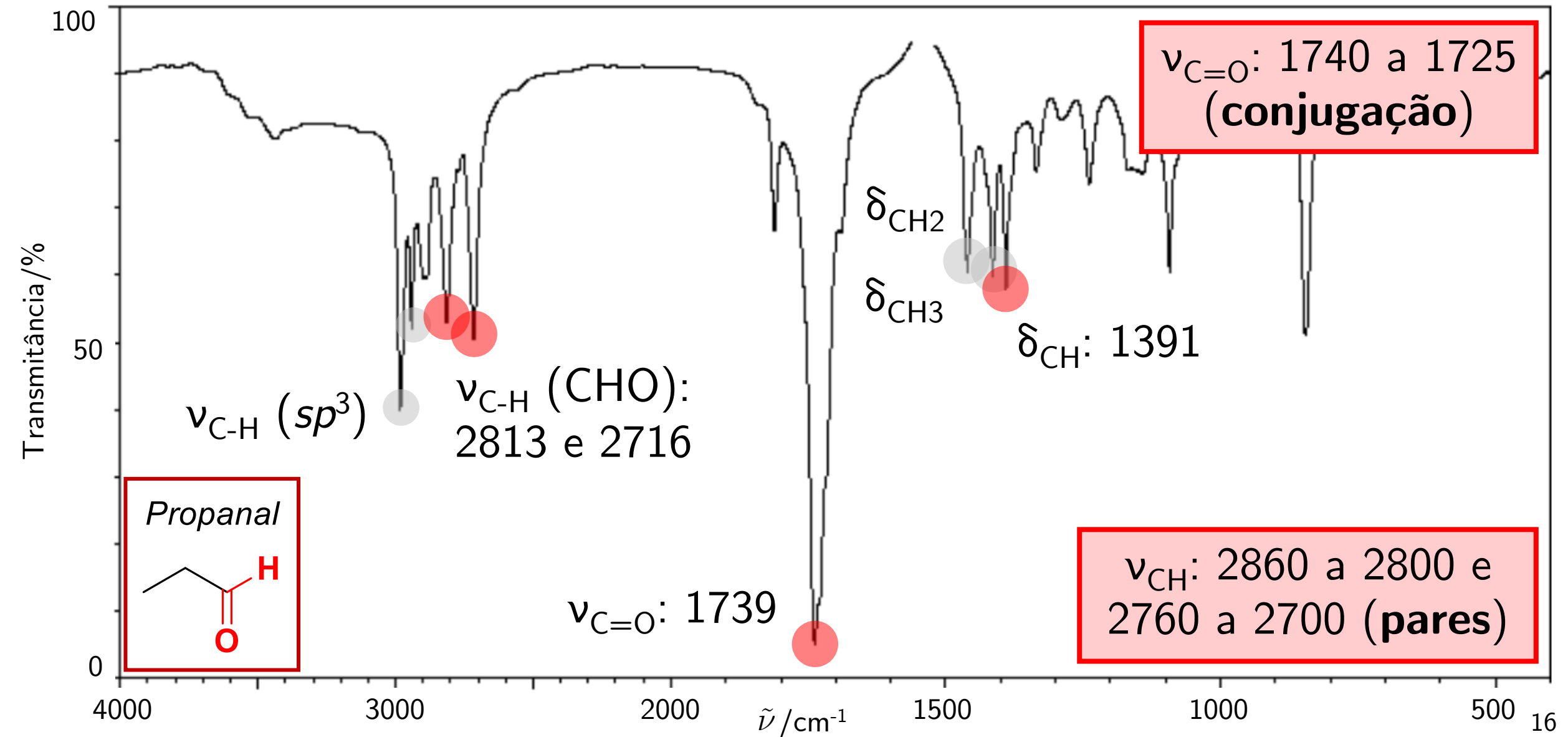
2. Considere o seguinte par de reações:



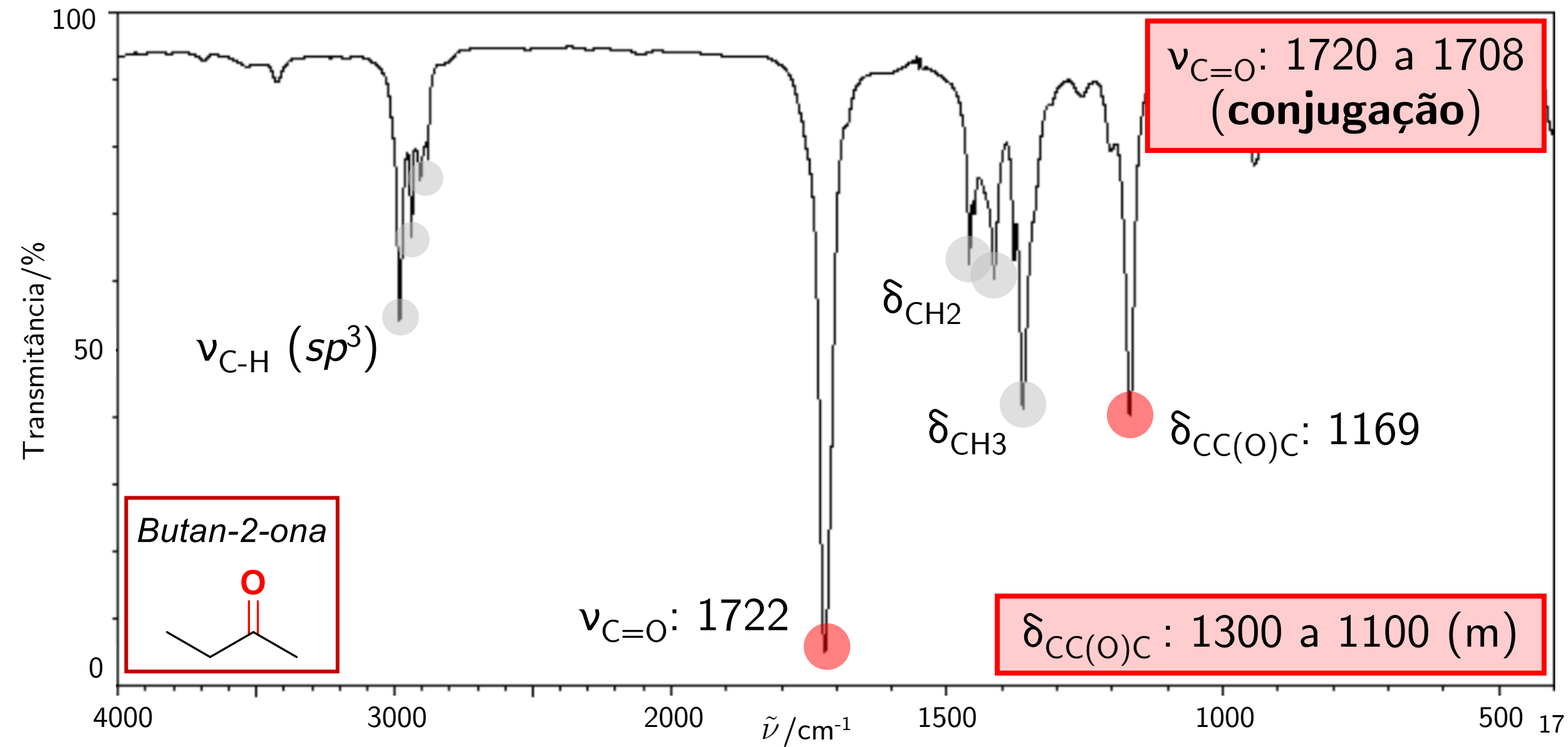
a. Para a formação de **A**, quando se substitui o NH_4Cl por H_2SO_4 concentrado e aquecimento, observa-se que o espectro no IV do produto resultante possui bandas com $\tilde{\nu}$ (cm^{-1}): 3082, 3060, 3027, 1630, 1601, 1496, 992, 909, 777 e 698. Qual o produto obtido para essa reação após a mudança 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?

