



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC  
Trabalho de Conclusão de Curso | Bacharelado em Química

Beatriz Araujo Lombardi

**Tomada de decisões sustentáveis no contexto das reações de  
substituição eletrofílica aromática**

Santo André  
ABRIL - 2021



Tomada de decisões sustentáveis no contexto das reações de  
substituição eletrofílica aromática

**Beatriz Araujo Lombardi**

***Orientador:* Prof. Dr. Marco A. B. Filho**

Monografia final de conclusão de curso apresentada  
ao Bacharelado em Química da UFABC, como  
requisito parcial para obtenção do título de  
Bacharel em Química.

*Área de Concentração:* Química orgânica

**UFABC**  
**Abril de 2021**

Lombardi, Beatriz Araujo  
Tomada de decisões sustentáveis no contexto das  
reações de substituição eletrofílica aromática / Beatriz  
Araujo Lombardi. - Santo André, 2021.  
214 p.; 29,7 cm.

Orientador: Marco A. B. Filho.  
Monografia (Graduação) - Universidade Federal do ABC  
(UFACBC), Santo André, 2021.

1. Friedel-Crafts; Química e sociedade;  
Responsabilidade ambiental. I. Filho, Marco A. B..  
II. Universidade Federal do ABC (UFACBC). III. Título.

*Dedico este trabalho a todos aqueles que de alguma forma estiveram e estão próximos de mim, fazendo esta vida valer cada vez mais a pena.*



# AGRADECIMENTOS

---

---

Agradeço à minha mãe Nilvia e meu pai Claudio por terem me apoiado e incentivado nesta longa jornada, estando sempre ao meu lado quando precisei.

Ao Prof. Dr. Marco Antonio Bueno Filho, do Centro de Ciências Naturais e Humanas (CCNH) da Universidade Federal do ABC (UFABC) pela oportunidade da realização deste projeto. Pela orientação e aprendizado, pela dedicação e disponibilidade, e pela compreensão e paciência.

À Universidade Federal do ABC (UFABC) pela autorização para execução deste projeto, e ao fornecimento de laboratório e equipamentos. Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela concessão de bolsa a este projeto



*“Na vida, não existe nada a temer,  
mas a entender.”  
(Marie Curie)*



# RESUMO

LOMBARDI, B. A.. **Tomada de decisões sustentáveis no contexto das reações de substituição eletrofílica aromática**. 2021. 214 f. Monografia (Graduação) – Universidade Federal do ABC (UFACBC), Santo André.

A química muitas vezes é associada apenas a seus resultados obtidos e experimentos realizados dentro de um laboratório, mas seu papel é muito além disso, existe uma responsabilidade com a sociedade e o meio ambiente que deve ser prioridade. A química oferece diversos benefícios, mas também grandes desvantagens, por exemplo, o desenvolvimento de um novo pesticida realiza o controle das pragas, mas pode prejudicar a pessoa que o aplica e as plantas ao redor. Tomadas de decisões que impactam a sociedade e meio ambiente são realizadas com base em resultados químicos analíticos, como segurança de produtos, decisões médicas e análises forenses. Este projeto realizou experimentos de acilações de Friedel-Crafts, que são reações de substituição eletrofílica aromáticas e frequentemente estão envolvidas no processo de diversos compostos. Nessas reações é comum a geração de subprodutos e é necessário uso de ácidos de Lewis, assim, são reações de grande interesse, pois podem proporcionar uma rica discussão para conectar os fatores químicos com uma contextualização social, científica e ambiental. As reações de substituição eletrofílica aromática foram feitas com três substituintes, variando-se com seis ácidos de Lewis. Com os dados obtidos, uma revisão bibliográfica foi feita a fim de poder colocar em pauta não somente os resultados de laboratório referente a rendimento de reação e regioselectividade, mas também abordar assunto de impactos sociais e ambientais.

**Palavras-chave:** Friedel-Crafts; Química e sociedade; Responsabilidade ambiental.



# ABSTRACT

LOMBARDI, B. A.. **Tomada de decisões sustentáveis no contexto das reações de substituição eletrofílica aromática**. 2021. 214 f. Monografia (Graduação) – Universidade Federal do ABC (UFACBC), Santo André.

Chemistry is often associated only with the results obtained and experiments carried out inside a laboratory, but its function is much more than that, there is a responsibility to society and the environment that must be a priority. Chemistry offers several benefits, but also major disadvantages, for example, the development of a new pesticide performs pest control, but can harm the person who applies it and the plants around it. Decision-making that impacts society and the environment is based on analytical chemical results, such as product safety, medical decisions and forensic analysis. This project performed Friedel-Crafts acylation experiments, which are electrophilic aromatic substitution reactions and are often involved in the process of several compounds. In these reactions, the generation of by-products is common and the use of Lewis acids is necessary, thus, they are reactions of great interest, as they can provide a rich discussion to connect chemical factors with a social, scientific and environmental context. The electrophilic aromatic substitution reactions were performed with three substituents by varying six Lewis acids. With the data obtained, a bibliographic review was made in order to be able to debate not only the laboratory results, such as reaction yield and regioselectivity, but also to address the issue of social and environmental impacts.

**Key-words:** Friedel-Crafts; Chemistry and society; Environmental responsibility.



# LISTA DE ILUSTRAÇÕES

---

---

Figura 1 – Triângulo de Johnstone com os cantos que representam os aspectos formais da química educação: o nível macro, o nível submicro, e o nível simbólico. . . . .	29
Figura 2 – Tetraedro de Mahaffy, que complementa Triângulo de Johnstone com topo, representando o elemento humano no ensino de química. . . . .	29
Figura 3 – Esquema geral das reações; X = ZnO, Co(acac) <sub>2</sub> , AuCl <sub>3</sub> ou NbCl <sub>5</sub> ; R = anisol, N,N-dimetilanilina e isopropoxibenzeno . . . . .	33
Figura 4 – Mecanismo de reação ácido benzóico . . . . .	37
Figura 5 – Procedimento geral usando-se ZnO . . . . .	37
Figura 6 – Mecanismo de formação de amida e clorometano . . . . .	38
Figura 7 – Procedimento geral usando-se Co(acac) <sub>2</sub> . . . . .	39
Figura 8 – Procedimento geral usando-se Au <sub>2</sub> Cl <sub>6</sub> . . . . .	40
Figura 9 – RMN <sup>1</sup> H do composto Isopropoxibenzeno em CDCl <sub>3</sub> / 60 MHz / Intervalo δ = 0 a 8 ppm . . . . .	59
Figura 10 – Infravermelho do complexo Co(Acac) <sub>2</sub> . . . . .	60
Figura 11 – Infravermelho do complexo Co(Acac) <sub>2</sub> (literatura) Fonte: Spectral Database for Organic Compounds (SDBS, 1999) . . . . .	60
Figura 12 – Raman do composto Au <sub>2</sub> Cl <sub>6</sub> . . . . .	61
Figura 13 – Raman do Au <sub>2</sub> Cl <sub>6</sub> (literatura) Fonte: NALBANDIAN , L.; PAPTAEODOROU , G.N. Raman spectra and molecular vibrations of Au <sub>2</sub> Cl <sub>6</sub> and AuAlCl <sub>6</sub> . Elsevier Science, Vibrational Spectroscopy, 1992. . . . .	61
Figura 14 – RMN <sup>1</sup> H da reação anisol com Zn em CDCl <sub>3</sub> / 500 MHz Intervalo δ = 0 a 9 ppm . . . . .	62
Figura 15 – RMN <sup>1</sup> H da reação anisol com ZnO em CDCl <sub>3</sub> / 500 MHz Intervalo δ = 5.3 a 8.3 ppm . . . . .	63
Figura 16 – RMN <sup>1</sup> H da reação anisol com ZnO em CDCl <sub>3</sub> / 500 MHz Intervalo δ = 7.8 a 8.3 ppm . . . . .	64
Figura 17 – RMN <sup>1</sup> H da reação anisol com ZnO em CDCl <sub>3</sub> / 500 MHz Intervalo δ = 7.2 a 7.7 ppm . . . . .	65
Figura 18 – RMN <sup>1</sup> H da reação anisol com ZnO em CDCl <sub>3</sub> / 500 MHz Intervalo δ = 6.8 a 7.1 ppm . . . . .	66
Figura 19 – RMN <sup>1</sup> H da reação anisol com ZnO em CDCl <sub>3</sub> / 500 MHz Intervalo δ = 3.6 a 4.1 ppm . . . . .	67

Figura 20 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0$ a 9 ppm . . . . .	68
Figura 21 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 3.0$ a 4.5 ppm . . . . .	69
Figura 22 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 4.5$ a 6.0 ppm . . . . .	70
Figura 23 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 6.5$ a 8.5 ppm . . . . .	71
Figura 24 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0$ a 10 ppm . . . . .	72
Figura 25 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 9$ a 10 ppm . . . . .	73
Figura 26 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 6.5$ a 9.0 ppm . . . . .	74
Figura 27 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 3.5$ a 5.5 ppm . . . . .	75
Figura 28 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0.8$ a 2.4 ppm . . . . .	76
Figura 29 – RMN $^1H$ da reação anisol com $NbCl_5$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0$ a 10 ppm . . . . .	77
Figura 30 – RMN $^1H$ da reação anisol com $NbCl_5$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 6.5$ a 8.5 ppm . . . . .	78
Figura 31 – RMN $^1H$ da reação anisol com $NbCl_5$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 4.5$ a 6.5 ppm . . . . .	79
Figura 32 – RMN $^1H$ da reação anisol com $NbCl_5$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 3.5$ a 4.5 ppm . . . . .	80
Figura 33 – RMN $^1H$ da reação anisol com $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0.0$ a 12.5 ppm . . . . .	81
Figura 34 – RMN $^1H$ da reação anisol com $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 10.5$ a 13.0 ppm . . . . .	82
Figura 35 – RMN $^1H$ da reação anisol com $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 5.0$ a 8.5 ppm . . . . .	83
Figura 36 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0$ a 12 ppm . . . . .	84
Figura 37 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 10$ a 12 ppm . . . . .	85
Figura 38 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 5$ a 9 ppm . . . . .	86

Figura 39 – RMN $^1H$ da reação anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 1.5$ a $4.5$ ppm . . . . .	87
Figura 40 – RMN $^1H$ da reação isopropoxibenzeno com $ZnO$ $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0$ a $9$ ppm . . . . .	88
Figura 41 – RMN $^1H$ da reação isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0$ a $10$ ppm . . . . .	89
Figura 42 – RMN $^1H$ da reação isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 6$ a $9$ ppm . . . . .	90
Figura 43 – RMN $^1H$ da reação isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 2$ a $5$ ppm . . . . .	91
Figura 44 – RMN $^1H$ da reação isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0.8$ a $2.0$ ppm . . . . .	92
Figura 45 – RMN $^1H$ da reação isopropoxibenzeno com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0$ a $10$ ppm . . . . .	93
Figura 46 – RMN $^1H$ da reação isopropoxibenzeno com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 6.5$ a $9.0$ ppm . . . . .	94
Figura 47 – RMN $^1H$ da reação isopropoxibenzeno com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 3.5$ a $6.0$ ppm . . . . .	95
Figura 48 – RMN $^1H$ da reação isopropoxibenzeno com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = -1.0$ a $2.5$ ppm . . . . .	96
Figura 49 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $ZnO$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0$ a $9$ ppm . . . . .	97
Figura 50 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $ZnO$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 6.5$ a $8.5$ ppm . . . . .	98
Figura 51 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $ZnO$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 4$ a $6$ ppm . . . . .	99
Figura 52 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $ZnO$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0$ a $4$ ppm . . . . .	100
Figura 53 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0$ a $10$ ppm . . . . .	101
Figura 54 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 9.2$ a $10.2$ ppm . . . . .	102
Figura 55 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 6.5$ a $9.0$ ppm . . . . .	103
Figura 56 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 4.8$ a $6.0$ ppm . . . . .	104
Figura 57 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $Co(acac)_2$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 1$ a $4$ ppm . . . . .	105

Figura 58 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 0$ a 9 ppm . . . . .	106
Figura 59 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 7.0$ a 8.5 ppm . . . . .	107
Figura 60 – RMN $^1H$ da reação N,N-dimetilanilina com $Au_2Cl_6$ em $CDCl_3/CH_2Cl_2$ / 60 MHz / Intervalo $\delta = 2.8$ a 4.0 ppm . . . . .	108
Figura 61 – Cromatograma da reação Anisol com $ZnO$ . . . . .	109
Figura 62 – Cromatograma da reação Anisol com $ZnO$ (continuação) . . . . .	110
Figura 63 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $ZnO$ ; T.R.=7.8; Ácido benzóico . . . . .	111
Figura 64 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $ZnO$ ; T.R.=7.8; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	112
Figura 65 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $ZnO$ ; T.R.= 15.4; o-metóxi-benzofenona	113
Figura 66 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $ZnO$ ; T.R.= 15.4; o-metóxi-benzofenona (continuação) . . . . .	114
Figura 67 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $ZnO$ ; T.R.= 17.0; p-metóxi-benzofenona	115
Figura 68 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $ZnO$ ; T.R.= 17.0; p-metóxi-benzofenona (continuação) . . . . .	116
Figura 69 – Cromatograma da reação Anisol com $Co(acac)_2$ . . . . .	117
Figura 70 – Cromatograma da reação Anisol com $Co(acac)_2$ (continuação) . . . . .	118
Figura 71 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 8.3; Ácido benzóico	119
Figura 72 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 8.3; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	120
Figura 73 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 16.4; o-metoxibenzofenona	121
Figura 74 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 16.4; o-metoxibenzofenona (continuação) . . . . .	122
Figura 75 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 18.0; p-metoxibenzofenona	123
Figura 76 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 18.0; p-metoxibenzofenona (continuação) . . . . .	124
Figura 77 – Cromatograma da reação Anisol com $Au_2Cl_6$ . . . . .	125
Figura 78 – Cromatograma da reação Anisol com $Au_2Cl_6$ (continuação) . . . . .	126
Figura 79 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Au_2Cl_6$ ; T.R.=7.5; Ácido benzóico	127
Figura 80 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Au_2Cl_6$ ; T.R.=7.5; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	128
Figura 81 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Au_2Cl_6$ ; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona	129
Figura 82 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Au_2Cl_6$ ; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona (continuação) . . . . .	130
Figura 83 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Au_2Cl_6$ ; T.R.= 16.9; p-metoxibenzofenona	131
Figura 84 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $Au_2Cl_6$ ; T.R.= 16.9; p-metoxibenzofenona (continuação) . . . . .	132

Figura 85 – Cromatograma da reação Anisol com $NbCl_5$ . . . . .	133
Figura 86 – Cromatograma da reação Anisol com $NbCl_5$ (continuação) . . . . .	134
Figura 87 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $NbCl_5$ ; T.R.=7.7; Ácido benzóico . . . . .	135
Figura 88 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $NbCl_5$ ; T.R.=7.7; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	136
Figura 89 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $NbCl_5$ ; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona	137
Figura 90 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $NbCl_5$ ; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona (continuação) . . . . .	138
Figura 91 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $NbCl_5$ ; T.R.= 17.1; p-metoxibenzofenona	139
Figura 92 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $NbCl_5$ ; T.R.= 17.1; p-metoxibenzofenona (continuação) . . . . .	140
Figura 93 – Cromatograma da reação Anisol com $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ . . . . .	141
Figura 94 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ ; T.R.= 8.1; Ácido benzóico . . . . .	142
Figura 95 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ ; T.R.= 8.1; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	143
Figura 96 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ ; T.R.= 16.6; Desconhecido . . . . .	144
Figura 97 – Espectro de Massas; Reação Anisol com $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ ; T.R.= 16.6; Desconhecido (continuação) . . . . .	145
Figura 98 – Cromatograma da reação Anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ . . . . .	146
Figura 99 – Cromatograma da reação Anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ (continuação) . . . . .	147
Figura 100–Espectro de Massas; Reação Anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ ; T.R.= 7.8; Ácido benzóico . . . . .	148
Figura 101–Espectro de Massas; Reação Anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ ; T.R.= 7.8; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	149
Figura 102–Espectro de Massas; Reação Anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ ; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona . . . . .	150
Figura 103–Espectro de Massas; Reação Anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ ; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona (continuação) . . . . .	151
Figura 104–Espectro de Massas; Reação Anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ ; T.R.= 16.9; p-metoxibenzofenona . . . . .	152
Figura 105–Espectro de Massas; Reação Anisol com $Hg[Co(SCN)_4]$ ; T.R.= 16.9; p-metoxibenzofenona (continuação) . . . . .	153
Figura 106–Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ . . . . .	154
Figura 107–Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ (continuação) . . . . .	155
Figura 108–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ ; T.R.= 5.4; Isopropoxibenzeno . . . . .	156

Figura 109–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ ; T.R.= 5.4; Isopropoxibenzeno(continuação) . . . . .	157
Figura 110–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ ; T.R.=7.5; Ácido benzóico . . . . .	158
Figura 111–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ ; T.R.=7.5; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	159
Figura 112–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ ; T.R.= 13.9; Benzil	160
Figura 113–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ ; T.R.= 13.9; Benzil (continuação) . . . . .	161
Figura 114–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ ; T.R.= 19.2; o-isopropoxibenzofenona . . . . .	162
Figura 115–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ ; T.R.= 19.2; o-isopropoxibenzofenona (continuação) . . . . .	163
Figura 116–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ ; T.R.= 17.9; p-isopropoxibenzofenona . . . . .	164
Figura 117–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $ZnO$ ; T.R.= 17.9; p-isopropoxibenzofenona (continuação) . . . . .	165
Figura 118–Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ . . . . .	166
Figura 119–Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ (continuação)	167
Figura 120–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 7.4; Ácido benzóico . . . . .	168
Figura 121–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 7.4; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	169
Figura 122–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 13.8; Benzil . . . . .	170
Figura 123–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 13.8; Benzil (continuação) . . . . .	171
Figura 124–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 17.8; p-isopropoxibenzofenona . . . . .	172
Figura 125–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 17.8; p-isopropoxibenzofenona (continuação) . . . . .	173
Figura 126–Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ . . . . .	174
Figura 127–Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ (continuação) . . .	175
Figura 128–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ ; T.R.= 5,4; Isopropoxibenzeno . . . . .	176
Figura 129–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ ; T.R.= 5,4; Isopropoxibenzeno(continuação) . . . . .	177
Figura 130–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ ; T.R.=7.8; Ácido benzóico . . . . .	178

Figura 131–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ ; T.R.=7.8; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	179
Figura 132–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ ; T.R.= 13.9; Benzil	180
Figura 133–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ ; T.R.= 13.9; Benzil (continuação) . . . . .	181
Figura 134–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ ; T.R.= 19.1; o-isopropoxibenzofenona . . . . .	182
Figura 135–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ ; T.R.= 19.1; o-isopropoxibenzofenona(continuação) . . . . .	183
Figura 136–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ ; T.R.= 17.9; p-isopropoxibenzofenona . . . . .	184
Figura 137–Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com $AuCl_3$ ; T.R.= 17.9; p-isopropoxibenzofenona (continuação) . . . . .	185
Figura 138–Cromatograma da reação N,N-dimetilanilina com $ZnO$ . . . . .	186
Figura 139–Cromatograma da reação N,N-dimetilanilina com $ZnO$ (continuação) . . . . .	187
Figura 140–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $ZnO$ ; T.R.=7.6; Ácido benzóico . . . . .	188
Figura 141–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $ZnO$ ; T.R.=7.6; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	189
Figura 142–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $ZnO$ ; T.R.= 16.2; N-metil-fenil-benzamida . . . . .	190
Figura 143–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $ZnO$ ; T.R.= 16.2; N-metil-fenil-benzamida (continuação) . . . . .	191
Figura 144–Cromatograma da reação N,N-dimetilanilina com $Co(acac)_2$ . . . . .	192
Figura 145–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $Co(acac)_2$ ; T.R.=7.5; Ácido benzóico . . . . .	193
Figura 146–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $Co(acac)_2$ ; T.R.=7.5; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	194
Figura 147–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 15.3; N-metil-fenil-benzamida . . . . .	195
Figura 148–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 15.3; N-metil-fenil-benzamida (continuação 1) . . . . .	196
Figura 149–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $Co(acac)_2$ ; T.R.= 15.3; N-metil-fenil-benzamida (continuação 2) . . . . .	197
Figura 150–Cromatograma da reação N,N-dimetilanilina com $AuCl_3$ . . . . .	198
Figura 151–Cromatograma da reação N,N-dimetilanilina com $AuCl_3$ (continuação) . . . . .	199
Figura 152–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $AuCl_3$ ; T.R.=7.9; Ácido benzóico . . . . .	200

Figura 153–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $AuCl_3$ ; T.R.=7.9; Ácido benzóico (continuação) . . . . .	201
Figura 154–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $AuCl_3$ ; T.R.= 6.3; N,N-dimetilanilina . . . . .	202
Figura 155–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $AuCl_3$ ; T.R.= 6.3; N,N-dimetilanilina (continuação) . . . . .	203
Figura 156–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $AuCl_3$ ; T.R.= 15.3; N-metil-fenil-benzamida . . . . .	204
Figura 157–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $AuCl_3$ ; T.R.= 15.3; N-metil-fenil-benzamida (continuação) . . . . .	205
Figura 158–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $AuCl_3$ ; T.R.= 16.6; Desconhecido . . . . .	206
Figura 159–Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com $AuCl_3$ ; T.R.= 16.6; Desconhecido (continuação) . . . . .	207
Figura 160–Fragmentação Ácido benzóico . . . . .	209
Figura 161–Fragmentação p-metóxi-benzofenona . . . . .	209
Figura 162–Fragmentação o-metóxi-benzofenona . . . . .	210
Figura 163–Fragmentação Isopropoxibenzeno . . . . .	210
Figura 164–Fragmentação Benzil . . . . .	211
Figura 165–Fragmentação o-isopropoxibenzofenona . . . . .	212
Figura 166–Fragmentação p-isopropoxibenzofenona . . . . .	213
Figura 167–Fragmentação N-metil-fenil-benzamida . . . . .	214

# LISTA DE TABELAS

---

---

Tabela 1 – Tempo de retenção (T.R. min) - Substituinte anisol . . . . .	42
Tabela 2 – Tempo de retenção (T.R. min) - Substituinte isopropoxibenzeno . . . . .	42
Tabela 3 – Tempo de retenção (T.R. min) - Substituinte N,N-dimetilanilina . . . . .	42
Tabela 4 – Rendimento Cromatográfico (R.C.%) - Substituinte Anisol . . . . .	43
Tabela 5 – Rendimento Cromatográfico (R.C.%) - Substituinte isopropoxibenzeno . . . . .	43
Tabela 6 – Rendimento Cromatográfico (R.C.%) - Substituinte N,N-dimetilanilina . . . . .	43
Tabela 7 – Comparação dos pontos positivos e negativos dos metais . . . . .	52



# SUMÁRIO

---

---

1	INTRODUÇÃO	27
2	OBJETIVOS	31
2.1	Geral	31
2.2	Específico	31
3	METODOLOGIA	33
3.1	Metodologia	33
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	35
4.1	Síntese cloreto de benzoíla	35
4.2	Síntese isopropoxibenzeno	35
4.3	Síntese do $Co(acac)_2$	36
4.4	Síntese $Au_2Cl_6$	36
4.5	Formação Ácido benzoico	36
4.6	Reações com $ZnO$	36
4.6.1	<i>Substituente Anisol</i>	37
4.6.2	<i>Substituente Isopropoxibenzeno</i>	37
4.6.3	<i>Substituente N,N-dimetilanilina</i>	38
4.7	Reações com $Co(acac)_2$	39
4.7.1	<i>Substituente Anisol</i>	39
4.7.2	<i>Substituente Isopropoxibenzeno</i>	39
4.7.3	<i>Substituente N,N-dimetilanilina</i>	40
4.8	Reações com $AuCl_3$	40
4.8.1	<i>Substituente Anisol</i>	40
4.8.2	<i>Substituente Isopropoxibenzeno</i>	40
4.8.3	<i>Substituente N,N-dimetilanilina</i>	41
4.9	Extras	41
4.9.1	<i>Pentacloreto de nióbio</i>	41
4.9.2	<i>tris-(oxalato)cromato(III) de potássio</i>	41
4.9.3	<i>tetratiocianocobalto(II) de mercúrio</i>	42
4.10	Dados compactos	42
4.11	Problemas sociais, ambientais e econômicos	44
4.11.1	<i>Zinco</i>	44

4.11.2	<b>Cobalto</b>	44
4.11.3	<b>Ouro</b>	46
4.11.4	<b>Mercúrio</b>	47
4.11.5	<b>Nióbio</b>	48
5	<b>CONCLUSÃO</b>	51
6	<b>PERSPECTIVA</b>	53
<b>REFERÊNCIAS</b>		55
<b>APÊNDICE A ESPECTROS DE RMN <sup>1</sup>H, RAMAN E IV</b>		59
A.1	<b>Síntese Reagentes</b>	59
A.1.1	<b>Isoproxibenzeno</b>	59
A.1.2	<i>Co(acac)<sub>2</sub></i>	60
A.1.3	<i>Au<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub></i>	61
A.2	<b>Reações de Friedel-Crafts</b>	62
A.2.1	<b>Anisol</b>	62
A.2.1.1	<i>ZnO</i>	62
A.2.1.2	<i>Co(acac)<sub>2</sub></i>	68
A.2.1.3	<i>Au<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub></i>	72
A.2.1.4	<i>NbCl<sub>5</sub></i>	77
A.2.1.5	<i>K<sub>3</sub>[Cr(C<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)<sub>3</sub>]</i>	81
A.2.1.6	<i>Hg[Co(SCN)<sub>4</sub>]</i>	84
A.2.2	<b>Isoproxibenzeno</b>	88
A.2.2.1	<i>ZnO</i>	88
A.2.2.2	<i>Co(acac)<sub>2</sub></i>	89
A.2.2.3	<i>Au<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub></i>	93
A.2.3	<b>N,N-dimetilanilina</b>	97
A.2.3.1	<i>ZnO</i>	97
A.2.3.2	<i>Co(acac)<sub>2</sub></i>	101
A.2.3.3	<i>Au<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub></i>	106
<b>APÊNDICE B ESPECTROS DE GC-MS</b>		109
B.1	<b>Anisol</b>	109
B.1.1	<i>ZnO</i>	109
B.1.2	<i>Co(acac)<sub>2</sub></i>	117
B.1.3	<i>AuCl<sub>3</sub></i>	125
B.1.4	<i>NbCl<sub>5</sub></i>	133
B.1.5	<i>K<sub>3</sub>[Cr(C<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)<sub>3</sub>]</i>	141

<b>B.1.6</b>	<i>Hg[Co(SCN)<sub>4</sub>]</i> . . . . .	<b>146</b>
<b>B.2</b>	<b>Isopropoxibenzeno</b> . . . . .	<b>154</b>
<b>B.2.1</b>	<i>ZnO</i> . . . . .	<b>154</b>
<b>B.2.2</b>	<i>Co(acac)<sub>2</sub></i> . . . . .	<b>166</b>
<b>B.2.3</b>	<i>AuCl<sub>3</sub></i> . . . . .	<b>174</b>
<b>B.3</b>	<b>N,N-dimetilanilina</b> . . . . .	<b>186</b>
<b>B.3.1</b>	<i>ZnO</i> . . . . .	<b>186</b>
<b>B.3.2</b>	<i>Co(acac)<sub>2</sub></i> . . . . .	<b>192</b>
<b>B.3.3</b>	<i>AuCl<sub>3</sub></i> . . . . .	<b>198</b>
<b>APÊNDICE C</b>	<b>FRAGMENTAÇÕES</b> . . . . .	<b>209</b>



---

# INTRODUÇÃO

---

A química frequentemente tem sua imagem limitada a laboratório, mas suas responsabilidades vão além das bancadas, deve-se incluir uma discussão ética na aplicação da ciência na sociedade. A química está presente nas atividades humanas há muito tempo, desde a pré-história com a descoberta e controle do fogo até os dias atuais com seu desenvolvimento tecnológico.

A química influenciava as relações entre os povos, uma vez que ao desenvolverem conhecimentos na área possuíam uma tecnologia capaz de ajudar ou prejudicar outros povos, seja na descoberta da preservação do couro animal para vestimenta ou o lançamento de uma flecha envenenada no inimigo. Assim, as relações comerciais eram afetadas pelas diferenças de tecnologias, de forma que os povos com maior conhecimento químico podiam se beneficiar (OLIVEIRA; MARTINS; APPELT, 2010).

As relações entre ciência, tecnologia e sociedade (CTS) começaram a ter maior reflexão com o agravamento dos problemas ambientais, sendo necessário discutir o conhecimento científico, seu papel na sociedade e seus impactos no meio ambiente. Assim, a ciência e tecnologia devem caminhar juntas com os aspectos históricos, éticos, políticos, ambientais e socioeconômicos. Deve-se compreender os processos químicos e debater suas aplicações tecnológicas, tomando decisões responsáveis com base nos efeitos sociais, melhoria da qualidade de vida e seus impactos ambientais (SANTOS *et al.*, 2009).

O surgimento da indústria química pesada, com a fabricação de ácido sulfúrico, soda e cloro, foi essencial para a Revolução Industrial, permitindo grandes avanços tecnológicos no início do séc. XIX. A descoberta do processo de obtenção do plástico não só influenciou o mundo, mas alterou o estilo de vida das sociedades, estando presente desde nossos eletrônicos até nos produtos de higiene e limpeza. Mas se de um lado essa descoberta facilitou nossas vidas, por outro gerou diversos problemas ambientais (OLIVEIRA; MARTINS; APPELT, 2010).

É evidente que a Química oferece uma grande variedade de benefícios à sociedade, mas a existência de suas desvantagens não pode ser ignorada. A necessidade de consumo atual é tão grande e “normal”, que a importância e os impactos da química na sociedade muitas vezes ficam despercebidas. Os químicos precisam ter conhecimento de suas responsabilidades.

Uma indústria farmacêutica pode cobrar um alto valor em um novo medicamento por ser a única a possuir a patente, determinando quem terá acesso a um devido tratamento (OLIVEIRA; MARTINS; APPELT, 2010). O petróleo é uma fonte de energia altamente utilizada no mundo,

mas sofre fortes oscilações no preço, podendo afetar a economia mundial e aumentar o custo de vida da população. Sua presença está na fabricação de plásticos, borrachas sintéticas, tintas, solventes, produtos cosméticos, entre outros bens de consumo. Sua alta demanda e impacto na economia já gerou diversas lutas (SOUZA, 2006).

Uma indústria química ao desenvolver um novo pesticida no mercado certamente colabora com o controle das pragas, mas se visar apenas o lucro e a função do produto em si, não se importando com fatores ambientais, seu produto pode prejudicar a pessoa que faz a aplicação, o solo e as plantas ao redor. Ou seja, um benefício gerado pela química, rapidamente pode-se tornar também um malefício (OLIVEIRA; MARTINS; APPELT, 2010).

A química analítica não pode deixar de ser citada, ela tem impactos diretos na sociedade, como o *doping* nos esportes, a entrega de resultados incorretos é acompanhada de efeitos na carreira do atleta. No setor agroalimentar, os resultados analíticos garantem a segurança de um produto, que devem estar livres de contaminante (VALCARCEL; CHRISTIAN; LUCENA, 2013).

Ou seja, a tomada de decisão a respeito da segurança de um produto é feita com base em resultados analíticos, assim, uma conclusão incorreta pode afetar negativamente a saúde do consumidor. Logo, diversas decisões que impactam a sociedade são feitas com base na química analítica, como segurança alimentar, decisões médicas, análises forenses, meio ambiente e regulamentos (VALCARCEL; CHRISTIAN; LUCENA, 2013).

A química orgânica moderna realiza pesquisas com foco em obter reações menos poluentes, mais eficientes e que sejam feitas em condições simples, com objetivo de evitar compostos secundários danosos tanto para a saúde quanto ao meio-ambiente, e também a diminuir os possíveis acidentes de laboratório.

Com esta abordagem, a química-verde deve ser mencionada, pois essa tem ganhado cada vez mais espaço por ter uma visão de harmonia do meio ambiente com a sociedade. Atualmente, muitos poluentes são gerados em diversos processos, como os industriais, e na maioria dos casos a diminuição dos impactos ao meio ambiente são problemas complexos que requerem pensamento crítico, resolução de problemas e tomada de decisões altamente responsáveis (ZOLLER, 2005).

Este projeto teve como estudo acilações de Friedel-Crafts, que são reação de substituição eletrofílica aromática usada para formar ligações carbono-carbono, reagindo compostos aromáticos com haletos de acila na presença de um ácido de Lewis (VOLLHARDT; SCHORE, 2013).

Contudo, estas características as tornam uma boa ferramenta de estudo, pois envolvem diversos fatores químicos, como regioselectividade, ácidos de Lewis, ressonância, efeito indutivo, grupos substituintes e propriedades físico-químicas (VOLLHARDT; SCHORE, 2013), além de ser comum a geração de subprodutos e rendimentos por vezes insatisfatórios. O estudo dessas reações é interessante, pois estão envolvidas no processo de diversos compostos devido à

introdução de vários grupos nos anéis aromáticos (SOLOMONS; FRYHLE, 2005).

Neste contexto, é importante abordar o ensino de química orientado para a “*Bildung*”, termo alemão sem tradução, mas que está ligado ao desenvolvimento de uma consciência crítica e de formação de caráter, ou seja, ensino com base em discurso reflexivo e crítico. Desta forma, este tipo de ensino vai além dos conhecimentos do conteúdo de química, abordando também seu papel na sociedade, a fim de desenvolver cidadãos críticos e competentes (Sjöström, 2013).

O método de ensino tradicional da química pode ser representado pelo triângulo de Johnstone mostrado na figura 1, no qual o nível macro diz respeito a substâncias e propriedades, o submicro a átomos e moléculas, e o nível simbólico a símbolos e equações. Em 2004, Peter Mahaffy complementou o triângulo com “Elemento humano”, que representa o contexto humano no ensino da química, adicionando perspectivas humanas, formando um tetraedro conforme a figura 2, que pode representar a forma de ensino “*Bildung*”(Sjöström, 2013).

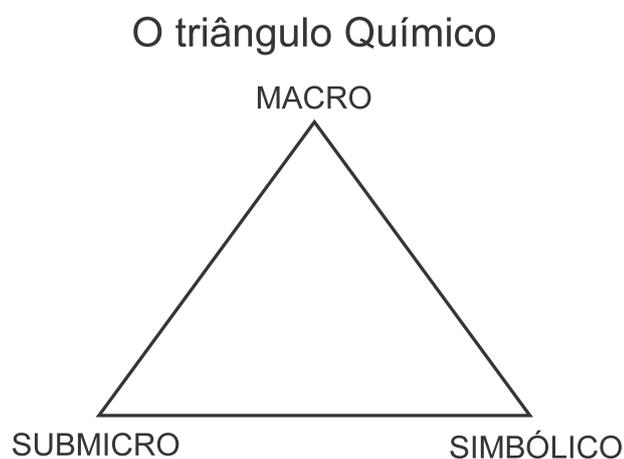


Figura 1 – Triângulo de Johnstone com os cantos que representam os aspectos formais da química educação: o nível macro, o nível submicro, e o nível simbólico.

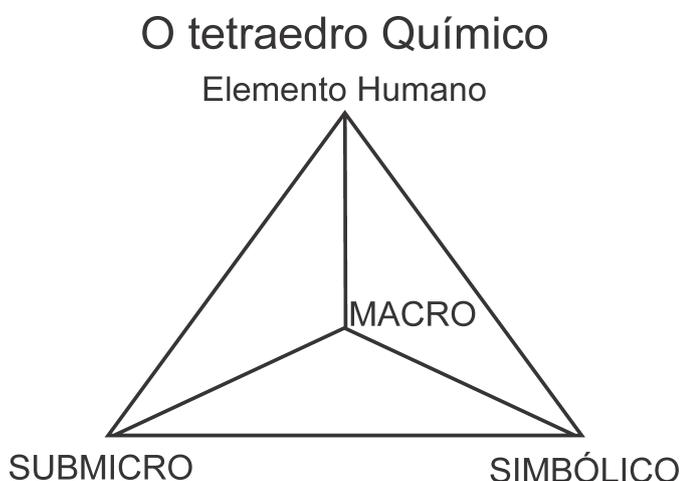


Figura 2 – Tetraedro de Mahaffy, que complementa Triângulo de Johnstone com topo, representando o elemento humano no ensino de química.

Com o objetivo de formar cidadãos responsáveis e críticos, a química deve abordar questões diárias da vida e da sociedade, incluindo as culturas humanas, ética e política. Deve-se também preocupar com avaliação de risco, aplicações industriais e seus impactos ecológicos e socioeconômicos. Logo, na formação de professores de química são necessários três tipos de conhecimento: (1) conhecimento em química “ontológico” (química real), (2) conhecimento “epistemológico” (filosófico e perspectivas sociológicas sobre a prática de química) e (3) conhecimento “ético” (reflexão do papel da química na sociedade) (Sjöström, 2013).

---

## OBJETIVOS

---

### 2.1 Geral

O objeto de estudo deste projeto foi o estudo das reações de substituição eletrofílica aromática, preocupando-se em avaliar fatores além da química, como seu contexto social, político, econômico e ambiental. Assim, possibilitar discussões, nas quais as tomadas de decisões não tenham uma visão limitada a resultados de bancada.

### 2.2 Específico

Utilizar como substratos-modelo anisol, N,N-dimetilanilina e isopropoxibenzeno na presença de ácidos de Lewis que se prestem à discussões de natureza sócio-ambiental na medida que diferem entre si quanto a disponibilidade dos recursos naturais, custo e toxicidade. Avaliar com base em RMN  $^1H$  e GC-MS a composição do bruto da mistura reacional e inferir sobre a seletividade e identidade dos produtos obtidos.

Por fim, realizar uma revisão bibliográfica para adquirir conhecimentos da disponibilidade, origem e efeitos do uso dos insumos, tendo base para relacionar as tomadas de decisões não só pelos fatores químicos, mas também no âmbito social, econômico e político.



---

## METODOLOGIA

---

### 3.1 Metodologia

Conforme a Figura 3, as reações estudadas foram acilação de Friedel-Crafts, usando-se  $ZnO$ ,  $Co(acac)_2$ ,  $AuCl_3$  e  $NbCl_5$  como ácidos de Lewis (X), fixou-se três grupos substituintes (R) para cada série de estudo: anisol, N,N-dimetilanilina e isopropoxibenzeno.

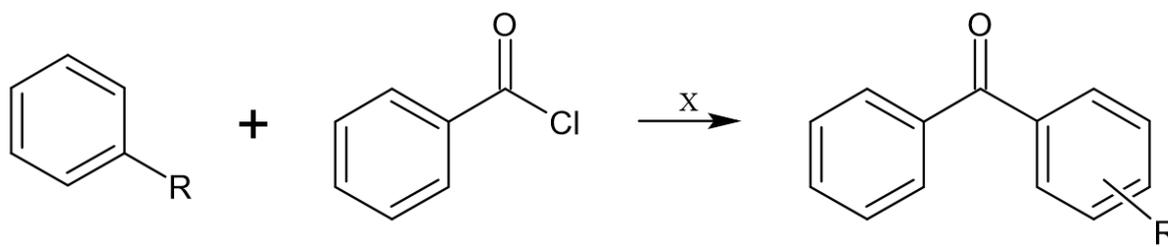


Figura 3 – Esquema geral das reações; X =  $ZnO$ ,  $Co(acac)_2$ ,  $AuCl_3$  ou  $NbCl_5$ ; R = anisol, N,N-dimetilanilina e isopropoxibenzeno

Os procedimentos tiveram como base dados encontrados na literatura, de forma a investigar e discutir as reações antes de levá-las a bancada de laboratório, e assim, evitando desperdícios desnecessários, e economizando tempo. As reações foram acompanhadas com cromatografia de camada delgada (CCD/TLC) e caracterizadas, inicialmente com RMN  $^1H$ , mas foi necessário, principalmente, análise via GC-MS.



---

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

---

### 4.1 Síntese cloreto de benzoíla

Misturou-se ácido benzóico ( $0,1779\text{mol}$ ) em tolueno ( $50\text{mL}$ ), a pouca solubilidade demonstrada deve-se a presença de anel aromático em ambos compostos. Conforme se adicionou cloreto de tionila ( $0,2134\text{mol}$ ) com o auxílio do funil de adição, a solubilidade aumentou. A reação permaneceu em refluxo por cerca de 30 minutos até solubilidade total. O produto de interesse foi destilado à pressão reduzida ( $100\text{mbar}$ ,  $85 - 90^\circ\text{C}$ ) (KUDELKO; WRÓBLOWSKA, 2014).

Devido a liberação de  $\text{HCl}(g)$  e  $\text{SO}_2(g)$ , montou-se uma armadilha para capturá-los, adicionando  $\text{NaOH}$  e fenolftaleína (controle de meio básico para neutralização dos gases ácidos liberados) em um frasco, o qual foi conectado a um frasco vazio, como garantia de que o frasco armadilha não expulsasse líquidos no balão de reação devido à pressão do sistema.

Massa de cloreto de benzoíla obtida:  $19,74\text{g}$ , líquido incolor, (rendimento:  $78\%$ ).

### 4.2 Síntese isopropoxibenzeno

Preparação do brometo de isopropila: Misturou-se álcool isopropílico ( $0,85\text{mol}$ ) com  $\text{NaBr}$  ( $0,92\text{mol}$ ), mantendo em agitação. Após esfriar, uma solução de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  ( $38\text{mL}$  de ácido diluído em  $38\text{mL}$  de água) foi adicionada lentamente. A mistura permaneceu em refluxo por uma hora em banho-maria com óleo, conforme esfriou, o sólido cristalizou-se, o qual se dissolveu novamente na destilação simples ( $T_e = 56^\circ\text{C}$ ) (ISOPROPYL...).

Massa de brometo de isopropila obtida:  $29,15\text{g}$ , líquido incolor, (rendimento:  $71\%$ ).

Para preparação do isopropoxibenzeno, adicionou-se sódio metálico ( $1,86\text{g}$ ) em excesso de etanol ( $50\text{mL}$ ), a isto se acrescentou fenol ( $0,081\text{mol}$ ) e, por último, o brometo de isopropila já sintetizado ( $0,081\text{mol}$ ). Por fim, o conteúdo ficou em refluxo por 5 horas. O etanol foi destilado ( $78^\circ\text{C}$ ), e nesta etapa, formou-se uma pasta, sendo necessária uma extração com água e diclorometano, após secagem com sulfato de sódio e filtração, a solução ficou límpida amarela, repetiu-se a destilação para retirar o diclorometano ( $38 - 42^\circ\text{C}$ )

Por fim, uma destilação à pressão reduzida ( $220\text{mbar}$ ,  $114^\circ\text{C}$ ) foi realizada para obter o composto desejado e sua síntese foi confirmada com análise de RMN  $^1\text{H}$  (SMITH, 1934).

Massa obtida: 4,29g, líquido incolor, (rendimento: 38%).

### 4.3 Síntese do $Co(acac)_2$

Dissolveu-se 1,6g de hidróxido de sódio (0,04mol) em 15mL de água, nesta mistura adicionou-se 4,5mL de acetilacetona (0,0044mol), mantendo a temperatura abaixo de 40°C com banho de gelo. Resultando numa mistura A com coloração amarela, porém o sólido não se dissolveu, acrescentando-se mais água até total dissolução.

Separadamente, 4,76g de  $CoCl_2 \cdot 6 H_2O$  (0,02mol) foi adicionado em 25mL de água, gerando uma mistura B de coloração avermelhada. A mistura A foi adicionada em B, aos poucos, gerando um precipitado salmão. Realizou-se filtração à vácuo e o sólido obtido foi dissolvido em uma mistura de 39mL de álcool etílico com 26mL de clorofórmio, purificando com recristalização (GOFF *et al.*, 1982). A fim de confirmar a síntese do  $Co(acac)_2$ , realizou-se uma análise por meio de Infravermelho, comparando com dados da literatura concluiu-se que, de fato, o produto desejado foi produzido.

Massa obtida de  $Co(acac)_2$ : 5,143g, pó rosa claro, (rendimento: 49%)

### 4.4 Síntese $Au_2Cl_6$

Adicionou-se 2,1g de ouro em 12mL de água régia 3ml HCl : 1ml HNO<sub>3</sub>, reagiu-se numa temperatura próxima, mas não superior, a 120°C. Obtendo-se uma solução laranja intensa, após evaporação do resto de água régia, obteve o produto desejado (CHEN; PAPANIZOS; FACKLER, 1985).

A confirmação do produto desejado foi feito por Espectroscopia Raman, comparando com espectro obtido na literatura.

Massa obtida: 2,829g, sólido vermelho, (rendimento 88%)

### 4.5 Formação Ácido benzoico

A formação de ácido benzoico, como será vista adiante, foi extremamente comum, assim, é importante entendermos o motivo. O cloreto de benzoíla ao entrar em contato com a água do ar pode voltar ao composto de partida, ou seja, ácido benzoico, conforme mecanismo apresentado na Figura 4 (SARVARI; SHARGHI, 2004).

