

**Ficha de auto-avaliação Técnicas de Caracterização**  
**Bloco de RMN**

1. Indique se as seguintes afirmações são verdadeiras (V) ou falsas (F), justificando.

- a) Os núcleos têm um momento magnético,  $\mu$ , que é proporcional ao seu momento angular de spin,  $I$ .....
- b) Núcleos com  $\gamma$  elevado são menos sensíveis. ....
- c) O desvio químico está relacionado com o ambiente eletrónico dos diferentes tipos de H. ....
- d) As integrações para cada sinal de  $^1\text{H}$  dão o número de H adjacentes. ....
- e) A razão das intensidades dos picos dum tripleto num espectro de RMN de  $^1\text{H}$  é 1:2:1. ....
- f) Isótopos do mesmo elemento podem ter diferentes spins nucleares.....
- g) As constantes de acoplamento  $J$  são dependentes do campo magnético, por isso são sempre indicadas em Hz.....
- h) O efeito mesomérico em benzenos monosubstituídos é mais pronunciado nos prótons *orto* e *para* do anel (relativamente ao substituinte).....
- i) As correntes de anel em sistemas aromáticos provocam desvios para maiores frequências no plano do anel aromático e para menores frequências quando os prótons estão acima ou abaixo do plano. ....

2. a) Indique qual a ordem decrescente de desvio químico, sabendo que:

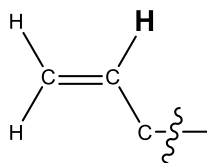
	F	O	Cl	Br
<b>Eletronegatividade</b>	4.0	3.5	3.1	2.8

$\text{CH}_3\text{F} > \text{CH}_3\text{OH} > \text{CH}_3\text{Cl} > \text{CH}_3\text{Br}$

$\text{CH}_3\text{F} > \text{CH}_3\text{Cl} > \text{CH}_3\text{Br} > \text{CH}_3\text{OH}$

$\text{CH}_3\text{Br} > \text{CH}_3\text{Cl} > \text{CH}_3\text{OH} > \text{CH}_3\text{F}$

b) Qual é a multiplicidade prevista para o próton destacado no espectro de  $^1\text{H}$  RMN? Justifique.



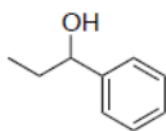
A. Dupletto de dupletos

B. Singuleto

C. Dupletto de dupletos de dupletos

D. Tripleto

c) Quantas ressonâncias de  $^{13}\text{C}$  RMN são esperadas para o 1-fenil-1-propanol?



9

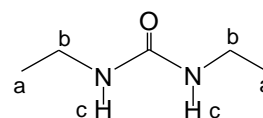
7

5

8

d) Quantos valores pode o número quântico magnético ter? Justifique.

3. a) Para cada uma das moléculas seguintes, determine o número de sinais esperados no espectro de próton, assinalando com uma letra minúscula cada tipo de prótons equivalentes (ver exemplo ao lado). Indique as integrações relativas e especifique a multiplicidade esperada para cada sinal de ressonância (considere apenas acoplamentos até três ligações).



Nota: use abreviaturas (s=singuleto, d=duplete, t=tripleto, q=quarteto, qui=quinteto, ... sept=septeto, m=multiplete, dd=duplete de dupletos, etc.).