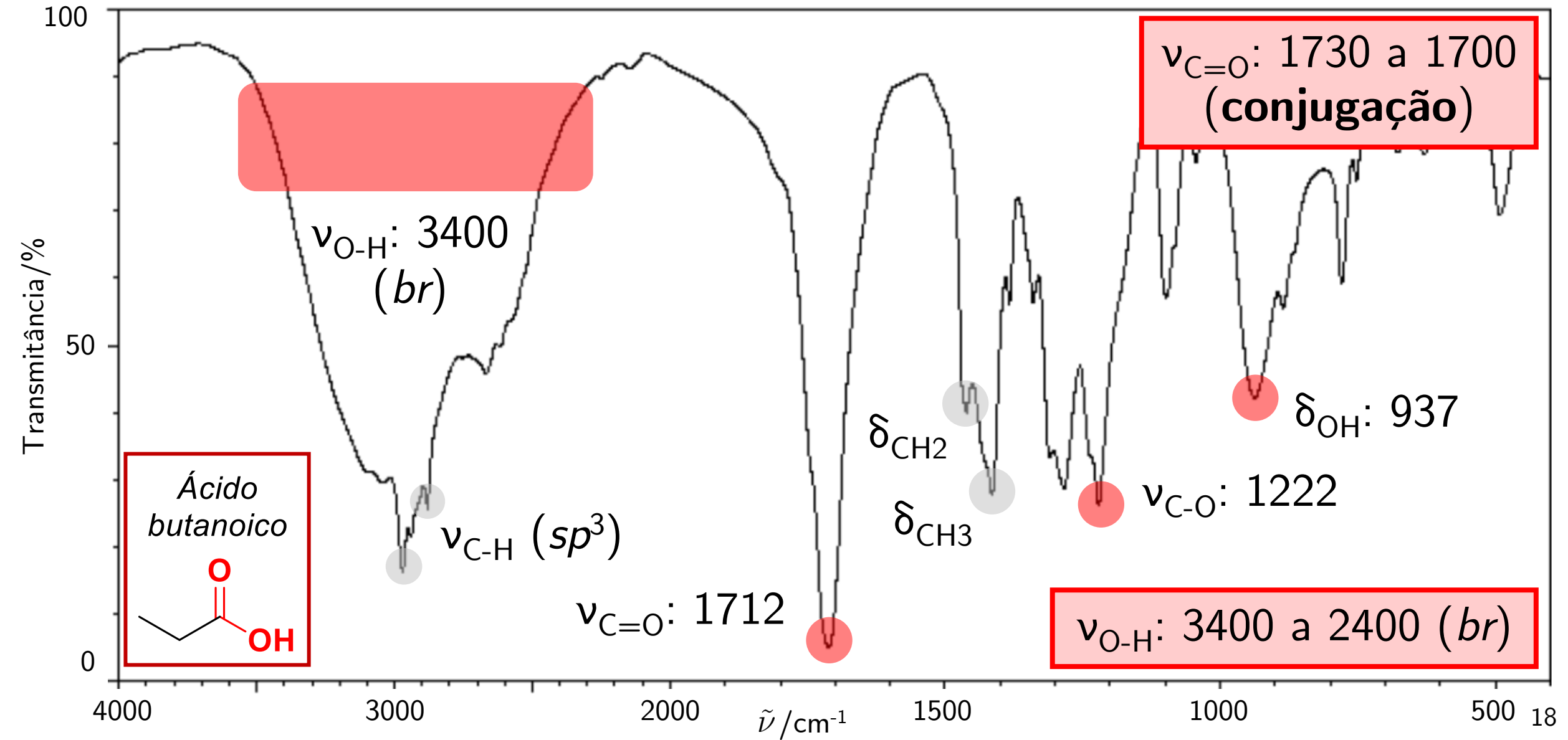
7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