### 4.6 Reações com ZnO

A Figura 5 apresenta o método geral utilizado ao usar o ZnO como ácido de Lewis.

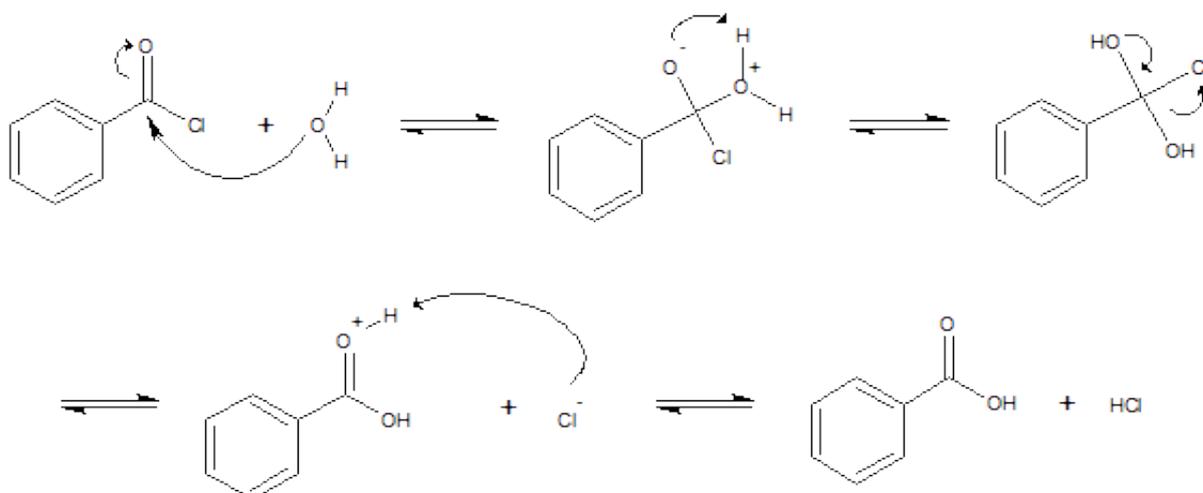


Figura 4 – Mecanismo de reação ácido benzóico

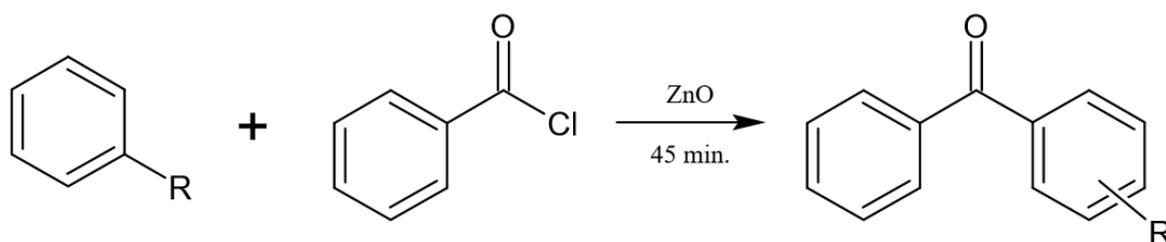


Figura 5 – Procedimento geral usando-se ZnO

Adição de cloreto de benzoíla (4,44mmol) ao grupo substituinte (4,44mmol), e por fim, o ZnO (2,22mmol), mantendo em agitação por cerca de 45 minutos. Usou-se diclorometano para finalizar as reações, que foram filtradas, extraídas com água e diclorometano, secadas com sulfato de sódio, filtradas novamente, evaporou-se o solvente e caracterizou-se com espectro de RMN  $^1H$  e CG-MS (SARVARI; SHARGHI, 2004).

#### 4.6.1 Substituinte Anisol

Com a adição do ZnO, a solução rapidamente ficou amarela e, em seguida, vermelha/alaranjada, liberando muito calor. Após análise dos espectros RMN  $^1H$  em conjunto com CG-MS, concluiu-se de que a reação ocorreu e o produto desejado foi alcançado, majoritariamente o p-metóxi-benzofenona (83,68%), mas obteve-se também o o-metóxi-benzofenona (2,36%) e resíduo de ácido benzóico (13,97%).

#### 4.6.2 Substituinte Isopropoxibenzeno

Quando o ZnO foi adicionado ao meio reacional, a solução ficou amarela e, rapidamente, laranja, liberando muito calor. Após purificação, realizou-se uma análise espectro de RMN  $^1H$  e

CG-MS. podendo concluir que a reação ocorreu. Formou-se de forma majoritária o produto p-isopropoxibenzofenona (67,60%), o-isopropoxibenzofenona (1,52%) e resíduo de ácido benzoico (2,62%). A fim de permitir a comparação entre as reações dos outros grupos substituintes, o resíduo de isopropoxibenzeno foi desconsiderado.

Aspecto: líquido amarelo.

### 4.6.3 Substituinte *N,N*-dimetilanilina

Realizando-se o procedimento geral, a *N,N*-dimetilanilina é misturada, primeiramente, com o cloreto de benzoíla, assim o par de elétrons isolado do nitrogênio ataca a carbonila, formando um intermediário e expulsando  $Cl^-$ , o qual pode retirar uma das metilas ligadas ao nitrogênio, formando uma amida e clorometano, conforme a Figura 6.

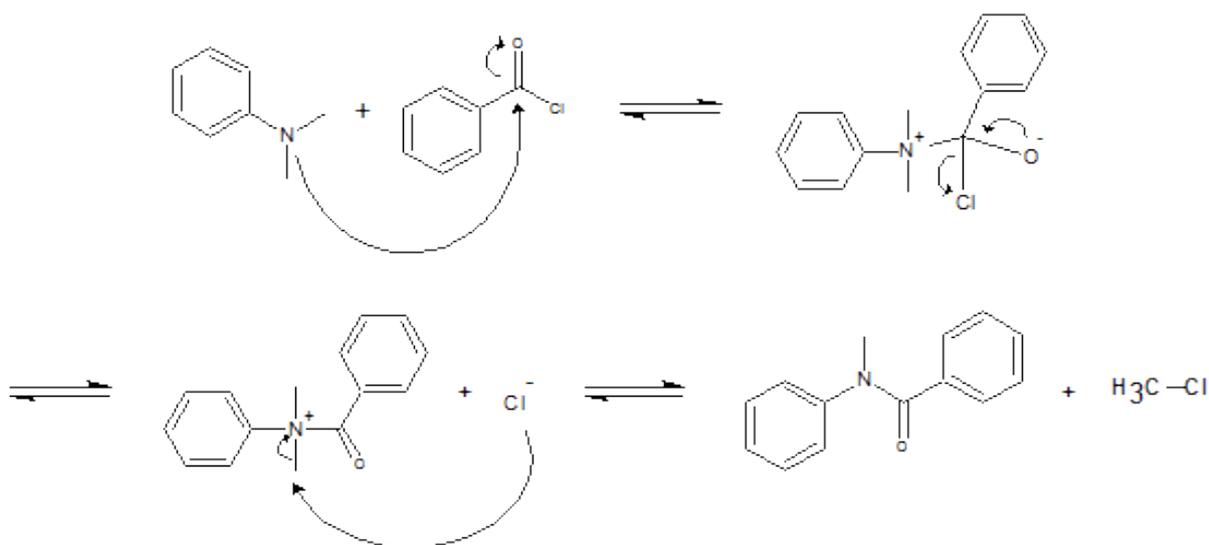


Figura 6 – Mecanismo de formação de amida e clorometano

Há ainda a possibilidade de uma complexação do Zinco do catalisador com o oxigênio proveniente do cloreto de benzoíla no composto intermediário, dessa forma o íon acílio é gerado e o intermediário retorna a *N,N*-dimetilanilina, que irá atacar o íon acílio, formando o produto de interesse.

Assim, realizando-se um segundo método ao alterar a ordem de adição dos reagentes, colocando primeiro o grupo substituinte com o óxido de zinco, e por último o cloreto de benzoíla, evitando formação da amida, uma vez que o cloreto de benzoíla não interage com o substituinte diretamente, facilitando a formação do íon acílio e consequentemente do produto desejado.

A ordem dos reagentes interfere no mecanismo de reação para este grupo, mas não nos outros devido ao fato do nitrogênio ser um melhor doador de elétrons, pois é menos eletronegativo que o oxigênio dos outros substituintes.

Realizou-se então a reação do segundo método, na qual a solução ficou amarela, seguida de verde e acabando em azul. Na extração, a fase aquosa ficou mais azul e a orgânica verde. Os espectros de RMN  $^1H$  e GC-MS indicaram que mesmo assim não foi formado o produto desejado, formou-se um produto desconhecido (83,73%), N-metil-fenil-benzamida (3,05%) e resíduo de ácido benzóico (8,48%)

Aspecto: Pasta azul.

## 4.7 Reações com $Co(acac)_2$

A Figura 7 apresenta o método geral utilizado ao usar o  $Co(acac)_2$  como ácido de Lewis.

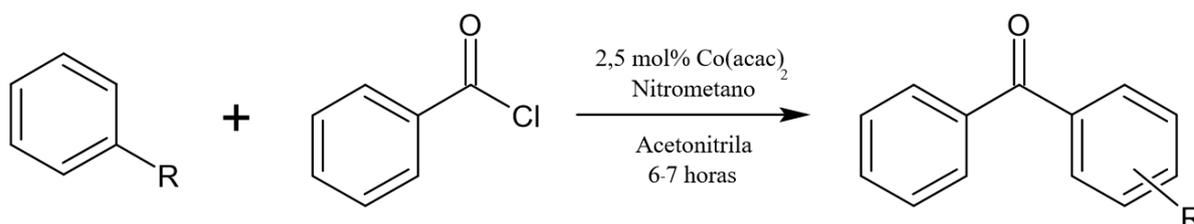


Figura 7 – Procedimento geral usando-se  $Co(acac)_2$

As reações de acilação de Friedel-Crafts, foram realizadas com um método geral, adicionou-se 4,44mmol do grupo substituinte em 2mL de uma mistura de nitrometano com acetonitrila, 7 : 2 respectivamente, a isto acrescentou-se 6,66mmol do cloreto de benzoíla, e por fim 2,5mol% do  $Co(acac)_2$ . As reações ficaram em refluxo por 6 – 7 horas (TAMILSELVAN *et al.*, 2008) e foram finalizadas com diclorometano, extraídas com este mesmo solvente e água, adição de agente secante (sulfato de sódio), filtragem e evaporação do solvente. Por fim, caracterizou-se com espectro de RMN  $^1H$  e CG-MS.

### 4.7.1 Substituinte Anisol

Na adição do complexo de cobalto, a mistura ficou azul, seguida de verde escuro e, ao fim, castanho escuro. Com os espectros de RMN  $^1H$  e GC-MS foi possível concluir de que houve a formação dos produtos p-metóxi-benzofenona (58,70%) e o-metóxi-benzofenona (9,01%) com resíduo de ácido benzóico (22,68%).

Aspecto: Cristal castanho.

### 4.7.2 Substituinte Isopropoxibenzeno

A alteração da coloração no decorrer da reação foi semelhante ao substituinte anisol. Obteve-se também os espectros de RMN  $^1H$  do bruto de reação, e GC-MS para análise.

Concluiu-se de que formou apenas o produto p-isopropoxibenzofenona (65,93%) e resíduo de ácido benzóico (10,57%).

Aspecto: Pasta castanhos escuro.

### 4.7.3 Substituinte *N,N*-dimetilanilina

Com a adição do complexo de cobalto, a mistura ficou verde, seguida de um azul escuro. Os espectros de RMN  $^1H$  e GC-MS permitiram concluir de que houve formação de *N*-metil-fenil-benzamida (74,50%) e resíduo de ácido benzóico (19,00%). Vale ressaltar de que esta reação com  $Co(acac)_2$  foi realizada de acordo com o procedimento geral descrito, sem ter feito pelo outro método de adicionar o cloreto de benzoíla por último, motivo pelo qual a amida obtida nesta série foi superior à obtida com  $ZnO$ .

Aspecto: Pasta azul escuro.

## 4.8 Reações com $AuCl_3$

A Figura 8 apresenta o método geral utilizado ao usar o  $Au_2Cl_6$  como ácido de Lewis.

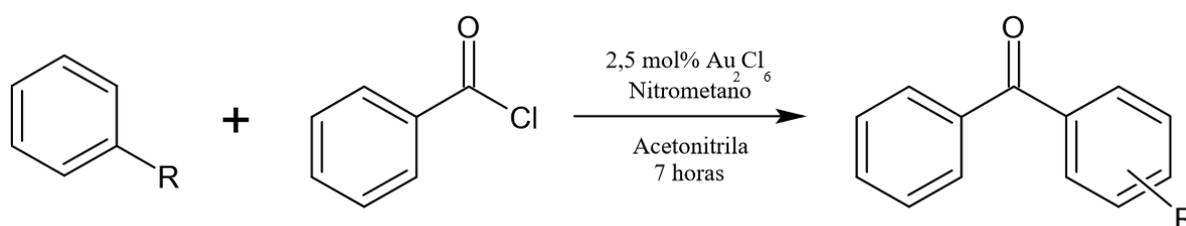


Figura 8 – Procedimento geral usando-se  $Au_2Cl_6$

As reações desta série foram realizadas de modo análogo às que tiveram o  $Co(acac)_2$  como ácido de Lewis.

### 4.8.1 Substituinte Anisol

Com a adição do  $Au_2Cl_6$ , a solução adquiriu uma coloração castanha/alaranjada. Com os espectros de RMN  $^1H$  e CG-MS, concluiu-se que formou-se p-metóxi-benzofenona (76,54%), o-metóxi-benzofenona (3,74%) e resíduo de ácido benzóico (7,83%).

Aspecto: Pasta castanho escuro.

### 4.8.2 Substituinte Isopropoxibenzeno

A mistura ficou amarela com a adição de  $Au_2Cl_6$ , seguida de laranja, vermelho e, por fim, castanho avermelhado. O estudo dos espectros permitiu-se concluir de que houve formação de

p-isopropoxibenzofenona (57,2%), o-isopropoxibenzofenona (0,6%) e resíduo de ácido benzóico (14,4%)

Aspecto: Líquido laranja.

### 4.8.3 *Substituinte N,N-dimetilanilina*

Após adição de  $Au_2Cl_6$ , a solução ficou verde, seguida de azul, roxo e, por fim, azul escuro. Com as análises dos espectros concluiu-se a formação de N-metil-fenil-benzamida (32,2%), resíduo de N,N-dimetilanilina (8,1%) e resíduo de ácido benzóico (50,8%)

Aspecto: Pasta azul esverdeada

## 4.9 Extras

Três reações “extras” foram realizadas com o grupo substituinte anisol, usando-se como ácido de Lewis, o pentacloroeto de nióbio e dois complexos preparados por alunos na disciplina de “Química de Coordenação” da UFABC. Exceto o  $NbCl_5$ , o procedimento foi realizado conforme descrito as reações com  $Co(acac)_2$ .

### 4.9.1 *Pentacloroeto de nióbio*

Preparou-se uma solução de 2mmol de  $NbCl_5$  em 4mL de diclorometano, na qual foi adicionado 0,5mmol de ácido benzoico. A esta mistura, acrescentou-se, lentamente, a solução de 1mol do substituinte em 1mL de diclorometano. Manteve-se agitação a temperatura ambiente por 80 minutos. Após adição de 15mL de água destilada, a agitação foi mantida por mais 30 minutos (BARBOSA; SILVA; CONSTANTINO, 2015).

Com a adição do anisol, a mistura ficou instantaneamente castanha escura. Mas após adição da água, a reação desta com o restante de  $NbCl_5$  formou-se óxido de nióbio, substância sólida e branca. Desta forma, precisou-se adicionar excesso de diclorometano e transferir toda a mistura para um funil de separação. Após uma extração grosseira da fase aquosa e fase orgânica. Repetiu-se a extração algumas vezes com a fase aquosa. Após unir as fases orgânicas obtidas, realizou-se secagem com sulfato de sódio, filtragem e secagem do solvente.

As análises dos espectros permitiram a conclusão da formação de p-metóxi-benzofenona (97,94%), o-metóxi-benzofenona (0,8%) e resíduo de ácido benzóico (1,3%).

Aspecto: Óleo verde claro.

### 4.9.2 *tris-(oxalato)cromato(III) de potássio*

O complexo quase não se dissolveu, com aquecimento a solubilidade aumentou um pouco, deixando a mistura esverdeada. O estudo dos aspectos inferiu a não ocorrência desta

reação, visto que não houve formação de produtos e observou-se apenas ácido benzóico (95,8%).

Aspecto: Cristais rosa

### 4.9.3 tetratiocianocobalto(II) de mercúrio

O complexo tetratiocianocobalto(II) de mercúrio mostrou uma maior solubilidade em relação ao complexo de cromato. A mistura obteve uma cor castanha. A investigação dos espectros permitiu a dedução de formação de p-metóxi-benzofenona (64,1%), o-metóxi-benzofenona (1,4%) e resíduo de ácido benzóico (34,4%)

Aspecto: Cristal castanho.

## 4.10 Dados compactos

As tabelas 1, 2 e 3 mostram, respectivamente os tempos de retenção obtidos para os substituintes anisol, isopropoxibenzeno e N,N-dimetilanilina.

Tabela 1 – Tempo de retenção (T.R. min) - Substituinte anisol

	ZnO	Co(acac) <sub>2</sub>	AuCl <sub>3</sub>	NbCl <sub>5</sub>	Hg[Co(SCN) <sub>4</sub> ]	K <sub>3</sub> [Cr(C <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> ]
Ácido Benzóico	7,8	8,3	7,5	7,7	7,8	8,1
o-metóxi-benzofenona	15,5	16,4	-	15,4	15,4	-
p-metóxi-benzofenona	17,0	18,0	16,9	17,1	16,9	-

Fonte: Dados da pesquisa.

Tabela 2 – Tempo de retenção (T.R. min) - Substituinte isopropoxibenzeno

	ZnO	Co(acac) <sub>2</sub>	AuCl <sub>3</sub>
Isopropoxibenzeno	5,4	-	5,4
Ácido Benzóico	7,5	7,4	7,8
o-isopropoxibenzofenona	19,2	-	19,1
p-isopropoxibenzofenona	17,9	17,8	17,9

Fonte: Dados da pesquisa.

Tabela 3 – Tempo de retenção (T.R. min) - Substituinte N,N-dimetilanilina

	ZnO	Co(acac) <sub>2</sub>	AuCl <sub>3</sub>
N,N-dimetilanilina	-	-	6,3
Ácido Benzóico	7,6	7,5	7,9
N,metil-fenil-benzamida	16,2	15,3	15,3

Fonte: Dados da pesquisa.

Os tempos de retenção ajuda a inferir que se trata do mesmo produto formado ao variar o ácido de Lewis, visto que ao tratar de um mesmo composto o tempo de retenção deve ser

semelhante, porém é insuficiente para caracterização. Nas tabelas mostradas acima é possível notar que os valores são parecidos, mas não idênticos, uma possível causa disso é devido a variações das condições do equipamento, visto que as análises foram feitas em dias distintos.

Já o rendimento cromatográfico da reação oferece uma visão para discussão dos melhores ácidos de Lewis utilizados no que diz respeito aos resultados obtidos. Os quais são apresentados nas tabelas 4, 5 e 6, referentes respectivamente aos substituintes anisol, isopropoxibenzeno e N,N-dimetilanilina.

Tabela 4 – Rendimento Cromatográfico (R.C.%) - Substituinte Anisol

	<i>ZnO</i>	<i>Co(acac)</i> <sub>2</sub>	<i>AuCl</i> <sub>3</sub>	<i>NbCl</i> <sub>5</sub>	<i>Hg[Co(SCN)</i> <sub>4</sub> ]	<i>K</i> <sub>3</sub> [ <i>Cr(C</i> <sub>2</sub> <i>O</i> <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> ]
Ácido Benzóico	7,8	22,7	7,8	1,3	34,4	95,8
o-metóxi-benzofenona	2,4	9,0	-	0,8	1,4	-
p-metóxi-benzofenona	83,7	58,7	76,6	97,9	64,1	-

Fonte: Dados da pesquisa.

Tabela 5 – Rendimento Cromatográfico (R.C.%) - Substituinte isopropoxibenzeno

	<i>ZnO</i>	<i>Co(acac)</i> <sub>2</sub>	<i>AuCl</i> <sub>3</sub>
Isopropoxibenzeno	Desconsiderado	-	Desconsiderado
Ácido Benzóico	2,6	10,6	14,4
o-isopropoxibenzofenona	1,5	-	0,6
p-isopropoxibenzofenona	67,6	65,9	57,2

Fonte: Dados da pesquisa.

Tabela 6 – Rendimento Cromatográfico (R.C.%) - Substituinte N,N-dimetilanilina

	<i>ZnO</i>	<i>Co(acac)</i> <sub>2</sub>	<i>AuCl</i> <sub>3</sub>
N,N-dimetilanilina	-	-	8,1
Ácido Benzóico	8,5	19,0	50,8
N,metil-fenil-benzamida	3,1	74,5	32,2

Fonte: Dados da pesquisa.

A discussão será baseada nos resultados obtidos para o substituinte anisol, visto que foi com este que se realizou maior número de reações variando-se o ácido de lewis. O *Co(acac)*<sub>2</sub> em relação ao *ZnO* mostrou um menor rendimento e menor seletividade, uma vez que sobra quantidades maiores de resíduo de ácido benzóico e maior formação do produto orto. Já o *AuCl*<sub>3</sub> em comparação ao *ZnO*, ambos possuem mesma quantidade de resíduo de ácido benzóico, e apesar do metal ouro ter oferecido menor rendimento do produto para-substituído, não houve formação do orto-substituído, mostrando-se melhor para reações regioseletivas.

Comparando o ácido de Lewis de ouro com o de nióbio, este manifestou um rendimento melhor que o *ZnO* e *AuCl*<sub>3</sub> e extremamente seletivo, embora tenha formado os produtos para e orto, este pode ser desconsiderado tendo em vista que formou apenas 0,8% enquanto que aquele

formou 97,9%. O complexo  $Hg[Co(SCN)_4]$  nitidamente foi aquele com pior rendimento, apesar de também ter se mostrado seletivo. Por fim, o complexo  $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$  não gerou produtos, obtendo apenas ácido benzóico (95,8%).

Os cromatogramas com suas atribuições e justificativas por meio de mecanismo bem como os espectros de RMN  $^1H$  encontram-se nos anexos.

## 4.11 Problemas sociais, ambientais e econômicos

Além dos fatores de rendimento de reação e regioselectividade dos ácidos de Lewis estudados, deve-se também avaliar a forma de obtenção desses metais, sua disponibilidade e impactos sociais e ambientais. Para isso, realizou-se uma revisão bibliográfica a fim de colocar diversos fatores em discussão. Este tópico irá discutir, separadamente, cada um dos metais utilizados, exceto aquele em que não houve formação de produto.

### 4.11.1 Zinco

A China é a maior produtora de minério zinco, produzindo 31,45%, enquanto que o Brasil representa apenas 2,3% da produção mundial. As reservas brasileiras de zinco com importância econômica significativa localizam-se, principalmente, no Estado de Minas Gerais (88%), e o restante distribuído em Mato Grosso, Paraná e Pará ([INFORMAÇÕES... , 2012](#)).

A principal empresa responsável pelo investimento da exploração mineral de zinco na América Latina é a Votorantim Metais, sendo esta uma das maiores produtoras mundiais, possui unidades Três Marias e Juiz de Fora, no Estado de Minas Gerais ([RUSSO, 2007](#)).

O zinco é extraído, principalmente, de minerais e ocorre em abundância na crosta terrestre. Aproximadamente 30% da produção deste metal tem origem na reciclagem de sucatas (metal secundário), recuperando o zinco sem perda de propriedades físico-químicas ([NEVES, .](#)). O processo metalúrgico para obtenção do zinco demanda elevado uso de energia elétrica, pois é necessária uma recuperação final do metal por eletrólise ([SANTOS, 2009](#)).

Por possuir propriedade anticorrosiva e se combinar facilmente a outros metais, é utilizado na automobilística, construção civil e eletrodomésticos ([NEVES, .](#)). O óxido de zinco  $ZnO$  tem aplicações diversas ao seu uso como catalisador de processos químicos. Possui utilidades na fabricação de tintas, cosméticos, fármacos, protetores solares, maquiagens, aditivo alimentar, e devido a seu caráter de semicondutor, é usado também em equipamentos eletrônicos ([MEDEIROS, 2012](#)).

### 4.11.2 Cobalto

O cobalto é encontrado, principalmente, nos minerais cobaltite ( $CoAsS$ ), esmaltita ( $CoAs_2$ ) e liníta ( $Co_3S_4$ ). Este mineral é obtido, majoritariamente, como subproduto da produção

do cobre e níquel (SHRIVER; ATKINS, 2008).

Aproximadamente metade da produção mundial de Cobalto é realizada na República Democrática do Congo (RDC). Especialistas do setor se preocupam com isso, visto que é um mineral com demandas crescentes, cujo maior responsável por sua produção é a África, que vivencia instabilidade e diversos problemas sociais. No Brasil, o cobalto é obtido como subproduto do níquel e cobre nas jazidas em Goiás e Minas Gerais e é fornecido às indústrias químicas pela Votorantim (FONSECA, 2013).

O cobalto possui aplicações na produção de vidros e cerâmicas azuis, produção de ligas especiais e superligas, na indústria do petróleo como catalisador, em tratamento de câncer, na produção de baterias de veículos híbridos e, principalmente, na produção da maioria dos dispositivos móveis. Avalia-se que o cobalto possa ser, no futuro, uma alternativa econômica para substituir a platina no processo na produção de hidrogênio combustível a partir da água (BOA, 2018).

O mercado mundial de cobalto é abastecido pela indústria mineradora de Katanga, região localizada no sul da RDC, porém esta indústria é acompanhada de violações dos direitos humanos e negligência. A descarga inadequada de águas residuais contaminadas tornou a água da região imprópria para consumo das comunidades locais (SCHEELE; HAAN; KIEZEBRINK, 2016).

As atividades de mineração são localizadas próximas a cidade e aldeias, deixando a população exposta à fumaça, poeira, ruído e água contaminada. Essa condição pode desencadear uma série de problemas pulmonares, como asma, diminuição da função pulmonar e pneumonia. Pesquisas já mostraram que as pessoas presentes próximas às minas continham 43 vezes mais o nível de cobalto considerado normal (SCHEELE; HAAN; KIEZEBRINK, 2016).

Um estudo avaliou a contaminação de metais na urina da população em Katanga, encontrando níveis altos de metais tóxicos na urina, principalmente em crianças. O cobalto mostrou-se o metal de maior concentração na urina, ultrapassando os níveis máximos toleráveis (BANZA *et al.*, 2009).

O setor de mineração é a principal fonte de renda do estado do congo, contribuindo com mais de 11% do produto bruto interno (PIB) e sendo responsável em oferecer emprego ao menos para meio milhão de pessoas. No entanto, submete homens, mulheres e crianças a trabalharem em condições atroz, com alta insegurança e com confrontos violentos da polícia, em troca de um baixo pagamento (SCHEELE; HAAN; KIEZEBRINK, 2016).

Além da violação do ponto de vista dos direitos humanos, há danos grandes do ponto de vista ambiental como a perda da biodiversidade, desmatamento, poluição do ar e contaminação da água com compostos tóxicos e radioativos (SCHEELE; HAAN; KIEZEBRINK, 2016).

O trabalho infantil nessas atividades minerárias é comum, devido, principalmente, ao fato das crianças conseguirem melhor acesso às minas pelos corredores estreitos devido a seus tamanhos (SCHEELE; HAAN; KIEZEBRINK, 2016).

A extração de mineral tem um enorme custo humano na África, sua história de exploração colonial bruta se repete nos dias atuais, condição mostrada por uma reportagem realizada pela *SkyNews* a respeito da exploração de minerais. A reportagem acompanha um grupo de trabalhadores, no qual o mais novo tinha apenas 4 anos, as crianças trabalham como escravos modernos, e apesar do trabalho árduo, a comida não é garantida. Elas trabalham sem sapatos, luvas ou máscaras nas condições mais precárias para fornecerem milhões para empresas multinacionais, principalmente as da china, enquanto sofrem em miséria ([SKY NEWS](#), ).

### 4.11.3 Ouro

O ouro é obtido em rochas antigas de depósitos, em geral, originados de eventos vulcânicos e alterações dessas rochas. As reservas mundiais de ouro ultrapassam 90.000 toneladas, porém aquelas com alto teor representam menos de 20% das reservas lavráveis de ouro. Os produtos de ouro com altos valores são as joias e adornos, mas possui usos também na indústria eletrônica ([NETO, 2009](#)). As reservas economicamente aproveitáveis no Brasil estão concentradas nos Estados de Minas Gerais (45,6%), Goiás (12,3%), Mato Grosso (11%), Pará (11%), Amapá (7,6%), Bahia (7,4%) e Maranhão (3,6%) ([LOBATO et al., 2016](#)).

Um marco na história do ouro no Brasil foi o garimpo de Serra Pelada, localizada no sudeste do Pará. A descoberta de ouro na região atraiu muitas pessoas em busca de fortuna no pará. O local pertencia a companhia Vale do Rio doce e, em 1992, o garimpo foi fechado, de forma que os garimpeiros que se mantiveram enfrentaram diversas dificuldades ([ANGOTTI et al., 2016](#)).

Somente em 2007, que se formalizou um acordo para regularização do garimpo na região, de forma que o minério extraído seria de direito dos garimpeiros, mas o calcário seria repassado à Vale do Rio Doce ([ANGOTTI et al., 2016](#)).

O principal efeito do garimpo é a poluição com mercúrio no solo, sedimentos, águas e rios. Os impactos na fauna e flora implicam na propagação de doenças, como a malária. Além de que, não havia nenhum cuidado com os garimpeiros, os trabalhadores que migraram em busca de um sonho, submetiam-se a condições precárias de vida com condições de trabalho insalubres ([ANGOTTI et al., 2016](#)).

Por trás da obtenção do ouro, há um grande impacto social uma vez que o garimpo é uma das principais atividades do setor, porém acompanhadas de uma grave situação do ponto de vista trabalhista, de saúde e segurança, por possuir alto índice de informalidade. As consequências do garimpo atingiam as vidas pessoais da comunidade local, já que era comum assassinatos devido brigas e “acertos de contas”, proliferação de doenças sexualmente transmissíveis e abuso de álcool e drogas ([ANGOTTI et al., 2016](#)).

#### 4.11.4 Mercúrio

O mercúrio é encontrado no meio ambiente associado a outros elementos, principalmente ao enxofre no minério de cor vermelha ou preta cinabre ( $HgS$ ), com as maiores reservas localizadas na Espanha e na Itália. O minério é aquecido e condensado para obtenção do mercúrio metálico. Outro meio de obtenção desse metal são erupções vulcânicas, evaporação natural e minas de mercúrio (MICARONI; BUENO; JARDIM, 2000).

As aplicações do mercúrio são diversas: Na forma metálica é usado em termômetros, barômetros e manômetro; Na forma de compostos orgânicos é aplicado em inseticidas, bactericidas e fungicidas; E na forma de compostos inorgânicos tem finalidade em catálise na indústria de polímeros sintéticos (MICARONI; BUENO; JARDIM, 2000).

Ao tratar de um metal pesado como o mercúrio, deve-se uma maior atenção em relação aos seus resíduos, uma vez que descarte inapropriado implica em efeitos ecotoxicológicos e doenças. No Brasil, a gestão de resíduos tecnológicos, os quais possuem diversos metais pesados, é insuficiente e há poucos sistemas de coleta ou tratamento de tais resíduos, acarretando em danos à saúde e ao meio ambiente (CESAR, 2011).

O mercúrio é um dos metais mais perigosos devido a sua alta ecotoxicidade e quando liberado ao meio ambiente, a cadeia alimentar é afetada por ele podendo atingir o homem através da alimentação provocando riscos de saúde (CESAR, 2011).

No Amapá, há muita liberação de metais pesados, em especial o mercúrio proveniente dos rejeitos da exploração de ouro na região de garimpo em Lourenço, provocando impactos ambientais. Encontrou-se a região níveis de mercúrio acima da concentração máxima permitida em várias espécies de peixes e na água. Verificou-se que a ingestão de metais pesados acima do permitido pode acarretar em atividade carcinogênica, e, no caso do mercúrio, os principais efeitos nocivos são lesões no sistema neurológico, imunológico, deformações no corpo e má formação do feto (LIMA, 2013).

O mercúrio é responsável pela captura e retenção de ouro, pois forma-se amálgama (liga metálica originada pela reação do mercúrio com outro metal). Desta forma, é o metal pesado mais liberado nas atividades de garimpo. Apresentou-se que 20% do mercúrio utilizado é perdido para a atmosfera na queima da amálgama e 10% é descarregado nas águas. Além de que, para obtenção de 1Kg de ouro, usa-se cerca de 1,5Kg de mercúrio (LIMA, 2013).

Durante amálgama, perde-se mercúrio metálico nos rios e solos devido às condições precárias de manuseio e a vaporização. Após esta etapa, o produto  $Au - Hg$  é queimado, em geral, ao ar livre, liberando mercúrio para a atmosfera, local em que é oxidado para mercúrio  $Hg^{2+}$ , então se condensa nas nuvens e volta ao solo e água através da chuva, alterando-se para uma constituição tóxica: mercúrio orgânico, o qual é absorvido pelos seres vivos e transformado para sua forma mais tóxica, o metilmercúrio ( $[CH_3Hg]^+$ ) (LIMA, 2013).

O metal encontra-se na forma mais tóxica quando está na forma de cátion ou associado a

cadeias carbônicas. Apresenta altos riscos aos organismos quando cátion, pois possui afinidade pelo enxofre, reagindo com radical sulfidril existente nas estruturas proteicas de enzimas, e portanto, causando danos ao metabolismo dos seres vivos. É o caso do mercúrio, quando na forma metilmercúrio atravessa as brânquias dos peixes e no interior do organismo interage com os grupos sulfidril das enzimas, motivo pelo qual é tóxico (LIMA; MERCON, 2011).

#### 4.11.5 Nióbio

O nióbio é um metal refratário de cor prateada-clara, dúctil, com elevado ponto de fusão resistente à corrosão, pois forma-se uma película superficial de óxido, apresenta diversos pontos de oxidação e, a temperatura ambiente, não reage com hidrogênio, ar, água e a maioria dos ácidos (SOUSA; FERNANDES; GUERRA, 2013).

O nióbio é aplicado em vários ramos, sendo o principal na obtenção de ligas, possui usos na indústria automobilística, naval e aeroespacial, construção civil e na obtenção de ligas supercondutoras, as quais são aplicadas em aparelhos de ressonância magnética nuclear (RMN), instrumento importante para a química e medicina. O composto pentóxido de nióbio ( $Nb_2O_5$ ) tem uso, por exemplo, em cerâmicas eletrônicas, lentes ópticas e filtros para receptores de TV (SOUSA; FERNANDES; GUERRA, 2013).

As maiores reservas de nióbio estão localizadas no Brasil, sendo as mais relevantes no Estado de Minas Gerais (Araxá e Tapira), Estado de Goiás (Catalão e Ouidor) e no Estado do Amazonas (São Gabriel da Cachoeira). O nióbio é encontrado em reservas significativas de minério pirocloro, atendendo necessidades atuais e futuras do uso de nióbio, mas este também é encontrado em minerais columbita e tantalita na Rondônia (Presidente Figueiredo) (LIMA., 2010).

Cerca de 98% das reservas de pirocloro estão no Brasil, oferecendo ao país uma posição privilegiada neste ramo, motivo pelo qual o maior produtor de nióbio é o Brasil, ofertando a liga ferro-nióbio, metal e outros compostos. O principal produtor, no Brasil, de nióbio é a Companhia Brasileira de Metalurgia e Mineração (CBMM), que junto em menor participação das empresas Anglo American e a Mineração Taboca, representam 98% da produção mundial (LIMA., 2010).

A versatilidade, vantagens econômicas e disponibilidade do nióbio contribuem para seu uso com um aumento acelerado. Por isso, as empresas brasileiras investem na pesquisa e desenvolvimento de produtos que utilizam nióbio, estimulando e diversificando o uso deste metal na siderurgia e metalurgia. Esta especial posição do Brasil ressalta a relevância de adoção de políticas que incentivem o uso do nióbio para um aumento da concorrência com o comércio exterior (LIMA., 2010).

A reserva de Morro dos Seis Lagos em São Gabriel da Cachoeira no Estado do Amazonas é considerada a maior do mundo, porém o nióbio, neste local, encontra-se na forma de mais de oito diferentes niobatos ( $NbO^{3-}$ ) complexos, não havendo ainda tecnologia conhecida

para aproveitamento do nióbio nestes minerais, sendo de alto interesse a pesquisa do mesmo (SANTOS; NAVA; FERREIRA, 2009).

O problema da exploração de nióbio no Amazonas, especificamente em São Gabriel da Cachoeira, deve-se ao fato de ser a região com a maior porcentagem (76,6%) de povos autodeclarados indígenas (IBGE, 2019). O que torna a exploração das riquezas naturais um assunto delicado por estarem presentes em terras indígenas, que devem ser discutida de forma cuidadosa, visto que trata-se de uma população que, historicamente, vive situações de pobreza e conflitos (SANTOS; NAVA; FERREIRA, 2009).

O estado do Amazonas é considerado um dos mais importantes do mundo devido sua vasta geodiversidade e importância ambiental, e possui uma diversidade de minerais metálicos (como ouro e nióbio) e não metálicos, além de fontes de petróleo e gás natural (SANTOS; NAVA; FERREIRA, 2009).

A mineração em terras indígenas é proibida no Brasil, mas há um projeto de Lei (PL 1610/96) que está em processo há 20 anos e tem como objetivo regularizar a exploração minerária em terras indígenas, e ainda tirar o direito dos indígenas de tomar decisão final a respeito da entrada de empresas mineradoras em suas terras. A aprovação desta lei impediria os índios de manterem sua autonomia e identidade a respeito da extração mineral em suas terras, eles devem ser consultados e terem a palavra final para qualquer aprovação (RADLER, 2017).

Embora a exploração minerária não seja permitida, as terras indígenas sofrem assédio pelos empreendimentos de extração minerária e as invasões de garimpeiros (RADLER, 2017). A atividade minerária trás impactos graves socioambientais e é uma constante ameaça, pois sua aprovação implicaria em impactos diretos em terras e povos indígenas (POR. . . , 2016).

A agência nacional de mineração (ANM) indeferiu mais de 50 processos interrompidos que requereu pesquisa e exploração mineral em terras indígenas, sendo São Gabriel da Cachoeira uma delas. Alguns dos requerentes foram a Vale e Mineração Taboca (LIMINAR. . . , 2019).

Logo, a exploração da reserva de Morro dos Seis Lagos em São Gabriel da Cachoeira não deve ser realizada a curto e médio prazo, pois tem como impedimento o fato de se situar em um território indígena e não possuir uma infraestrutura (JUNIOR; CAMPOS, 2016).

A questão da exploração de minerais na Amazônia não se restringe apenas às terras indígenas. A Amazônia tem sofrido diversas ações humanas que afetam sua conservação, como por exemplo as queimadas e o garimpo. A floresta amazônica representa um terço das florestas tropicais do mundo e possui mais da metade da biodiversidade do planeta, atribuindo-lhe papéis fundamentais na manutenção ecológica (A. . . , 2016).

A vegetação alta e densa desta floresta impede que o fogo escape de campos agrícolas e pastagens, protegendo contra incêndios. É nesta floresta também que se encontra 20% da água doce do mundo. Sua biodiversidade é um tesouro para a humanidade devido seu alto potencial de desenvolvimento biotecnológico. A Amazônia legal abriga 69% das terras indígenas do Brasil

e 55% das populações indígenas, que necessitam da floresta para manterem seu modo de vida e cultura (A..., 2016).

A floresta Amazônica possui um papel de escala mundial devido ao desempenho das árvores, que reduzem os níveis de poluição, as plantas conseguem retirar o gás carbônico da atmosfera e liberam oxigênio através do processo de fotossíntese. Porém, o carbono é armazenado para crescimento das plantas, e a queima da floresta libera novamente o gás carbônico para a atmosfera, logo, as queimadas intensificam o efeito estufa, e conseqüentemente, as alterações climáticas (GAMBARINI, 2019).

As queimadas é um processo final do desmatamento para converter uma área florestal em pasto para a atividade pecuária. O imenso aumento das queimadas, em 2019, devem ter como causa o alto desmatamento, pois não houve outro fenômeno que explique tal ocorrido, uma vez que não teve uma seca extrema ou eventos climáticos que intensificam as secas, como o El Niño (MADEIRO, 2019).

As queimadas da Amazônia alertaram diretamente a população do estado de São Paulo, no dia 19 de agosto de 2019, ao faltar luz durante o dia, pois às 15h da tarde o dia virou noite (VITORIO, 2019). Este fenômeno observado ocorreu devido ao encontro da fumaça dos incêndios com nuvens de uma frente fria (OLIVEIRA, 2019).

Desta forma, a exploração de nióbio no estado do Amazonas deve ser impedida para conservação da floresta de importância mundial. A exploração deste minério agravaria mais ainda a situação da Amazônia, comprometendo seu papel de biodiversidade, manutenção do ecossistema e disponibilidade para terras indígenas.

---

## CONCLUSÃO

---

A tabela 7 mostra, resumidamente, os pontos positivos e negativos principais de cada metal.

A partir dos dados experimentais obtidos e da revisão bibliográfica, é notável que a decisão de qual o melhor ácido de Lewis a ser utilizado não pode ser restrito a fatores químicos, uma vez, que ao olhar apenas rendimento e seletividade, o uso do Nióbio é extremamente tentador, mas devido a seus impactos sociais e ambientais, sua escolha já não é mais tão atrativa.

Assim, o olhar de um químico deve ser ampliado e ir além dos resultados obtidos em bancada, deve-se sempre pensar não só nas consequências que haverá no meio ambiente e na sociedade, como no caso do nióbio, mas também em como seu uso pode estar alimentando condições de trabalho precário, como a extração de cobalto.

Tabela 7 – Comparação dos pontos positivos e negativos dos metais

Metal	Pontos Positivos	Pontos Negativos
Zinco	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bom rendimento</li> <li>• Baixa toxicidade</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Quantidade usada não catalítica</li> <li>• Poucas jazidas no Brasil</li> </ul>
Cobalto	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Baixa toxicidade</li> <li>• Quantidade usada catalítica</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Jazidas localizadas na África (Condições de trabalho precária e Exploração infantil)</li> </ul>
Ouro	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bom rendimento</li> <li>• Seletivo</li> <li>• Há jazidas no Brasil</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Garimpo (uso de mercúrio)</li> <li>• Invasão em terras indígenas</li> <li>• Alto custo</li> </ul>
Mercúrio	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se para fins didáticos: Estoque disponível na universidade federal do ABC do complexo sintetizado por alunos da disciplina de Química de Coordenação</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Metal extremamente tóxico</li> <li>• Baixo rendimento</li> </ul>
Nióbio	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ótimo rendimento</li> <li>• Seletivo</li> <li>• Maiores jazidas no Brasil</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Jazidas localizadas em terras indígenas no Amazonas</li> <li>• Exploração minerária traz impactos a Amazônia</li> </ul>

Fonte: Dados da pesquisa.

## PERSPECTIVA

---

---

Este projeto abre espaço para continuidade, com os dados experimentais obtidos e a realização da revisão bibliográfica, pode-se pesquisar formas de como aplicar a discussão da química associada a sociedade e meio ambiente na graduação, gerando debates que incentivem os alunos a tomarem decisões com base na eficácia do ácido de Lewis, toxicidade, disponibilidade, problemas sociais, éticos, ambientais e políticos.



