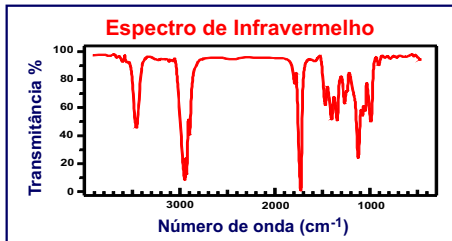


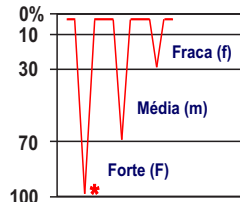
GUIA PARA INTERPRETAÇÃO DE ESPECTROS DE INFRAVERMELHO

Sociedade Brasileira de Química Regional Bahia
http://www.s bq.org.br

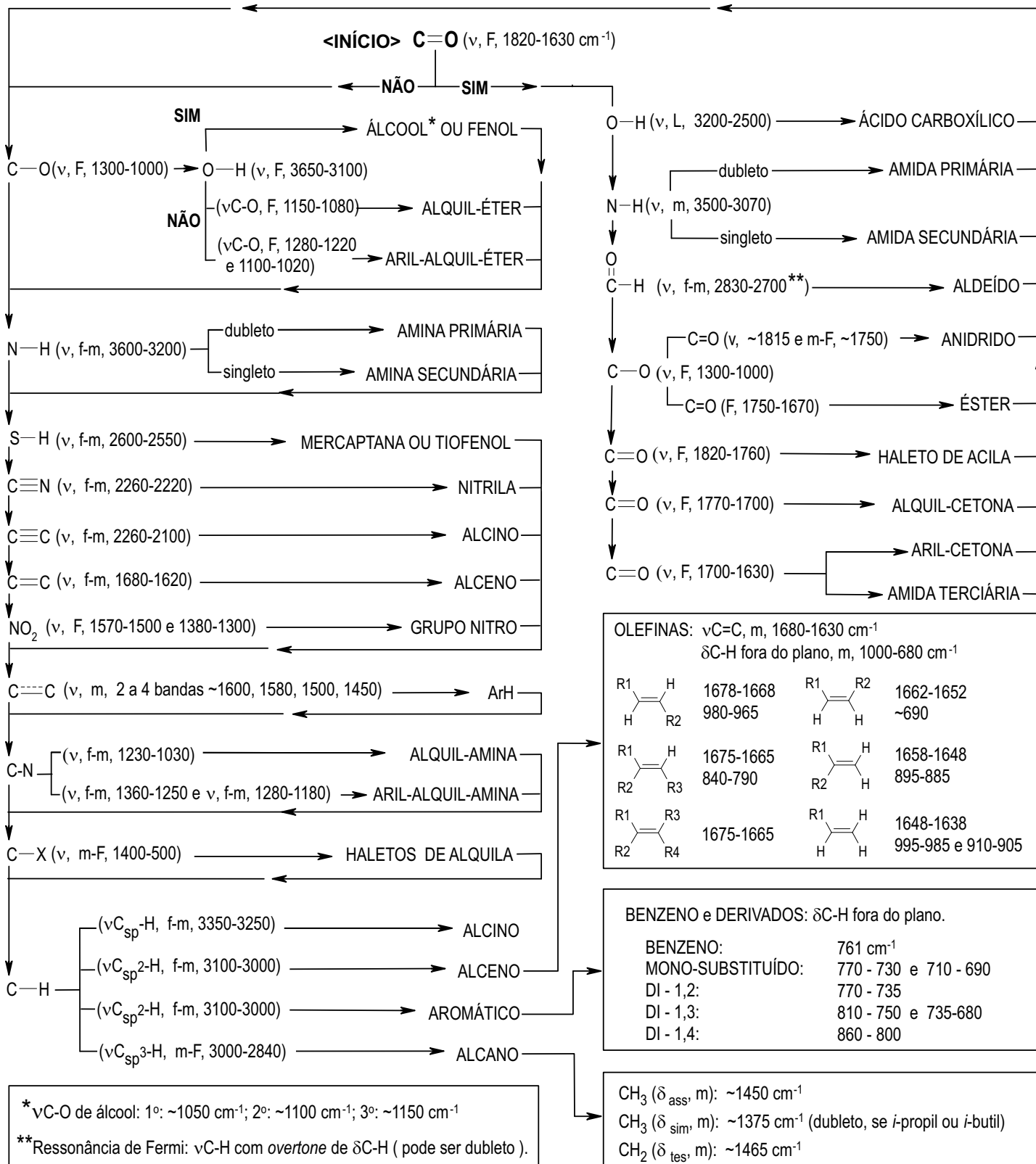
Apoio:
SCIENTIFIC INSTRUMENTS CO.
SINC DO BRASIL
INSTRUMENTAÇÃO CIENTÍFICA LTDA



Intensidade relativa das bandas de absorção.