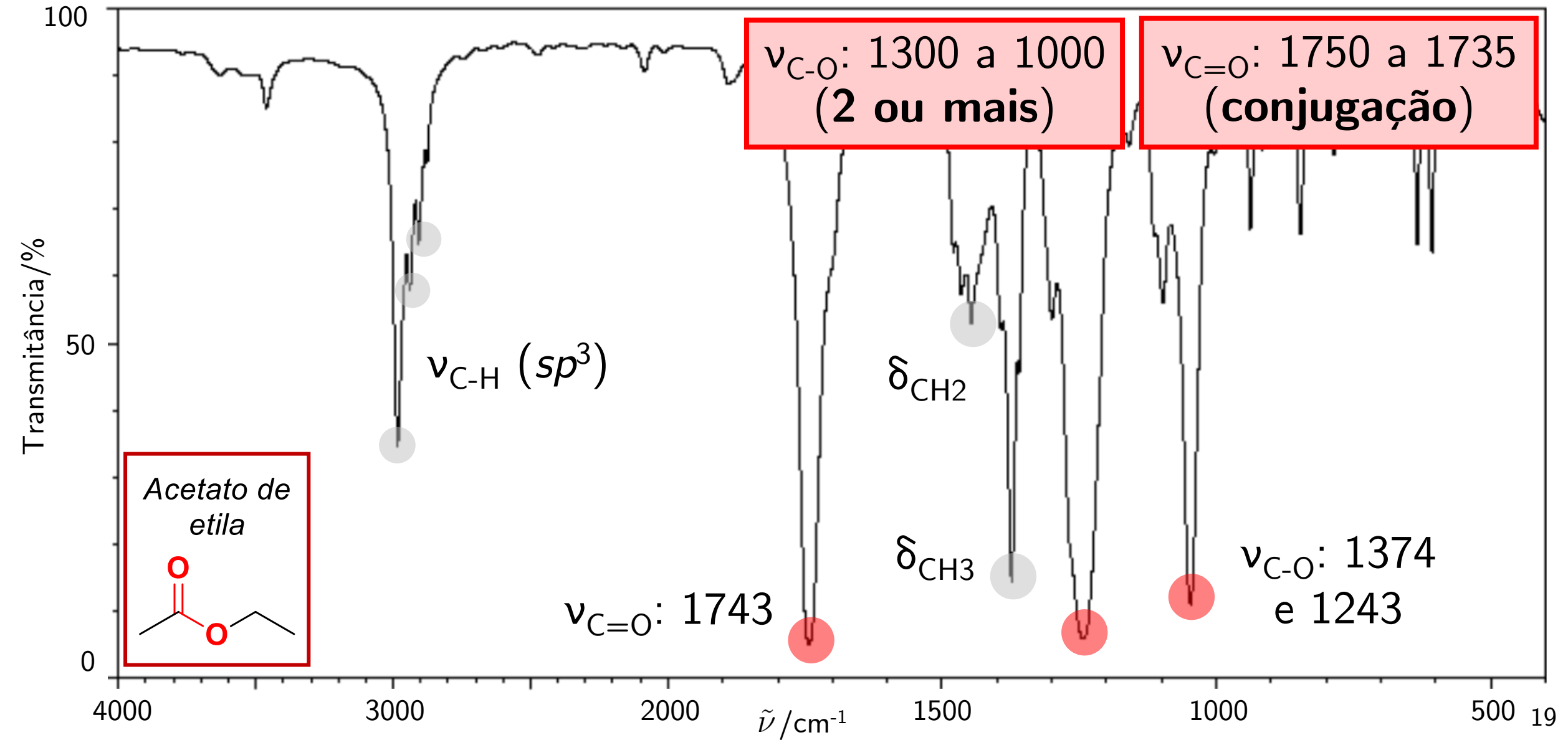
7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



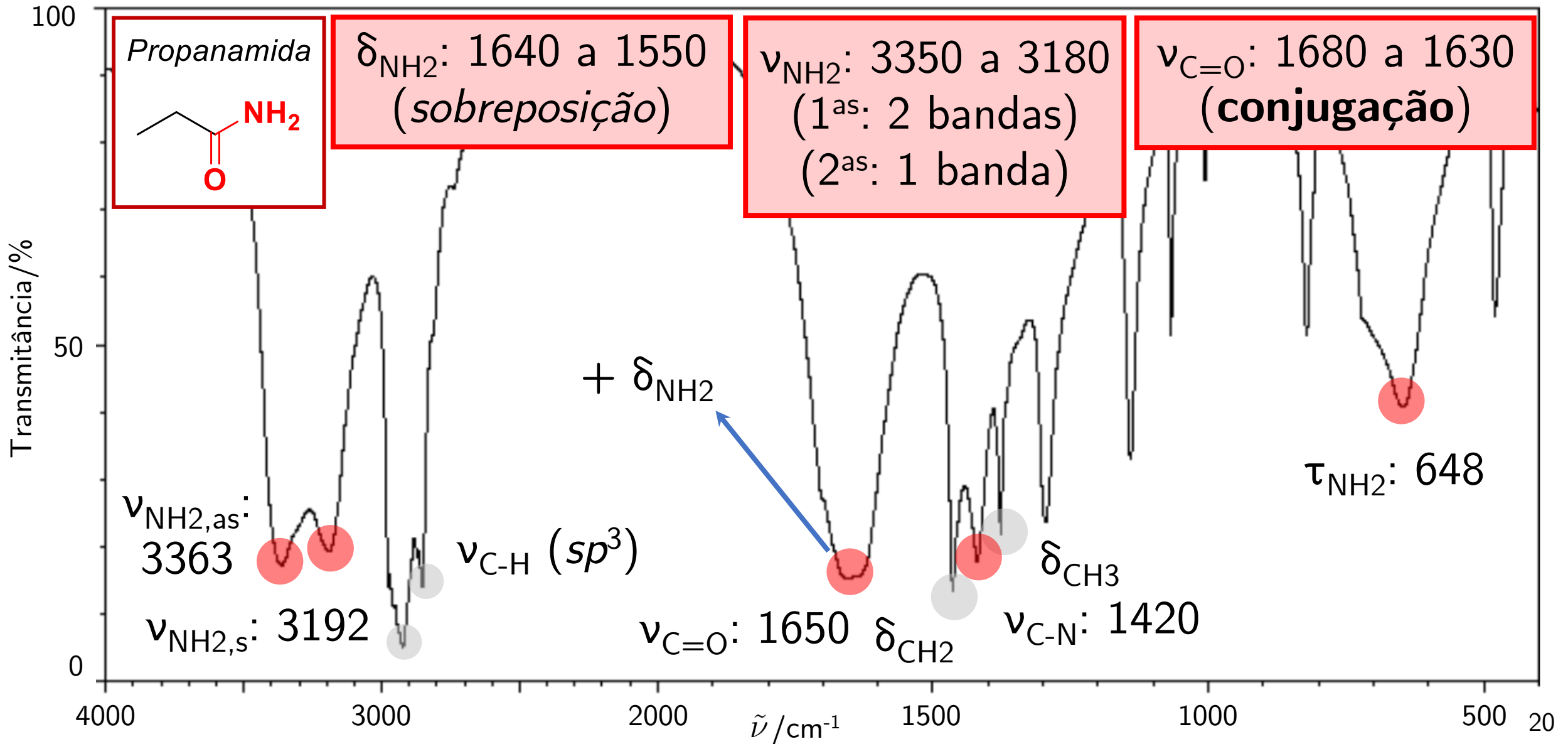
7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