## REFERÊNCIAS

---

---

- A importância das florestas em pé na Amazônia: CARTILHAS. 2016. <<https://www.socioambiental.org/pt-br/blog/blog-domonitoramento/por-que-nao-minerar-em-terras-indigenas>>. Instituto de Pesquisa Ambiental da Amazônia(IPAM). Citado 2 vezes nas páginas 49 e 50.
- ANGOTTI, M.; LOURENÇO, R.; Sá, C.; FERREIRA, A. Garimpo de ouro, seus impactos socioambientais e políticas públicas: Caso de ensino baseado no filme "serra pelada". In: . [S.l.: s.n.], 2016. Citado na página 46.
- BANZA, L. N. C.; NAWROT, S. T.; HAUFROID, V.; DECRÉE, S.; PUTTER, D. T.; SMOLDERS, E.; KABYLA, I. B.; LUBOYA, N. O.; ILUNGA, N. A.; MUTOMBO, M. A.; NEMERY, B. High human exposure to cobalt and other metals in katanga, a mining area of the democratic republic of congo. **Environmental Research**, p. 745–752, 2009. Citado na página 45.
- BARBOSA, J. d. S.; SILVA, G. V. J. d.; CONSTANTINO, M. G. One-step synthesis of indanones through nbcl5-induced friedel-crafts reaction. **Tetrahedron Letters**, v. 46, n. 45, 2015. Citado na página 41.
- BOA, T. M. R. F. **Recursos Minerais De Minas Gerais – Níquel E Cobalto**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Minas Gerais, 2018. Citado na página 45.
- CESAR, A. Riscos socioambientais dos resíduos tecnológicos: uma análise do tema legislação e suas implicações para a sociedade. **Tecnologia e Sociedade**, v. 7, dez. 2011. Citado na página 47.
- CHEN, H.; PAPARIZOS, C.; FACKLER, J. Dimethylgold(iii) complexes. synthesis of several compounds with auc2s2 coordination. the crystal and molecular structure of [(ch3)2ausc2h5]2. **Inorganica Chimica Acta**, v. 96, n. 2, p. 137–149, 1985. Citado na página 36.
- FONSECA, D. S. Sumário mineral 2012. **Departamento nacional de produção mineral, Brasília, Brasil**, v. 32, p. 53–54, 2013. Citado na página 45.
- GAMBARINI, A. **Por que a Amazônia é importante?** 2019. <[https://www.wwf.org.br/natureza\\_brasileira/areas\\_prioritarias/amazonia1/bioma\\_amazonia/porque\\_amazonia\\_e\\_importante/](https://www.wwf.org.br/natureza_brasileira/areas_prioritarias/amazonia1/bioma_amazonia/porque_amazonia_e_importante/)>. World Wide Fund for Nature (WWF-Brasil). Citado na página 50.
- GOFF, H. M.; HINES, J.; GRIESEL, J.; MOSSMAN, C. Synthesis, characterization, and use of a cobalt(ii) complex as an nmr shift reagent: An integrated laboratory experiment. **Journal of Chemical Education**, v. 59, n. 5, p. 422, 1982. Citado na página 36.
- IBGE. **GRÁFICOS e tabelas: Censo Demográfico 1991/2010**. 2019. <<https://indigenas.ibge.gov.br/graficos-e-tabelas-2.html>>. IBGE Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. Citado na página 49.
- INFORMAÇÕES e análises da economia mineral Brasileira: Zinco. 2012. <<http://www.ibram.org.br/sites/1300/1382/00003797.pdf>>. Acesso: 7 ago. 2019. Citado na página 44.

- ISOPROPYL Bromide. <<http://williestop.tripod.com/orgsynpages/isopropylbromide.html>>. Acesso: 8 jan. 2019. Citado na página 35.
- JUNIOR, A. S.; CAMPOS, M. Relevância das terras raras para o setor energético. v. 1, p. 350–363, 2016. Citado na página 49.
- KUDELKO, A.; WRÓBLOWSKA, M. An efficient synthesis of conjugated 5-aryl-1,3,4-oxadiazoles from 3-heteroarylacrylohydrazides and acid chlorides. *Tetrahedron Letters*, v. 55, n. 21, p. 3252–3254, 2014. Citado na página 35.
- LIMA, D. **Avaliação Da Contaminação Por Metais Pesados Na Água E Nos Peixes Da Bacia Do Rio Cassiporé**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal Do Amapá, 2013. Citado na página 47.
- LIMA., J. M. G. de. Ministério de minas e energia - mme secretaria de geologia, mineração e transformação mineral-sgm (brasil) produto 11 perfil da mineração do nióbio. CONTRATO Nº 48000.003155/2007-17, n. DESENVOLVIMENTO DE ESTUDOS PARA ELABORAÇÃO DO PLANO DUODECENAL (2010 - 2030) DE GEOLOGIA, MINERAÇÃO E TRANSFORMAÇÃO MINERAL, 2010. Citado na página 48.
- LIMA, V. F.; MERCON, F. Metais pesados no ensino de química. *QUÍMICA NOVA NA ESCOLA*, v. 33, nov. 2011. Citado na página 48.
- LIMINAR determina indeferimento de todos os pedidos de mineração em terras indígenas no AM. 2019. <<http://www.mpf.mp.br/am/sala-deimprensa/noticias-am/liminar-determina-indeferimento-de-todos-os-pedidos-demineracao-em-terras-indigenas-no-am>>. Acesso: 22 ago. 2019. Citado na página 49.
- LOBATO, L. M.; COSTA, M. A. da; HAGEMANN, S. G.; MARTINS, R. Recursos minerais no brasil problemas e desafios: Ouro no brasil: principais depósitos, produção e perspectivas. p. 46–56, 2016. Citado na página 46.
- MADEIRO, C. **Queimadas na Amazônia: Percentual em agosto é o maior já medido pelo Inep**. 2019. <<https://noticias.uol.com.br/meio-ambiente/ultimas-noticias/redacao/2019/08/21/queimadas-na-amazonia-percentual-em-agosto-e-o-maior-ja-medido-pelo-inep.htm>>. Uol Notícias. Citado na página 50.
- MEDEIROS, M. de A. Elemento químico: Zinco. *QUÍMICA NOVA NA ESCOLA*, v. 34, n. 3, p. 159–160, 2012. Citado na página 44.
- MICARONI, R. C. A. d. C. M.; BUENO, M. I. M. S.; JARDIM, W. d. F. Compostos de mercúrio. revisão de métodos de determinação, tratamento e descarte. *Química Nova*, scielo, v. 23, p. 487 – 495, 08 2000. Citado na página 47.
- NETO, H. de A. Ministério de minas e energia - mme secretaria de geologia, mineração e transformação mineral-sgm (brasil) produto 19 minério de ouro. CONTRATO Nº 48000.003155/2007-17, n. DESENVOLVIMENTO DE ESTUDOS PARA ELABORAÇÃO DO PLANO DUODECENAL (2010 - 2030) DE GEOLOGIA, MINERAÇÃO E TRANSFORMAÇÃO MINERAL, 2009. Citado na página 46.
- NEVES, C. A. R. **Zinco: Departamento Nacional de Produção Mineral (DNPM)**. <[https://sistemas.dnpm.gov.br/publicacao/mostra\\_imagem.asp?IDBancoArquivoArquivo=3985](https://sistemas.dnpm.gov.br/publicacao/mostra_imagem.asp?IDBancoArquivoArquivo=3985)>. Acesso: 19 ago. 2019. Citado na página 44.

OLIVEIRA, E. **Amazônia em chamas? O que se sabe sobre a evolução das queimadas no Brasil.** 2019. <<https://g1.globo.com/natureza/noticia/2019/08/23/amazonia-em-chamas-o-que-se-sabe-sobre-a-evolucao-das-queimadas-no-brasil.ghtml>>. G1. Citado na página 50.

OLIVEIRA, J. S.; MARTINS, M.; APPELT, H. R. Trilogia: Química, sociedade e consumo. **Química nova na escola**, p. 140–144, fev. 2010. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.

POR que não minerar em Terras Indígenas? 2016. <<https://www.socioambiental.org/pt-br/blog/blog-domonitoramento/por-que-nao-minerar-em-terras-indigenas>>. Acesso: 22 ago. 2019. Citado na página 49.

RADLER, J. **População indígena protesta contra mineração em São Gabriel da Cachoeira (AM): Instituto Socioambiental.** 2017. <<https://www.socioambiental.org/pt-br/noticias-socioambientais/populacaoindigena-protesta-contramineracao-em-sao-gabriel-da-cachoeira-am>>. Acesso: 22 ago. 2019. Citado na página 49.

RUSSO, M. L. C. **Beneficiamento De Rejeito De Minério De Zinco.** Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Ouro Preto, 2007. Citado na página 44.

SANTOS, J. F. dos. Ministério de minas e energia - mme secretaria de geologia, mineração e transformação mineral- sgm. CONTRATO Nº 48000.003155/2007-17, n. DESENVOLVIMENTO DE ESTUDOS PARA ELABORAÇÃO DO PLANO DUODECENAL (2010 - 2030) DE GEOLOGIA, MINERAÇÃO E TRANSFORMAÇÃO MINERAL, 2009. Citado na página 44.

SANTOS, R.; NAVA, D.; FERREIRA, A. Recursos minerais em terras indígenas do estado do Amazonas: gargalos, potencialidades e perspectivas. **Revista Brasileira de Geociências**, v. 39, p. 669–678, dez. 2009. Citado na página 49.

SANTOS, W. L. P. d.; SOUZA, M. Gerson de; DA, S. R. R.; DE, C. E. N. F.; SOUZA, S. Gentil de; ROSELI, T. M.; OLIVEIRA, S. Sandra Maria de; FRANÇA, D. S. M. Química e sociedade: um projeto brasileiro para o ensino de química por meio de temas cts. **Educação química**, p. 20–28, sep. 2009. Citado na página 27.

SARVARI, M. H.; SHARGHI, H. Reactions on a solid surface. a simple, economical and efficient friedel-crafts acylation reaction over zinc oxide (zno) as a new catalyst. **The Journal of Organic Chemistry**, v. 69, n. 20, p. 6953–6956, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 37.

SCHEELE, F.; HAAN, E. de; KIEZEBRINK, V. Cobalt blues environmental pollution and human rights violations in katanga's copper and cobalt mines. **SOMO**, 2016. Citado na página 45.

SHRIVER, D.; ATKINS, P. **Química Inorgânica.** [S.l.]: Bookman, 2008. Citado na página 45.

Sjöström, J. Towards Bildung-Oriented Chemistry Education. **Science & Education**, v. 22, n. 7, p. 1873–1890, jul. 2013. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 30.

SKY NEWS. **Special Report: Unseen Africa with Alex Crawford.** YOUTUBE. Disponível em: <<https://www.youtube.com/watch?v=25fQfCzCpxk&feature=youtu.be>>. Citado na página 46.

SMITH, R. A. Studies in the rearrangements of phenyl ethers. the course of the reaction in the presence of foreign aromatic bodies. **Journal of the American Chemical Society**, v. 56, n. 3, p. 717–718, 1934. Citado na página 35.

SOLOMONS, T.; FRYHLE, C. **Química orgânica 1**. [S.l.]: LTC, 2005. (Química orgânica, v. 1). Citado na página 29.

SOUSA, R. M. F. de; FERNANDES, L. E.; GUERRA, W. Elemento químico: Nióbio. **QUÍMICA NOVA NA ESCOLA**, v. 35, n. 1, p. 68 – 69, fev. 2013. Citado na página 48.

SOUZA, F. R. **IMPACTO DO PREÇO DO PETRÓLEO NA POLÍTICA ENERGÉTICA MUNDIAL**. 290 p. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2006. Citado na página 28.

TAMILSELVAN, P.; BASAVARAJU, Y. B.; MURUGESAN, R.; SAMPATHKUMAR, E. Cobalt(ii) acetylacetonate catalyzed friedel–crafts acylation of anisole, thioanisole, and toluene. **Catalysis Communications**, v. 10, n. 3, p. 300–303, 2008. Citado na página 39.

VALCARCEL, M.; CHRISTIAN, G. D.; LUCENA, R. Teaching social responsibility in analytical chemistry. **Analytical Chemistry**, v. 85, n. 13, p. 6152–6161, 2013. Citado na página 28.

VITORIO, T. **Queimadas na Amazônia podem ser vistas do espaço, mostra Nasa**. 2019. <<https://exame.abril.com.br/brasil/queimadas-na-amazonia-podem-ser-vistas-do-espaco-mostra-nasa/>>. Exame. Citado na página 50.

VOLLHARDT, P.; SCHORE, N. **Química Orgânica: Estrutura e Função**. [S.l.]: Bookman, 2013. Citado na página 28.

ZOLLER, U. Education in environmental chemistry: Setting the agenda and recommending action. a workshop report summary. **Journal of Chemical Education**, v. 82, n. 8, p. 1237, 2005. Citado na página 28.

---

# APÊNDICE A

## ESPECTROS DE RMN $^1H$ , RAMAN E IV

---

---

### A.1 Síntese Reagentes

#### A.1.1 Isopropoxibenzeno

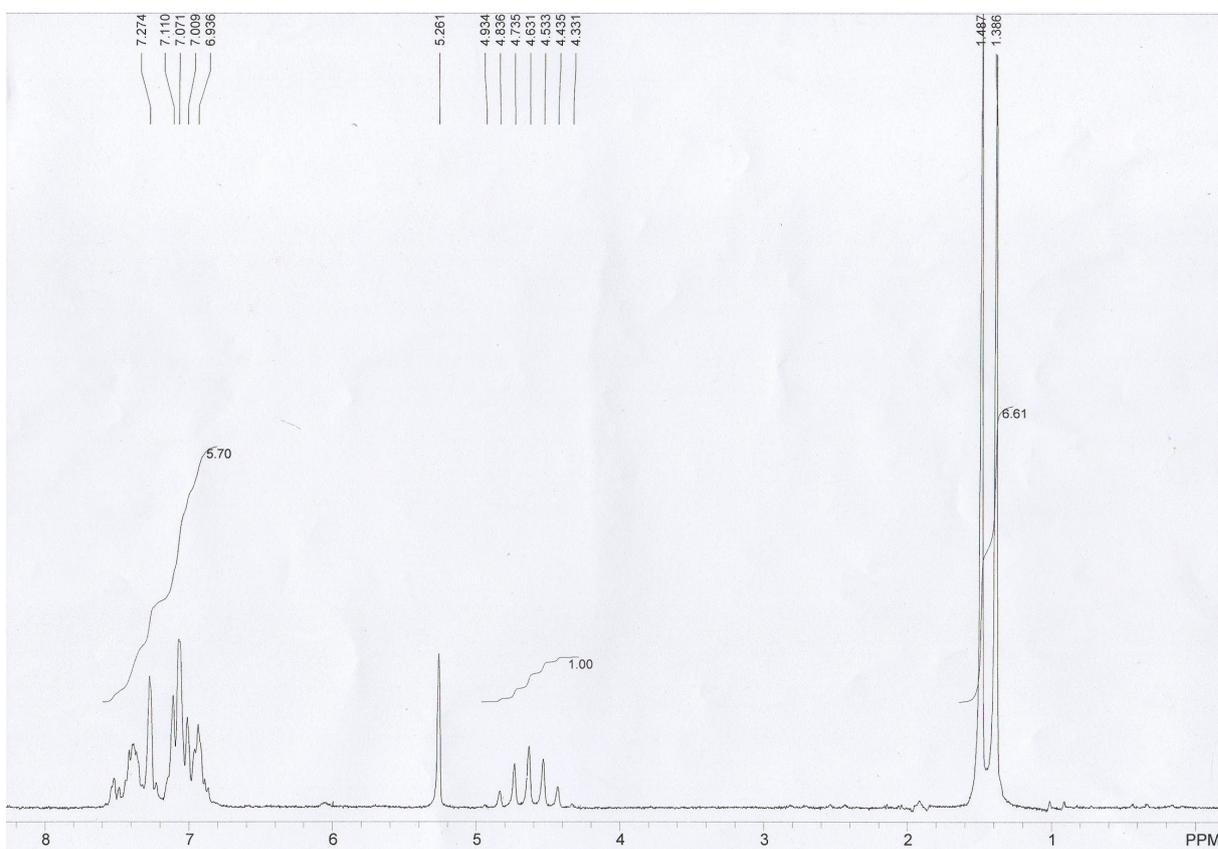


Figura 9 – RMN  $^1H$  do composto Isopropoxibenzeno em  $CDCl_3$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 8 ppm

### A.1.2 *Co(acac)*<sub>2</sub>

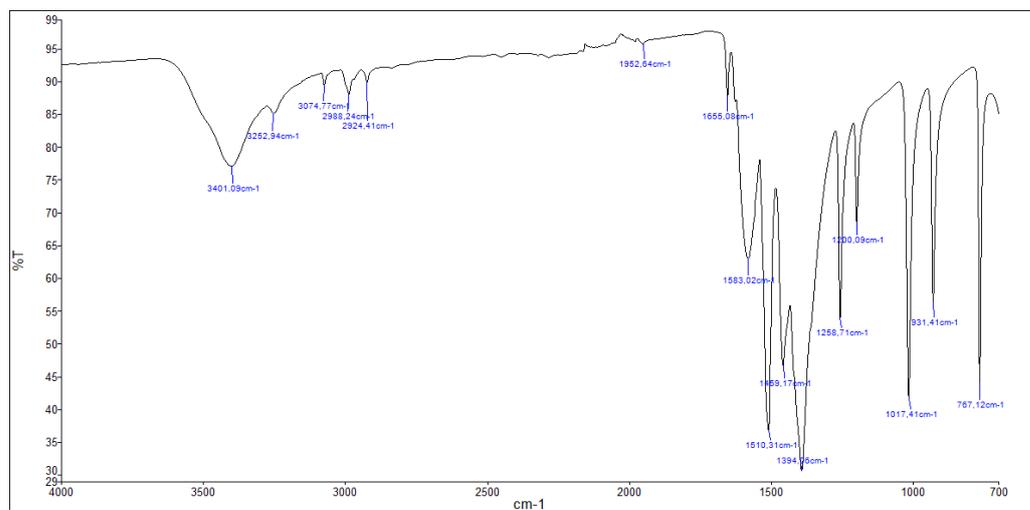


Figura 10 – Infravermelho do complexo *Co(Acac)*<sub>2</sub>

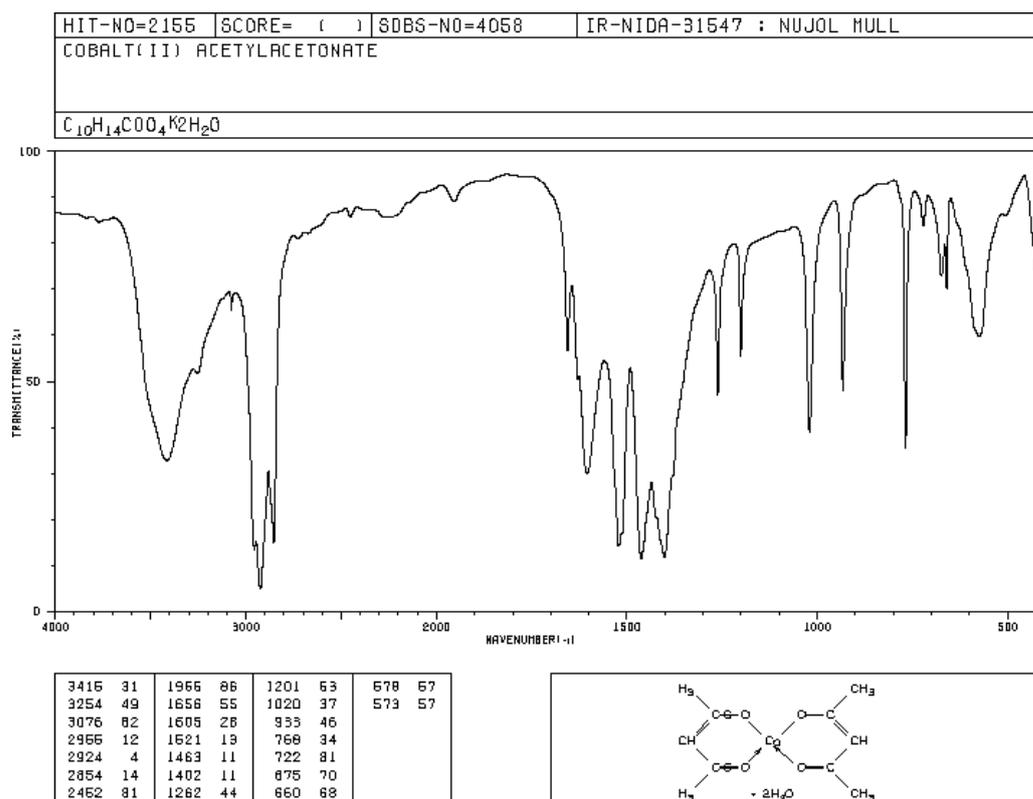


Figura 11 – Infravermelho do complexo *Co(Acac)*<sub>2</sub> (literatura) Fonte: Spectral Database for Organic Compounds (SDBS, 1999)

### A.1.3 $Au_2Cl_6$

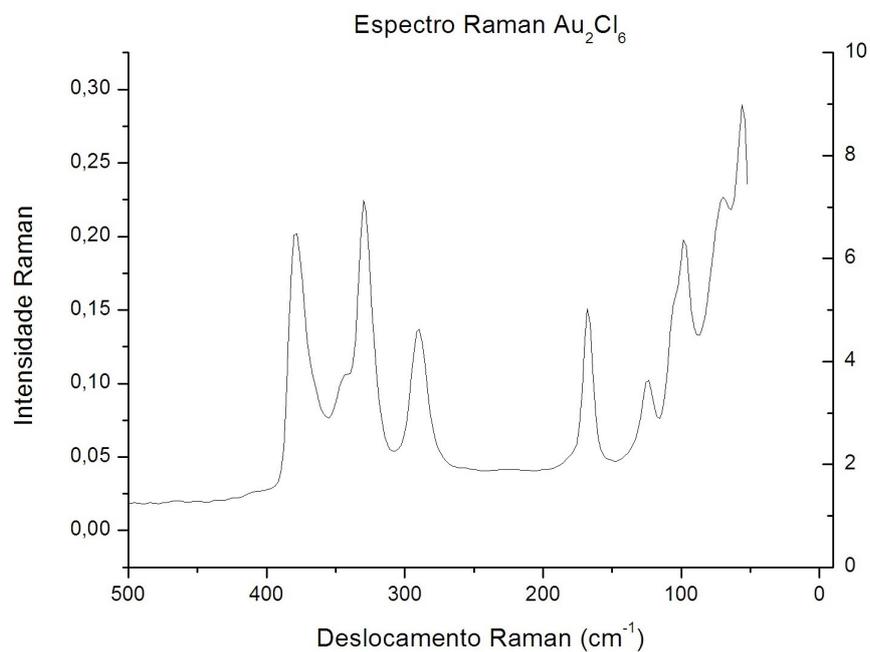


Figura 12 – Raman do composto  $Au_2Cl_6$

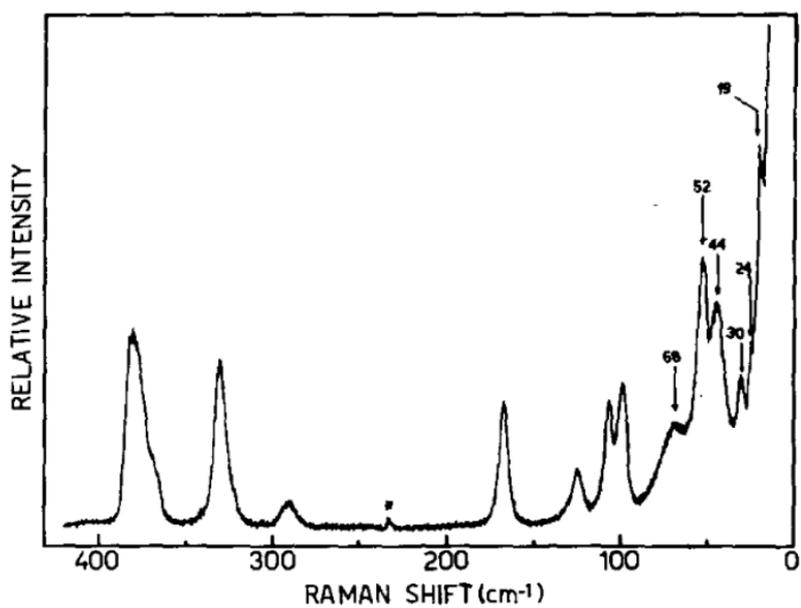


Figura 13 – Raman do  $Au_2Cl_6$  (literatura) Fonte: NALBANDIAN, L.; PAPTAEODOROU, G.N. Raman spectra and molecular vibrations of  $Au_2Cl_6$  and  $AuAlCl_6$ . Elsevier Science, Vibrational Spectroscopy, 1992.

## A.2 Reações de Friedel-Crafts

### A.2.1 Anisol

#### A.2.1.1 ZnO

BIA\_07112018

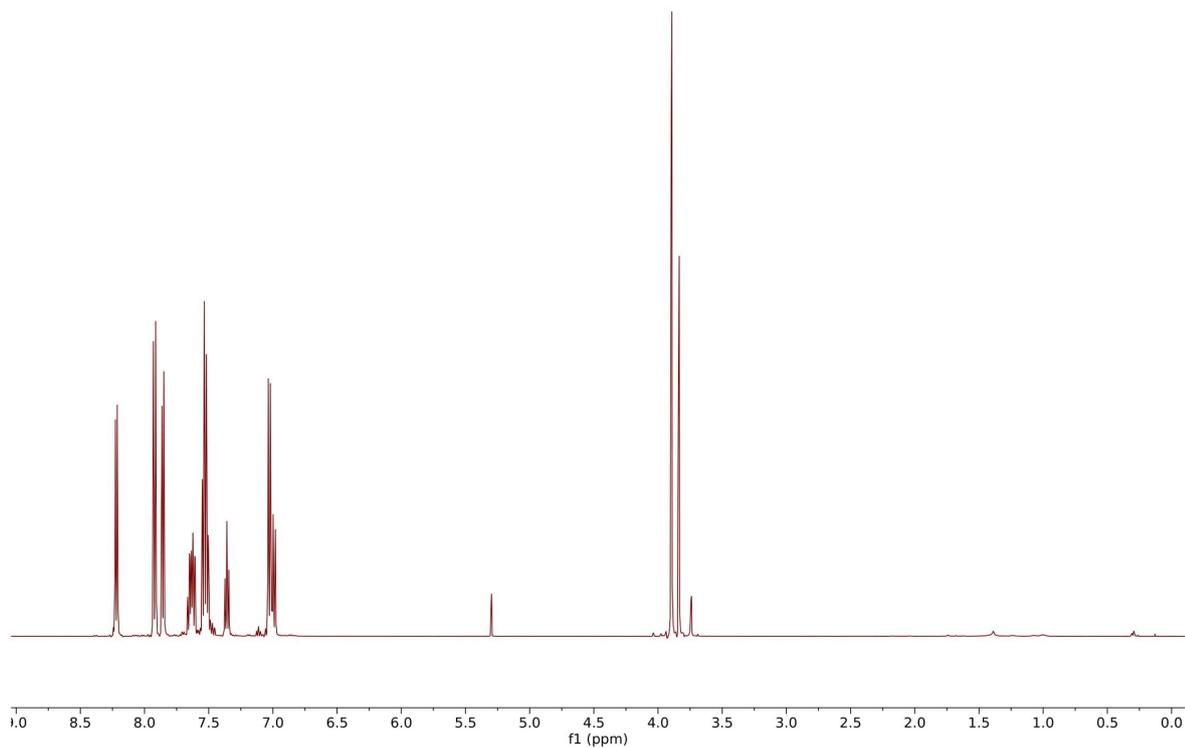


Figura 14 – RMN  $^1H$  da reação anisol com ZnO em  $CDCl_3$  / 500 MHz Intervalo  $\delta = 0$  a 9 ppm

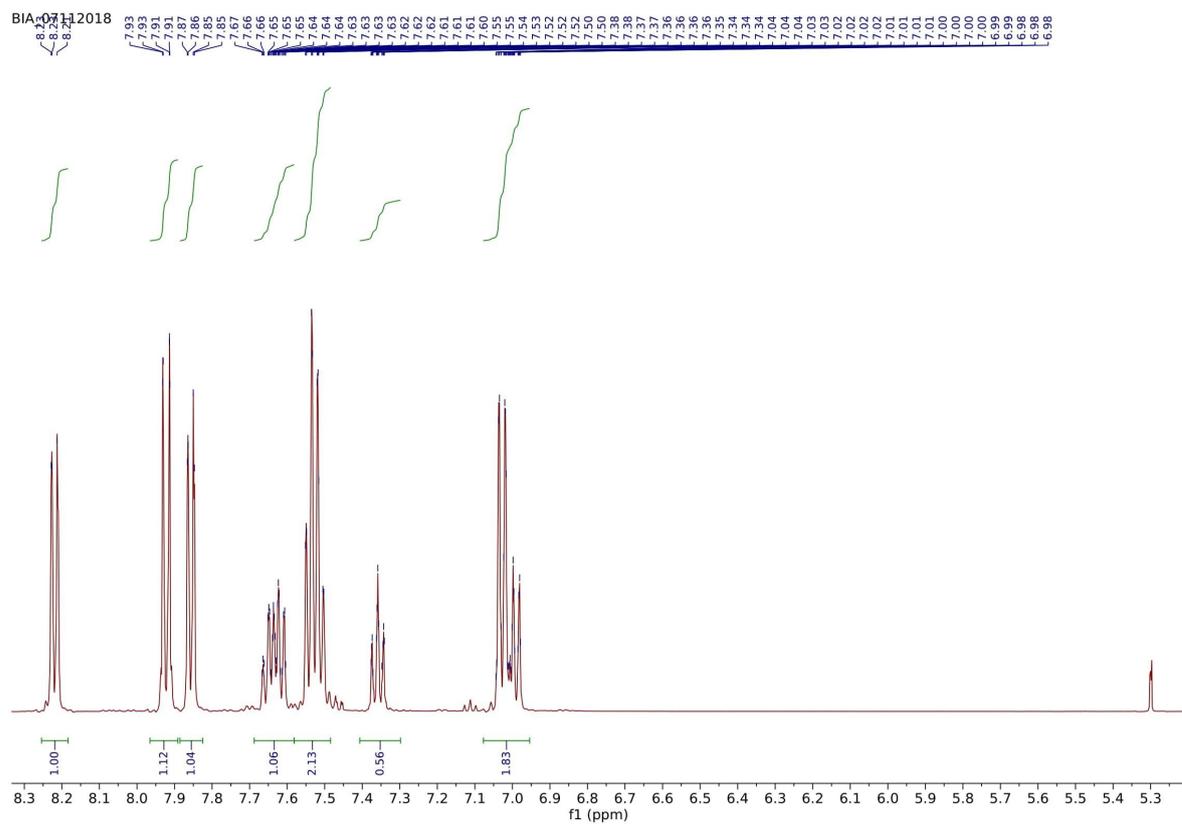


Figura 15 – RMN  $^1H$  da reação anisol com ZnO em  $CDCl_3$  / 500 MHz Intervalo  $\delta = 5.3$  a 8.3 ppm

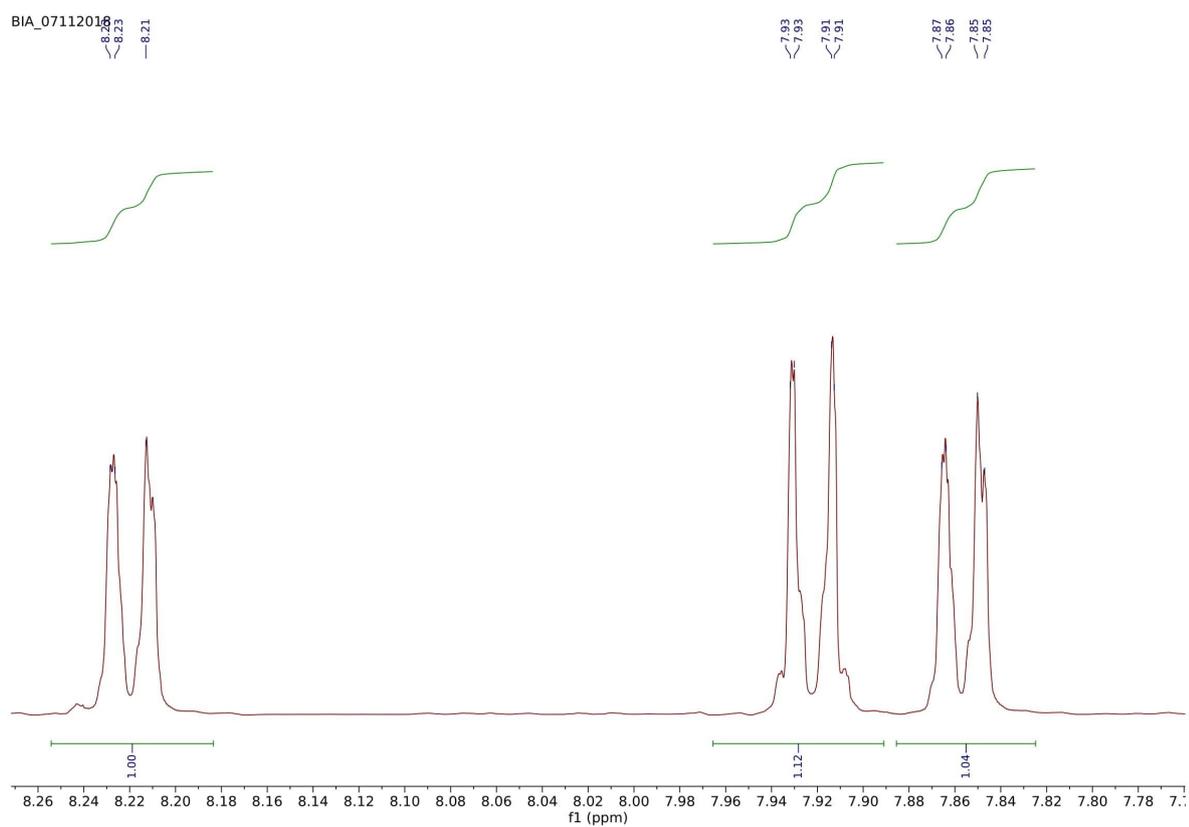


Figura 16 – RMN  $^1H$  da reação anisol com ZnO em  $CDCl_3$  / 500 MHz Intervalo  $\delta = 7.8$  a 8.3 ppm

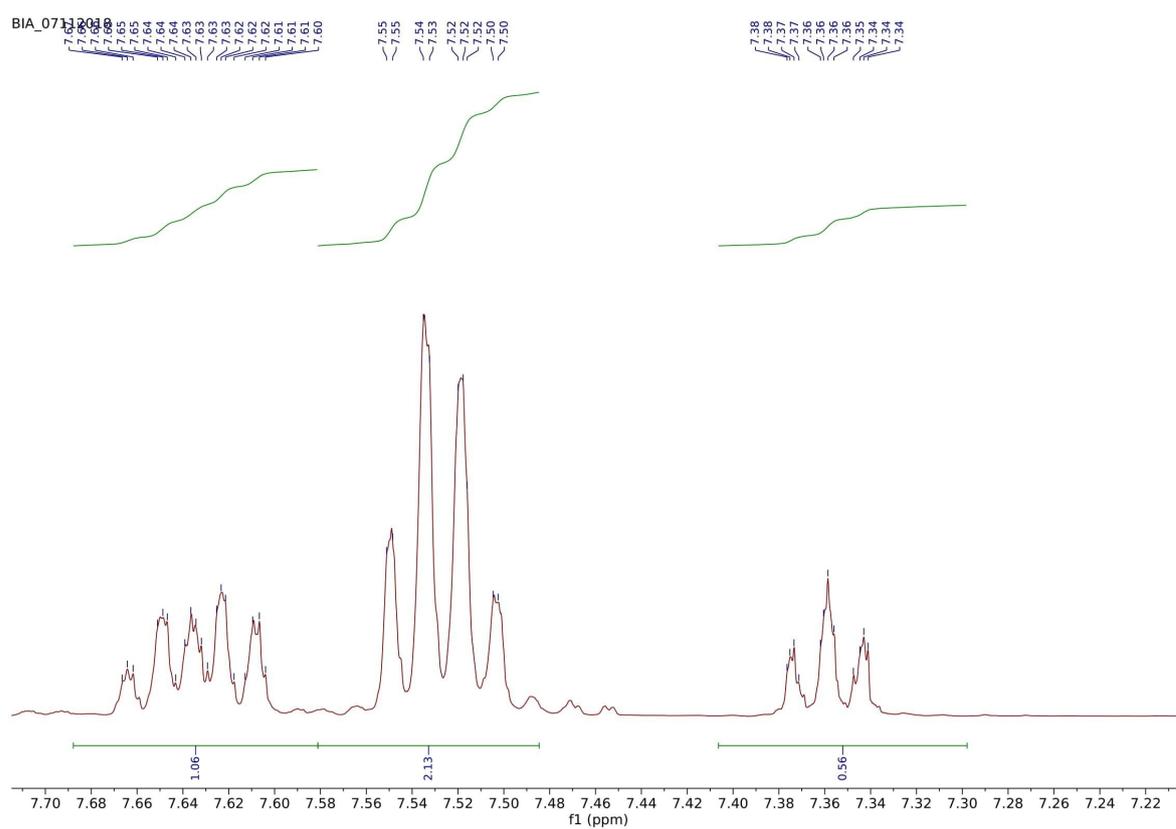


Figura 17 – RMN  $^1\text{H}$  da reação anisol com  $\text{ZnO}$  em  $\text{CDCl}_3$  / 500 MHz Intervalo  $\delta = 7.2$  a  $7.7$  ppm

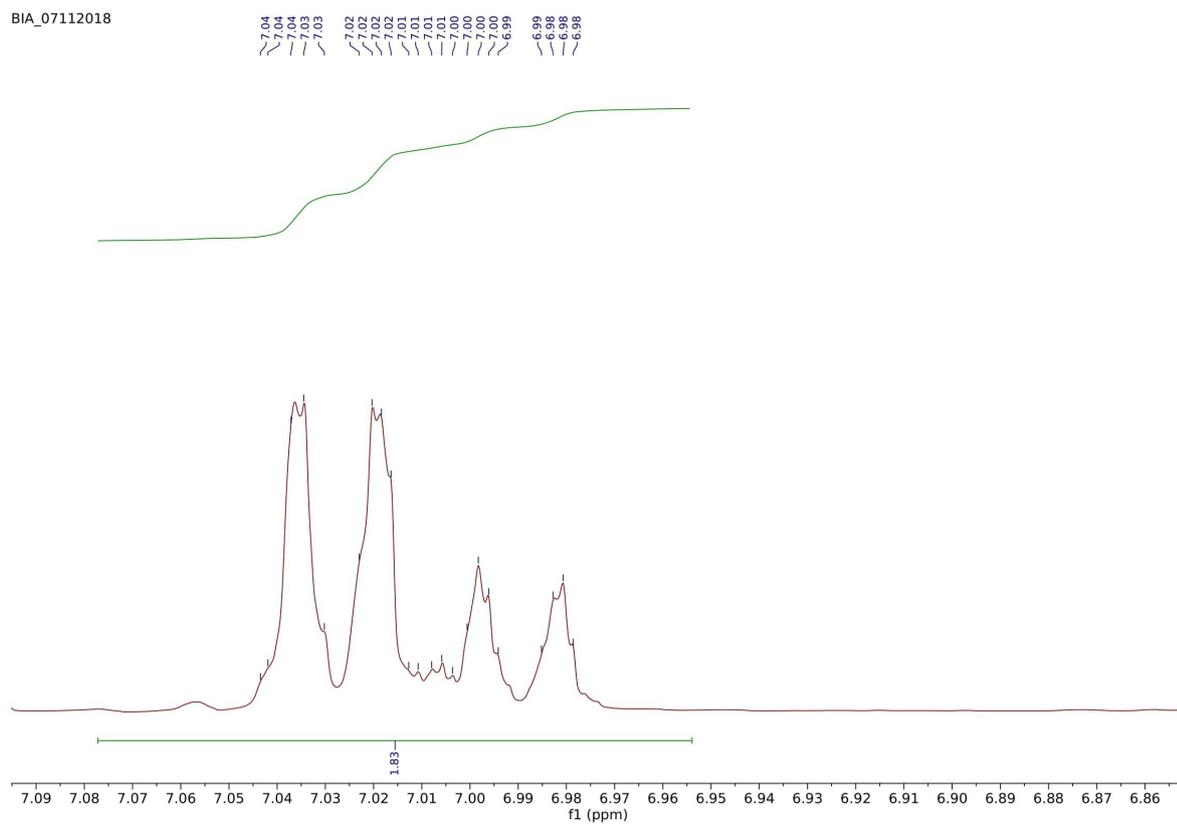


Figura 18 – RMN  $^1H$  da reação anisol com ZnO em  $CDCl_3$  / 500 MHz Intervalo  $\delta = 6.8$  a 7.1 ppm

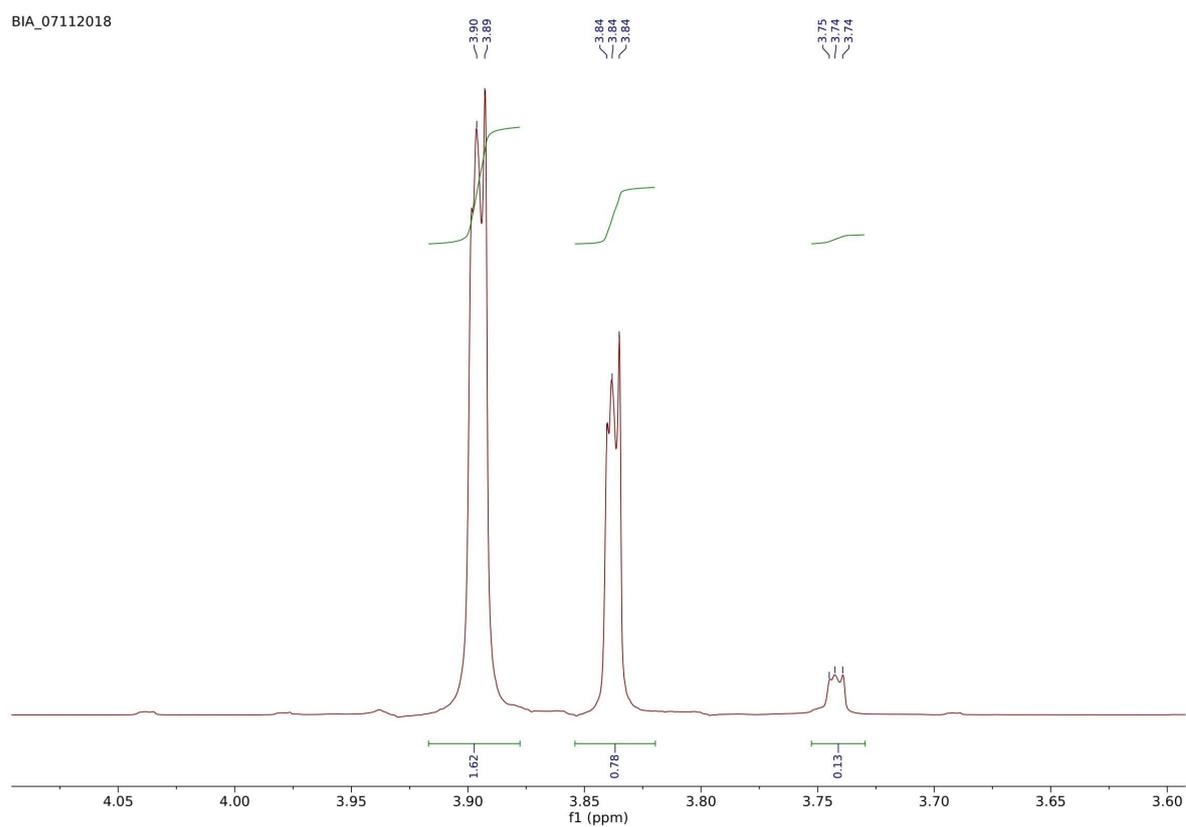


Figura 19 – RMN  $^1\text{H}$  da reação anisol com ZnO em  $\text{CDCl}_3$  / 500 MHz Intervalo  $\delta = 3.6$  a 4.1 ppm