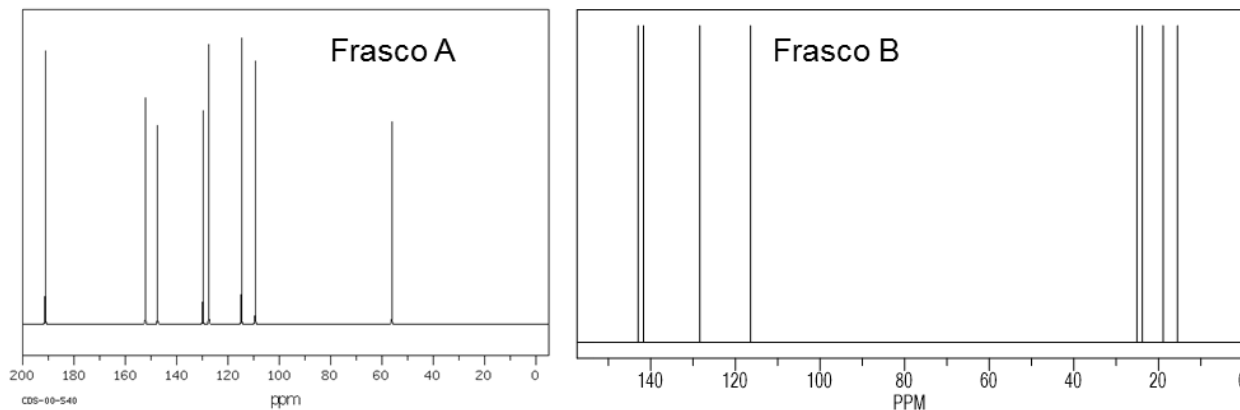
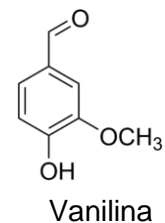
	1	2	3	4
Composto				
Nº de sinais de $^1\text{H}$ e atribuição				
Integrações relativas				
Multiplicidade dos sinais				

b) No caso do **composto 3**, indique qual é o sinal que estará mais desblindado no espectro de  $^1\text{H}$  RMN. Justifique.

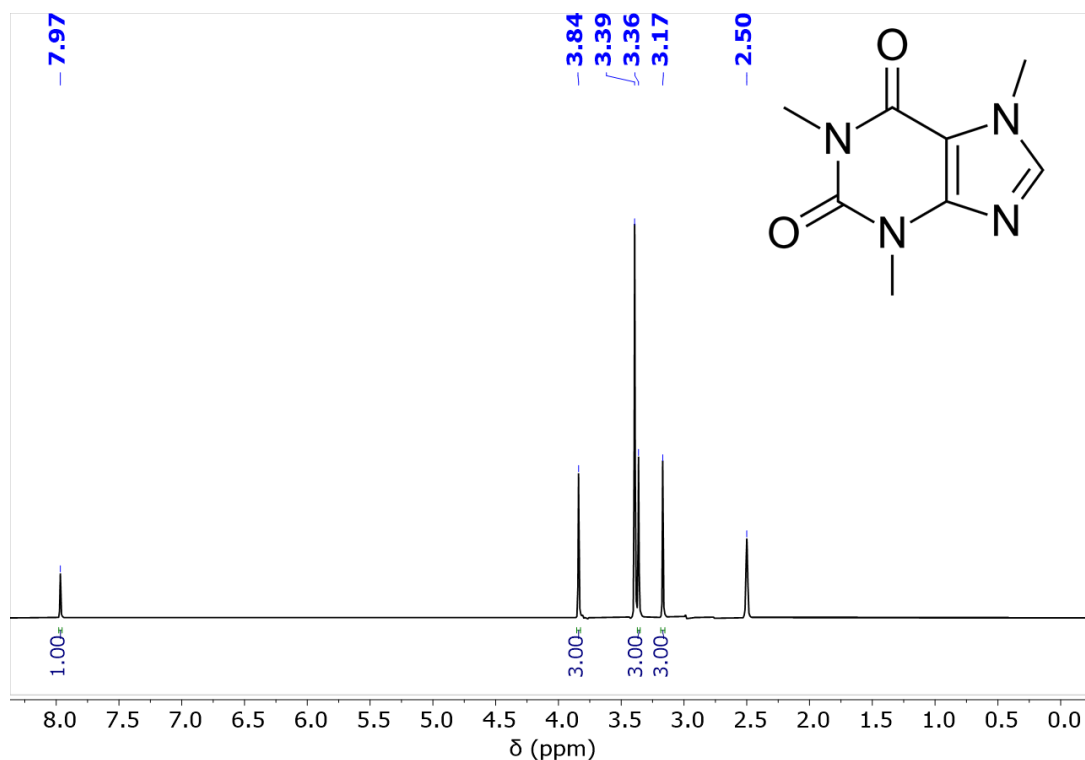
4. a) Se a frequência de um sinal (tripleto) de  $^1\text{H}$  a  $\delta$  3.7 ppm (relativamente ao TMS) for 1480 Hz, qual é a frequência do espectrómetro para este núcleo?

b) Indique as frequências (em Hz e em ppm) dos picos laterais desse mesmo tripleto, admitindo que a constante de acoplamento é  $J = 8$  Hz.