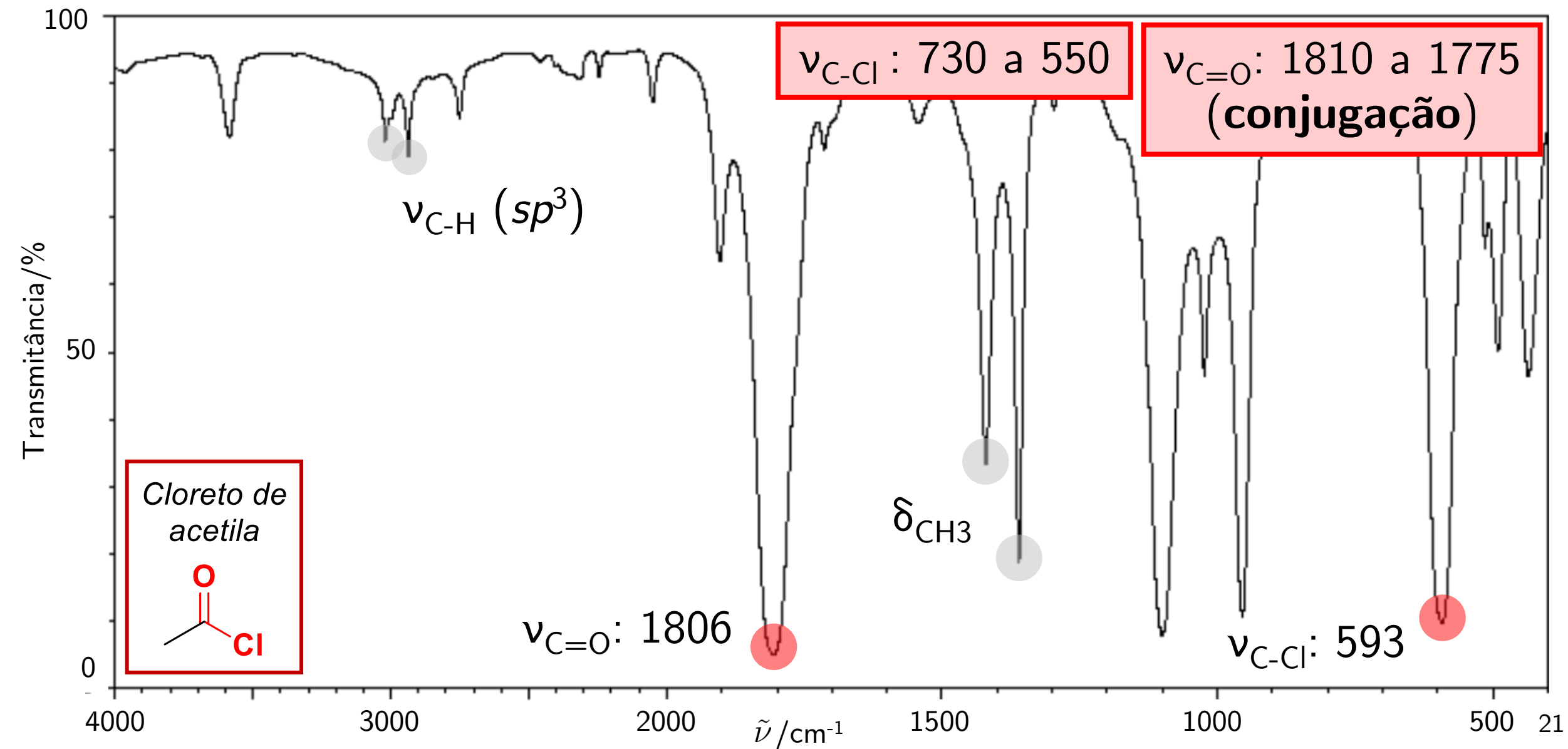
7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



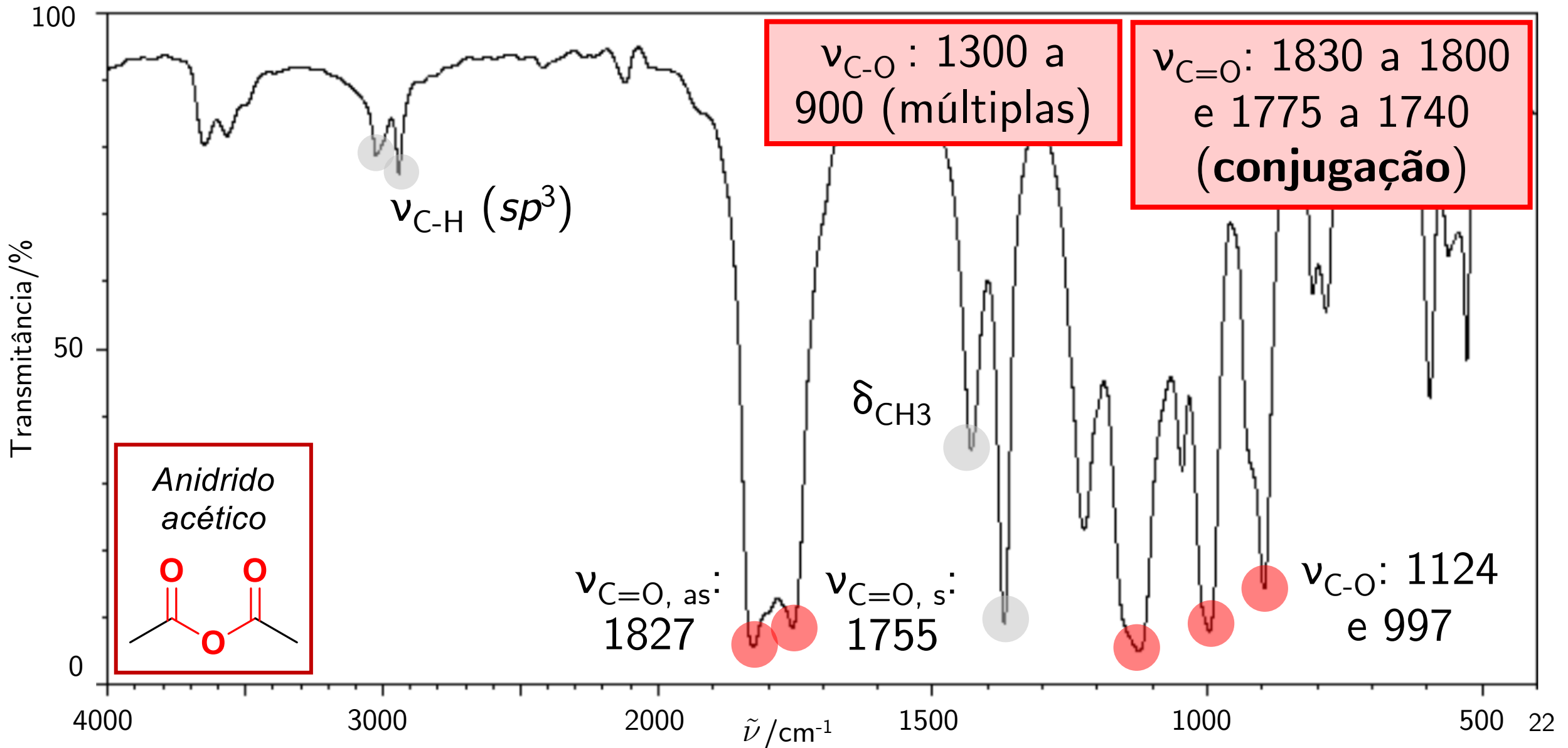
7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