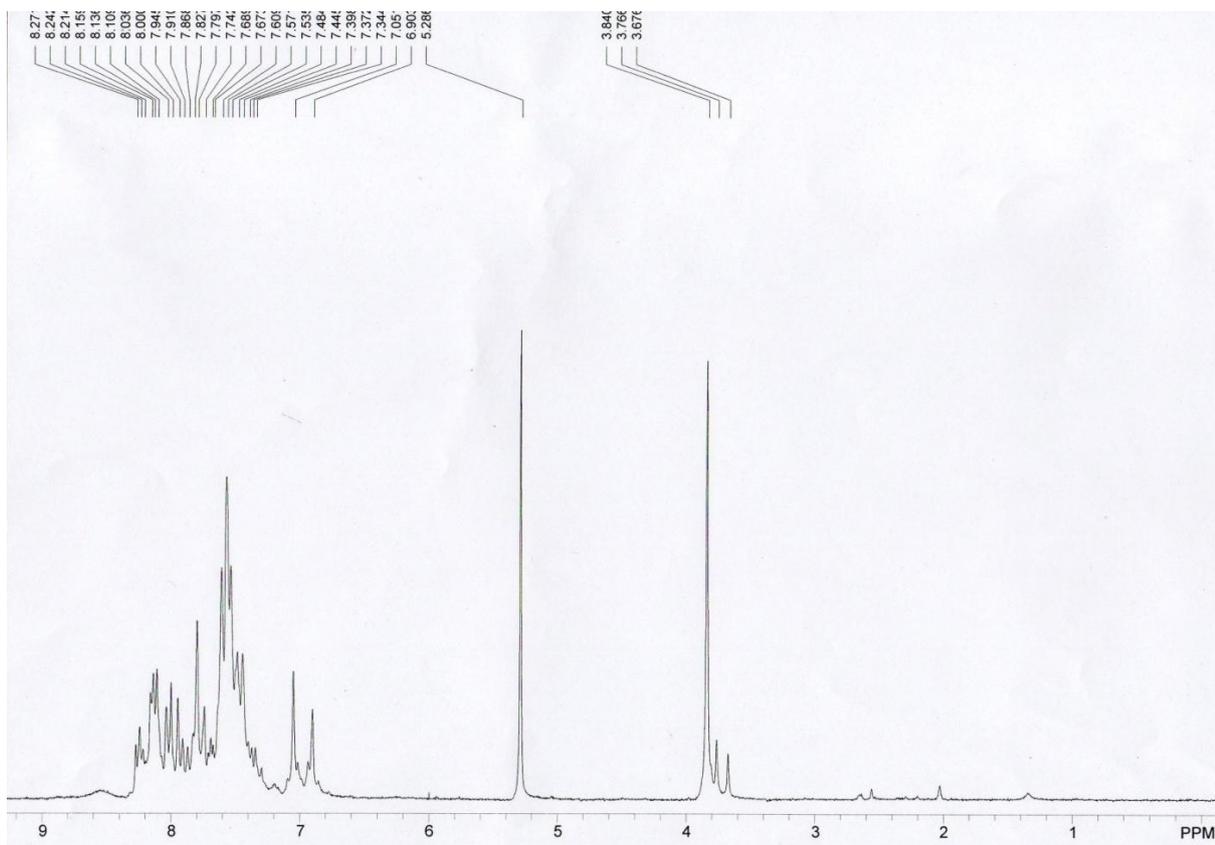
A.2.1.2  $Co(acac)_2$ 

Figura 20 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $Co(acac)_2$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 9 ppm

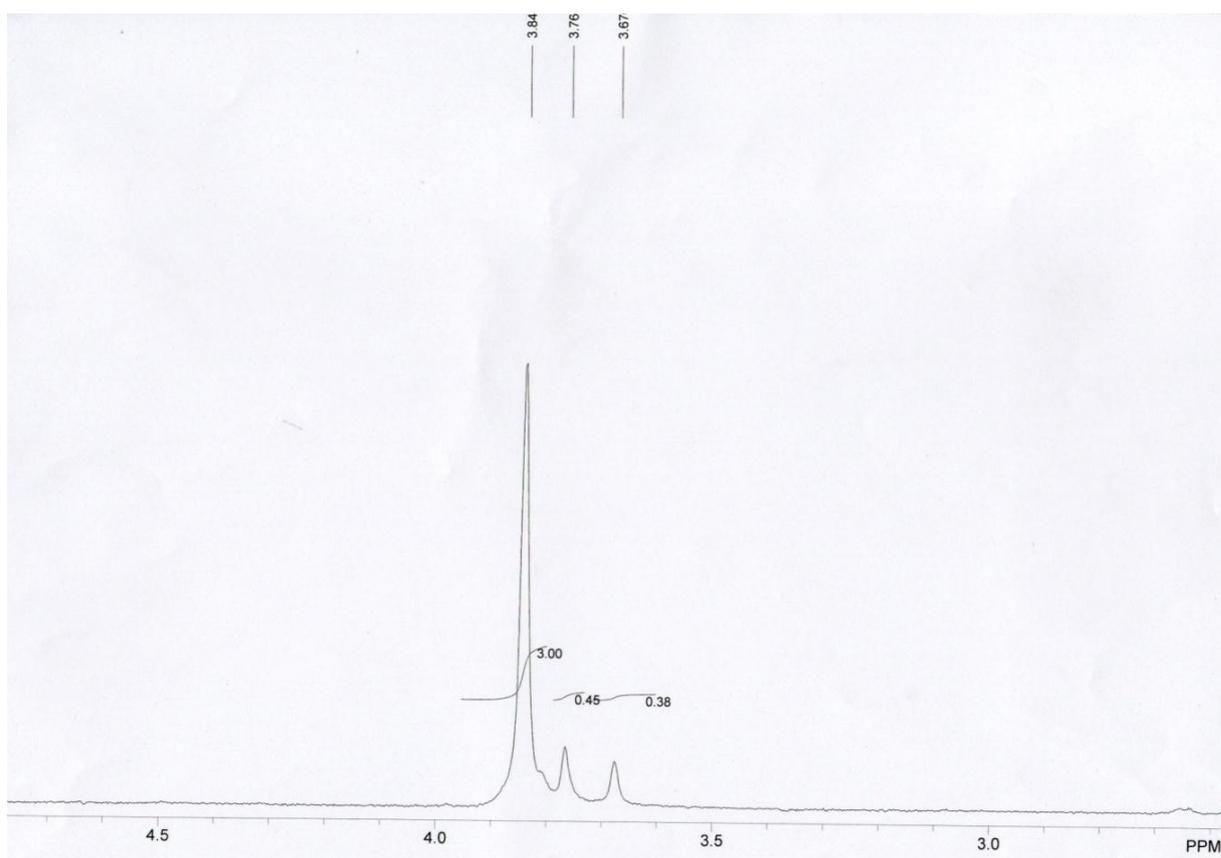


Figura 21 – RMN  $^1\text{H}$  da reação anisol com  $\text{Co}(\text{acac})_2$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 3.0$  a 4.5 ppm

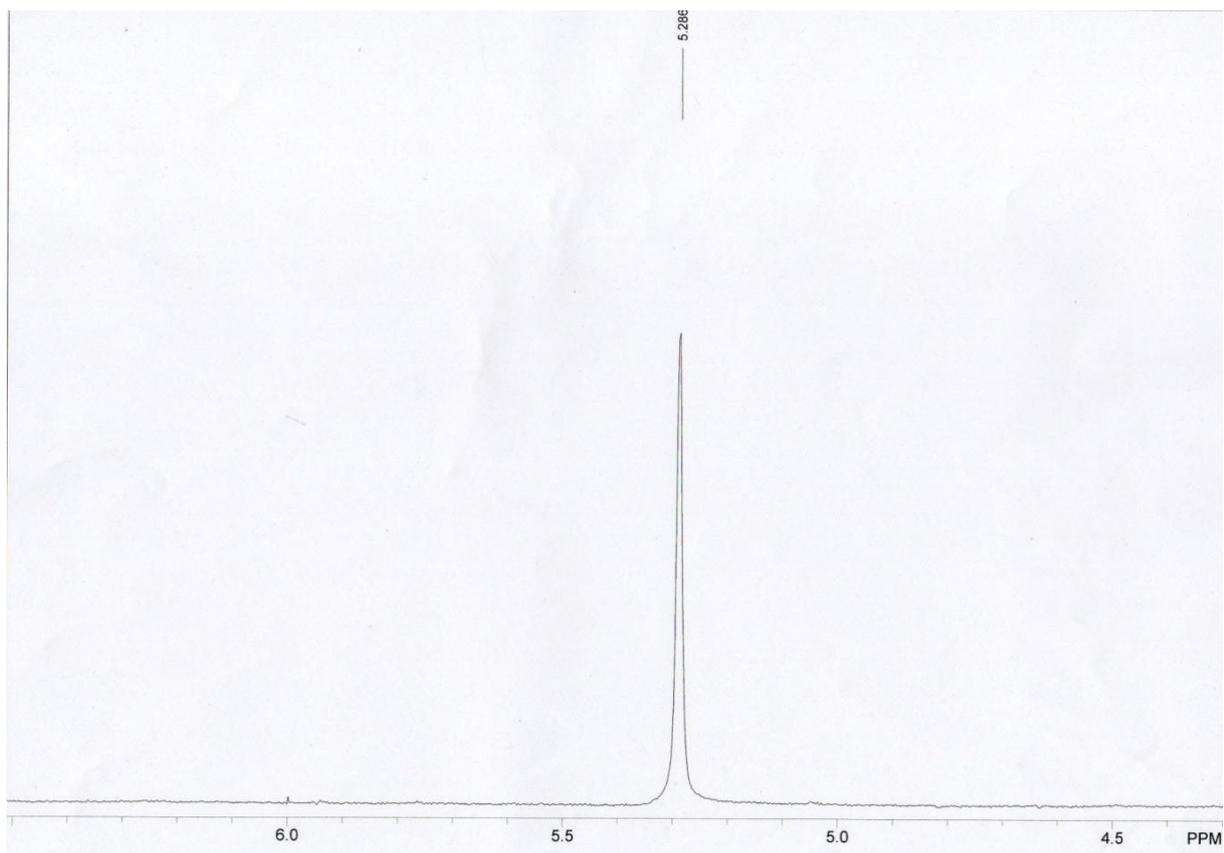


Figura 22 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $Co(acac)_2$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 4.5$  a 6.0 ppm

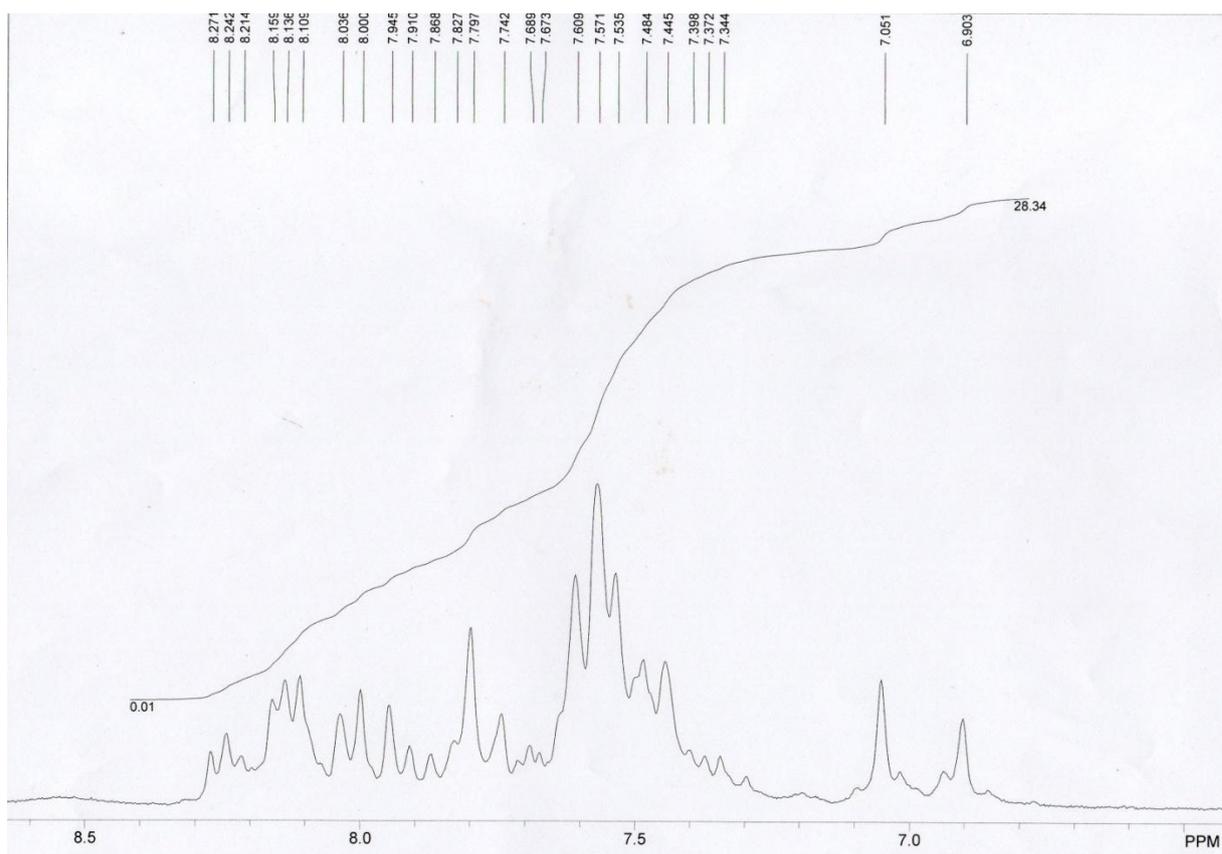
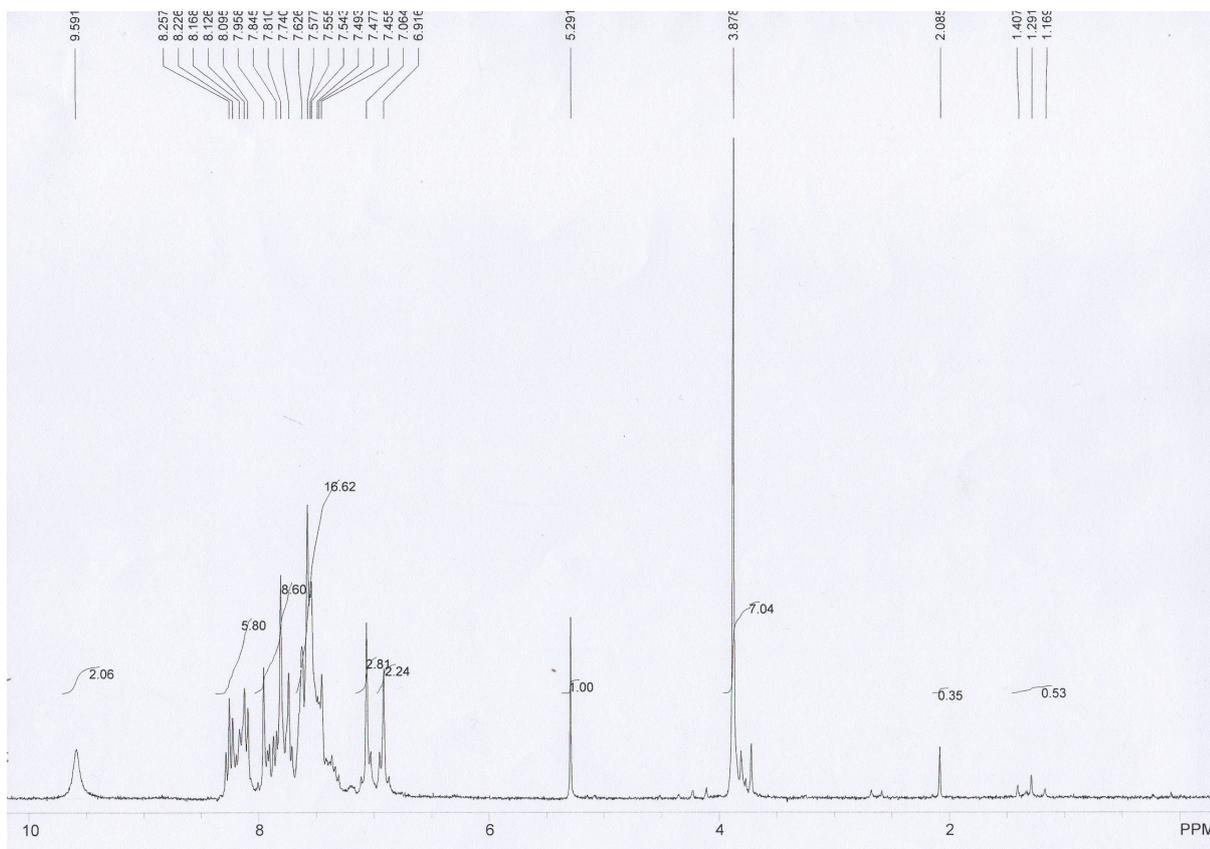


Figura 23 – RMN  $^1\text{H}$  da reação anisol com  $\text{Co}(\text{acac})_2$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 6.5$  a 8.5 ppm

A.2.1.3  $Au_2Cl_6$ Figura 24 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $Au_2Cl_6$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 10 ppm

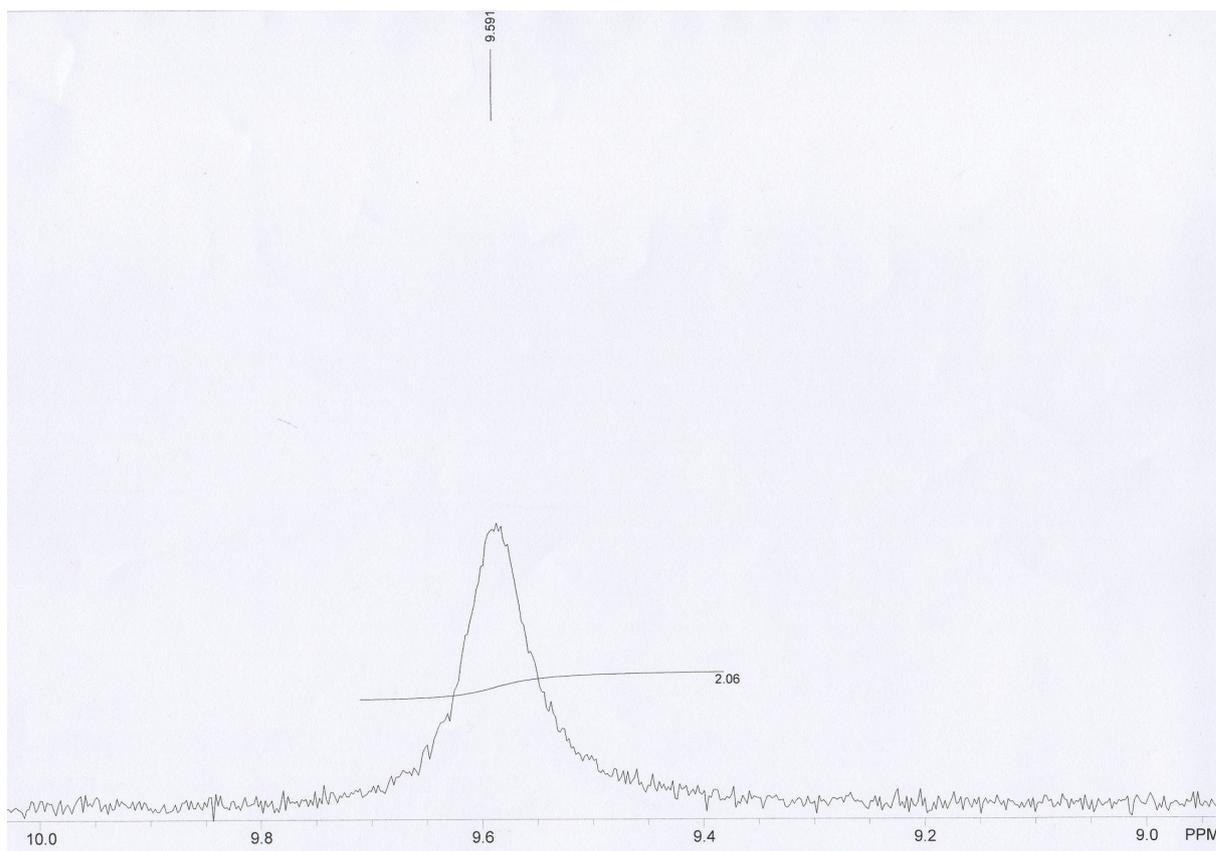


Figura 25 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $Au_2Cl_6$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 9$  a 10 ppm

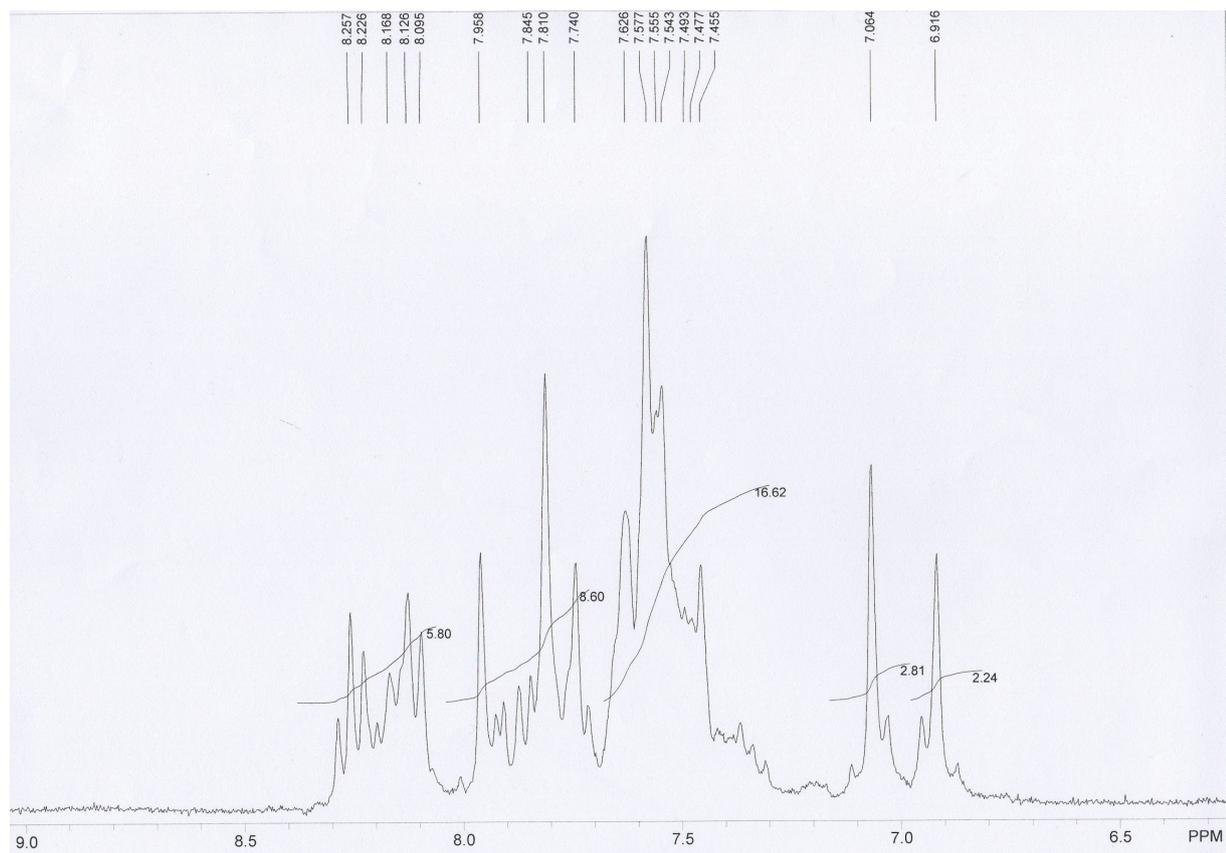


Figura 26 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $Au_2Cl_6$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 6.5$  a 9.0 ppm

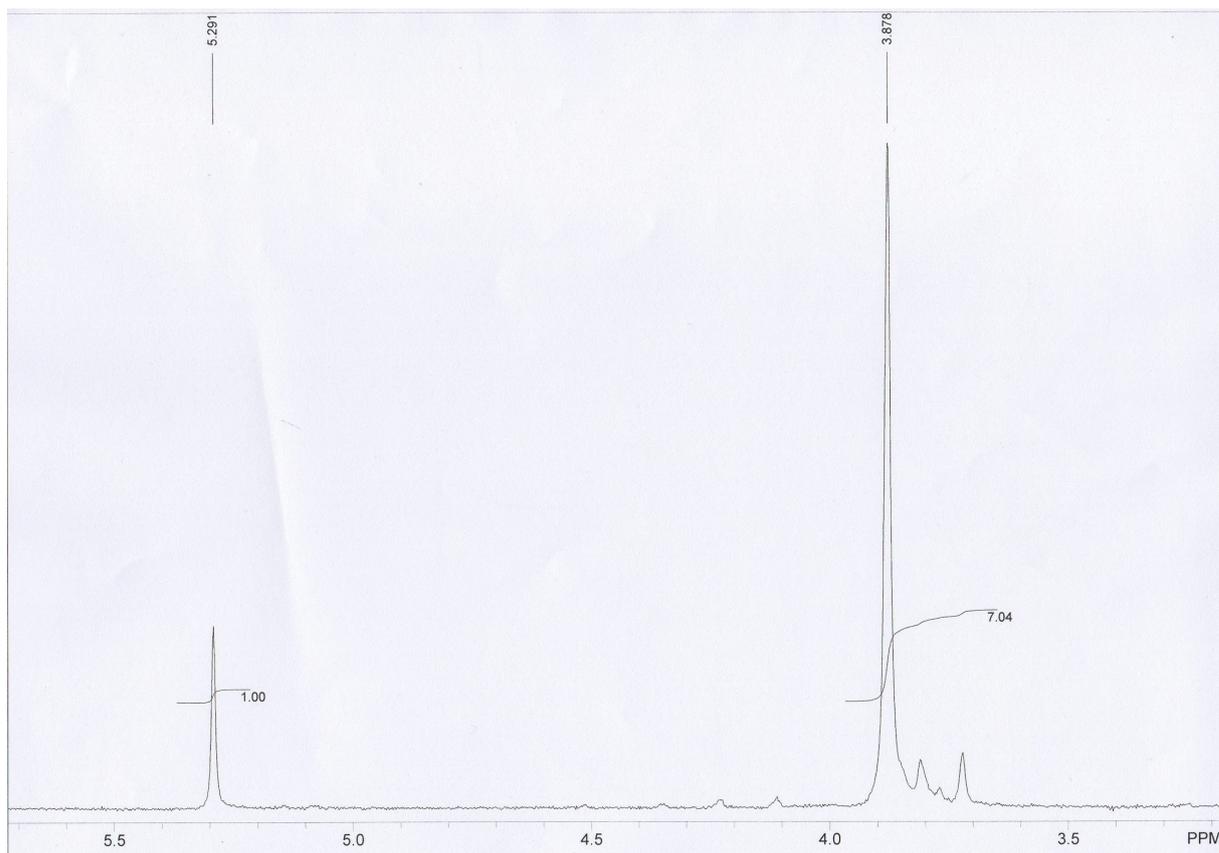


Figura 27 – RMN  $^1\text{H}$  da reação anisol com  $\text{Au}_2\text{Cl}_6$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 3.5$  a 5.5 ppm

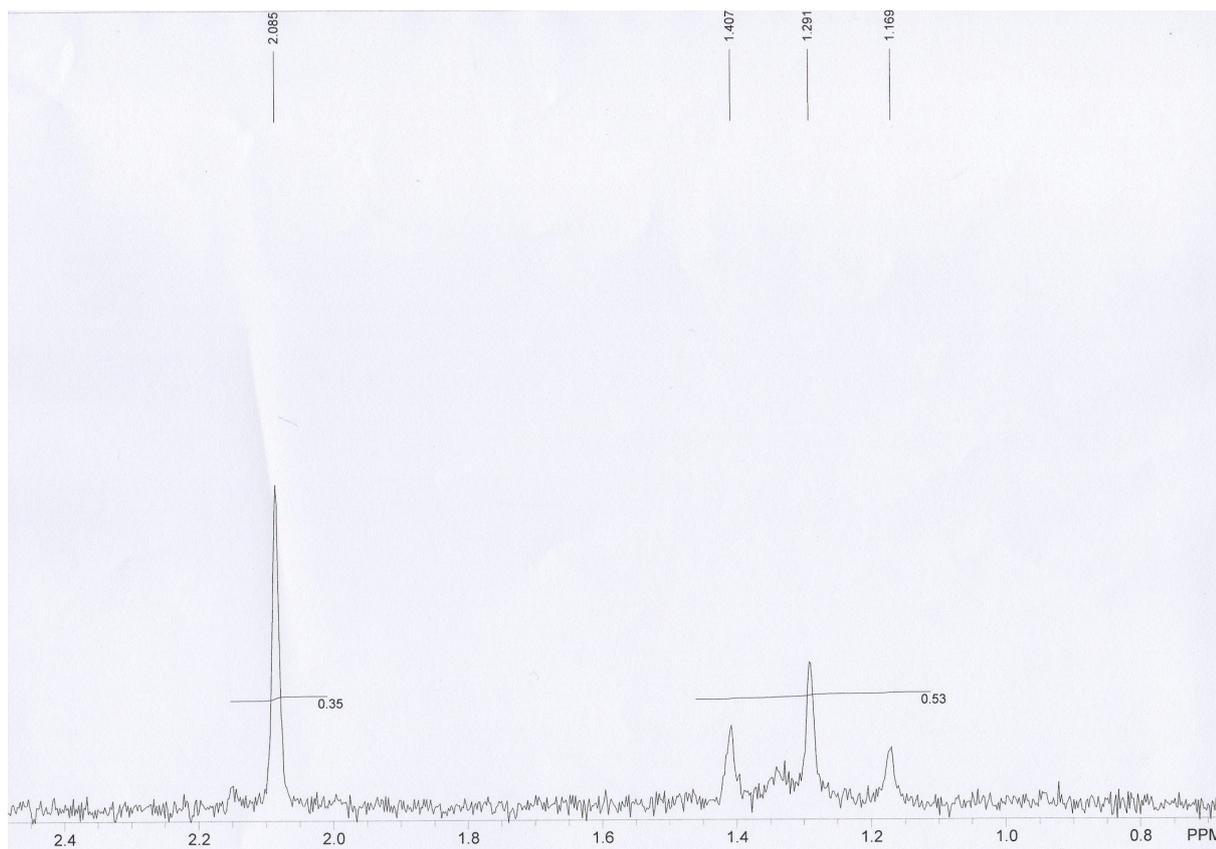
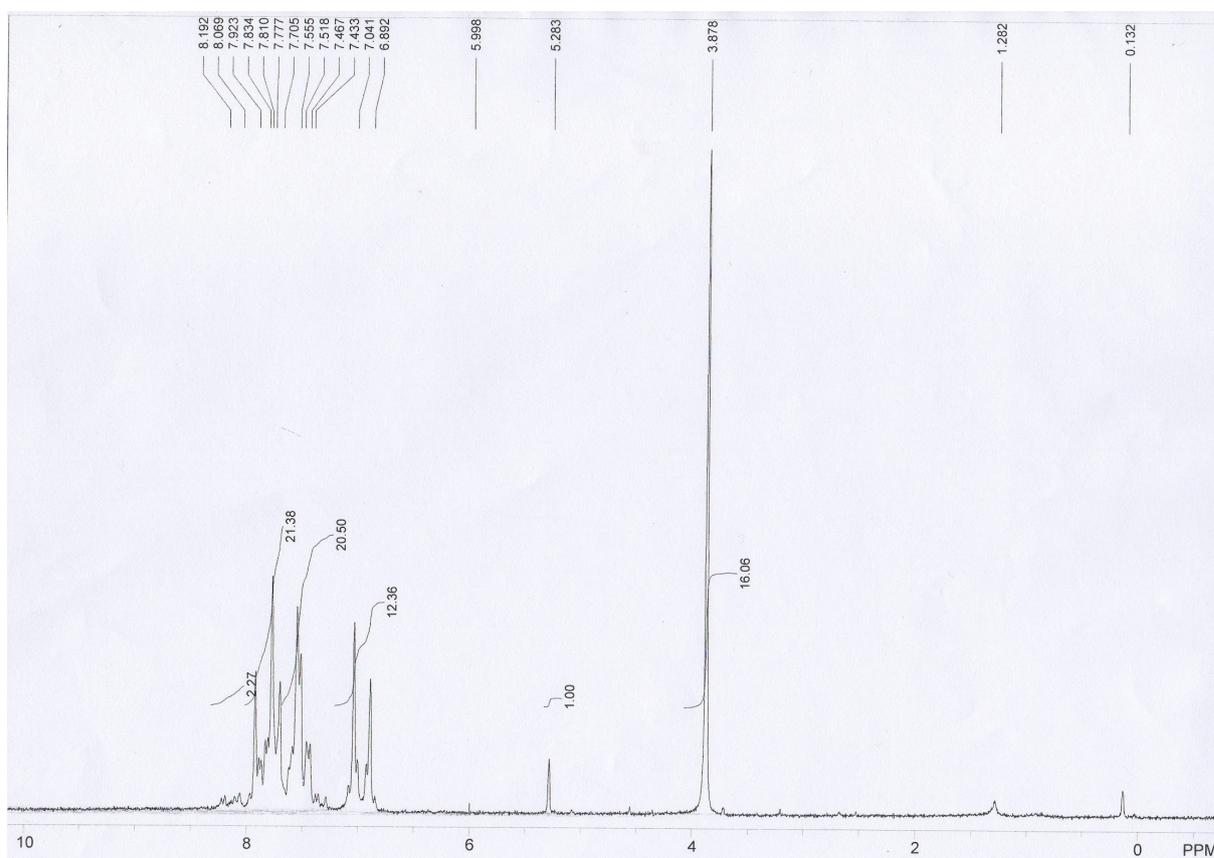


Figura 28 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $Au_2Cl_6$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0.8$  a 2.4 ppm

A.2.1.4  $NbCl_5$ Figura 29 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $NbCl_5$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 10 ppm

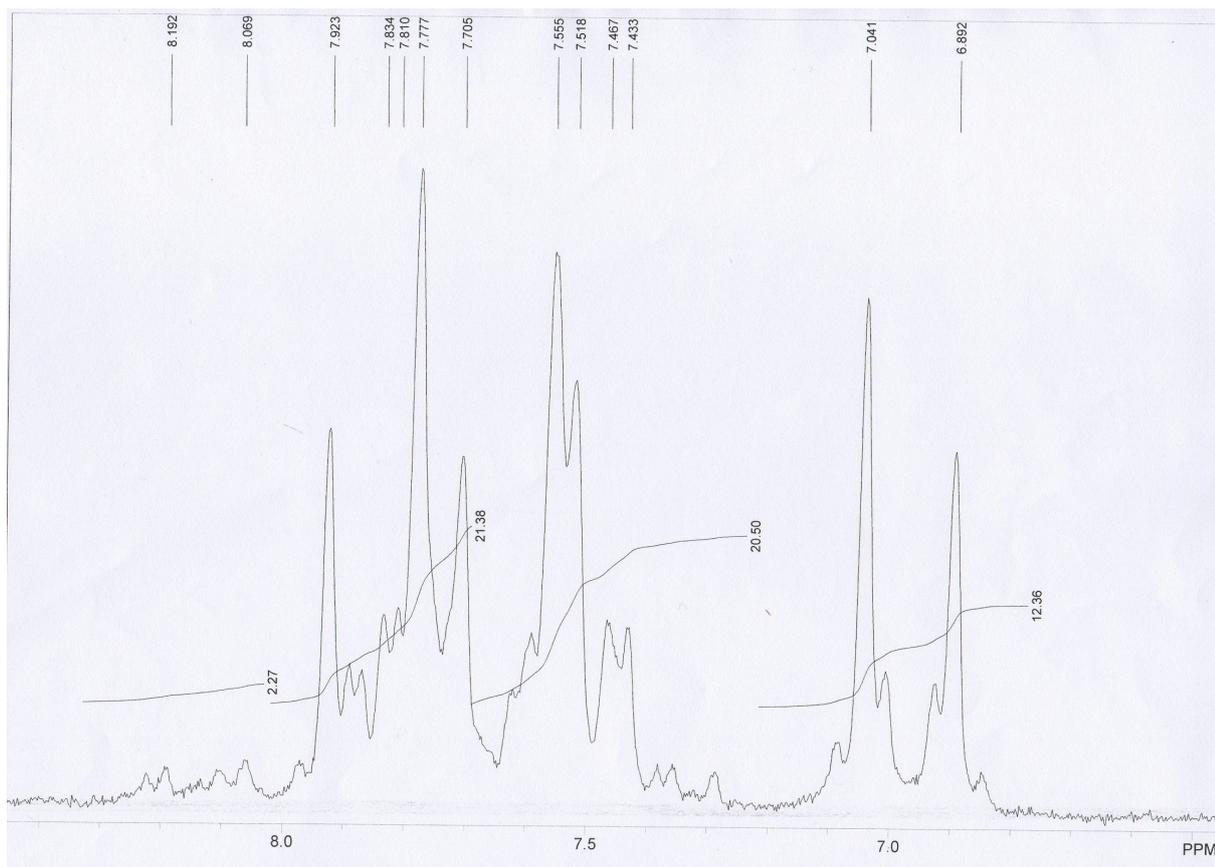


Figura 30 – RMN  $^1\text{H}$  da reação anisol com  $\text{NbCl}_5$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 6.5$  a 8.5 ppm

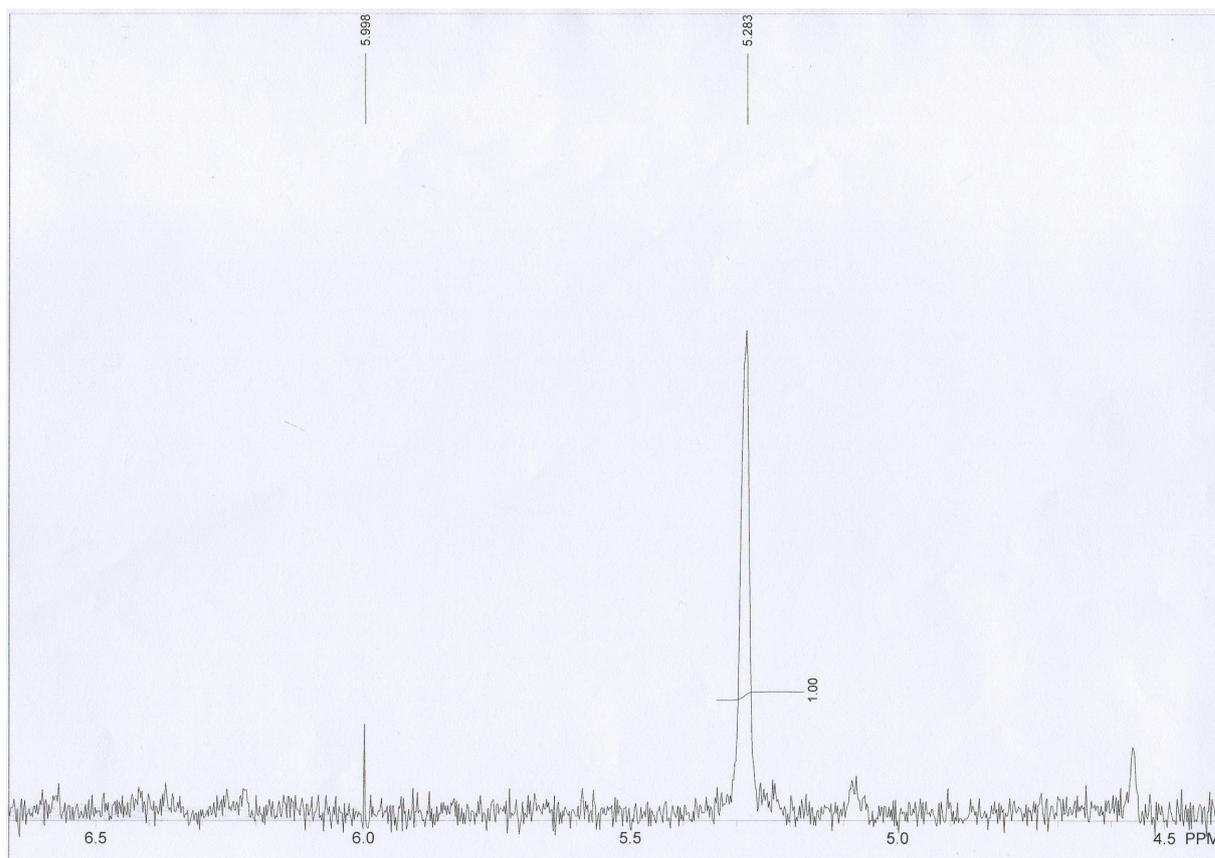


Figura 31 – RMN  $^1\text{H}$  da reação anisol com  $\text{NbCl}_5$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 4.5$  a 6.5 ppm

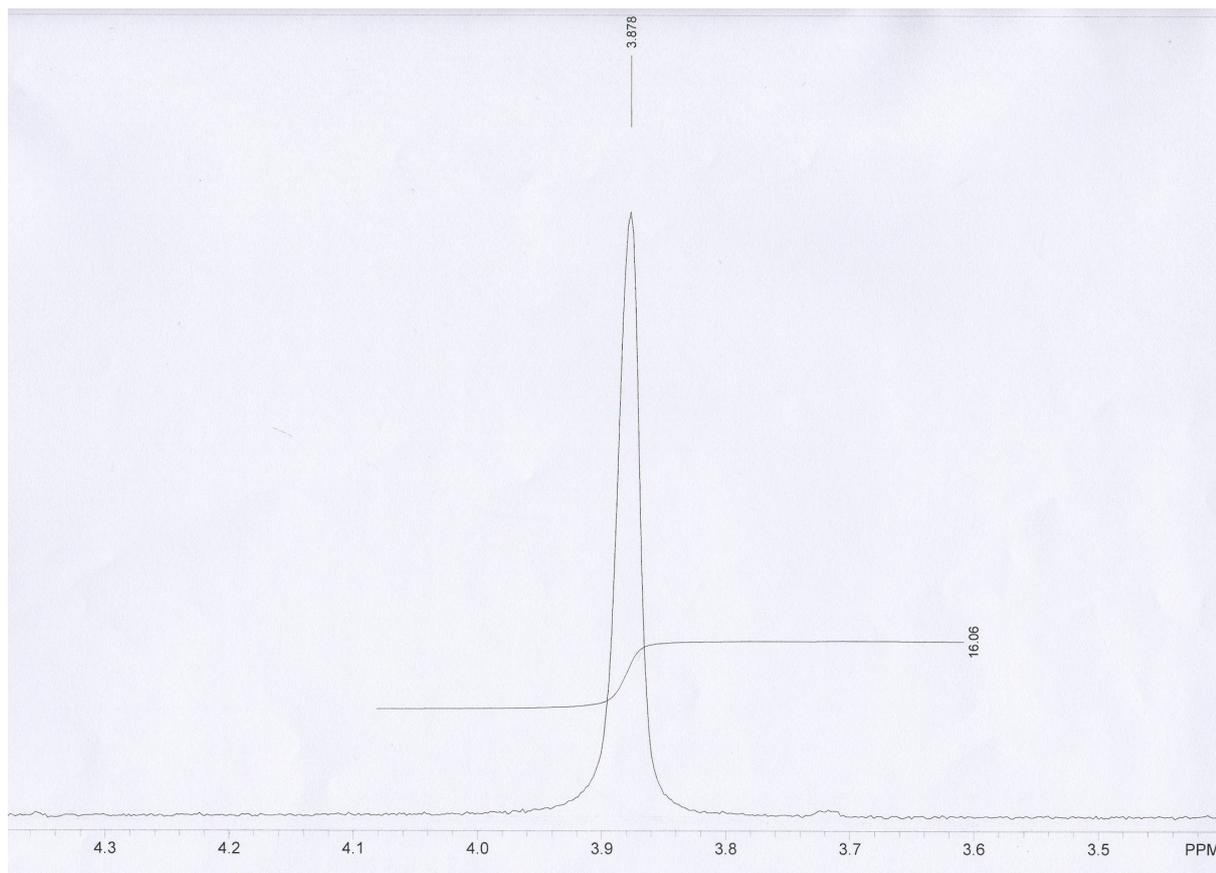


Figura 32 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $NbCl_5$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 3.5$  a 4.5 ppm

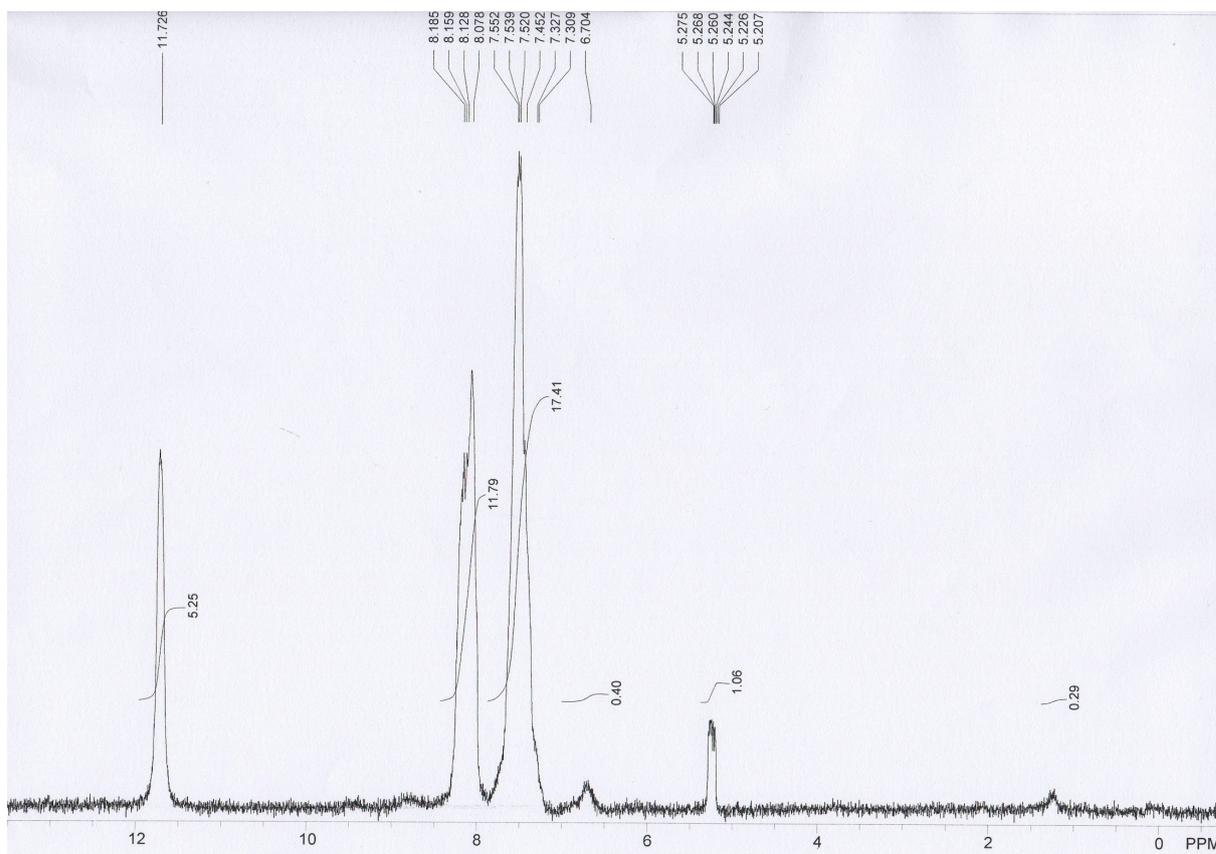
A.2.1.5  $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ 