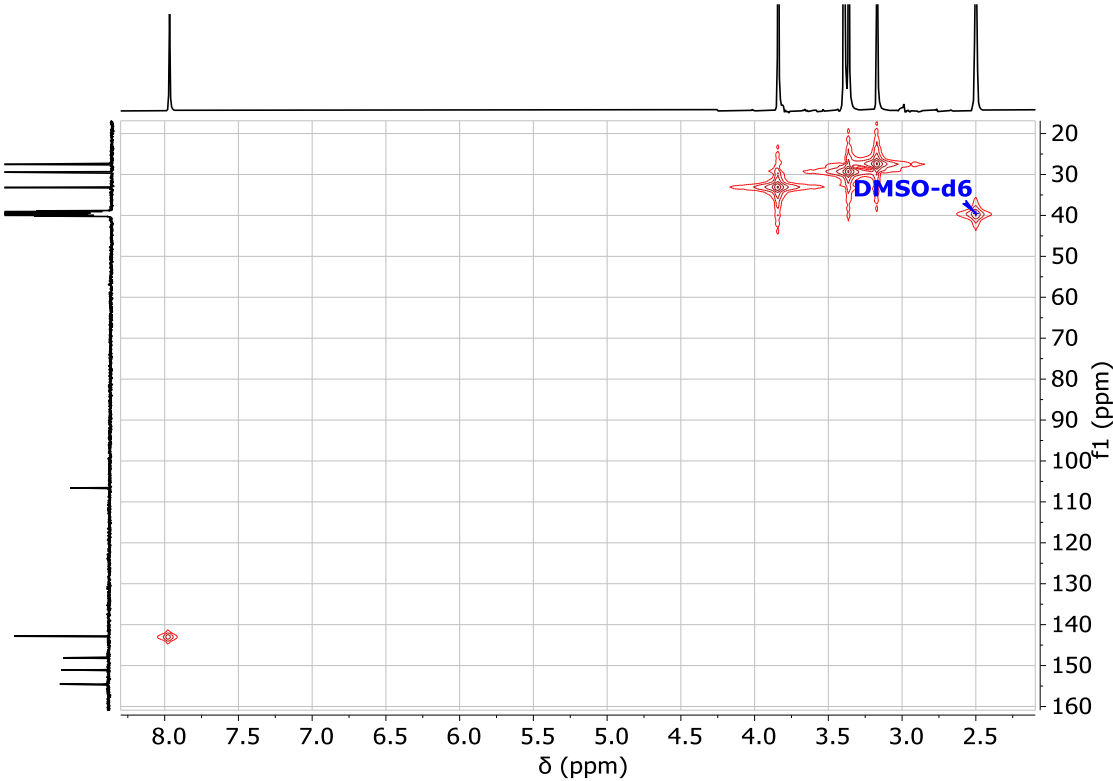
5. Os rótulos de dois frascos existentes num laboratório ficaram acidentalmente ilegíveis. Sabia-se que um deles continha vanilina e foi possível analisar ambos por espectroscopia de  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$  RMN. Poderá identificar qual dos frascos (A ou B) contém a vanilina, com base nos espectros de carbono obtidos? Justifique. (Nota: o sinal do solvente foi eliminado).



6. a) Na figura abaixo encontra-se o  $^1\text{H}$  RMN da cafeína em DMSO- $d_6$  ( $\text{H}_2\text{O}$  presente no solvente observável a 3.39 ppm). Numere na figura todos os prótons e carbonos. Analisando somente o espectro de  $^1\text{H}$  RMN, que próton é que consegue atribuir inequivocamente. Justifique.



b) Que informação consegue obter do espectro de HMQC abaixo. Justifique. (nota: o carbono representado no eixo dos yy é um  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ ).



c) Na imagem abaixo, encontram-se duas zonas do espectro de HMBC ampliadas. Identifique os sinais possíveis com base nas correlações observadas. Justifique. (nota: o carbono representado no eixo dos yy é um  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ ).