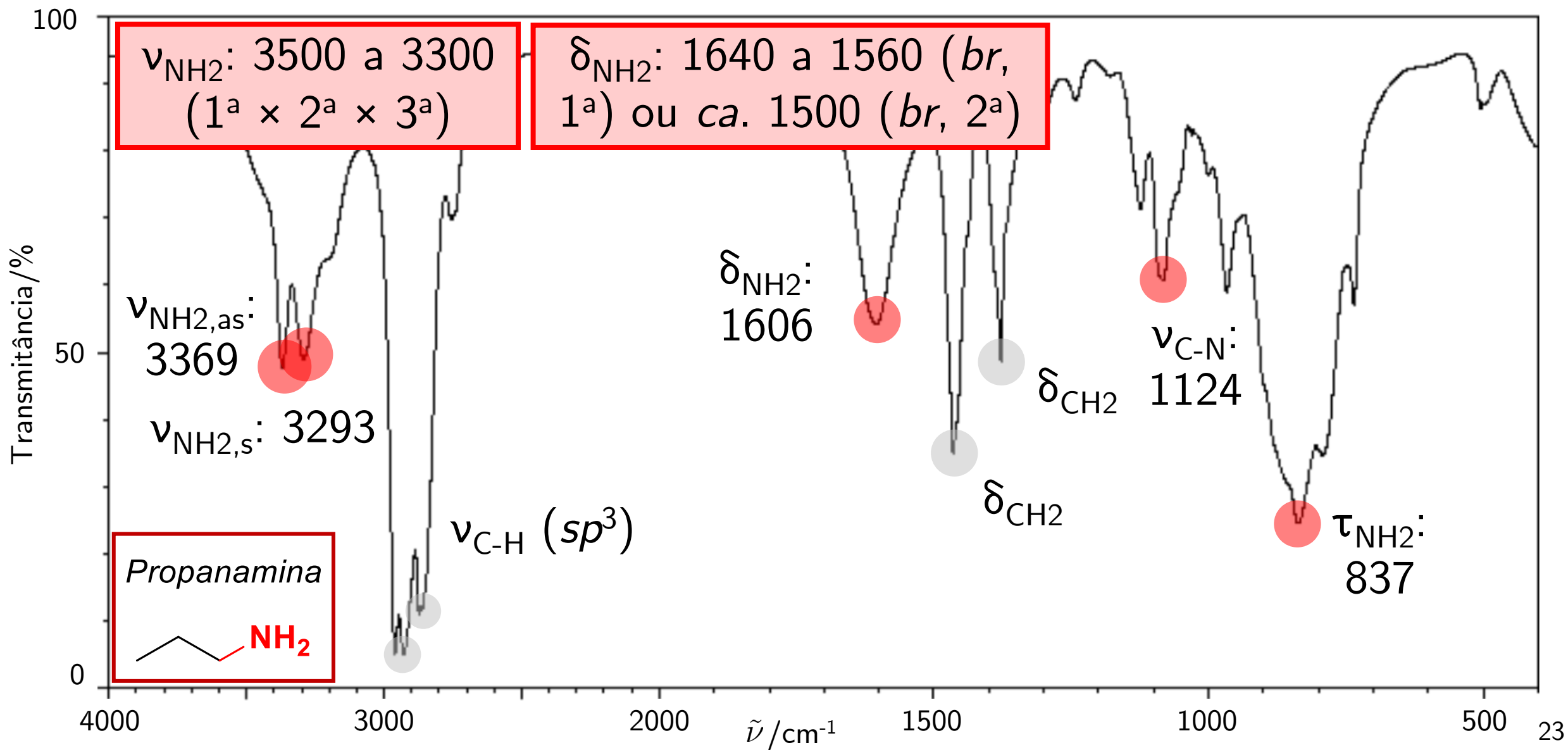
7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



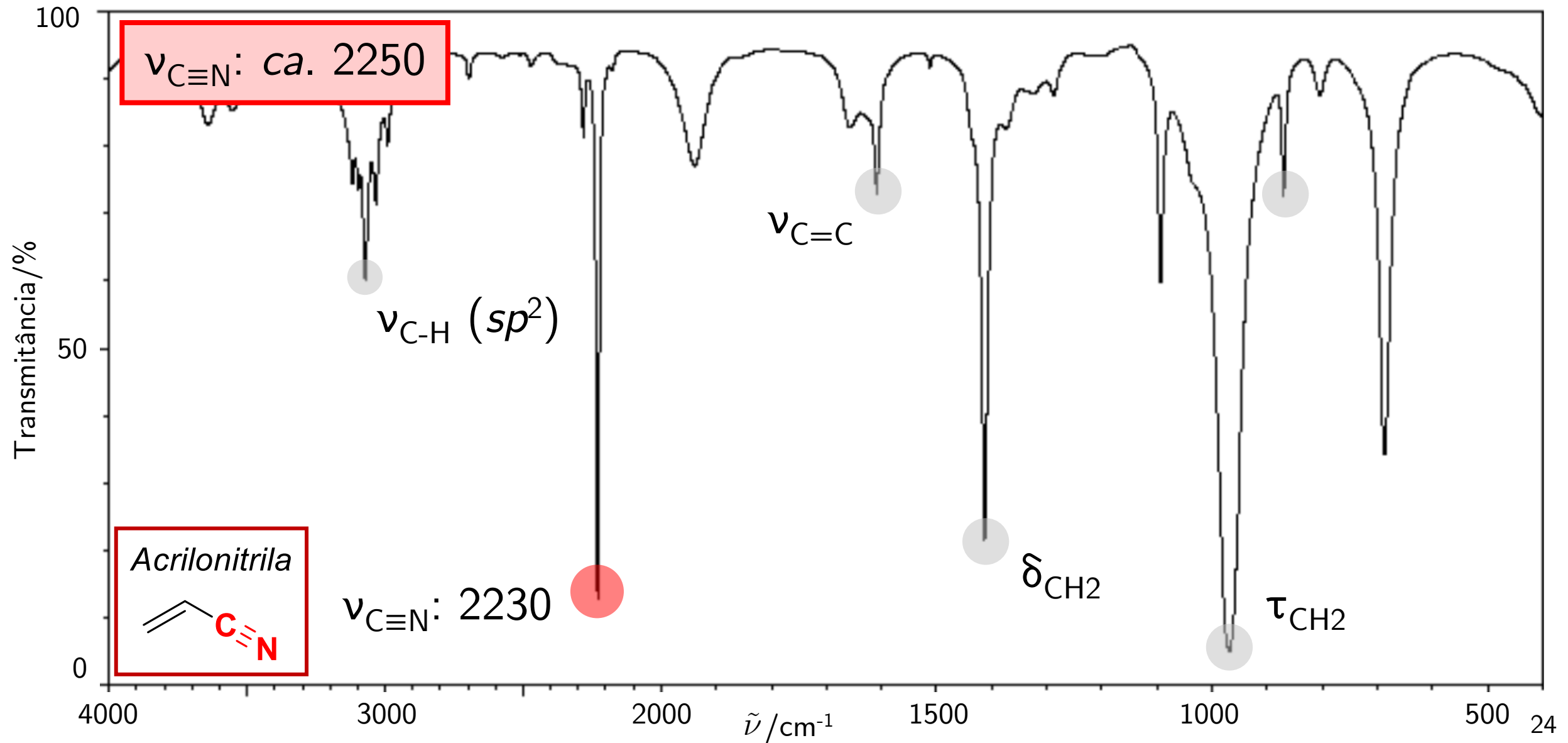
7. Espectro no IV de compostos carbonílicos