Figura 33 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0.0$  a 12.5 ppm

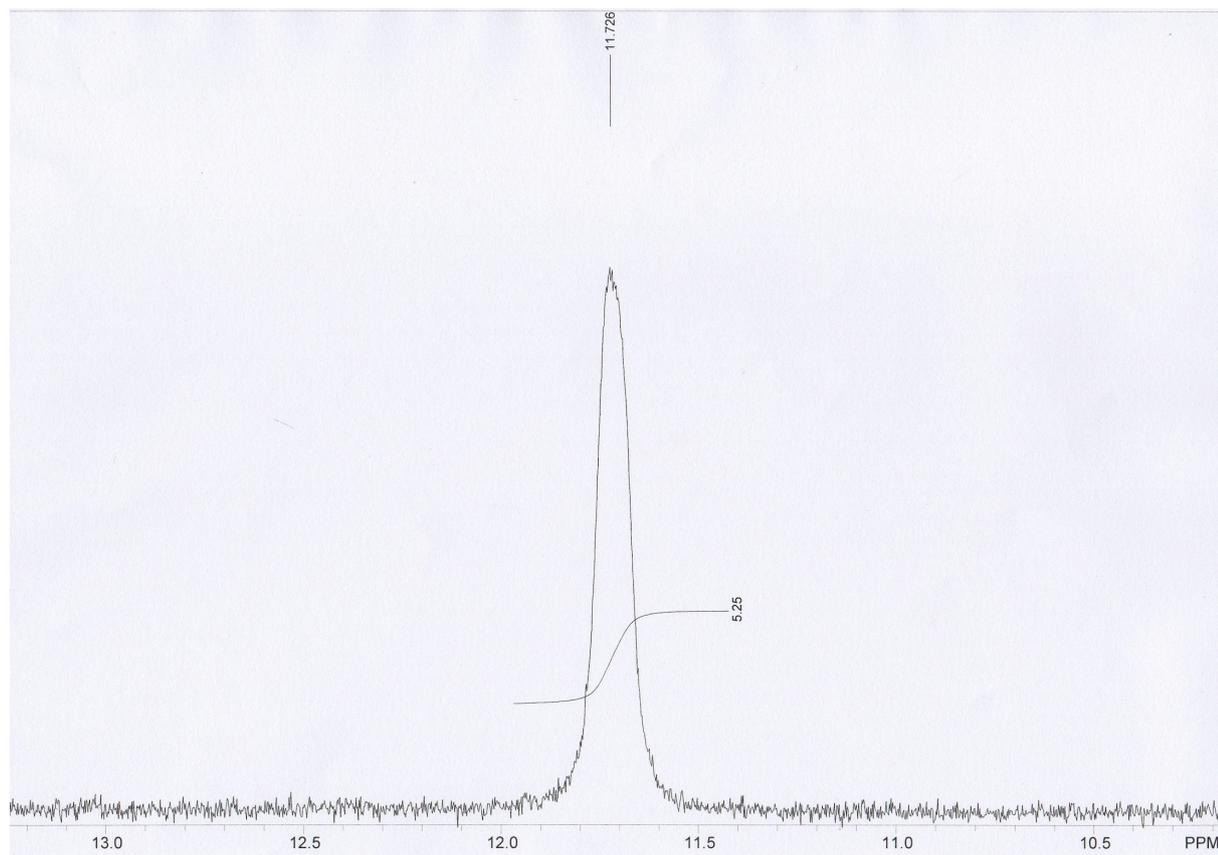


Figura 34 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 10.5$  a 13.0 ppm

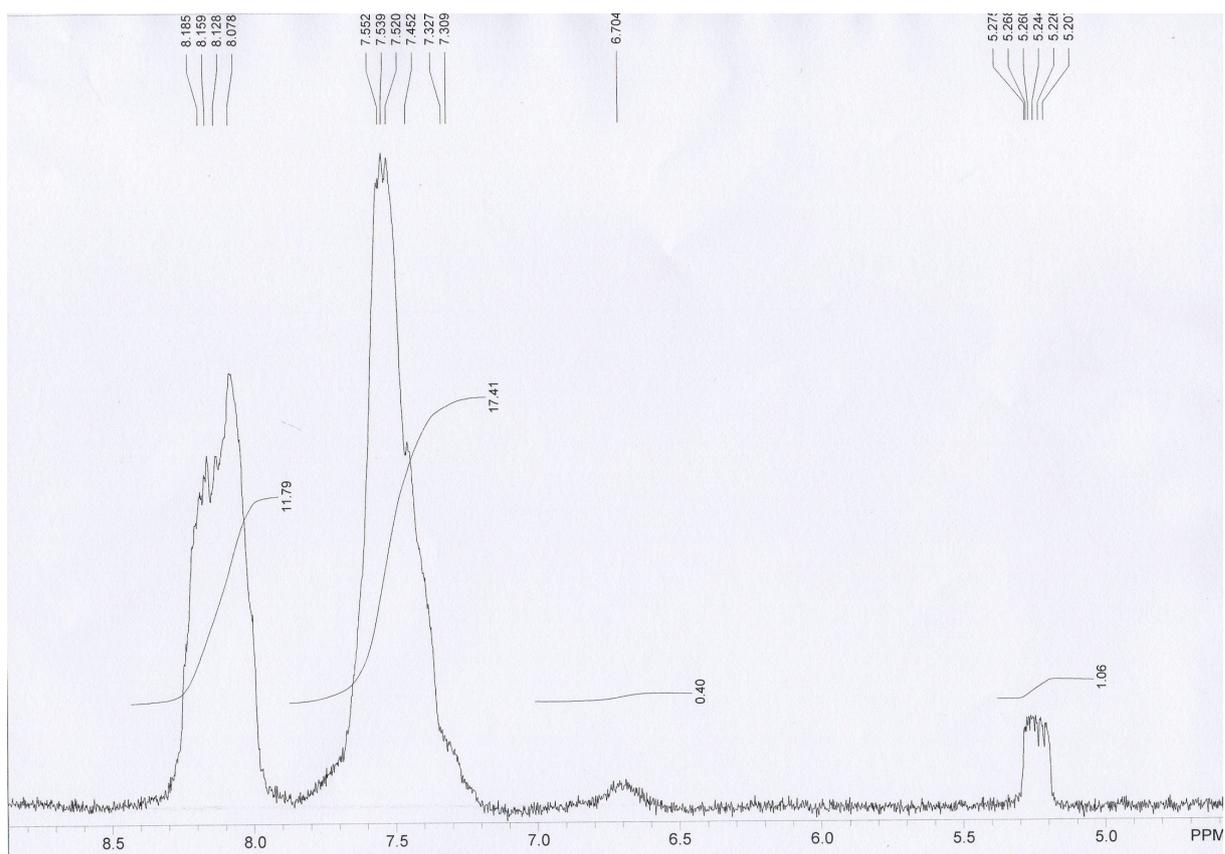
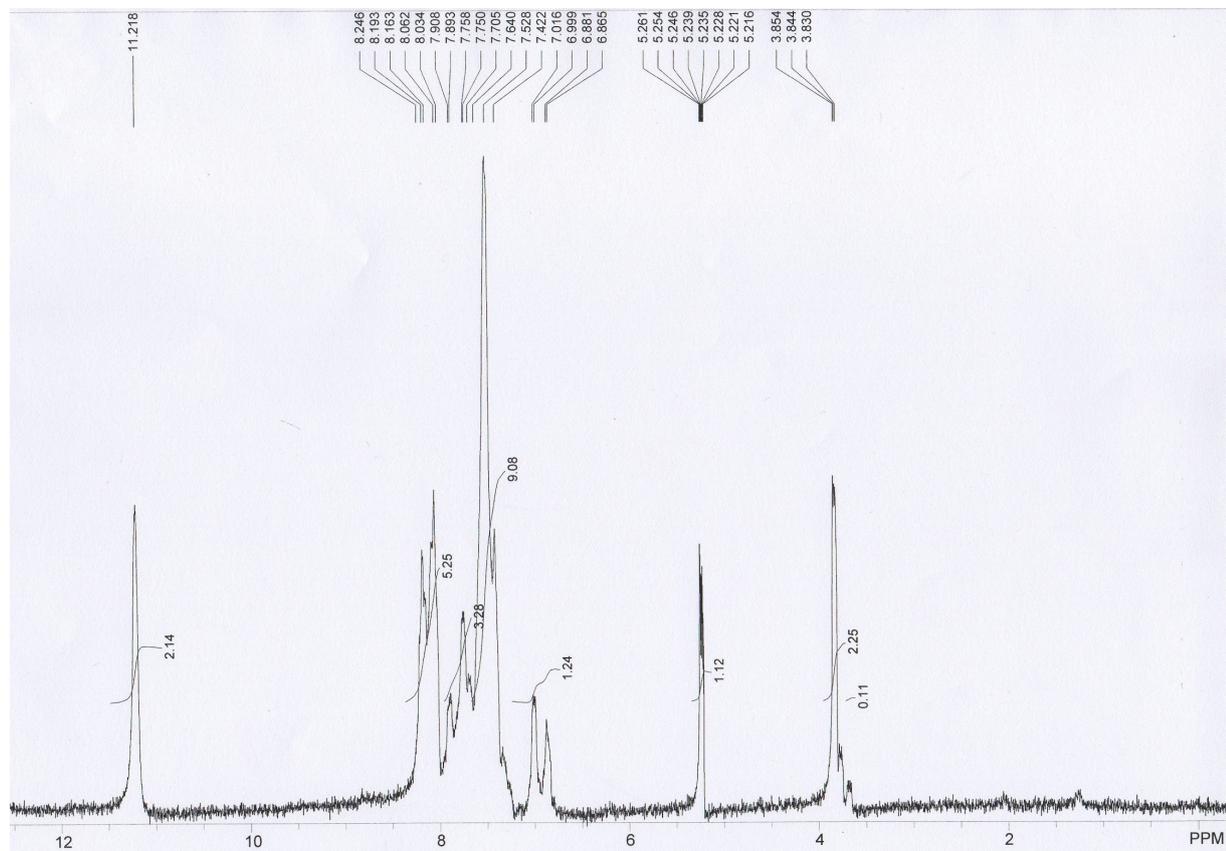


Figura 35 – RMN  $^1\text{H}$  da reação anisol com  $\text{K}_3[\text{Cr}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 5.0$  a  $8.5$  ppm

A.2.1.6  $Hg[Co(SCN)_4]$ Figura 36 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $Hg[Co(SCN)_4]$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 12 ppm

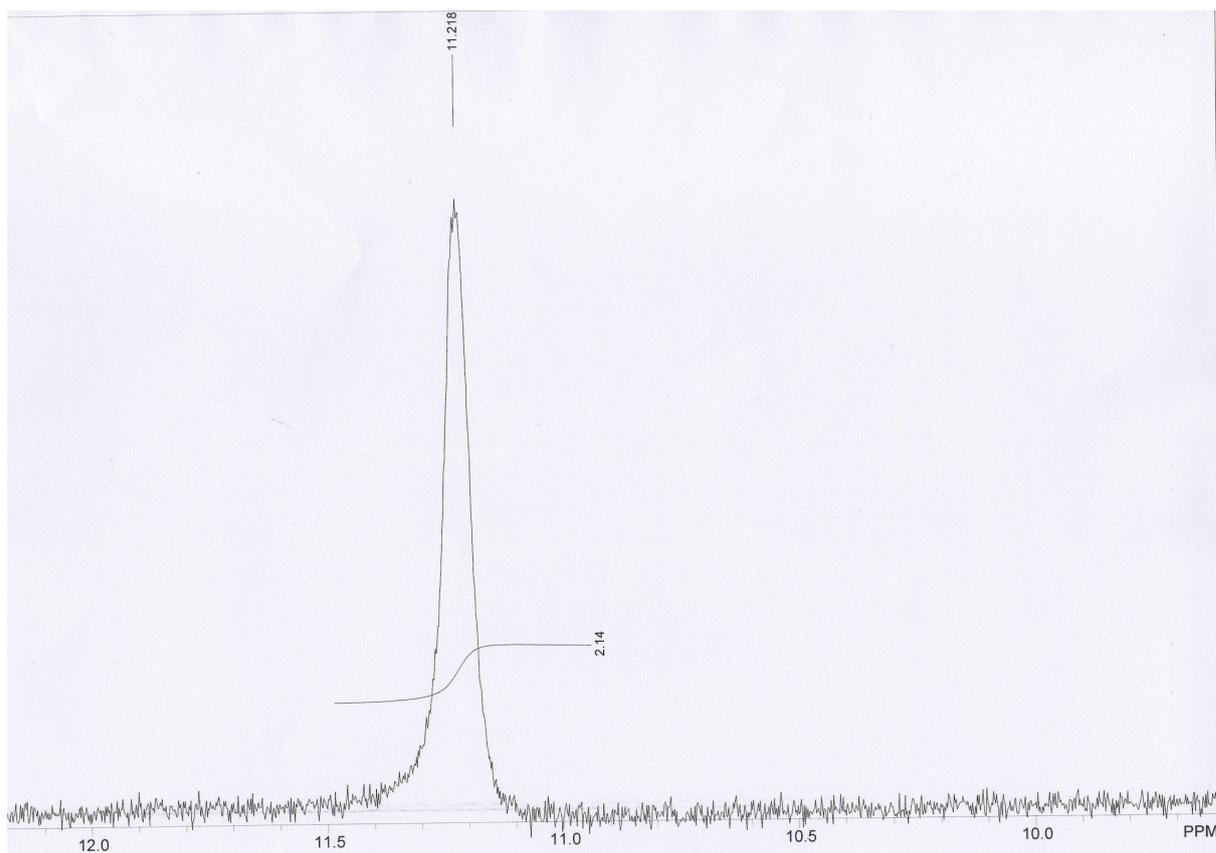


Figura 37 – RMN  $^1\text{H}$  da reação anisol com  $\text{Hg}[\text{Co}(\text{SCN})_4]$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 10$  a 12 ppm

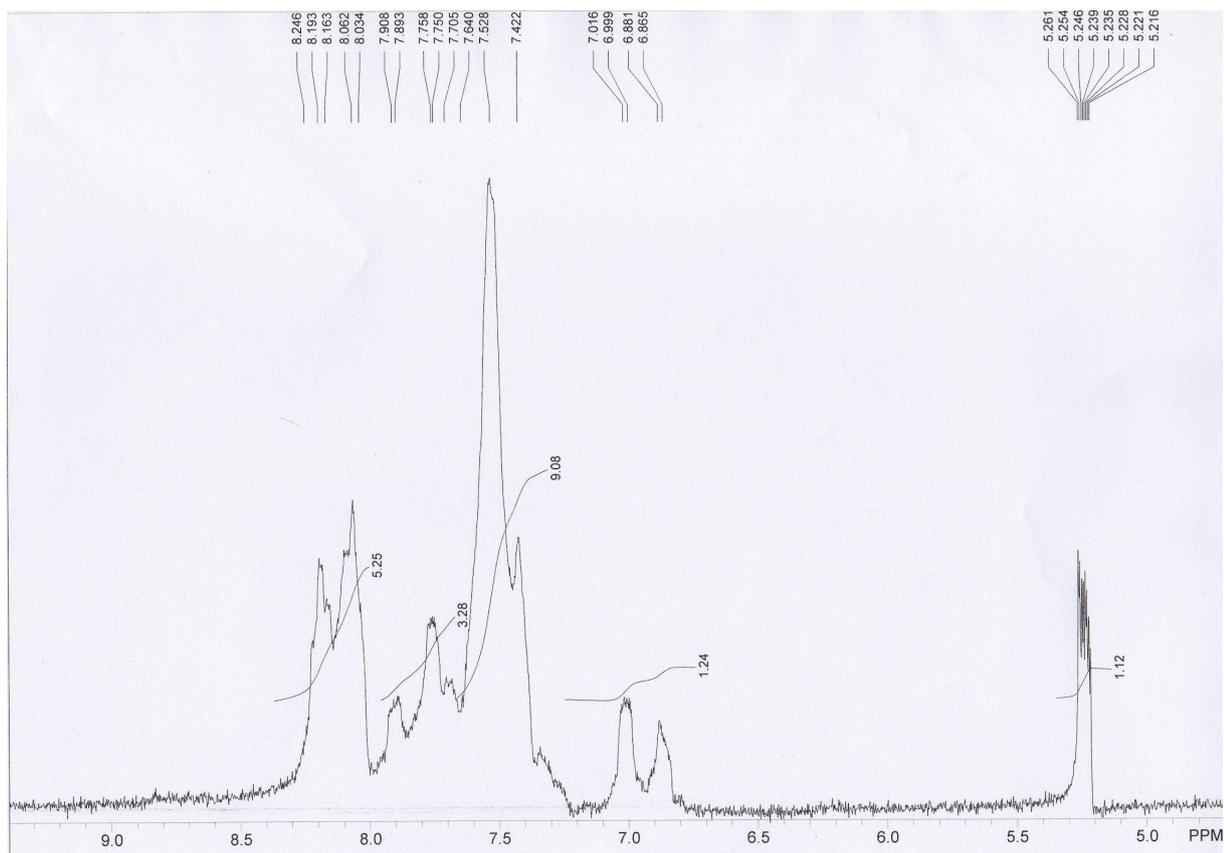


Figura 38 – RMN  $^1H$  da reação anisol com  $Hg[Co(SCN)_4]$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 5$  a 9 ppm

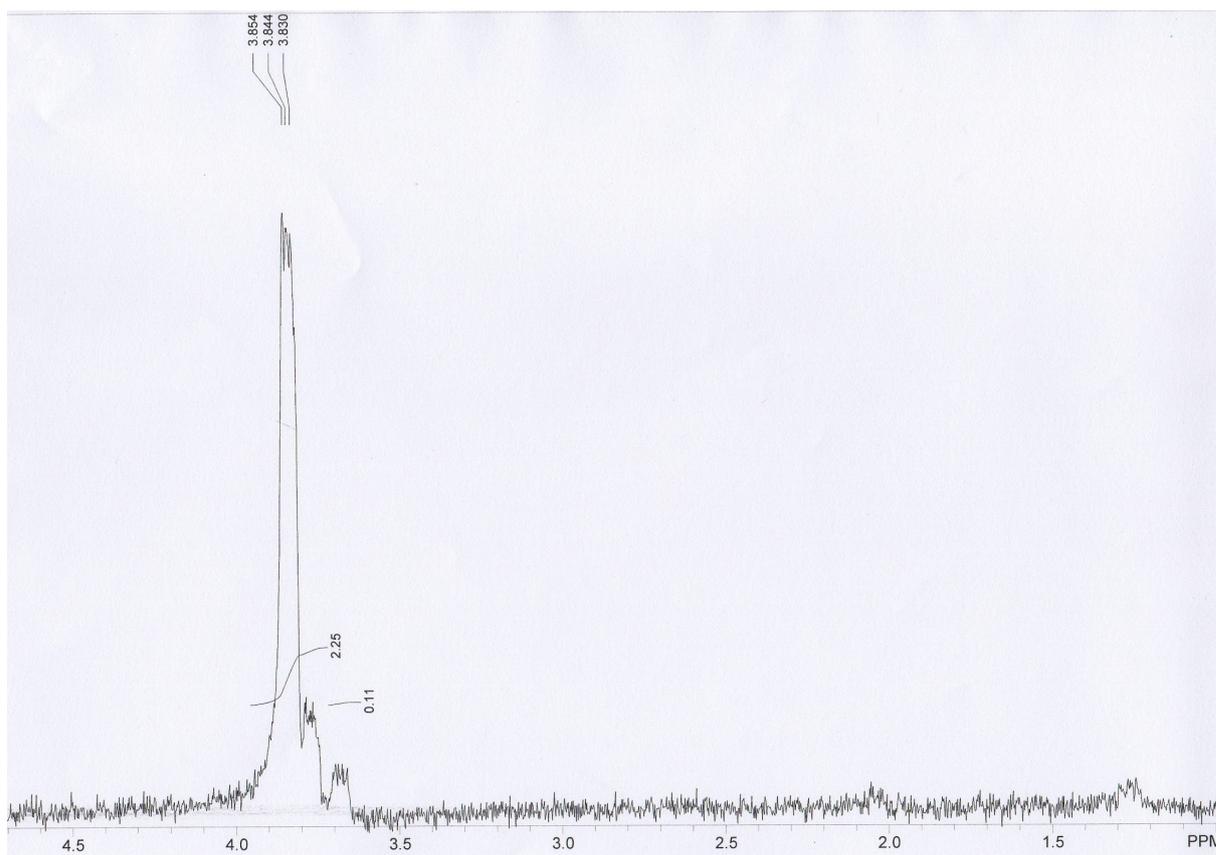


Figura 39 – RMN  $^1\text{H}$  da reação anisol com  $\text{Hg}[\text{Co}(\text{SCN})_4]$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 1.5$  a 4.5 ppm

## A.2.2 Isopropoxibenzeno

### A.2.2.1 ZnO

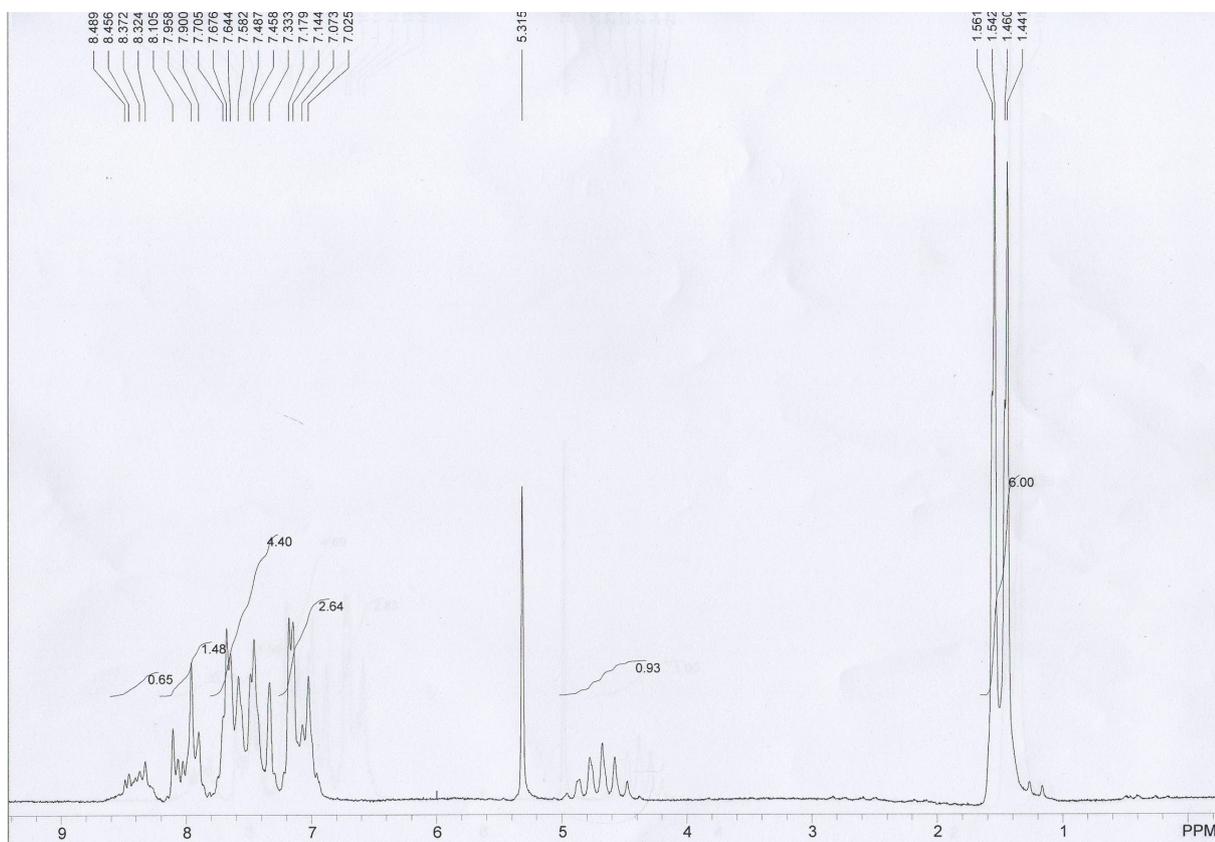


Figura 40 – RMN  $^1H$  da reação isopropoxibenzeno com ZnO  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 9 ppm

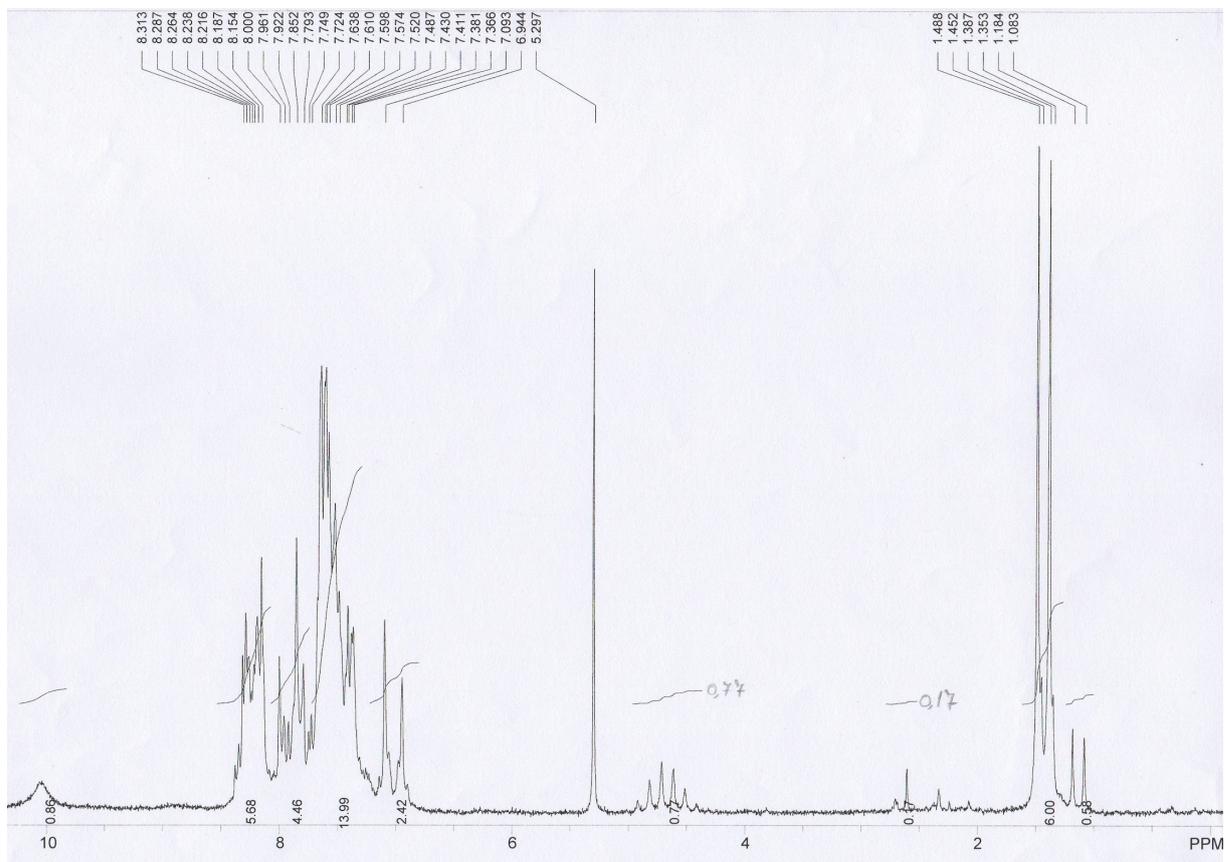
A.2.2.2  $Co(acac)_2$ 

Figura 41 – RMN  $^1H$  da reação isopropoxibenzeno com  $Co(acac)_2$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 10 ppm

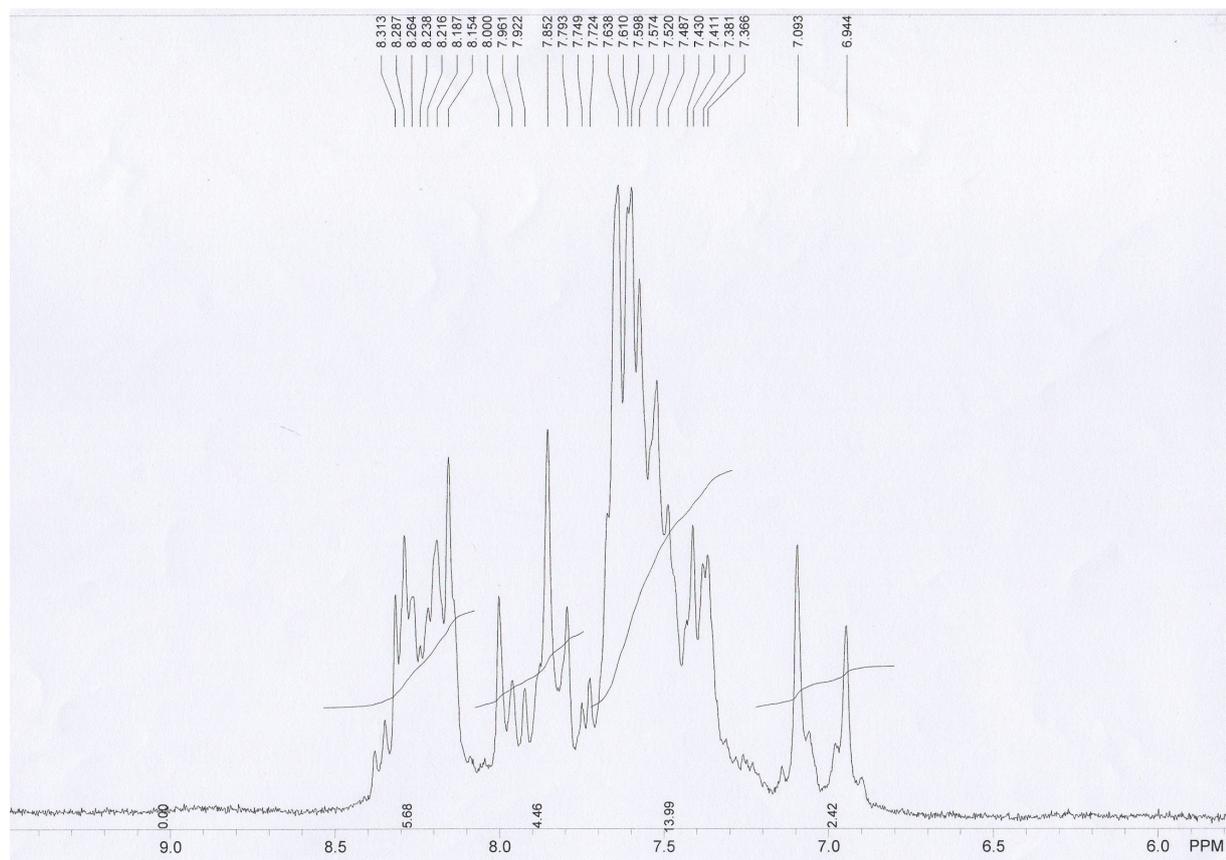


Figura 42 – RMN  $^1H$  da reação isopropoxibenzeno com  $Co(acac)_2$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 6$  a 9 ppm

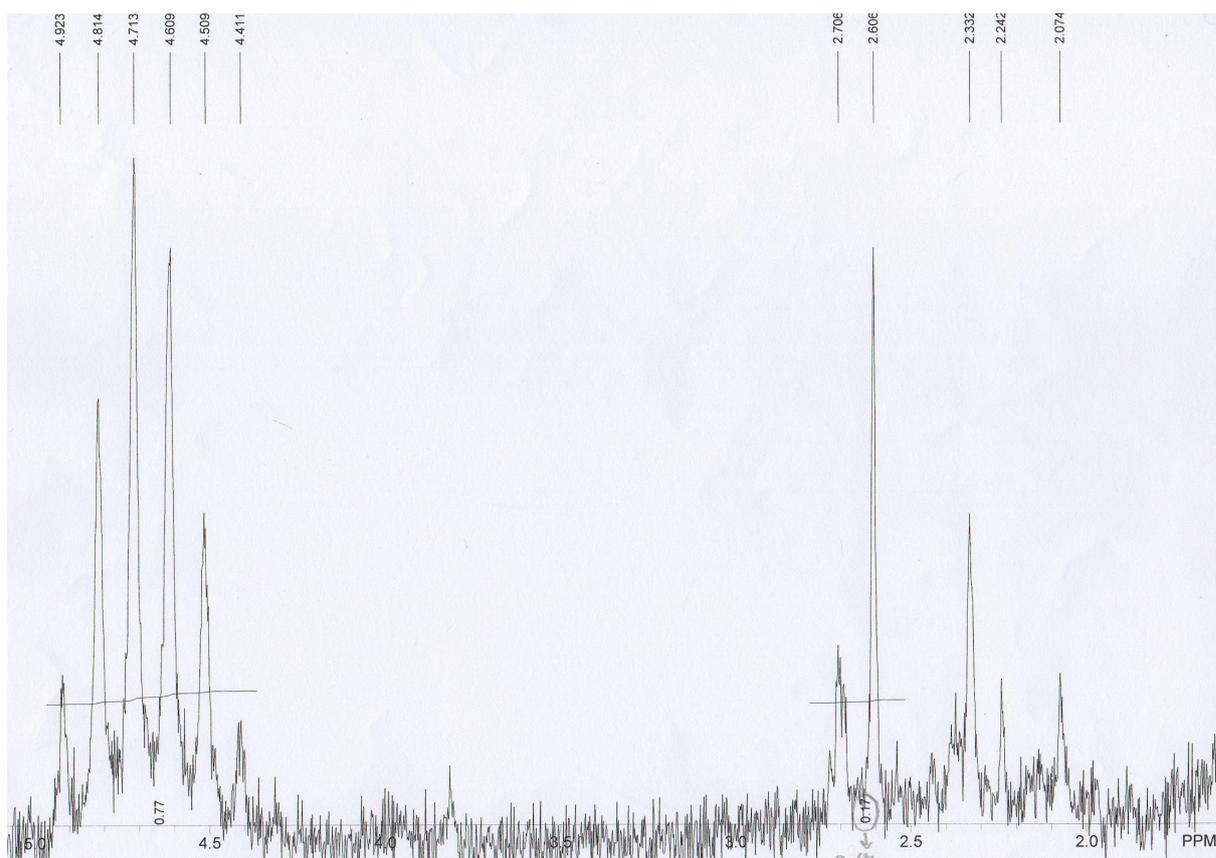


Figura 43 – RMN  $^1\text{H}$  da reação isopropoxibenzeno com  $\text{Co}(\text{acac})_2$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 2$  a 5 ppm

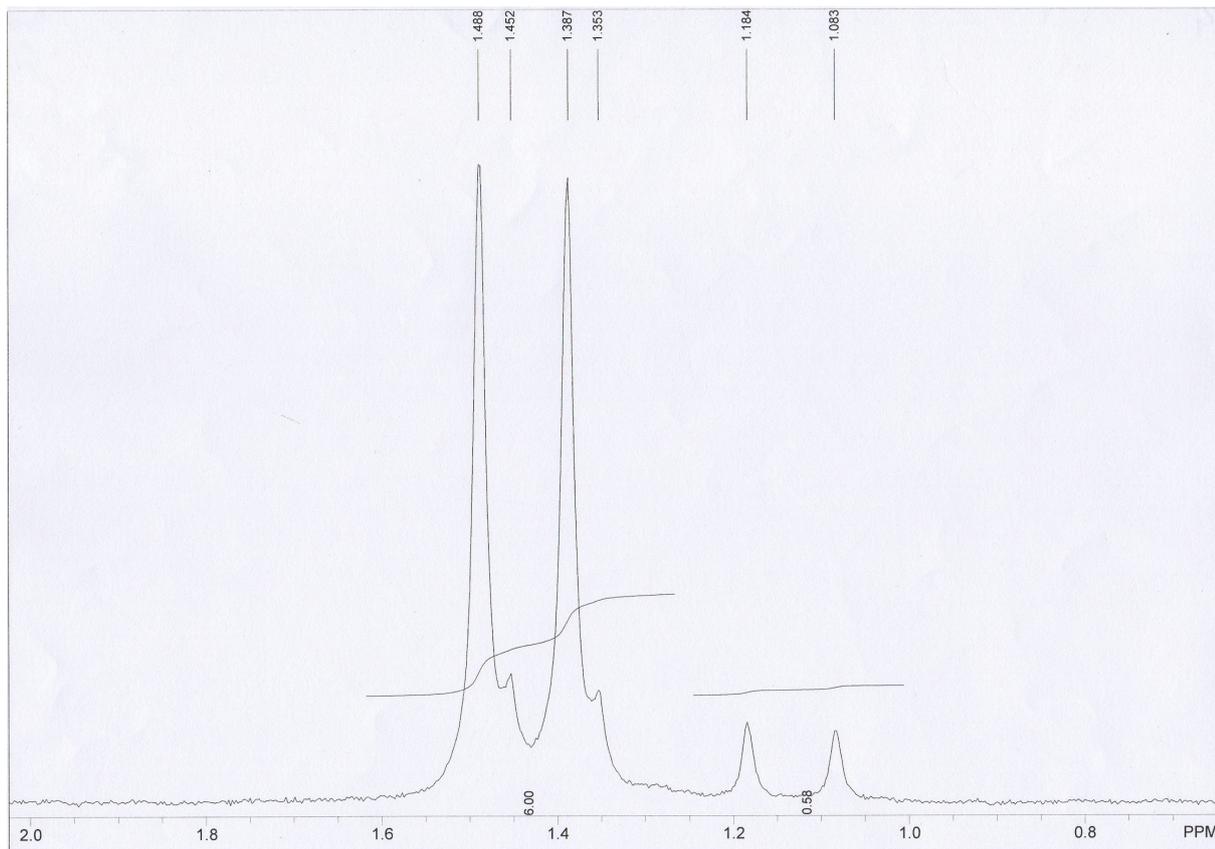


Figura 44 – RMN  $^1H$  da reação isopropoxibenzeno com  $Co(acac)_2$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0.8$  a 2.0 ppm

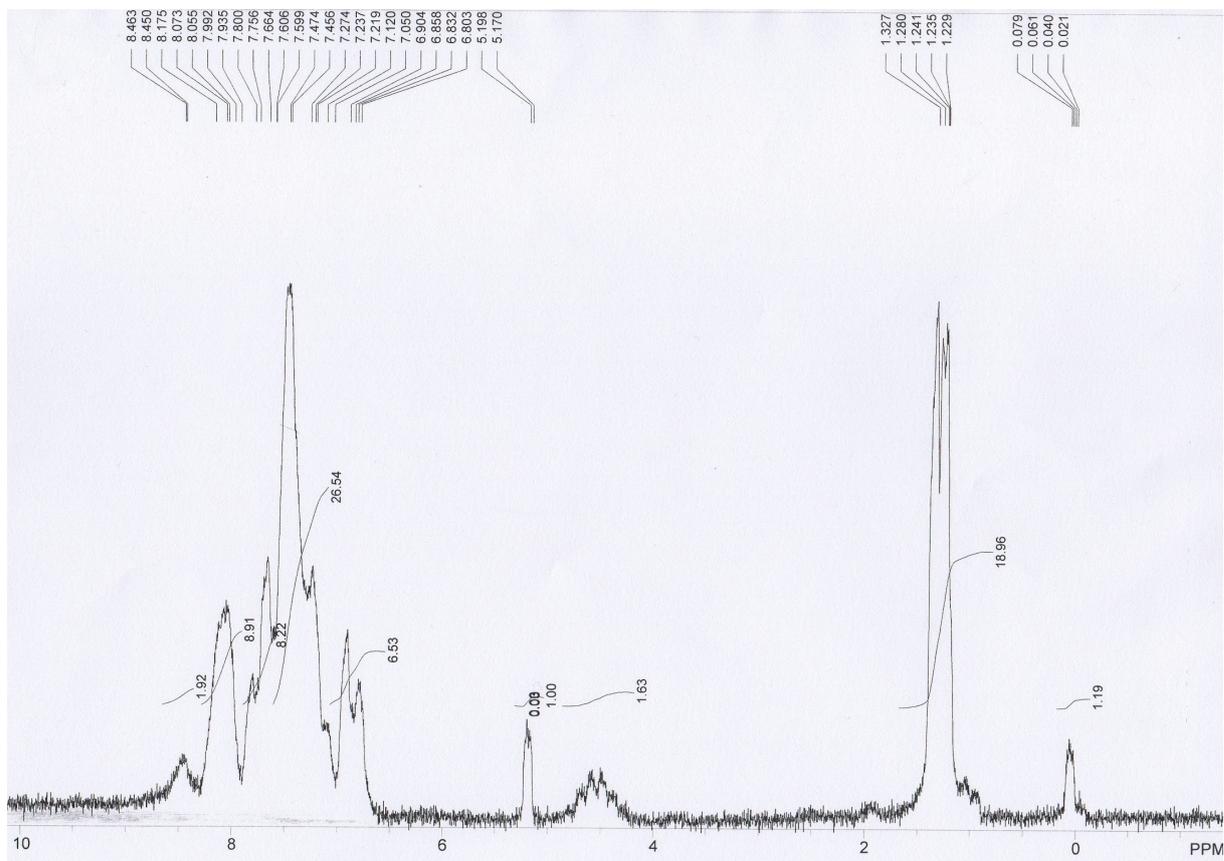
A.2.2.3  $Au_2Cl_6$ 

Figura 45 – RMN  $^1H$  da reação isopropoxibenzeno com  $Au_2Cl_6$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 10 ppm

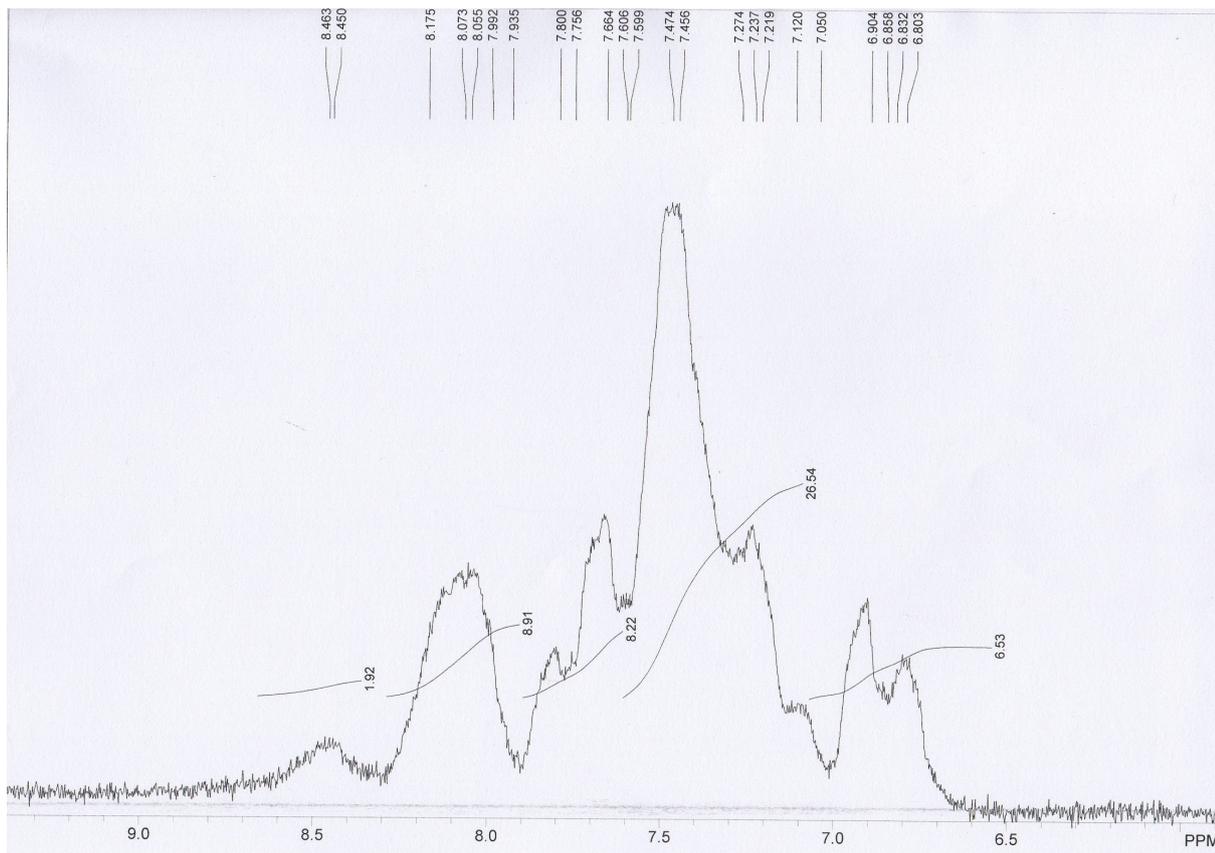


Figura 46 – RMN  $^1H$  da reação isopropoxibenzeno com  $Au_2Cl_6$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta$  = 6.5 a 9.0 ppm