* Banda mais forte do espectro.

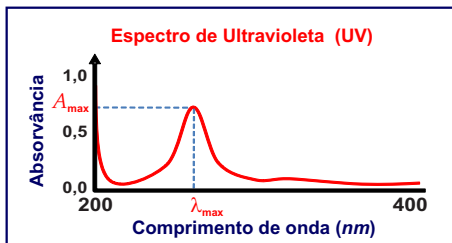


v = estiramento; δ = deformação; ass = assimétrica; sim = simétrica; tes = tesoura; F = forte; m = média; f = fraca; L = larga; v = variável.

GUIA PARA INTERPRETAÇÃO DE ESPECTROS DE ULTRAVIOLETA

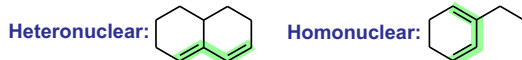
Sociedade Brasileira de Química Regional Bahia
http://www.sbq.org.br

Apoio:
SCIENTIFIC INSTRUMENTS CO.
SINC DO BRASIL
INSTRUMENTAÇÃO CIENTÍFICA LTDA



Regras de Woodward-Fieser para o cálculo de λ_{max} (absorção) no UV-Vis (nm)

Dienos e polienos

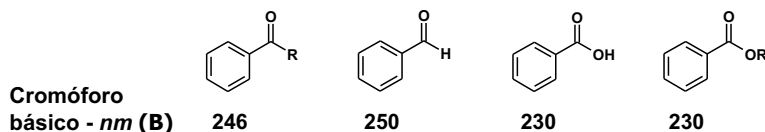


Cromóforo básico (B)	nm
Acíclico ou heteronuclear (transoide)	214
Homonuclear (cisoide)	253

Incremento por modificação (I)	nm
C=C extensão da conjugação	+30
Dupla exocíclica	+5
Alquila (R) ou resíduo de anel	+5
O-acila	+0
S-alquila	+30
O-alquila	+6
NR ₂	+60
Cl, Br	+5
Correção de solvente	0

$$\lambda_{calc.} = B + \Sigma I$$

Derivados substituídos do benzeno

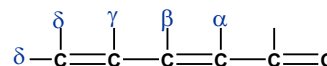
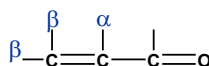


Incremento por modificação (I)	nm		
Substituinte:	<i>orto</i>	<i>meta</i>	<i>para</i>
Alquila (R) ou resíduo de anel	+3	+3	+10
OH, OCH ₃ , OR	+7	+7	+25
O ⁻ (oxiânion)	+11	+20	+78
Cl	0	0	+10
Br	+2	+2	+15
NH ₂	+13	+13	+58
NHCOCH ₃	+20	+20	+45
NHCH ₃	-	-	+73
N(CH ₃) ₂	+20	+20	+85

$$\lambda_{calc.} = B + \Sigma I$$

Enonas e dienonas

Cromóforo básico (B)	nm
	215
	215
	202
	210
	195



Incremento por modificação (I)	nm			
Extensão da conjugação	+30			
Ligação C=C exocíclica	+5			
Contribuição de homodieno	+39			
Substituinte:	α	β	γ	δ
Alquila (R) ou resíduo de anel	+10	+12	+18	+18 [#]
OH	+35	+30	-	+50
O-Ac	+6	+6	+6	+6
O-alquila	+35	+30	+17	+31
NR ₂	-	+95	-	-
S-alquila	-	+85	-	-
Cl	+15	+12	-	-
Br	+25	+30	-	-

Correção do solvente	nm
Água	-8
EtOH, MeOH	0
CHCl ₃	+1
Dioxano	+5
Et ₂ O	+7
Hexano, ciclo-hexano	+11

[#] = válido para δ ou maior que δ .

$$\lambda_{calc.} = B + \Sigma I + \text{correção do solvente}$$

Dados de absorção para cromóforos isolados

Grupo cromofórico	Grupo	Exemplo	λ_{max} (nm)	ϵ_{max}	Transição	Solvente
Etilênico	RHC=CHR	Eteno	165	15.000	$\pi \rightarrow \pi^*$	Vapor
Acetilênico	RC \equiv CR	Etino	173	6.000	$\pi \rightarrow \pi^*$	Vapor
Carbonílico	R ₁ R ₂ C=O	Propanona	188	900	$\pi \rightarrow \pi^*$	<i>n</i> -Hexano
			279	15	$n \rightarrow \pi^*$	