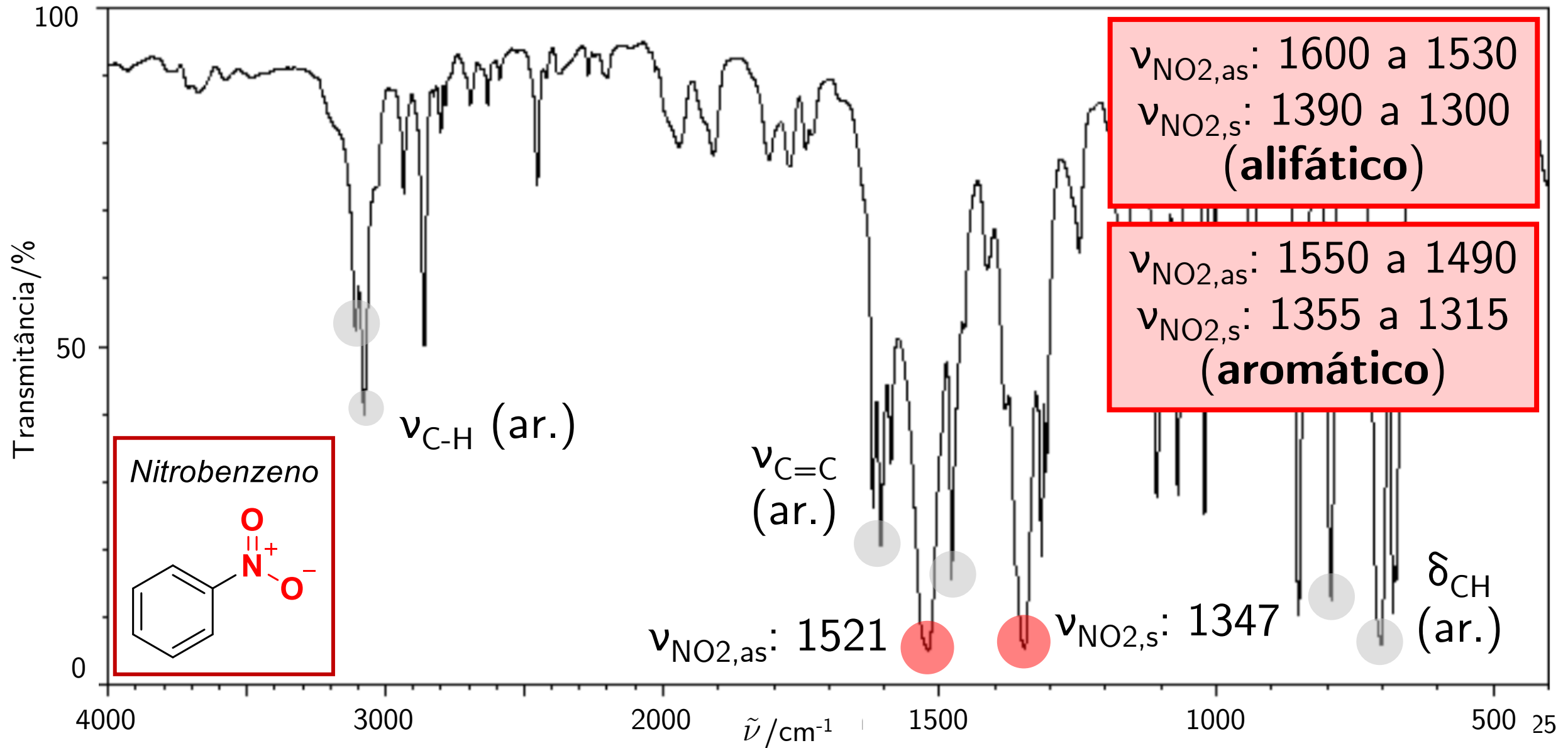
8. Espectro no IV de aminas



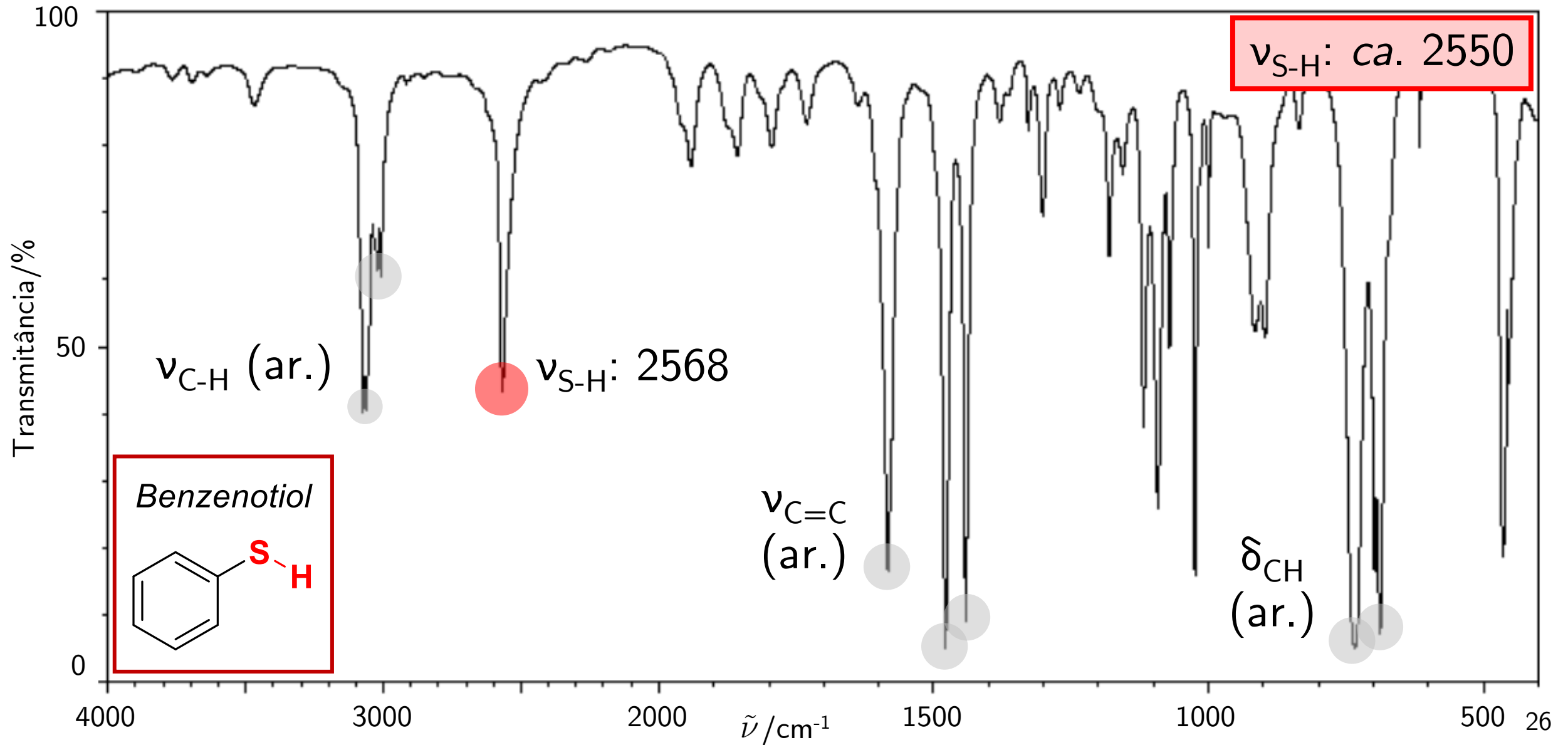
9. Espectro no IV de nitrilas



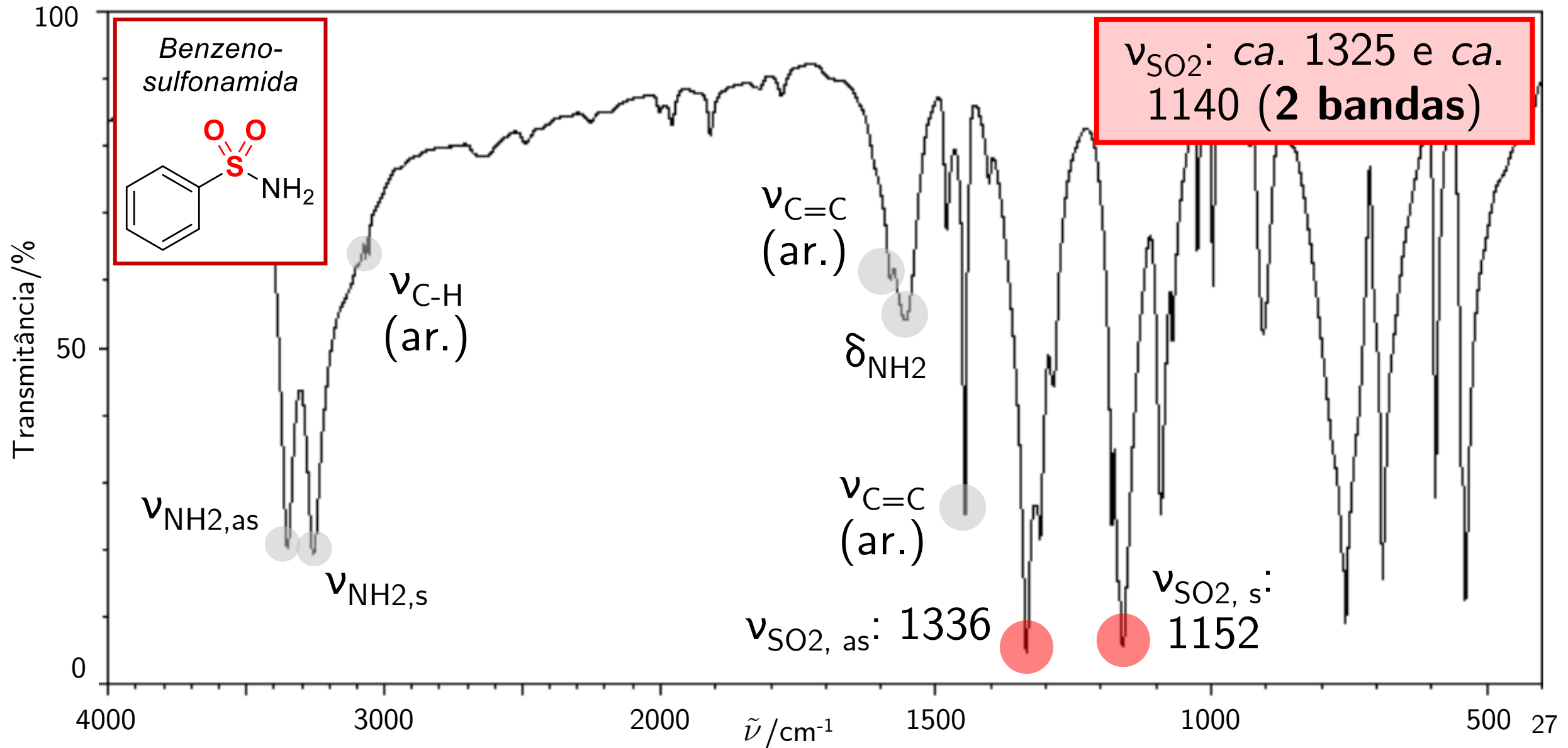
10. Espectro no IV de nitrocompostos