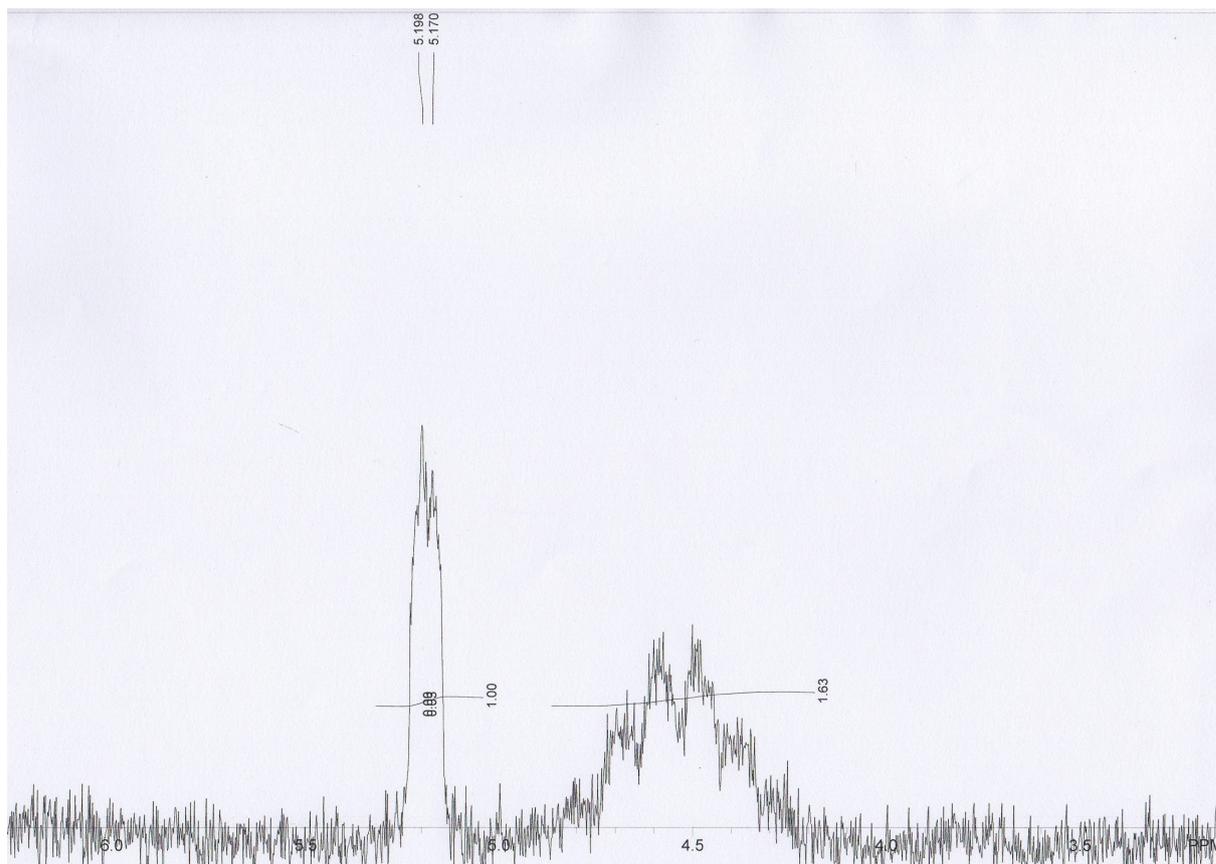


Figura 47 – RMN  $^1\text{H}$  da reação isopropoxibenzeno com  $\text{Au}_2\text{Cl}_6$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 3.5$  a 6.0 ppm

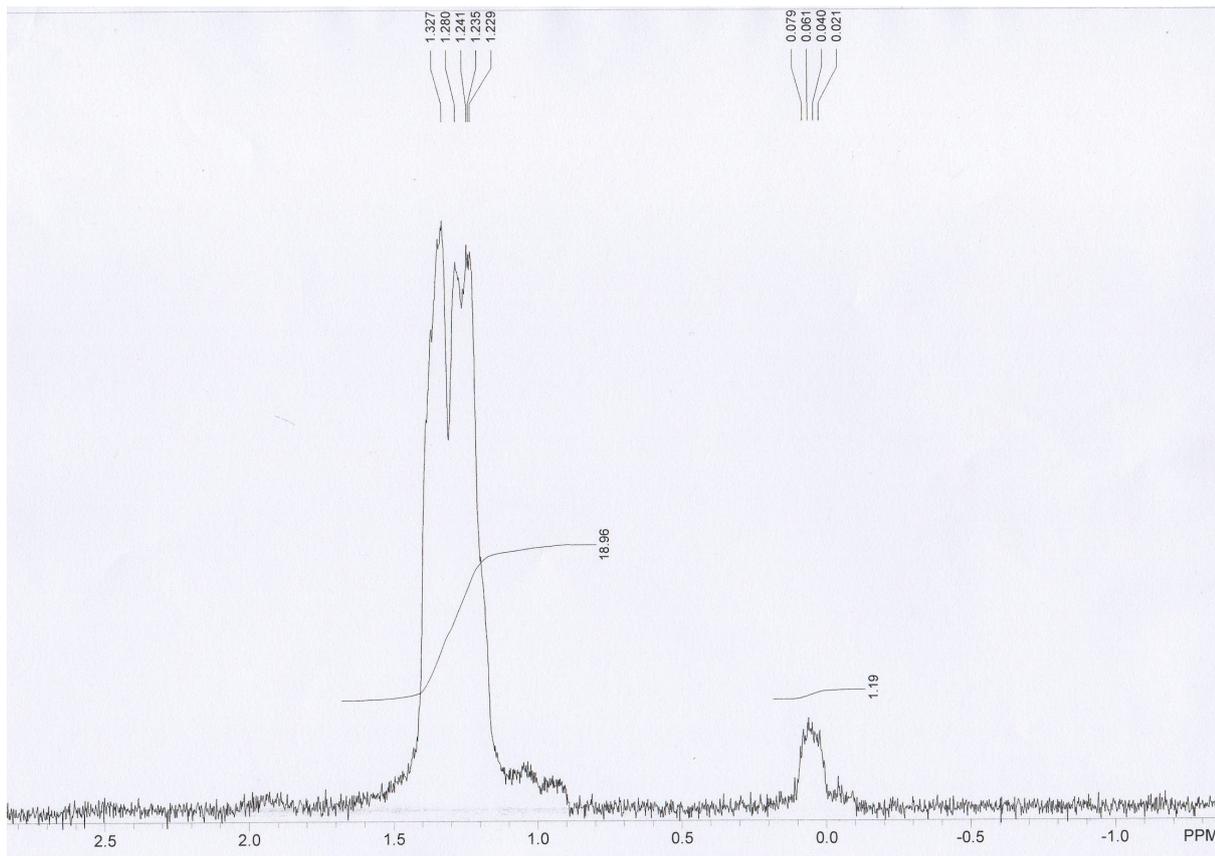


Figura 48 – RMN  $^1H$  da reação isopropoxibenzeno com  $Au_2Cl_6$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = -1.0$  a 2.5 ppm

## A.2.3 *N,N*-dimetilanilina

### A.2.3.1 ZnO

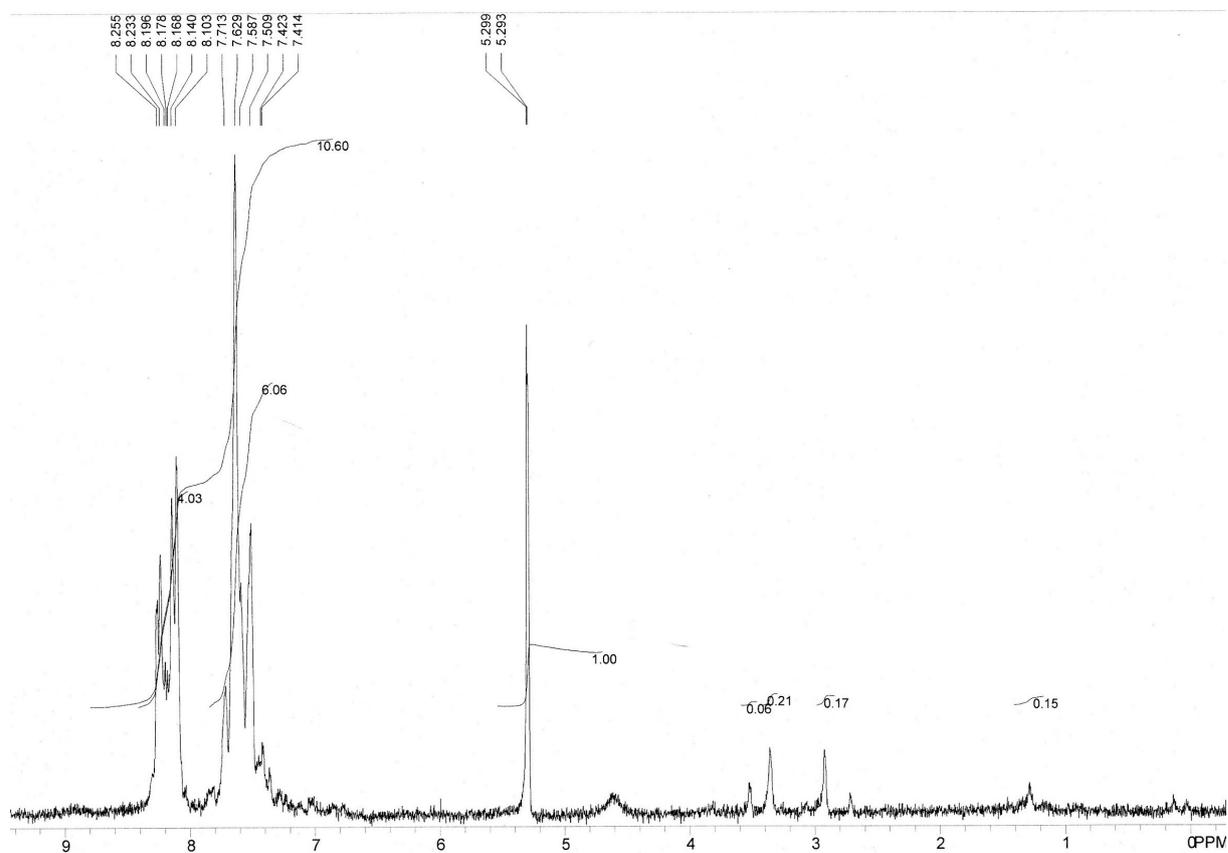


Figura 49 – RMN  $^1\text{H}$  da reação *N,N*-dimetilanilina com ZnO em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 9 ppm

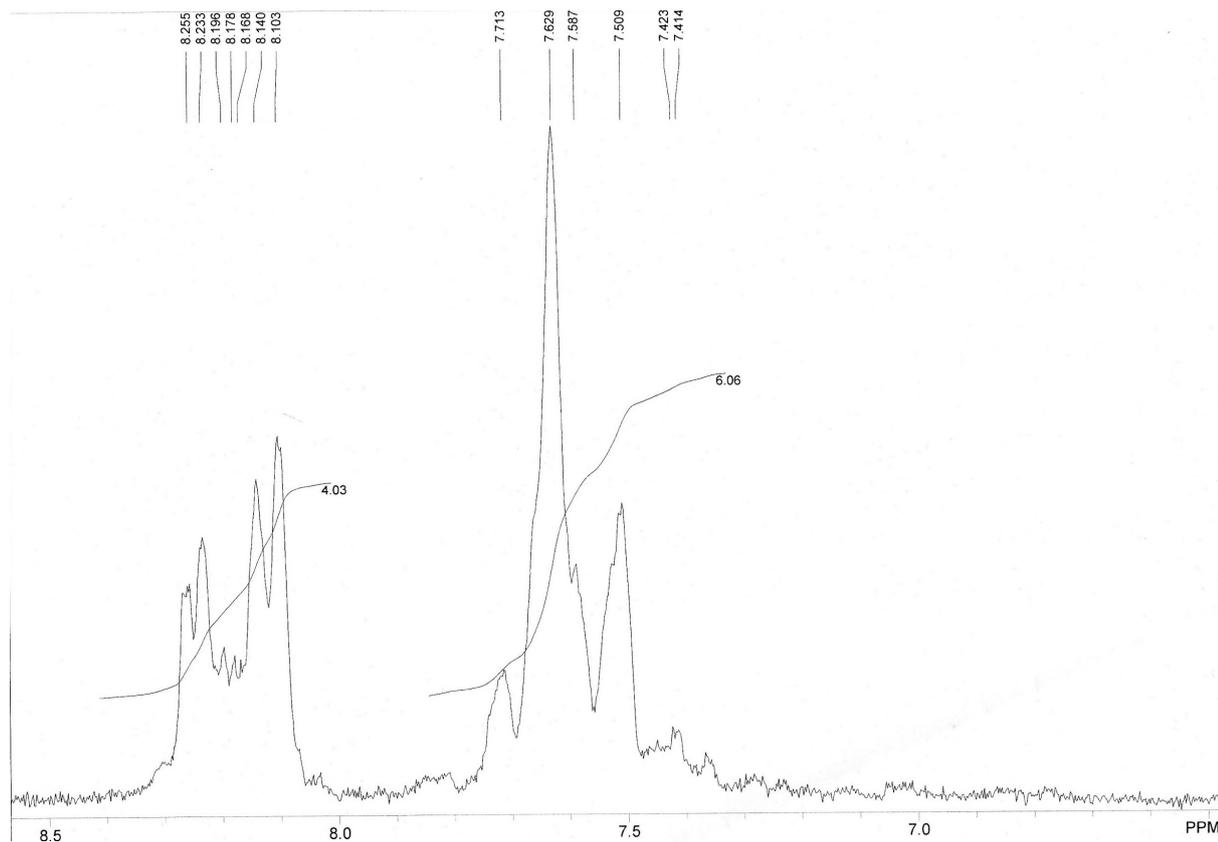


Figura 50 – RMN  $^1H$  da reação N,N-dimetilanilina com ZnO em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 6.5$  a 8.5 ppm

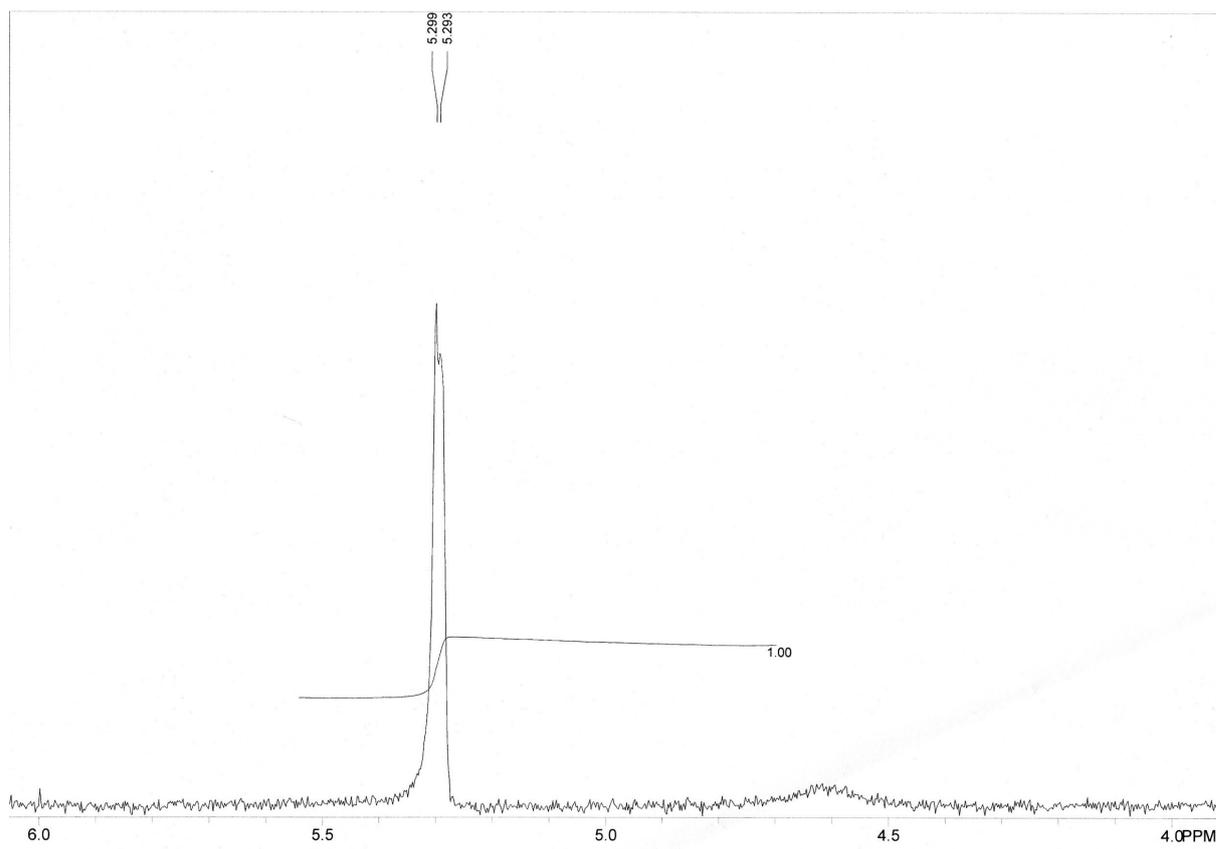


Figura 51 – RMN  $^1\text{H}$  da reação N,N-dimetilanilina com ZnO em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 4$  a 6 ppm

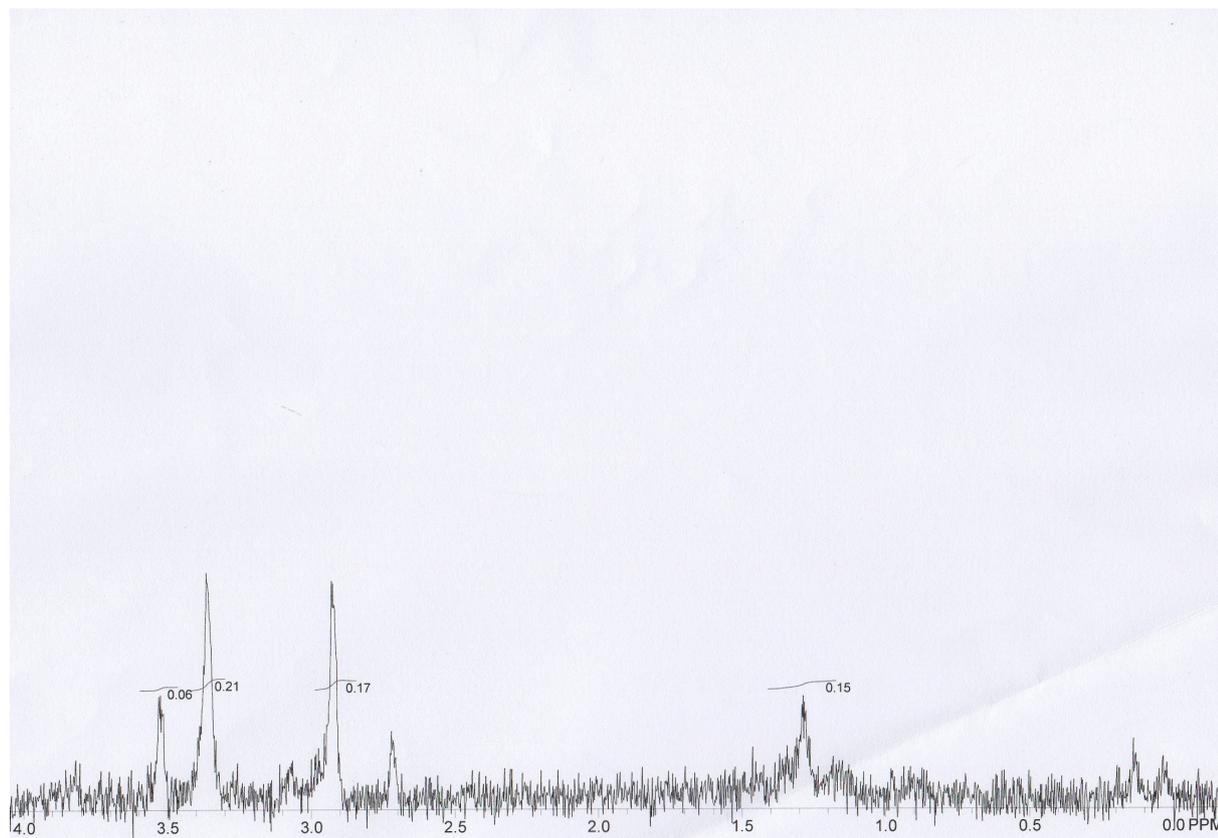


Figura 52 – RMN  $^1H$  da reação N,N-dimetilanilina com ZnO em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 4 ppm

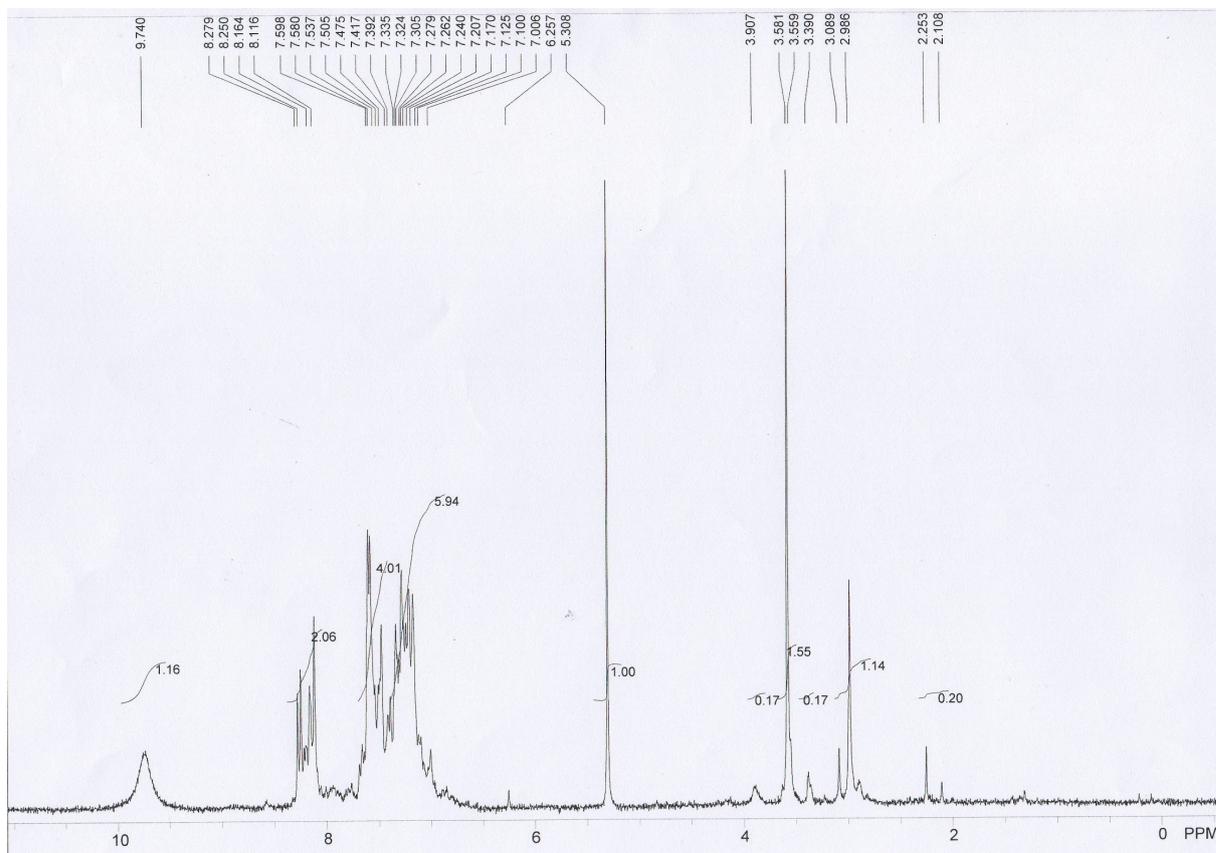
A.2.3.2  $Co(acac)_2$ 

Figura 53 – RMN  $^1H$  da reação N,N-dimetilanilina com  $Co(acac)_2$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 10 ppm

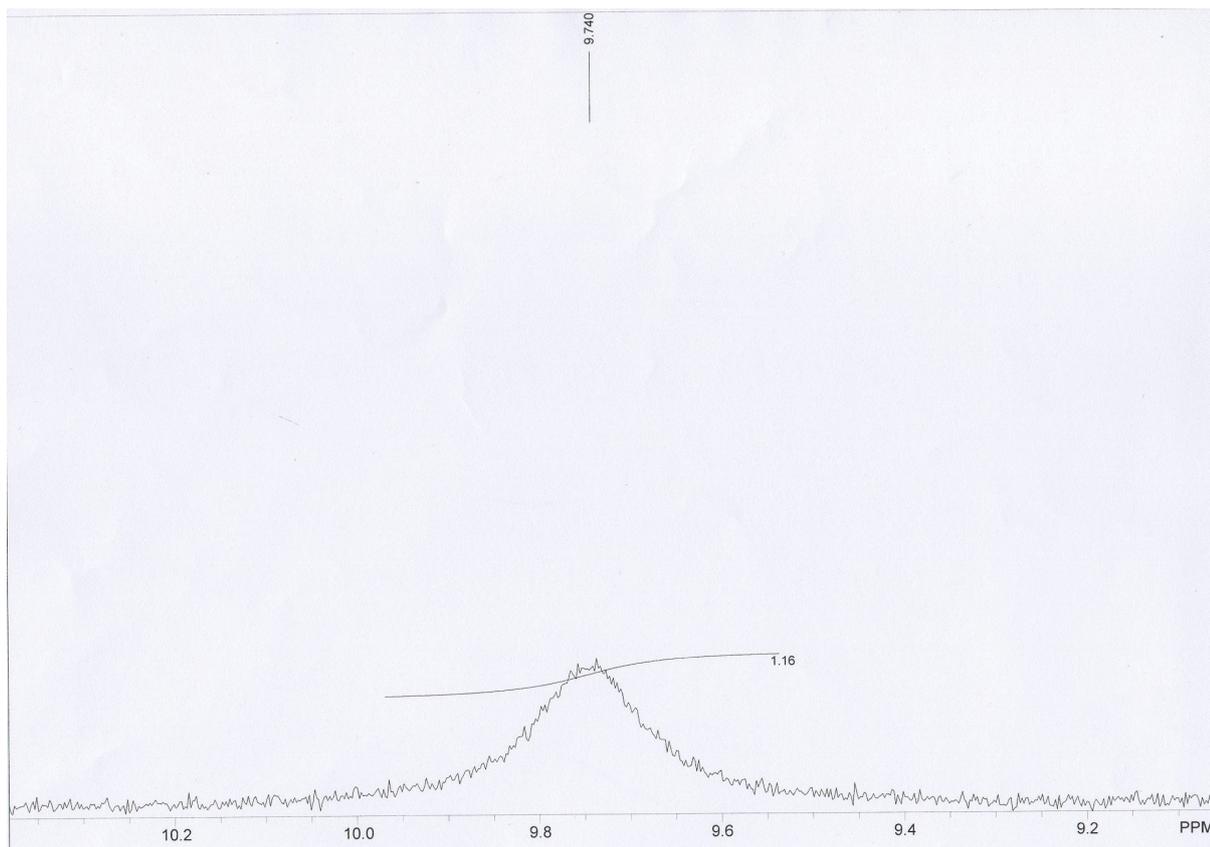


Figura 54 – RMN  $^1H$  da reação N,N-dimetilanilina com  $Co(acac)_2$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 9.2$  a 10.2 ppm

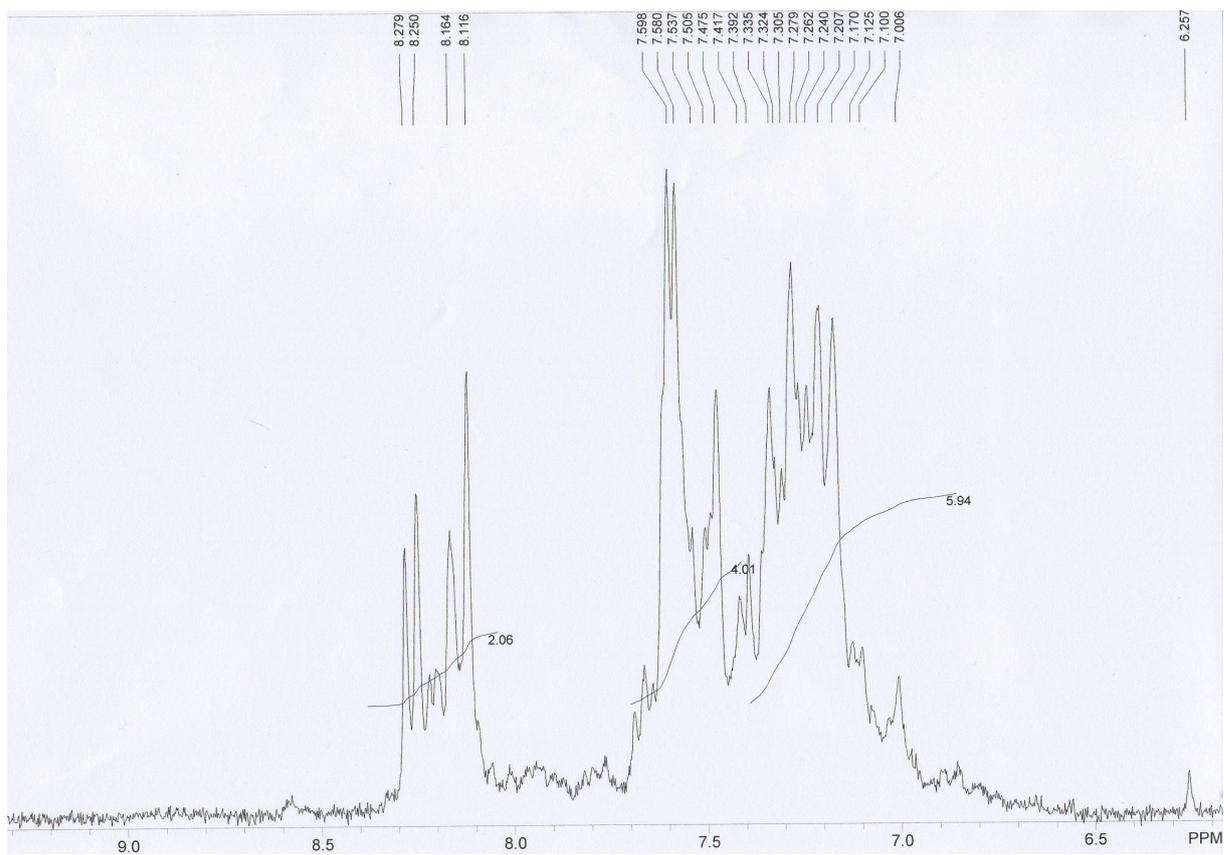


Figura 55 – RMN  $^1\text{H}$  da reação N,N-dimetilanilina com  $\text{Co}(\text{acac})_2$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 6.5$  a 9.0 ppm

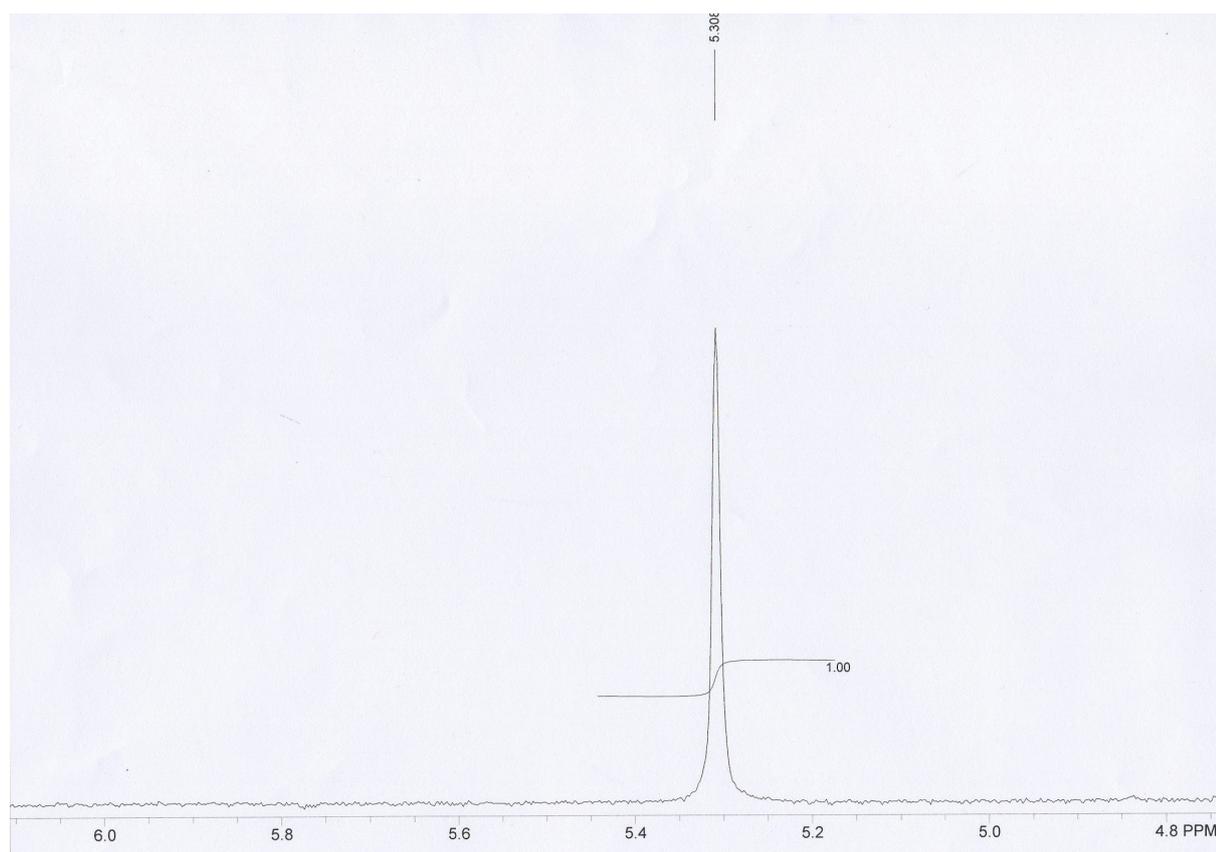


Figura 56 – RMN  $^1H$  da reação N,N-dimetilanilina com  $Co(acac)_2$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 4.8$  a 6.0 ppm

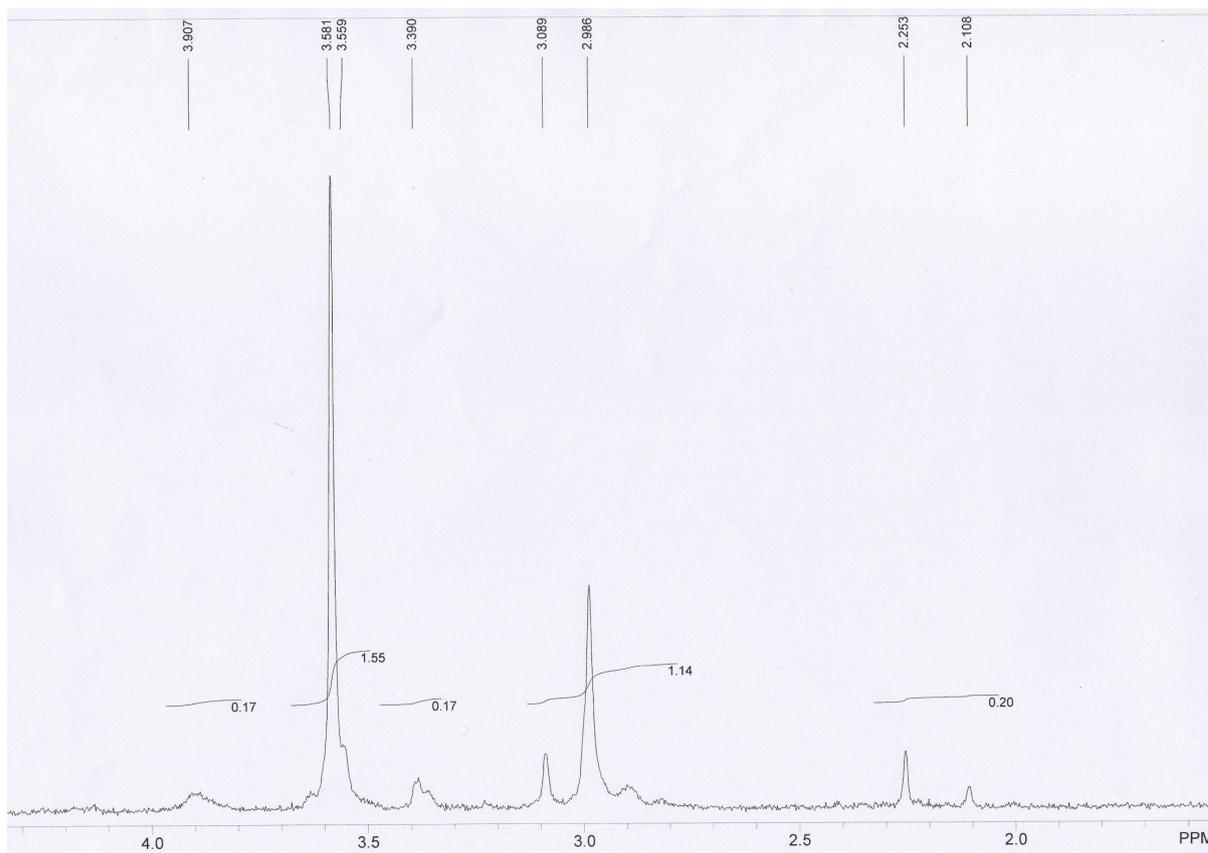


Figura 57 – RMN  $^1\text{H}$  da reação N,N-dimetilanilina com  $\text{Co}(\text{acac})_2$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 1$  a 4 ppm

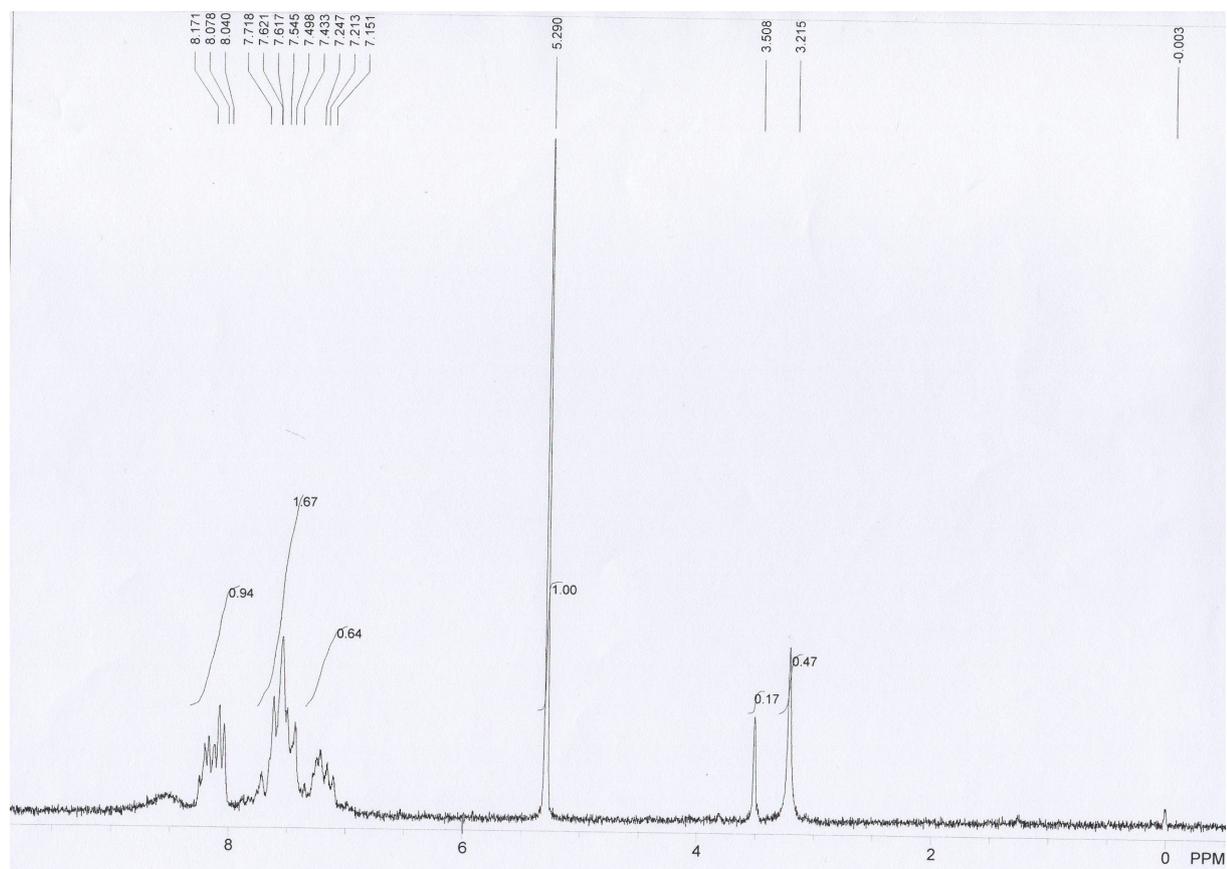
A.2.3.3  $Au_2Cl_6$ 

Figura 58 – RMN  $^1H$  da reação N,N-dimetilanilina com  $Au_2Cl_6$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 0$  a 9 ppm

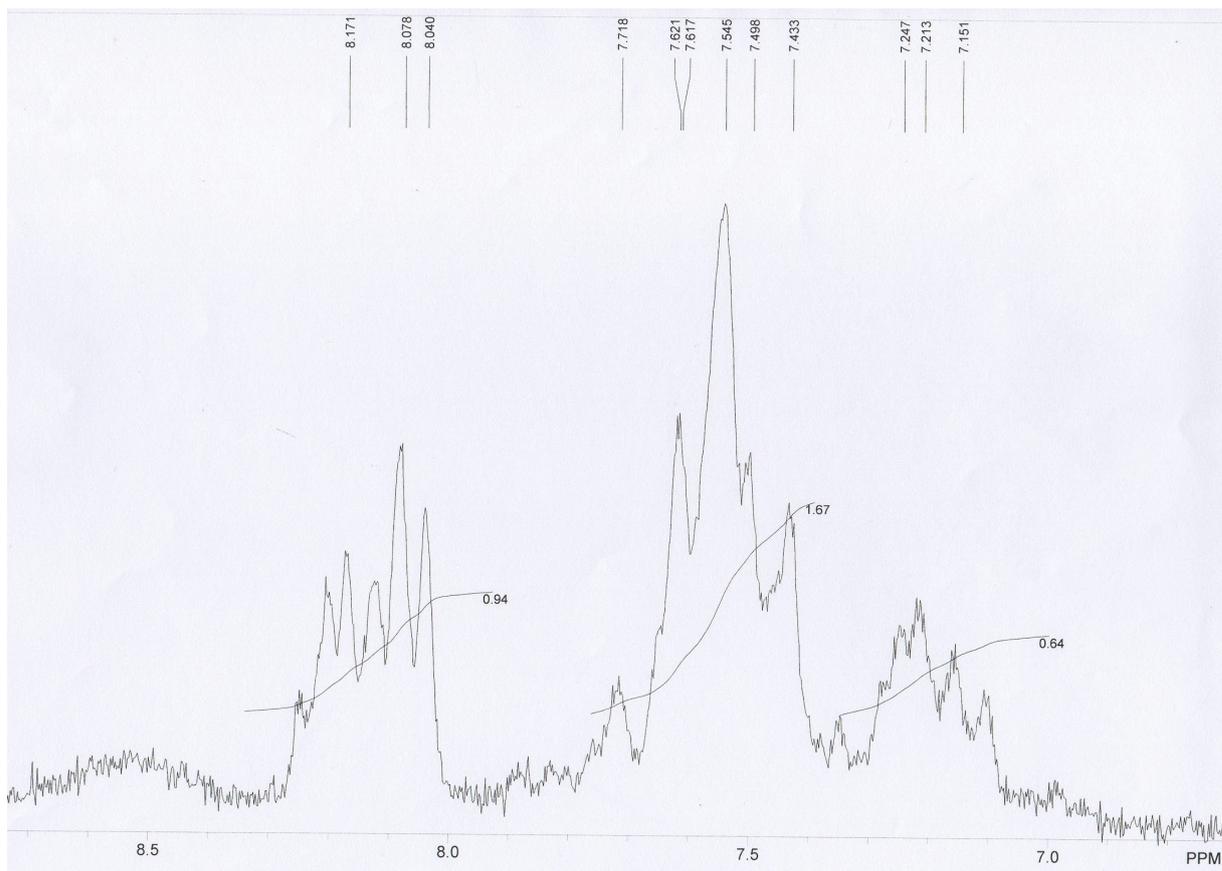


Figura 59 – RMN  $^1\text{H}$  da reação N,N-dimetilanilina com  $\text{Au}_2\text{Cl}_6$  em  $\text{CDCl}_3/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 7.0$  a 8.5 ppm

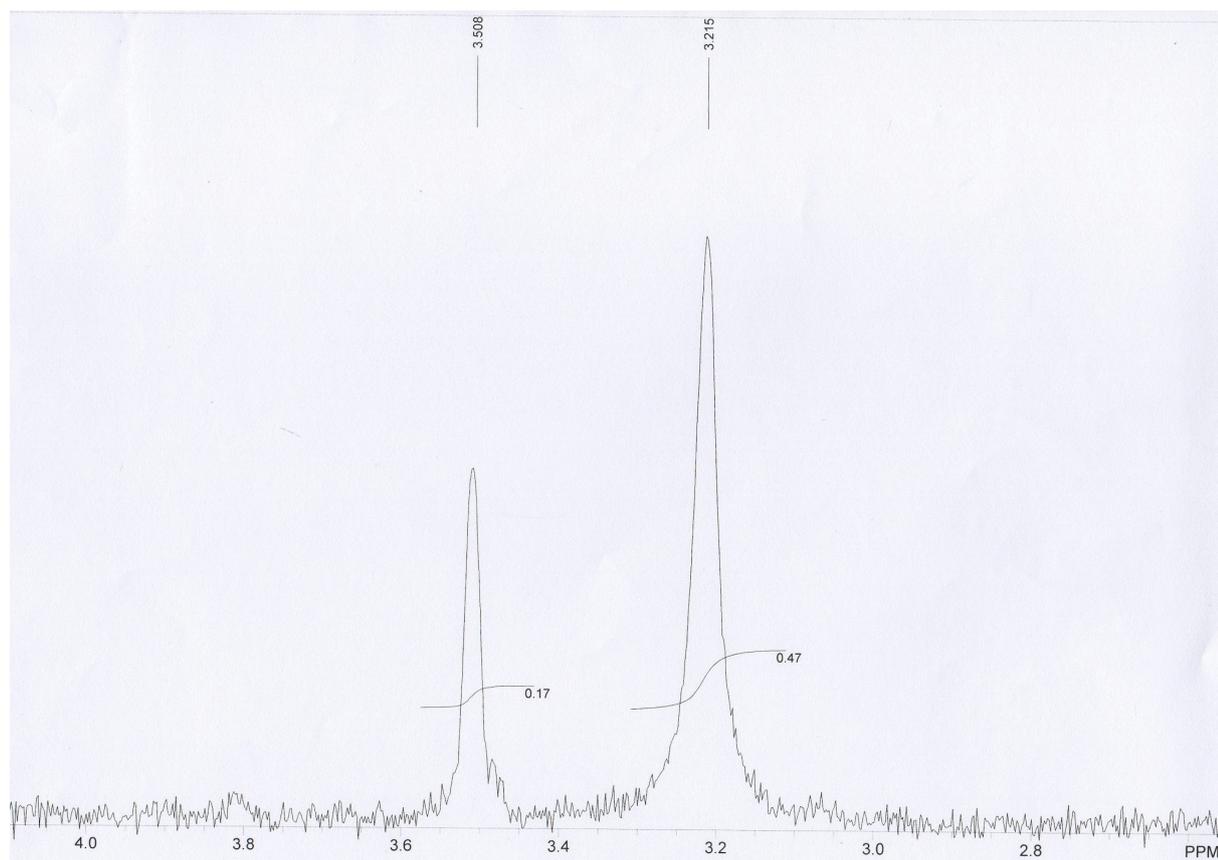


Figura 60 – RMN  $^1H$  da reação N,N-dimetilanilina com  $Au_2Cl_6$  em  $CDCl_3/CH_2Cl_2$  / 60 MHz / Intervalo  $\delta = 2.8$  a 4.0 ppm

# APÊNDICE B

## ESPECTROS DE GC-MS

### B.1 Anisol

#### B.1.1 ZnO

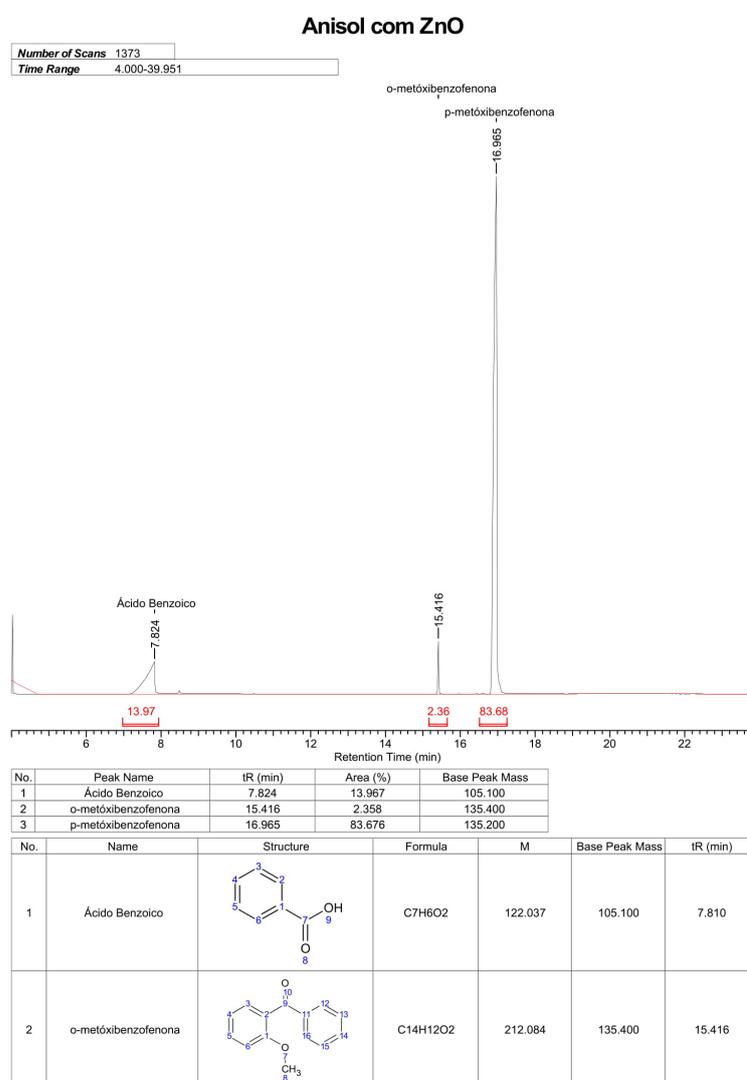


Figura 61 – Cromatograma da reação Anisol com ZnO

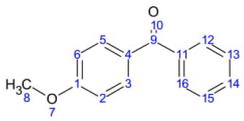
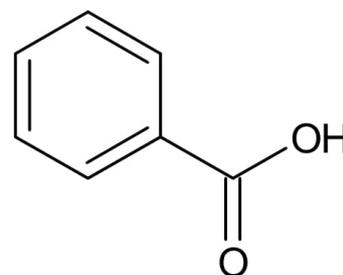
No.	Name	Structure	Formula	M	Base Peak Mass	tR (min)
3	p-metóxiacetofenona		C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	212.084	135.200	16.965

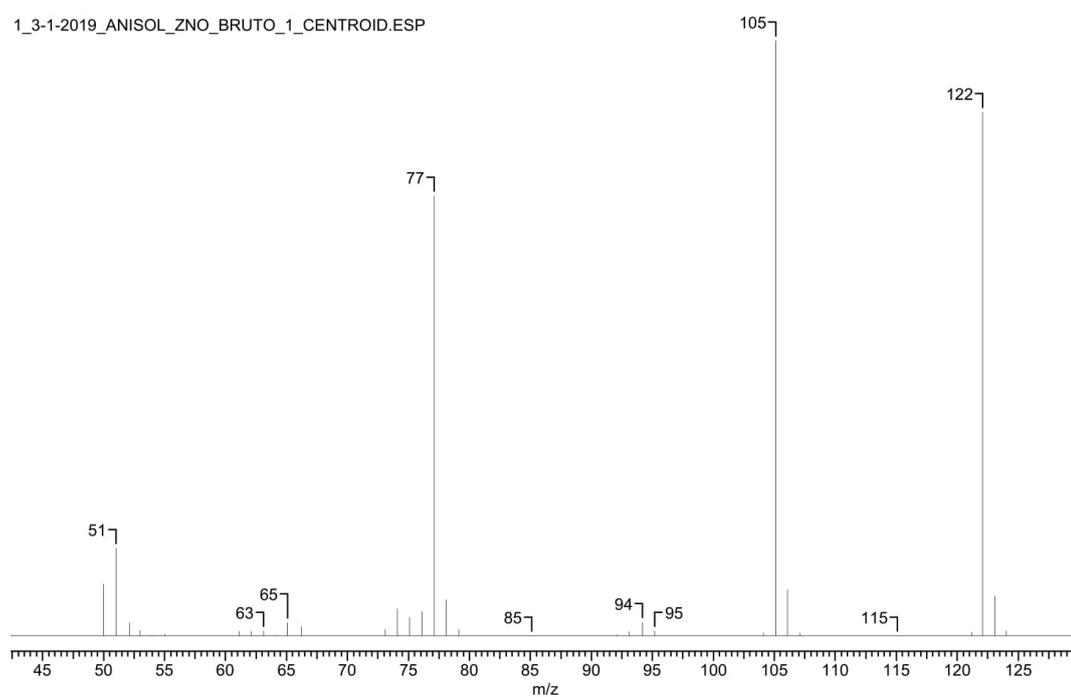
Figura 62 – Cromatograma da reação Anisol com ZnO (continuação)

## Anisol com ZnO

<b>Formula</b>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	122.1213
<b>Count</b>	54	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>Date</b>	01 Mar 19 12:41 pm	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>File Name</b>	1_3-1-2019_ANISOL_ZNO_BRUTO_1_CENTROID	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	7.810
<b>Scan</b>	157	<b>TIC</b>	336.61
<b>Total Signal</b>	1972296		



1\_3-1-2019\_ANISOL\_ZNO\_BRUTO\_1\_CENTROID.ESP



No.	m/z	RI(%)	DI
1	51.000	14.759	86479.000
2	77.100	73.908	433041.000
3	105.100	100.000	585922.000
4	122.100	87.996	515586.031

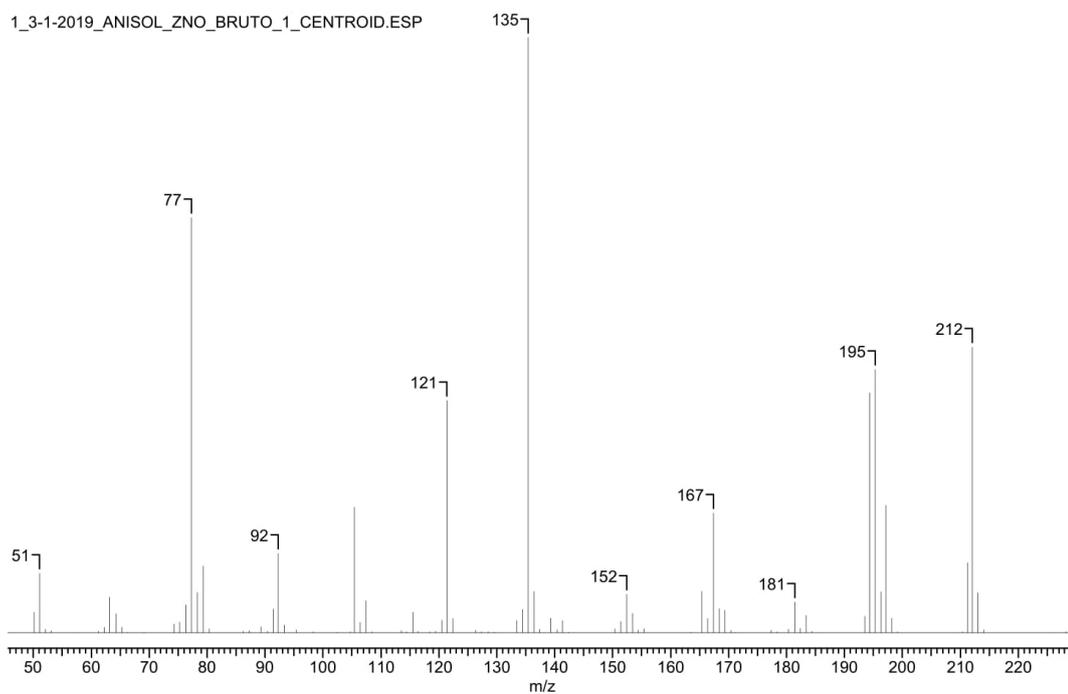
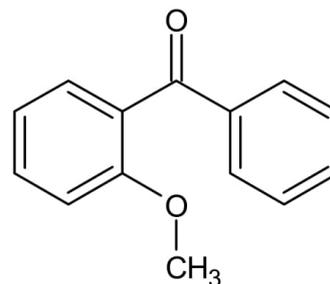
Figura 63 – Espectro de Massas; Reação Anisol com ZnO; T.R.=7.8; Ácido benzóico

No.	<i>m/z</i>	TIC(%)
1	50.000	2.588
2	51.000	4.385
3	52.100	0.671
4	53.000	0.268
5	54.000	0.031
6	55.000	0.073
7	60.100	0.003
8	61.100	0.229
9	62.100	0.235
10	63.100	0.245
11	64.100	0.025
12	65.100	0.661
13	66.200	0.479
14	67.200	0.020
15	68.400	0.005
16	69.300	0.008
17	70.700	0.005
18	72.200	0.002
19	73.100	0.319
20	74.100	1.373
21	75.100	0.933
22	76.100	1.214
23	77.100	21.956
24	78.100	1.796
25	79.100	0.320
26	80.100	0.000
27	81.000	0.002
28	85.100	0.016
29	89.300	0.018
30	91.200	0.016
31	92.100	0.049
32	93.100	0.198
33	94.200	0.678
34	95.200	0.260
35	96.300	0.005
36	104.100	0.145
37	105.100	29.708
38	106.100	2.314
39	107.100	0.120
40	108.200	0.012
41	111.200	0.001
42	115.100	0.002
43	119.100	0.005
44	121.200	0.174
45	122.100	26.141
46	123.100	1.998
47	124.000	0.259
48	154.200	0.003
49	179.200	0.002
50	180.200	0.001
51	202.200	0.003
52	210.300	0.019
53	266.900	0.003
54	355.000	0.003

Figura 64 – Espectro de Massas; Reação Anisol com ZnO; T.R.=7.8; Ácido benzóico (continuação)

## Anisol com ZnO

<b>Formula</b>	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	212.2439
<b>Count</b>	114	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	1_3-1-2019_ANISOL_ZNO_BRUTO_1	<b>Date</b>	01 Mar 19 12:41 pm
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>Total Signal</b>	3403405	<b>Retention Time</b>	15.416
		<b>Scan</b>	464
		<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
		<b>TIC</b>	589.49



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.300	69.721	402535.063
2	79.300	11.221	64785.000
3	92.300	13.390	77309.000
4	105.400	21.121	121945.016
5	121.400	38.985	225081.031
6	135.400	100.000	577352.063
7	167.400	20.134	116245.000
8	194.400	40.295	232644.016
9	195.300	44.224	255327.016
10	197.200	21.459	123893.016
11	211.200	11.788	68059.000
12	212.100	47.999	277126.031

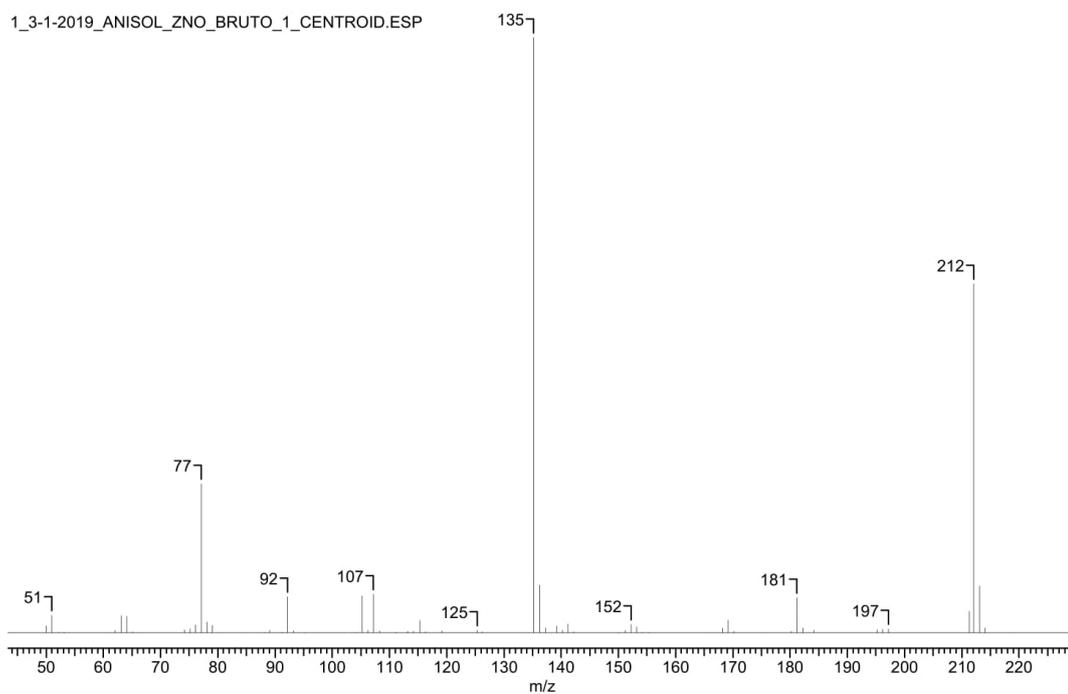
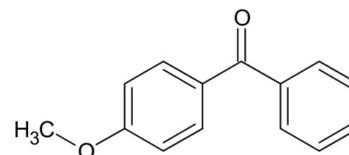
Figura 65 – Espectro de Massas; Reação Anisol com ZnO; T.R.= 15.4; o-metóxiacetofenona

No.	<i>m/z</i>	TIC(%)									
1	50.100	0.591	30	89.300	0.171	59	126.400	0.077	88	171.200	0.013
2	51.100	1.695	31	90.400	0.046	60	127.400	0.030	89	177.400	0.079
3	52.100	0.099	32	91.400	0.685	61	128.500	0.037	90	178.400	0.035
4	53.100	0.059	33	92.300	2.272	62	129.500	0.024	91	179.300	0.001
5	57.700	0.002	34	93.400	0.229	63	133.500	0.347	92	180.300	0.109
6	61.200	0.044	35	94.300	0.010	64	134.500	0.671	93	181.400	0.880
7	62.200	0.160	36	95.400	0.085	65	135.400	16.964	94	182.400	0.135
8	63.200	1.024	37	98.300	0.040	66	136.400	1.186	95	183.400	0.502
9	64.300	0.551	38	99.200	0.011	67	137.400	0.108	96	184.400	0.052
10	65.300	0.161	39	100.300	0.006	68	138.300	0.006	97	185.400	0.006
11	66.300	0.026	40	101.500	0.001	69	139.300	0.417	98	193.500	0.470
12	69.100	0.021	41	102.300	0.021	70	140.400	0.091	99	194.400	6.836
13	69.900	0.008	42	104.700	0.032	71	141.300	0.354	100	195.300	7.502
14	73.400	0.001	43	105.400	3.583	72	142.400	0.023	101	196.300	1.170
15	74.300	0.253	44	106.400	0.303	73	150.400	0.116	102	197.200	3.640
16	75.300	0.305	45	107.400	0.916	74	151.400	0.330	103	198.200	0.427
17	76.400	0.801	46	108.400	0.032	75	152.400	1.107	104	199.200	0.033
18	77.300	11.827	47	111.300	0.007	76	153.400	0.565	105	209.300	0.002
19	78.300	1.161	48	113.500	0.056	77	154.400	0.081	106	210.400	0.031
20	79.300	1.904	49	114.400	0.034	78	155.400	0.119	107	211.200	2.000
21	80.300	0.110	50	115.500	0.581	79	156.400	0.001	108	212.100	8.143
22	81.200	0.001	51	116.400	0.046	80	163.500	0.013	109	213.000	1.140
23	82.300	0.006	52	118.400	0.033	81	164.400	0.005	110	214.000	0.082
24	83.300	0.001	53	119.400	0.052	82	165.400	1.179	111	226.500	0.006
25	84.300	0.005	54	120.500	0.363	83	166.400	0.404	112	228.200	0.027
26	85.400	0.005	55	121.400	6.613	84	167.400	3.416	113	229.500	0.013
27	86.300	0.043	56	122.400	0.402	85	168.400	0.693	114	231.400	0.006
28	87.300	0.067	57	123.400	0.009	86	169.300	0.643			
29	88.200	0.007	58	125.300	0.001	87	170.400	0.074			

Figura 66 – Espectro de Massas; Reação Anisol com ZnO; T.R.= 15.4; o-metóxibenzofenona (continuação)

## Anisol com ZnO

<b>Formula</b>	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	212.2439
<b>Count</b>	93	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>Date</b>	01 Mar 19 12:41 pm	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>File Name</b>	1 3-1-2019 ANISOL_ZNO_BRUTO_1 Centroid	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	16.965
<b>Total Signal</b>	33485284	<b>Scan</b>	526
		<b>TIC</b>	265.83

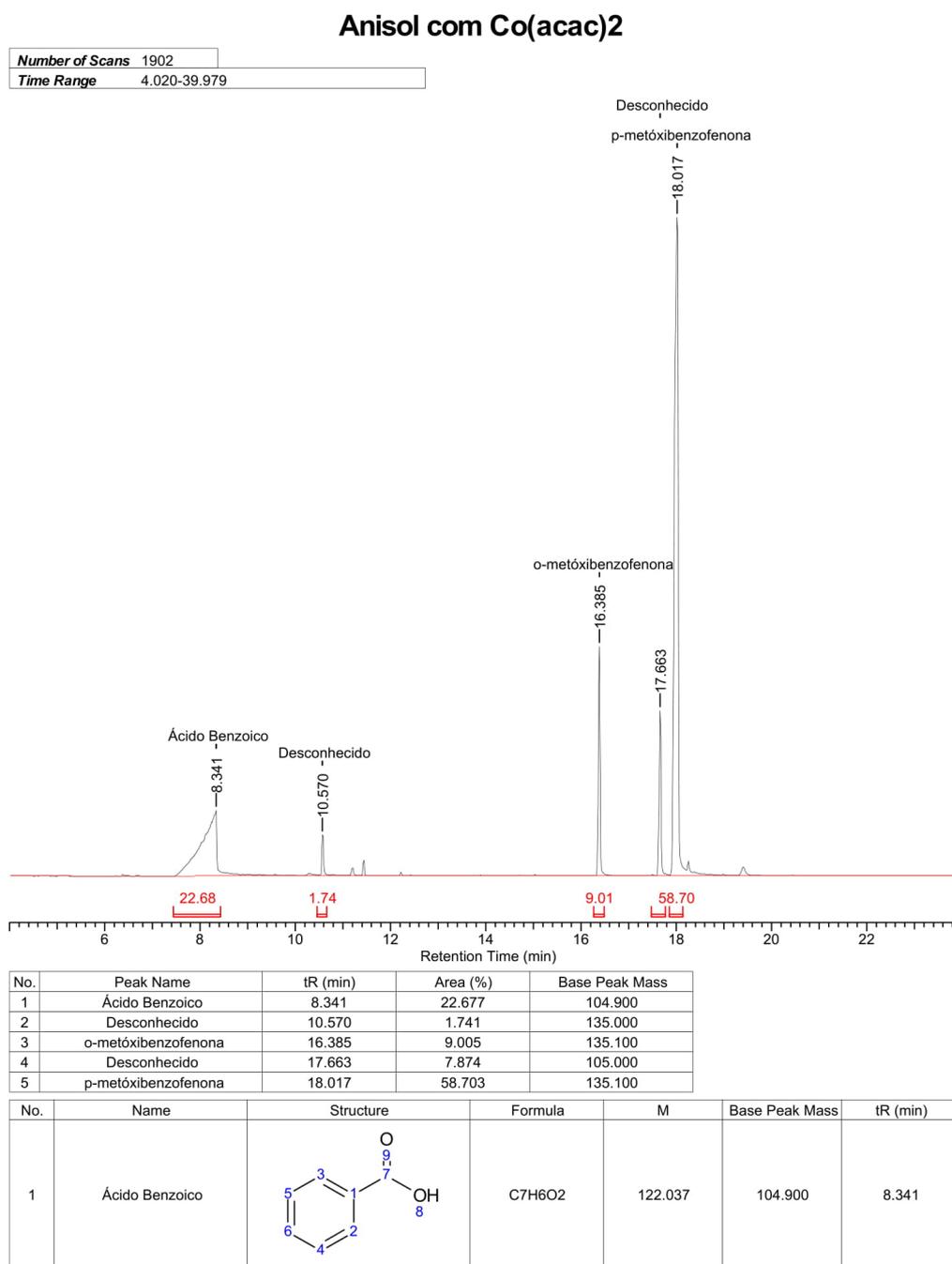


No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.100	25.044	3154667.500
2	135.200	100.000	12596295.000
3	212.100	58.631	7385329.000

Figura 67 – Espectro de Massas; Reação Anisol com ZnO; T.R.= 17.0; p-metóxi-benzofenona

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	50.000	0.450	25	88.200	0.057	49	116.300	0.075	73	167.200	0.004
2	51.000	1.111	26	89.100	0.157	50	119.200	0.120	74	168.200	0.276
3	52.100	0.045	27	90.100	0.026	51	121.200	0.001	75	169.200	0.802
4	53.100	0.058	28	91.200	0.033	52	125.300	0.155	76	170.200	0.105
5	54.200	0.008	29	92.200	2.284	53	126.200	0.066	77	176.100	0.005
6	61.100	0.012	30	93.200	0.139	54	127.200	0.018	78	180.200	0.095
7	62.000	0.166	31	94.100	0.018	55	133.300	0.001	79	181.200	2.228
8	63.100	1.080	32	95.200	0.057	56	134.300	0.007	80	182.200	0.309
9	64.100	1.061	33	97.200	0.004	57	135.200	37.617	81	183.300	0.022
10	65.100	0.078	34	98.100	0.007	58	136.200	3.029	82	184.200	0.171
11	66.100	0.020	35	99.200	0.012	59	137.200	0.318	83	195.200	0.190
12	69.700	0.013	36	100.200	0.008	60	139.200	0.449	84	196.200	0.234
13	73.200	0.002	37	101.100	0.018	61	140.200	0.176	85	197.200	0.248
14	74.200	0.204	38	102.100	0.014	62	141.200	0.572	86	211.300	1.351
15	75.100	0.267	39	103.400	0.003	63	142.200	0.063	87	212.100	22.055
16	76.100	0.490	40	104.200	0.053	64	149.200	0.002	88	213.100	2.975
17	77.100	9.421	41	105.200	2.348	65	150.100	0.032	89	214.100	0.335
18	78.100	0.680	42	106.200	0.176	66	151.200	0.155	90	215.100	0.001
19	79.100	0.460	43	107.200	2.435	67	152.200	0.534	91	218.300	0.011
20	80.200	0.022	44	108.300	0.124	68	153.200	0.380	92	289.100	0.002
21	81.200	0.000	45	111.200	0.037	69	154.200	0.040	93	319.200	0.007
22	84.800	0.000	46	113.200	0.101	70	155.300	0.041			
23	86.200	0.018	47	114.200	0.104	71	156.200	0.002			
24	87.100	0.020	48	115.300	0.796	72	165.300	0.025			

Figura 68 – Espectro de Massas; Reação Anisol com ZnO; T.R.= 17.0; p-metóxi-benzofenona (continuação)

B.1.2  $Co(acac)_2$ Figura 69 – Cromatograma da reação Anisol com  $Co(acac)_2$

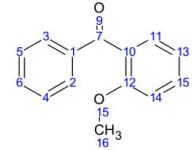
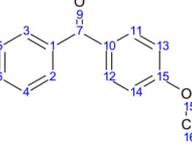
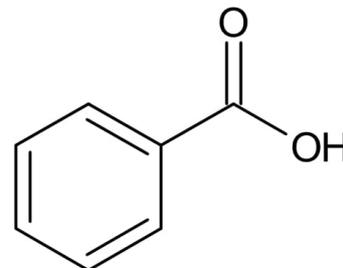
No.	Name	Structure	Formula	M	Base Peak Mass	tR (min)
2	o-metóxi-benzenona		C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	212.084	135.100	16.385
3	p-metóxi-benzofenona		C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	212.084	135.100	18.017

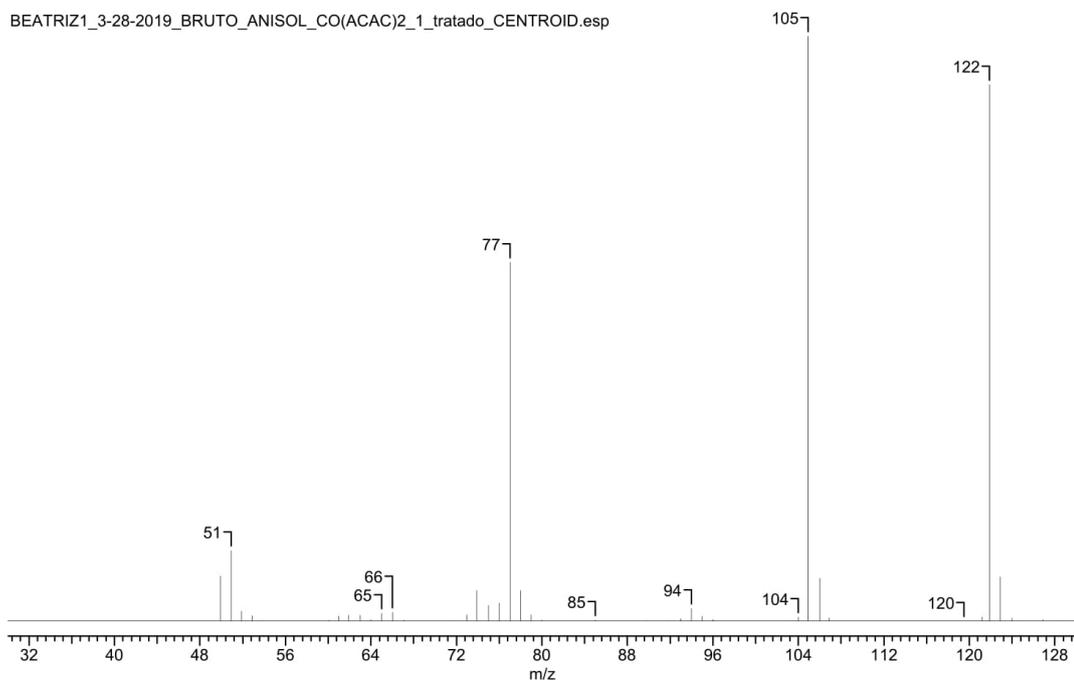
Figura 70 – Cromatograma da reação Anisol com  $Co(acac)_2$  (continuação)

Anisol com Co(acac)<sub>2</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	122.1213
<b>Count</b>	114	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>Date</b>	28 Mar 19 08:11 pm		
<b>File Name</b>	BEATRIZ1_3-28-2019_BRUTO_ANISOL_CO(ACAC)2_1_Centroid		
<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick		
<b>Retention Time</b>	8.341	<b>Scan</b>	233
<b>TIC</b>	322.06		
<b>Total Signal</b>	1867049		



BEATRIZ1\_3-28-2019\_BRUTO\_ANISOL\_CO(ACAC)2\_1\_tratado\_CENTROID.esp



No.	m/z	RI(%)	DI
1	50.900	12.065	69943.000
2	77.000	61.291	355318.000
3	104.900	100.000	579721.000
4	121.900	91.718	531710.063

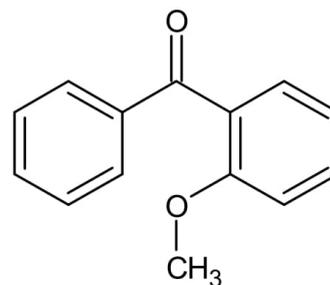
Figura 71 – Espectro de Massas; Reação Anisol com Co(acac)<sub>2</sub>; T.R.= 8.3; Ácido benzóico

No.	<i>m/z</i>	TIC(%)									
1	49.900	2.366	30	91.100	0.002	59	153.400	0.001	88	587.400	0.000
2	50.900	3.746	31	91.900	0.022	60	154.300	0.001	89	617.900	0.001
3	51.900	0.508	32	93.000	0.115	61	162.400	0.001	90	640.100	0.001
4	52.900	0.292	33	94.000	0.674	62	166.900	0.000	91	675.500	0.000
5	53.800	0.019	34	95.000	0.245	63	167.900	0.005	92	676.500	0.001
6	54.900	0.009	35	96.000	0.068	64	179.000	0.033	93	677.700	0.001
7	56.700	0.000	36	98.900	0.003	65	179.900	0.000	94	695.100	0.001
8	60.100	0.041	37	103.100	0.028	66	180.700	0.005	95	732.100	0.000
9	61.000	0.258	38	104.000	0.204	67	186.900	0.000	96	733.100	0.001
10	61.900	0.308	39	104.900	31.050	68	193.000	0.004	97	763.800	0.001
11	63.000	0.315	40	106.000	2.270	69	195.400	0.000	98	784.800	0.001
12	64.000	0.087	41	106.900	0.164	70	207.400	0.001	99	799.400	0.001
13	65.000	0.405	42	109.600	0.001	71	208.100	0.001	100	827.900	0.001
14	66.000	0.459	43	119.500	0.001	72	208.900	0.001	101	829.400	0.001
15	67.100	0.050	44	120.400	0.006	73	225.800	0.001	102	873.800	0.001
16	71.900	0.022	45	121.200	0.200	74	226.500	0.001	103	875.600	0.001
17	73.000	0.332	46	121.900	28.479	75	227.800	0.001	104	894.400	0.001
18	73.900	1.616	47	122.900	2.340	76	232.000	0.001	105	903.400	0.001
19	75.000	0.834	48	124.000	0.147	77	244.700	0.001	106	904.800	0.001
20	76.000	0.958	49	124.800	0.020	78	251.800	0.012	107	905.700	0.001
21	77.000	19.031	50	126.900	0.065	79	406.800	0.000	108	939.800	0.001
22	78.000	1.635	51	128.100	0.024	80	438.500	0.001	109	941.000	0.001
23	79.000	0.346	52	131.400	0.001	81	518.700	0.000	110	951.400	0.001
24	80.000	0.048	53	133.200	0.001	82	519.800	0.001	111	956.600	0.001
25	81.000	0.004	54	134.200	0.001	83	525.400	0.001	112	958.400	0.001
26	84.100	0.002	55	135.300	0.001	84	547.400	0.001	113	995.800	0.001
27	85.000	0.046	56	139.000	0.007	85	548.800	0.001	114	996.700	0.001
28	87.700	0.003	57	151.900	0.001	86	574.200	0.000			
29	89.800	0.022	58	152.700	0.001	87	585.400	0.001			

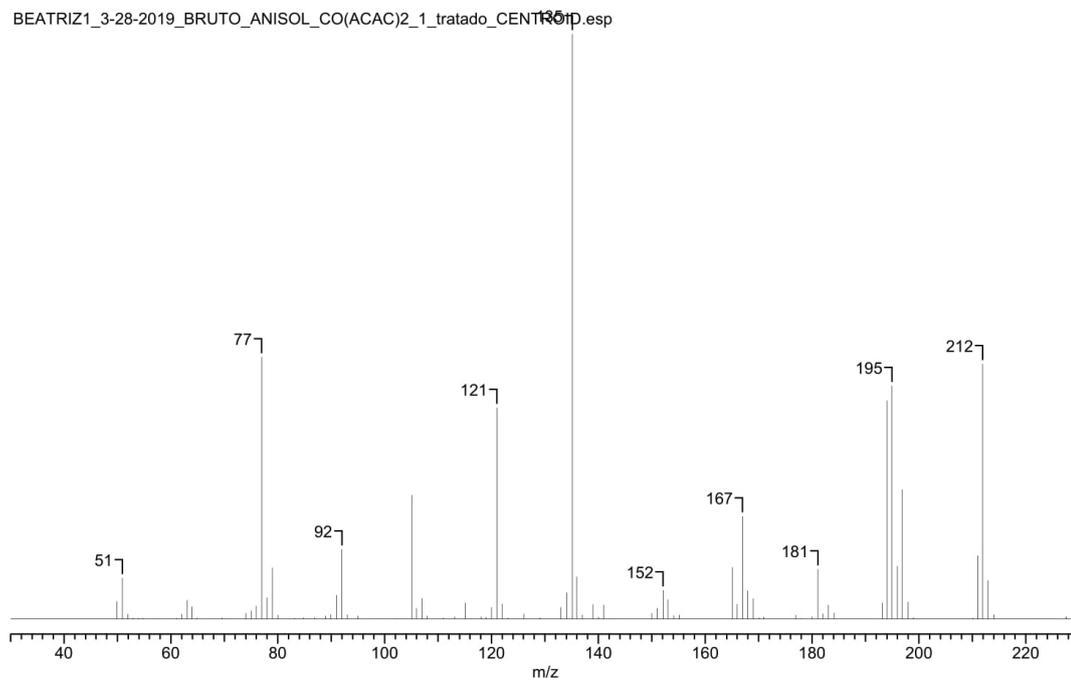
Figura 72 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $Co(acac)_2$ ; T.R.= 8.3; Ácido benzóico (continuação)

Anisol com Co(acac)<sub>2</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	212.2439
<b>Count</b>	135	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>Date</b>	28 Mar 19 08:11 pm		
<b>File Name</b>	BEATRIZ1_3-28-2019_BRUTO_ANISOL_CO(ACAC)2_1_Centroid		
<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick		
<b>Retention Time</b>	16.385	<b>Scan</b>	673
<b>TIC</b>	534.22		
<b>Total Signal</b>	6514759		



BEATRIZ1\_3-28-2019\_BRUTO\_ANISOL\_CO(ACAC)2\_1\_tratado\_CENTROID.esp



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.000	44.767	545932.875
2	92.000	11.906	145187.953
3	105.000	21.241	259027.906
4	121.000	36.099	440228.875
5	135.100	100.000	1219492.625
6	167.000	17.515	213590.938
7	194.000	37.350	455480.844
8	195.000	39.850	485961.844
9	196.900	22.133	269914.938
10	211.000	10.801	131719.953
11	211.900	43.598	531671.813

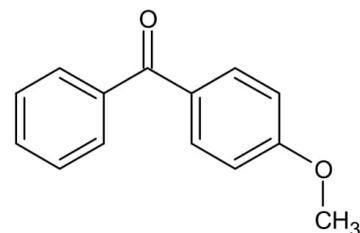
Figura 73 – Espectro de Massas; Reação Anisol com Co(acac)<sub>2</sub>; T.R.= 16.4; o-metoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	49.900	0.567	69	142.200	0.015
2	50.900	1.302	70	143.100	0.007
3	51.900	0.151	71	143.800	0.002
4	52.900	0.026	72	144.600	0.002
5	53.900	0.031	73	150.000	0.184
6	54.800	0.024	74	151.000	0.340
7	56.300	0.002	75	152.100	0.915
8	57.400	0.016	76	153.000	0.626
9	61.000	0.024	77	154.100	0.106
10	62.000	0.157	78	155.100	0.118
11	63.000	0.613	79	155.800	0.001
12	63.900	0.383	80	157.100	0.005
13	64.900	0.030	81	164.000	0.014
14	69.500	0.053	82	165.000	1.646
15	70.400	0.021	83	166.000	0.463
16	74.000	0.180	84	167.000	3.279
17	75.000	0.262	85	168.000	0.895
18	76.000	0.426	86	169.000	0.654
19	77.000	8.380	87	170.100	0.052
20	78.000	0.685	88	171.000	0.061
21	79.000	1.634	89	177.000	0.126
22	80.000	0.123	90	178.000	0.012
23	82.000	0.003	91	179.000	0.000
24	83.100	0.028	92	180.000	0.080
25	84.000	0.010	93	181.100	1.591
26	84.900	0.043	94	182.000	0.177
27	85.900	0.020	95	183.000	0.445
28	86.900	0.051	96	184.100	0.196
29	88.000	0.002	97	186.300	0.002
30	89.000	0.100	98	193.100	0.507
31	89.900	0.136	99	194.000	6.992
32	91.000	0.760	100	195.000	7.459
33	92.000	2.229	101	196.000	1.695
34	93.000	0.140	102	196.900	4.143
35	95.000	0.089	103	198.000	0.540
36	99.000	0.007	104	199.000	0.053
37	100.900	0.001	105	208.900	0.011
38	102.000	0.013	106	210.100	0.034
39	103.900	0.017	107	211.000	2.022
40	105.000	3.976	108	211.900	8.161
41	106.000	0.347	109	212.900	1.228
42	107.000	0.660	110	214.000	0.145
43	108.000	0.098	111	221.600	0.001
44	110.000	0.002	112	227.500	0.083
45	111.000	0.024	113	229.600	0.024
46	113.100	0.085	114	237.100	0.000
47	115.100	0.520	115	249.200	0.001
48	116.100	0.015	116	271.200	0.001
49	118.100	0.073	117	421.300	0.000
50	119.000	0.062	118	423.000	0.004
51	120.000	0.374	119	557.800	0.002
52	121.000	6.757	120	583.300	0.002
53	122.000	0.478	121	585.500	0.001
54	123.100	0.033	122	674.600	0.000
55	124.300	0.001	123	737.900	0.000
56	125.000	0.022	124	756.800	0.002
57	126.100	0.158	125	757.900	0.001
58	127.000	0.002	126	758.800	0.001
59	129.100	0.043	127	824.400	0.000
60	133.000	0.376	128	846.400	0.002
61	134.100	0.834	129	862.900	0.003
62	135.100	18.719	130	868.600	0.001
63	136.000	1.350	131	892.300	0.001
64	137.000	0.128	132	894.300	0.002
65	138.100	0.000	133	924.600	0.000
66	139.000	0.471	134	940.300	0.001
67	140.000	0.067	135	971.600	0.001
68	141.000	0.451			

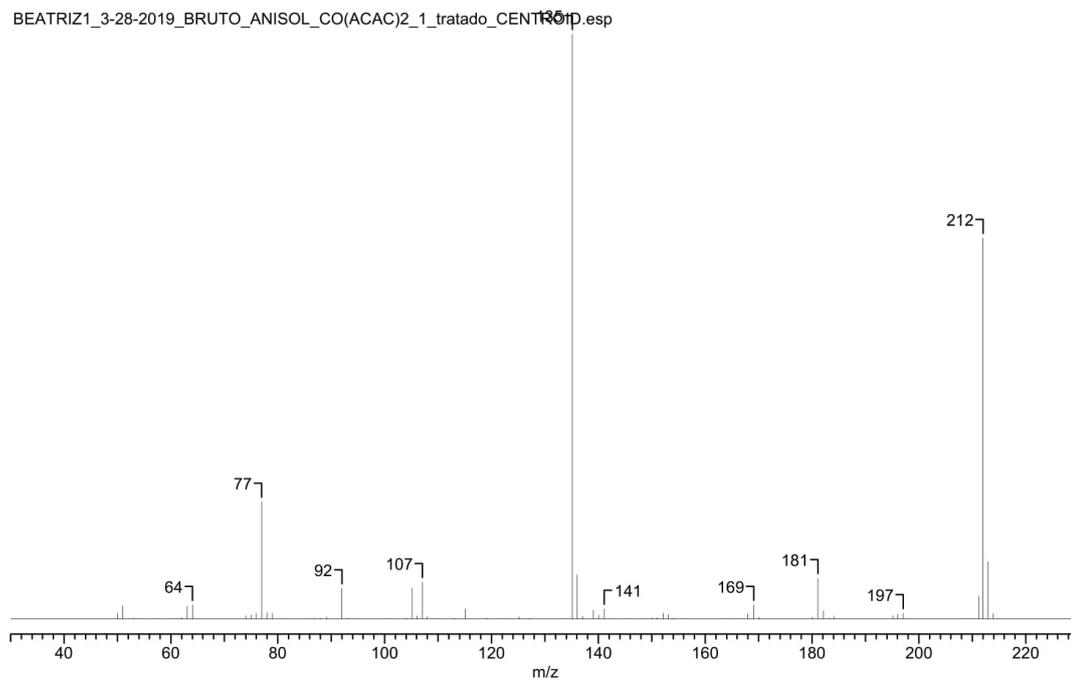
Figura 74 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $Co(acac)_2$ ; T.R.= 16.4; o-metoxibenzofenona (continuação)