11. Espectro no IV de compostos sulfurados

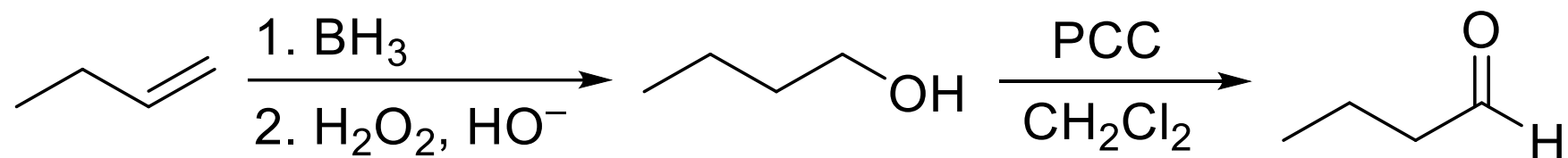


11. Espectro no IV de compostos sulfurados



Exercícios

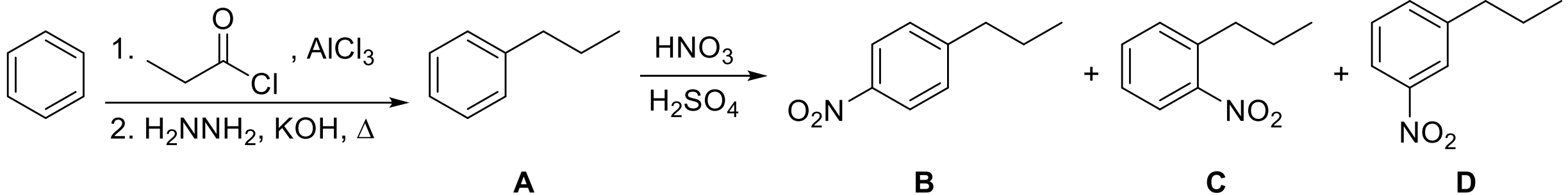
3. Considere as duas reações mostradas abaixo:



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

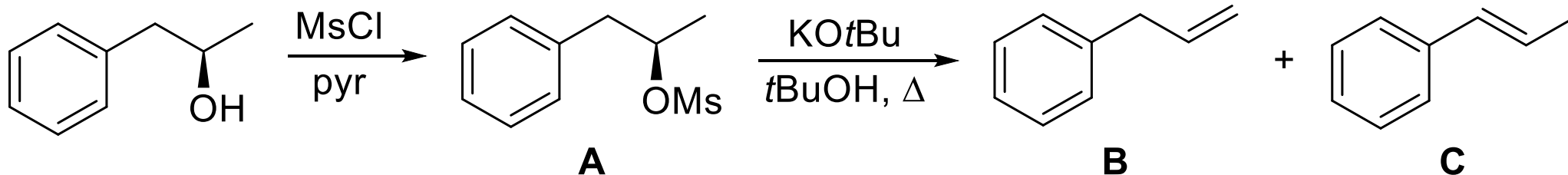


a. Quando as condições reacionais 1. e 2. são substituídas por cloreto de propila e AlCl_3 , o espectro no IV resultante tem as bandas ($\tilde{\nu}$, cm^{-1}): 3133, 3086, 3019, 2960, 2930, 2870, 1509, 1460, 1382, 1363 e 829. Qual é o produto formado?

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:

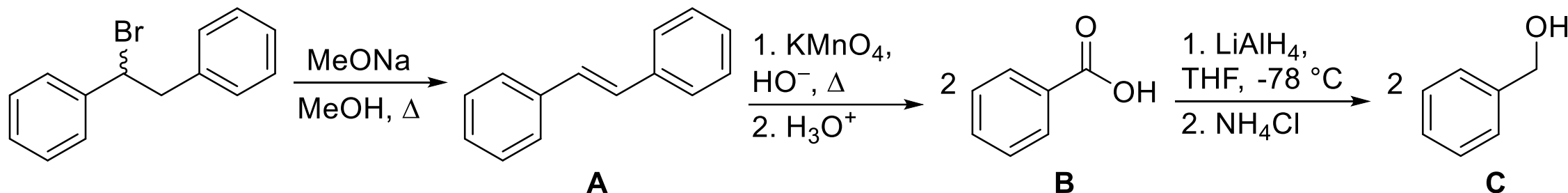


a. Qual(is) mudança(s) no espectro de infravermelho seria(m) capaz(es) de comprovar a proteção do álcool com o grupo mesilato em **A**?

b. O espectro da mistura reacional **B** + **C** possui as bandas ($\tilde{\nu}$, 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:

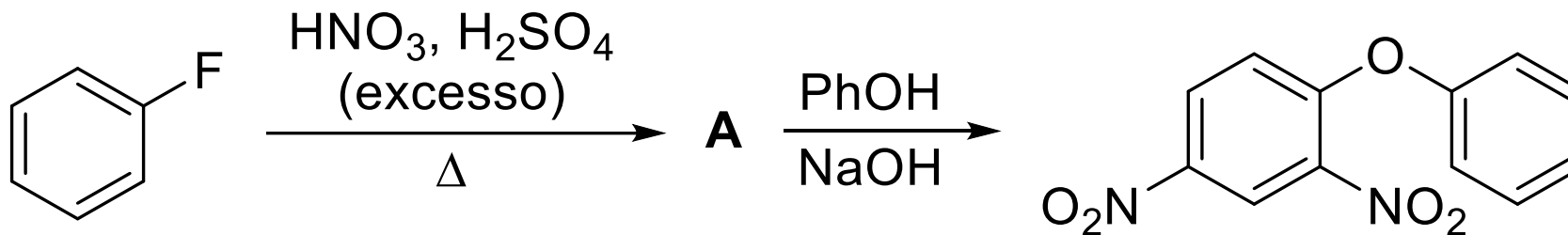


a. Durante a formação de **B**, caso O_3 e dimetilsulfeto fossem utilizados ao invés de 1 e 2, o IV resultante teria as bandas ($\tilde{\nu}$, cm^{-1}): 3086, 3065, 3031, 2820, 2738, 1703, 1664, 1456, 1391, 746 e 688. Qual produto seria formado nesse caso?

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?

Exercícios

7. Considere as duas reações abaixo:

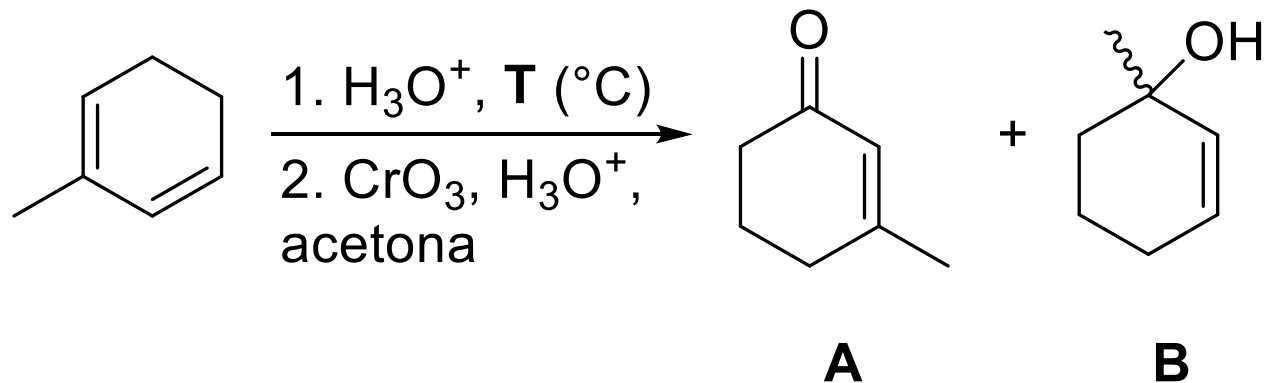


a. O espectro no infravermelho do composto **A** revelou as bandas ($\tilde{\nu}$, cm^{-1}): 3119, 3091, 1616, 1544, 1488, 1349, 741, 709. Qual é o produto formado? Considere que a reação usou excesso considerável de reagentes e foi feita à 200 °C.

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 NaOH?

Exercícios

8. Considere o seguinte conjunto de reações:



a. Quando $\text{T} = 150$ $^\circ\text{C}$, o espectro no IV apresenta as bandas ($\tilde{\nu}$, 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**?