Anisol com Co(acac)<sub>2</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	212.2439
<b>Count</b>	127	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	BEATRIZ1_3-28-2019_BRUTO_ANISOL_CO(ACAC)2_1	<b>Date</b>	28 Mar 19 08:11 pm
<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Retention Time</b>	18.017	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>Total Signal</b>	18671418	<b>Scan</b>	767
		<b>TIC</b>	265.43



BEATRIZ1\_3-28-2019\_BRUTO\_ANISOL\_CO(ACAC)2\_1\_tratado\_CENTROID.esp



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.000	20.060	1411085.375
2	135.100	100.000	7034326.500
3	212.000	65.155	4583216.000

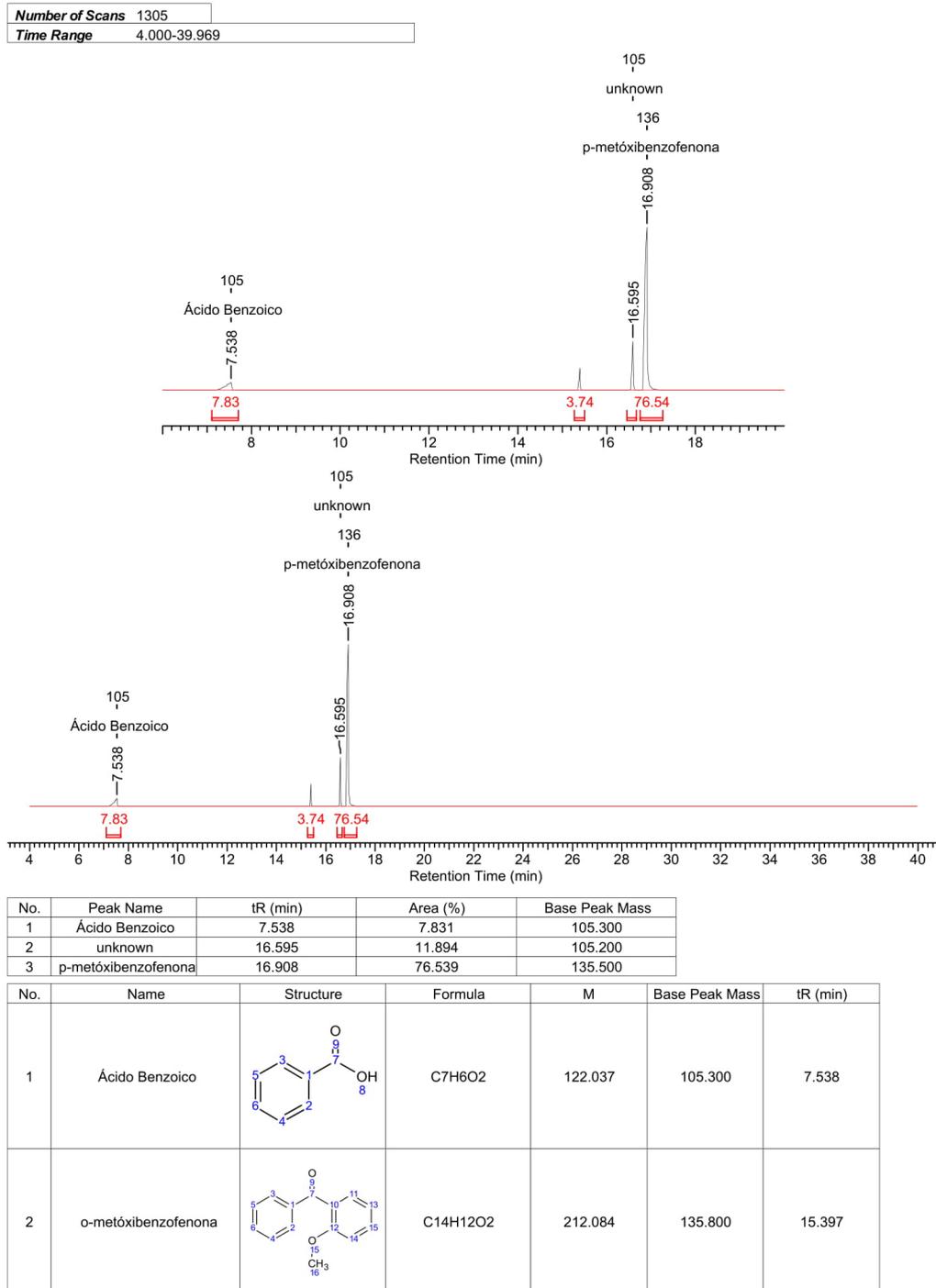
Figura 75 – Espectro de Massas; Reação Anisol com Co(acac)<sub>2</sub>; T.R.= 18.0; p-metoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	50.000	0.384	34	99.800	0.000	67	150.100	0.085	100	273.600	0.000
2	51.000	0.835	35	102.100	0.001	68	151.000	0.103	101	356.400	0.001
3	51.900	0.005	36	104.000	0.074	69	152.100	0.389	102	423.800	0.000
4	53.000	0.069	37	105.100	1.992	70	153.100	0.286	103	424.800	0.000
5	53.900	0.023	38	106.100	0.181	71	154.100	0.057	104	468.700	0.000
6	56.000	0.007	39	107.100	2.367	72	155.100	0.010	105	469.500	0.000
7	58.200	0.003	40	108.000	0.154	73	156.200	0.013	106	526.400	0.001
8	61.000	0.040	41	109.000	0.020	74	160.900	0.001	107	527.800	0.000
9	62.000	0.086	42	110.000	0.011	75	162.500	0.000	108	548.800	0.000
10	63.000	0.844	43	112.000	0.004	76	164.900	0.040	109	570.300	0.001
11	64.000	0.900	44	113.100	0.066	77	166.900	0.034	110	599.700	0.001
12	65.100	0.040	45	114.300	0.000	78	168.000	0.349	111	622.600	0.000
13	66.000	0.009	46	115.100	0.653	79	169.100	0.916	112	623.500	0.001
14	74.000	0.214	47	116.100	0.016	80	170.100	0.111	113	654.200	0.001
15	75.000	0.240	48	119.100	0.065	81	180.100	0.130	114	689.200	0.000
16	76.000	0.376	49	120.100	0.008	82	181.100	2.641	115	701.200	0.000
17	77.000	7.557	50	122.800	0.018	83	182.100	0.519	116	710.100	0.001
18	78.000	0.415	51	125.100	0.150	84	183.200	0.069	117	711.800	0.001
19	79.000	0.375	52	126.000	0.018	85	184.100	0.192	118	730.800	0.000
20	80.100	0.001	53	127.200	0.061	86	195.100	0.204	119	769.200	0.000
21	81.000	0.020	54	133.200	0.011	87	196.100	0.318	120	769.900	0.000
22	85.000	0.025	55	134.400	0.003	88	197.100	0.368	121	865.800	0.001
23	86.000	0.044	56	135.100	37.674	89	198.100	0.040	122	889.500	0.000
24	86.900	0.057	57	136.100	2.854	90	207.300	0.002	123	904.700	0.000
25	88.000	0.051	58	137.100	0.190	91	209.200	0.001	124	934.500	0.001
26	89.100	0.119	59	138.000	0.032	92	209.800	0.000	125	965.900	0.000
27	91.000	0.028	60	139.100	0.550	93	211.200	1.506	126	967.200	0.001
28	92.000	1.963	61	140.100	0.238	94	212.000	24.547	127	997.200	0.000
29	93.100	0.076	62	141.100	0.648	95	212.900	3.705			
30	93.900	0.017	63	142.100	0.044	96	213.900	0.332			
31	95.000	0.038	64	142.900	0.003	97	215.000	0.021			
32	96.200	0.000	65	145.200	0.000	98	228.700	0.000			
33	99.000	0.006	66	149.100	0.017	99	238.400	0.000			

Figura 76 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $Co(acac)_2$ ; T.R.= 18.0; p-metoxibenzofenona (continuação)

B.1.3 AuCl<sub>3</sub>Anisol com AuCl<sub>3</sub>

4 Jun 2019

Figura 77 – Cromatograma da reação Anisol com Au<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub>

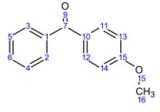
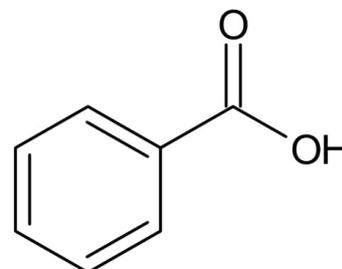
No.	Name	Structure	Formula	M	Base Peak Mass	tR (min)
3	p-metóxibenzofenona	 The chemical structure shows a benzene ring with a carbonyl group (-C(=O)-) at the top position and a methoxy group (-OCH <sub>3</sub> ) at the para position (bottom). The atoms are numbered: 1 for the carbonyl carbon, 2 for the carbonyl oxygen, 3 for the ortho carbons, 4 for the para carbon, 5 for the meta carbons, 6 for the ring carbons, 7 for the methoxy oxygen, 8 for the methoxy carbon, 9 for the methoxy hydrogen, 10 for the carbonyl hydrogen, 11 for the ring nitrogens, 12 for the ring nitrogens, 13 for the ring nitrogens, 14 for the ring nitrogens, 15 for the methoxy carbon, and 16 for the methoxy hydrogen.	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	212.084	135.500	16.908

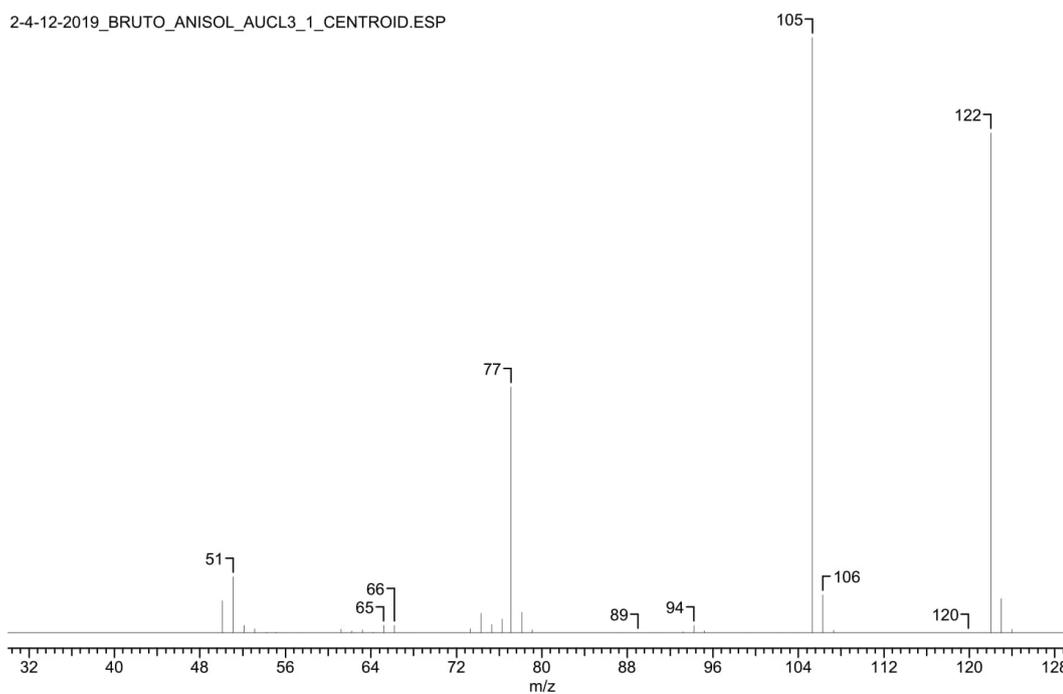
Figura 78 – Cromatograma da reação Anisol com  $Au_2Cl_6$  (continuação)

## Anisol com AuCl3

<b>Formula</b>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	122.1213
<b>Count</b>	121	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	2-4-12-2019 BRUTO ANISOL AUCL3_1 Centroid	<b>Date</b>	12 Apr 19 01:38 pm
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>TIC</b>	273.66	<b>Retention Time</b>	7.538
		<b>Scan</b>	134
		<b>Total Signal</b>	216004



2-4-12-2019\_BRUTO\_ANISOL\_AUCL3\_1\_CENTROID.ESP



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.100	41.293	32593.939
2	105.300	100.000	78932.859
3	122.000	83.917	66237.883

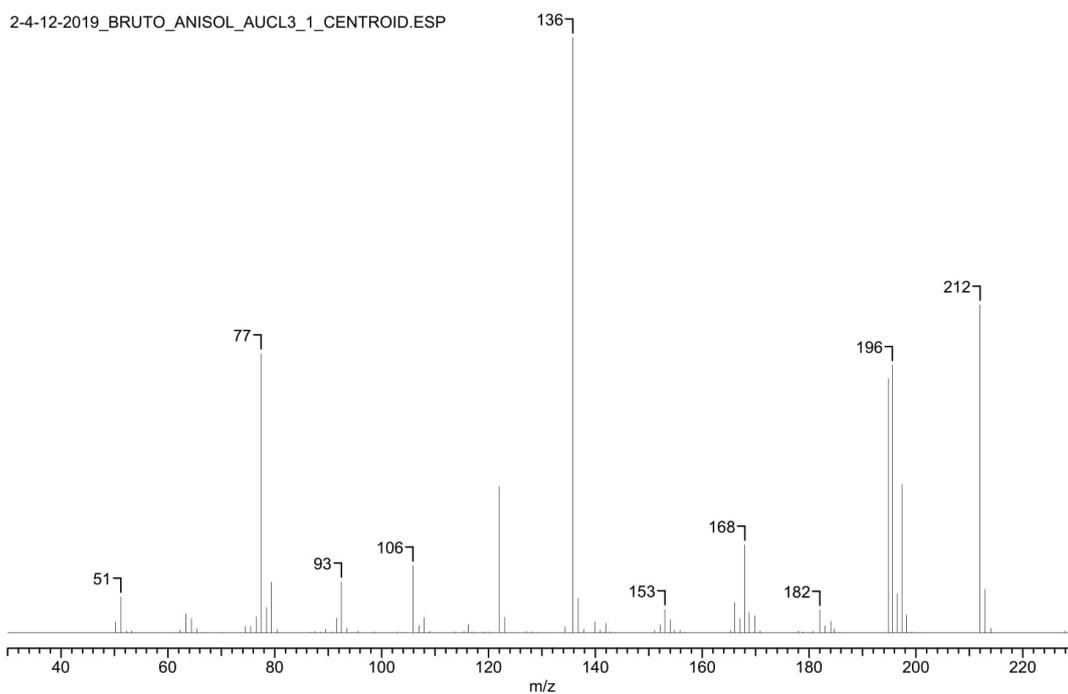
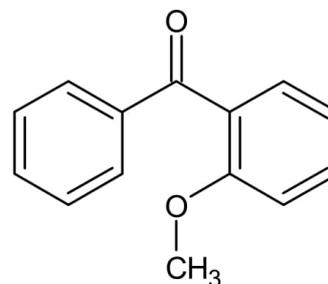
Figura 79 – Espectro de Massas; Reação Anisol com Au<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub>; T.R.=7.5; Ácido benzóico

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	50.100	1.993	32	84.400	0.000	63	138.900	0.000	94	243.300	0.001
2	51.100	3.453	33	87.500	0.000	64	141.900	0.001	95	245.200	0.000
3	52.100	0.452	34	89.000	0.001	65	143.900	0.001	96	251.900	0.000
4	53.100	0.241	35	90.300	0.004	66	149.300	0.000	97	252.900	0.001
5	54.200	0.033	36	91.200	0.010	67	151.100	0.000	98	402.900	0.001
6	55.100	0.044	37	92.100	0.012	68	152.000	0.005	99	404.000	0.000
7	56.000	0.000	38	93.200	0.067	69	152.800	0.001	100	411.700	0.000
8	57.100	0.000	39	94.200	0.472	70	163.700	0.000	101	451.000	0.000
9	60.100	0.016	40	95.200	0.142	71	172.000	0.001	102	468.000	0.000
10	61.200	0.218	41	96.300	0.004	72	174.400	0.000	103	478.600	0.001
11	62.200	0.125	42	97.000	0.000	73	175.300	0.001	104	479.600	0.001
12	63.200	0.192	43	99.100	0.000	74	178.800	0.001	105	538.300	0.000
13	64.200	0.050	44	99.800	0.000	75	179.900	0.006	106	589.500	0.000
14	65.200	0.455	45	101.900	0.001	76	180.900	0.001	107	610.000	0.000
15	66.200	0.469	46	102.600	0.001	77	183.000	0.001	108	621.700	0.000
16	67.200	0.024	47	103.700	0.012	78	191.000	0.001	109	623.200	0.000
17	68.200	0.001	48	105.300	36.542	79	197.800	0.001	110	641.600	0.001
18	69.300	0.000	49	106.300	2.345	80	203.900	0.001	111	652.400	0.000
19	70.500	0.001	50	107.300	0.153	81	205.000	0.001	112	654.200	0.000
20	71.400	0.000	51	109.500	0.000	82	210.200	0.001	113	655.100	0.000
21	72.100	0.006	52	116.500	0.000	83	211.800	0.001	114	733.500	0.001
22	73.300	0.261	53	119.900	0.000	84	213.300	0.000	115	762.200	0.000
23	74.300	1.219	54	122.000	30.665	85	219.800	0.001	116	772.500	0.001
24	75.300	0.521	55	123.000	2.100	86	225.000	0.000	117	775.400	0.000
25	76.300	0.862	56	124.000	0.207	87	225.900	0.000	118	792.300	0.000
26	77.100	15.090	57	126.400	0.000	88	227.000	0.000	119	886.700	0.001
27	78.100	1.268	58	128.000	0.001	89	227.800	0.000	120	907.700	0.000
28	79.100	0.181	59	129.500	0.000	90	233.800	0.001	121	986.200	0.001
29	80.100	0.022	60	136.200	0.000	91	235.800	0.001			
30	81.100	0.005	61	136.900	0.000	92	236.900	0.000			
31	82.200	0.000	62	137.900	0.000	93	242.100	0.000			

Figura 80 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $Au_2Cl_6$ ; T.R.=7.5; Ácido benzóico (continuação)

## Anisol com AuCl3

<b>Formula</b>	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	212.2439
<b>Count</b>	207	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	2-4-12-2019 BRUTO ANISOL AUCL3_1 Centroid	<b>Date</b>	12 Apr 19 01:38 pm
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>TIC</b>	486.73	<b>Retention Time</b>	15.397
		<b>Scan</b>	416
		<b>Total Signal</b>	616769



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.400	46.946	59489.008
2	105.900	11.302	14321.002
3	122.000	24.647	31232.006
4	135.800	100.000	126717.023
5	168.000	14.816	18775.004
6	194.900	42.780	54209.008
7	195.600	44.983	57001.008
8	197.400	24.971	31642.006
9	212.000	55.115	69840.008

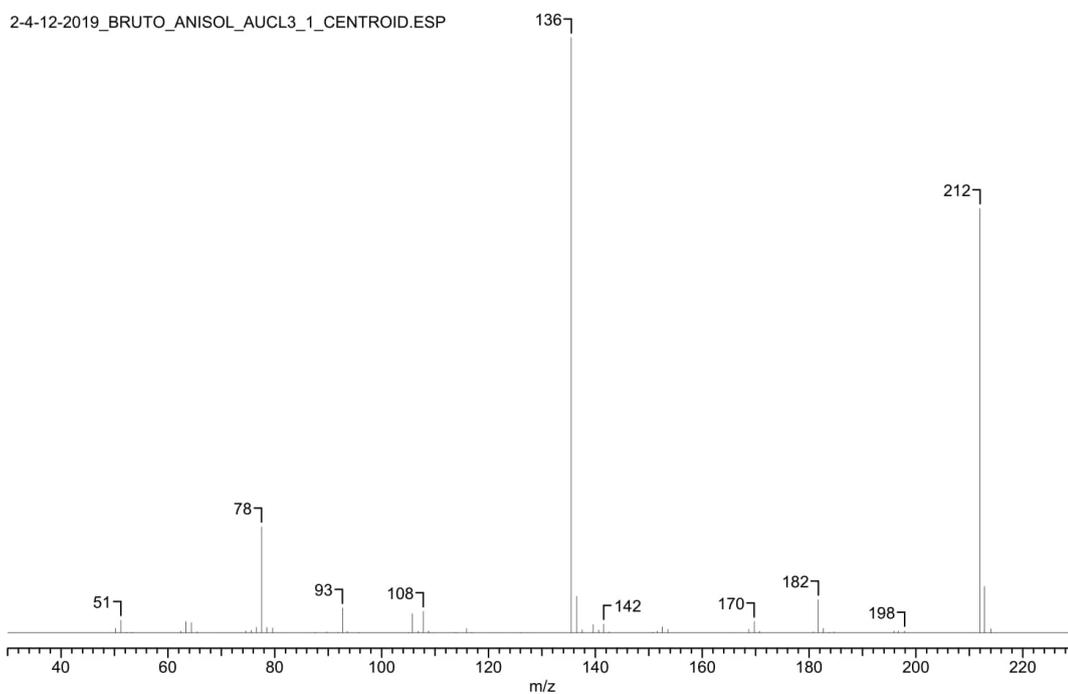
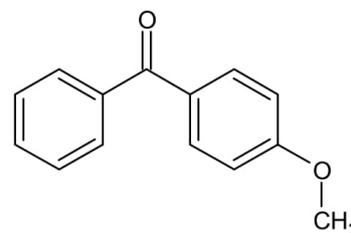
Figura 81 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $Au_2Cl_6$ ; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)									
1	50.200	0.384	54	111.200	0.001	107	182.900	0.237	160	628.400	0.001
2	51.200	1.255	55	113.100	0.001	108	184.000	0.402	161	642.400	0.001
3	52.200	0.075	56	113.800	0.034	109	184.800	0.144	162	654.100	0.001
4	53.200	0.073	57	114.400	0.015	110	186.500	0.001	163	656.600	0.001
5	54.300	0.009	58	115.400	0.050	111	194.900	8.789	164	664.600	0.001
6	55.200	0.014	59	116.200	0.297	112	195.600	9.242	165	665.700	0.001
7	56.300	0.001	60	117.000	0.045	113	196.500	1.360	166	666.600	0.001
8	57.100	0.001	61	117.900	0.001	114	197.400	5.130	167	686.700	0.000
9	57.900	0.013	62	119.100	0.043	115	198.300	0.624	168	691.600	0.001
10	60.100	0.001	63	120.000	0.034	116	199.300	0.044	169	703.100	0.000
11	61.300	0.013	64	122.000	5.064	117	200.200	0.001	170	708.900	0.001
12	62.300	0.109	65	123.000	0.538	118	202.100	0.000	171	712.600	0.001
13	63.400	0.665	66	124.700	0.001	119	203.300	0.001	172	726.900	0.001
14	64.400	0.509	67	126.000	0.001	120	209.300	0.001	173	728.300	0.001
15	65.400	0.136	68	127.100	0.060	121	212.000	11.324	174	748.000	0.001
16	66.400	0.016	69	128.100	0.036	122	212.900	1.499	175	748.700	0.001
17	70.000	0.015	70	129.300	0.015	123	214.000	0.152	176	749.400	0.001
18	70.900	0.001	71	130.800	0.001	124	215.300	0.001	177	759.500	0.001
19	73.400	0.001	72	132.800	0.001	125	216.100	0.001	178	769.400	0.001
20	74.500	0.222	73	134.300	0.231	126	222.300	0.001	179	788.700	0.001
21	75.500	0.240	74	135.800	20.545	127	226.900	0.001	180	789.700	0.001
22	76.600	0.561	75	136.800	1.197	128	227.900	0.073	181	805.900	0.000
23	77.400	9.645	76	137.800	0.116	129	229.100	0.027	182	827.800	0.001
24	78.400	0.887	77	138.900	0.006	130	230.600	0.001	183	828.800	0.000
25	79.400	1.745	78	139.900	0.381	131	231.600	0.027	184	851.000	0.000
26	80.500	0.118	79	140.900	0.106	132	235.900	0.001	185	861.700	0.000
27	81.400	0.006	80	141.900	0.322	133	351.300	0.001	186	872.800	0.001
28	82.500	0.001	81	142.800	0.039	134	406.800	0.001	187	874.400	0.001
29	83.300	0.001	82	143.700	0.001	135	408.500	0.001	188	891.000	0.001
30	84.500	0.001	83	144.900	0.003	136	409.700	0.001	189	892.200	0.001
31	86.600	0.027	84	149.700	0.001	137	417.500	0.001	190	893.800	0.001
32	87.500	0.049	85	151.100	0.087	138	418.200	0.000	191	912.800	0.001
33	88.600	0.036	86	152.100	0.268	139	427.500	0.001	192	914.100	0.001
34	89.500	0.120	87	153.000	0.815	140	429.500	0.001	193	914.800	0.001
35	90.600	0.037	88	154.000	0.459	141	430.200	0.001	194	915.900	0.001
36	91.600	0.513	89	154.800	0.104	142	438.500	0.001	195	928.600	0.001
37	92.500	1.773	90	155.900	0.093	143	439.200	0.001	196	929.800	0.001
38	93.500	0.173	91	156.700	0.024	144	440.600	0.000	197	931.900	0.000
39	94.400	0.001	92	157.500	0.001	145	447.200	0.001	198	933.600	0.001
40	95.600	0.056	93	164.200	0.008	146	458.000	0.000	199	938.200	0.000
41	96.600	0.001	94	165.300	0.087	147	462.500	0.001	200	950.600	0.000
42	97.800	0.001	95	166.100	1.052	148	476.600	0.001	201	953.000	0.001
43	98.600	0.044	96	167.100	0.500	149	477.500	0.001	202	964.400	0.001
44	99.400	0.008	97	168.000	3.044	150	492.200	0.001	203	966.000	0.001
45	101.100	0.001	98	168.800	0.710	151	493.800	0.001	204	966.800	0.001
46	101.800	0.001	99	169.900	0.594	152	524.400	0.001	205	981.400	0.001
47	102.800	0.035	100	170.800	0.074	153	561.700	0.001	206	983.400	0.001
48	104.600	0.021	101	172.000	0.008	154	562.700	0.000	207	985.100	0.000
49	105.900	2.322	102	177.000	0.001	155	574.300	0.001			
50	107.000	0.254	103	178.000	0.080	156	577.400	0.001			
51	108.000	0.522	104	178.800	0.033	157	599.400	0.001			
52	109.000	0.062	105	180.700	0.052	158	614.600	0.001			
53	110.200	0.001	106	182.000	0.799	159	627.300	0.001			

Figura 82 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $Au_2Cl_6$ ; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona (continuação)

## Anisol com AuCl3

<b>Formula</b>	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	212.2439
<b>Count</b>	135	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	2-4-12-2019 BRUTO ANISOL AUCL3_1 Centroid	<b>Date</b>	12 Apr 19 01:38 pm
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>TIC</b>	246.13	<b>Retention Time</b>	16.908
		<b>Scan</b>	476
		<b>Total Signal</b>	4518032

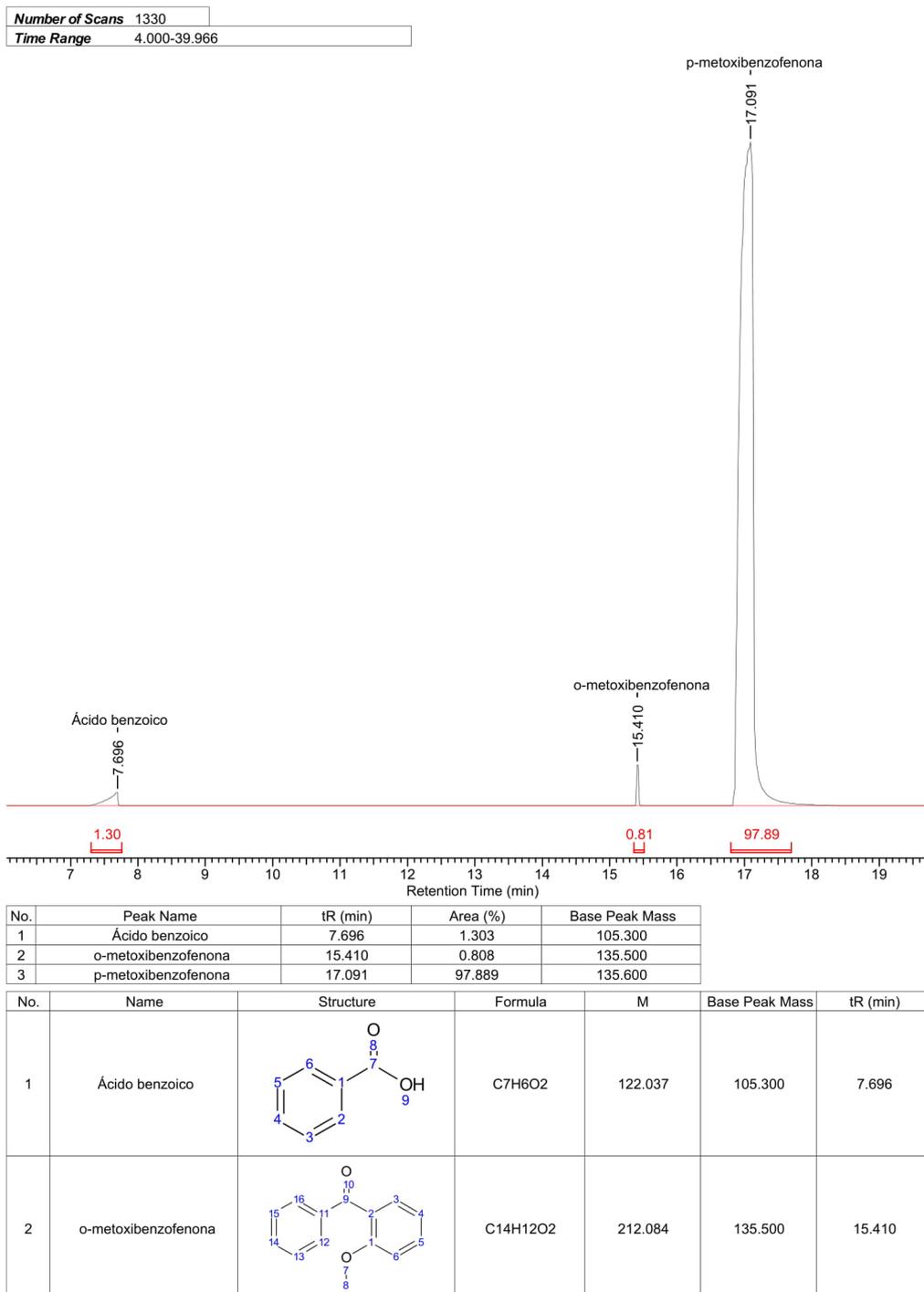


No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.500	17.861	327866.719
2	135.500	100.000	1835615.375
3	212.000	71.248	1307840.750

Figura 83 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $Au_2Cl_6$ ; T.R.= 16.9; p-metoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	50.200	0.328	69	152.600	0.426
2	51.200	0.877	70	153.600	0.245
3	52.300	0.033	71	154.800	0.018
4	53.300	0.053	72	155.800	0.021
5	54.300	0.001	73	163.600	0.001
6	58.000	0.001	74	165.700	0.008
7	62.400	0.098	75	167.800	0.013
8	63.400	0.787	76	168.700	0.250
9	64.400	0.721	77	169.700	0.787
10	65.400	0.068	78	170.700	0.097
11	66.400	0.014	79	179.900	0.001
12	70.100	0.018	80	180.800	0.086
13	71.000	0.001	81	181.700	2.281
14	73.500	0.000	82	182.700	0.308
15	74.600	0.152	83	183.800	0.056
16	75.600	0.167	84	184.700	0.087
17	76.600	0.394	85	185.800	0.001
18	77.500	7.257	86	195.900	0.134
19	78.500	0.379	87	196.700	0.115
20	79.600	0.346	88	197.900	0.158
21	80.600	0.012	89	210.900	0.015
22	81.700	0.001	90	212.000	28.947
23	85.200	0.001	91	212.800	3.174
24	86.600	0.020	92	214.000	0.282
25	87.600	0.035	93	214.900	0.001
26	88.500	0.029	94	225.600	0.001
27	89.700	0.091	95	228.000	0.001
28	90.600	0.001	96	246.900	0.001
29	91.800	0.056	97	261.700	0.000
30	92.700	1.707	98	288.500	0.001
31	93.600	0.107	99	290.000	0.007
32	94.700	0.014	100	291.300	0.001
33	95.800	0.031	101	308.700	0.001
34	96.700	0.001	102	310.300	0.001
35	98.800	0.020	103	318.800	0.001
36	99.800	0.001	104	329.800	0.000
37	101.000	0.001	105	338.400	0.001
38	101.800	0.001	106	362.400	0.000
39	102.700	0.007	107	391.300	0.001
40	103.800	0.001	108	392.300	0.001
41	105.000	0.052	109	401.000	0.001
42	105.800	1.313	110	415.200	0.001
43	106.900	0.116	111	424.500	0.001
44	107.800	1.471	112	426.200	0.001
45	108.800	0.145	113	446.700	0.001
46	109.700	0.001	114	573.900	0.001
47	110.800	0.008	115	574.600	0.001
48	113.900	0.049	116	576.100	0.001
49	115.900	0.315	117	593.500	0.001
50	116.900	0.054	118	595.400	0.001
51	119.900	0.022	119	629.700	0.001
52	121.000	0.001	120	681.600	0.001
53	121.700	0.001	121	693.300	0.000
54	126.100	0.039	122	731.000	0.001
55	127.400	0.011	123	750.700	0.001
56	128.100	0.007	124	752.300	0.001
57	129.300	0.001	125	783.300	0.001
58	135.500	40.629	126	784.700	0.000
59	136.500	2.496	127	820.800	0.000
60	137.500	0.210	128	874.600	0.001
61	138.600	0.025	129	924.300	0.001
62	139.600	0.569	130	950.500	0.001
63	140.600	0.218	131	967.800	0.001
64	141.600	0.622	132	969.600	0.001
65	142.600	0.067	133	971.300	0.001
66	149.600	0.006	134	986.600	0.001
67	150.700	0.058	135	996.100	0.001
68	151.600	0.105			

Figura 84 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $Au_2Cl_6$ ; T.R.= 16.9; p-metoxibenzofenona (continuação)

B.1.4  $NbCl_5$ Anisol com  $NbCl_5$ Figura 85 – Cromatograma da reação Anisol com  $NbCl_5$

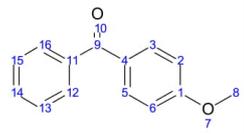
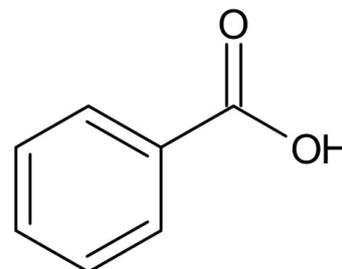
No.	Name	Structure	Formula	M	Base Peak Mass	tR (min)
3	p-metoxibenzofenona		C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	212.084	135.600	17.091

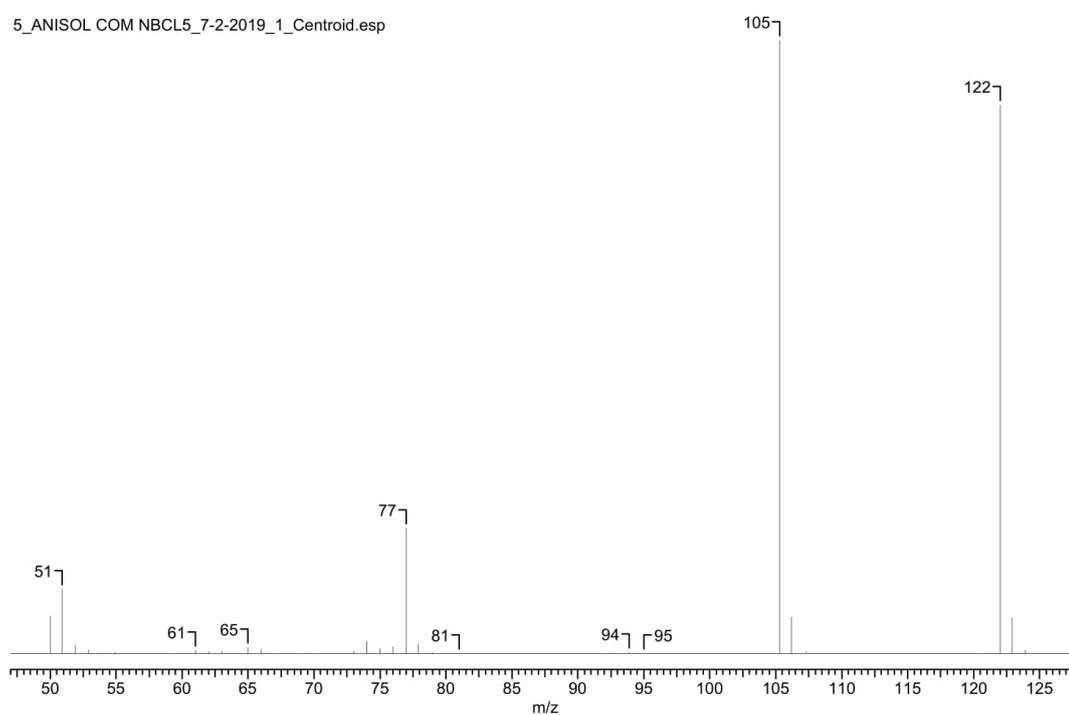
Figura 86 – Cromatograma da reação Anisol com  $NbCl_5$  (continuação)

Anisol com NbCl<sub>5</sub>

<b>Count</b>	182	<b>Data Type</b>	Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 07:34 am
<b>File Name</b>	5_ANISOL COM NBCL5 7-2-2019_1_Centroid	<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	7.696	<b>Scan</b>	141
<b>Total Signal</b>	166121			<b>TIC</b>	251.90



5\_ANISOL COM NBCL5\_7-2-2019\_1\_Centroid.esp



No.	m/z	RI(%)	DI
1	50.900	10.519	6937.010
2	77.000	20.405	13457.019
3	105.300	100.000	65948.086
4	122.000	89.442	58985.078

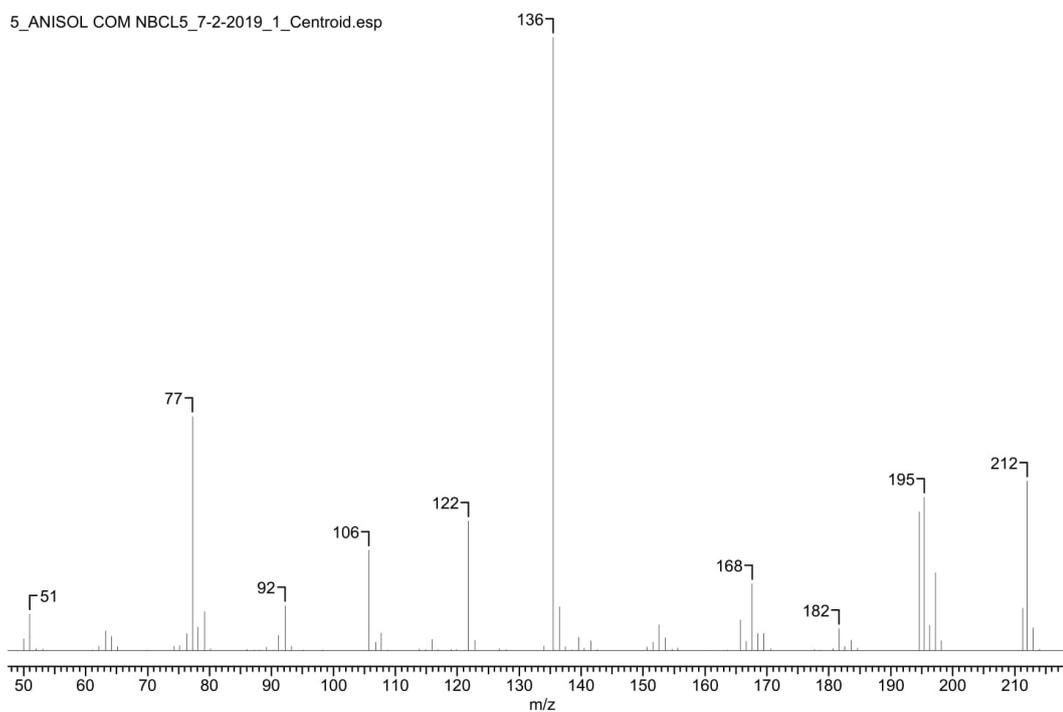
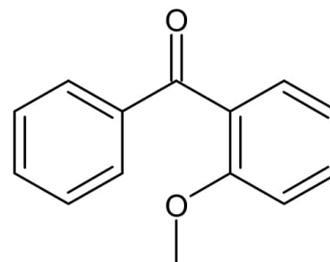
Figura 87 – Espectro de Massas; Reação Anisol com NbCl<sub>5</sub>; T.R.=7.7; Ácido benzóico

No.	m/z	TIC(%)									
1	50.000	2.446	47	129.800	0.001	93	504.700	0.001	139	724.900	0.001
2	50.900	4.176	48	130.800	0.001	94	524.000	0.001	140	733.900	0.001
3	51.900	0.583	49	135.000	0.001	95	525.200	0.001	141	735.700	0.001
4	52.900	0.258	50	145.900	0.001	96	531.300	0.001	142	744.600	0.001
5	53.900	0.054	51	154.900	0.001	97	540.800	0.001	143	747.100	0.001
6	54.900	0.116	52	156.200	0.001	98	542.300	0.001	144	749.800	0.001
7	55.900	0.014	53	162.800	0.001	99	545.900	0.001	145	768.100	0.001
8	57.000	0.006	54	163.900	0.001	100	550.400	0.001	146	770.800	0.001
9	59.000	0.001	55	166.100	0.001	101	551.400	0.001	147	776.500	0.001
10	59.900	0.023	56	176.000	0.001	102	561.900	0.001	148	790.800	0.001
11	61.000	0.216	57	207.000	0.001	103	562.600	0.001	149	792.100	0.001
12	62.000	0.132	58	208.200	0.001	104	567.100	0.001	150	800.300	0.001
13	63.000	0.134	59	241.300	0.001	105	573.000	0.001	151	802.100	0.001
14	64.000	0.023	60	243.800	0.001	106	577.400	0.001	152	809.100	0.001
15	65.000	0.385	61	250.800	0.001	107	578.300	0.001	153	823.200	0.001
16	66.000	0.309	62	251.900	0.001	108	590.600	0.001	154	825.300	0.001
17	67.000	0.014	63	252.800	0.001	109	600.700	0.001	155	845.500	0.001
18	69.000	0.014	64	257.500	0.001	110	617.000	0.001	156	849.900	0.001
19	70.100	0.001	65	259.900	0.001	111	619.300	0.001	157	851.000	0.001
20	71.200	0.001	66	261.900	0.001	112	620.900	0.001	158	858.700	0.001
21	73.000	0.141	67	273.200	0.001	113	621.600	0.001	159	859.900	0.001
22	74.000	0.787	68	277.500	0.001	114	622.700	0.001	160	861.100	0.001
23	75.000	0.346	69	279.100	0.001	115	623.400	0.001	161	872.000	0.001
24	76.000	0.468	70	280.900	0.001	116	624.000	0.001	162	874.300	0.001
25	77.000	8.101	71	291.100	0.001	117	639.500	0.001	163	875.000	0.001
26	77.900	0.645	72	299.100	0.001	118	640.900	0.001	164	877.100	0.001
27	79.000	0.083	73	323.000	0.001	119	642.000	0.001	165	880.600	0.001
28	80.100	0.001	74	325.100	0.001	120	644.700	0.001	166	895.400	0.001
29	81.000	0.001	75	355.900	0.001	121	645.400	0.001	167	896.300	0.001
30	81.900	0.001	76	362.200	0.001	122	650.200	0.001	168	897.000	0.001
31	90.900	0.001	77	364.100	0.001	123	660.800	0.001	169	904.100	0.001
32	92.100	0.001	78	382.800	0.001	124	666.300	0.001	170	906.100	0.001
33	92.900	0.014	79	399.900	0.001	125	676.900	0.001	171	922.000	0.001
34	93.900	0.078	80	405.800	0.001	126	677.800	0.001	172	938.300	0.001
35	95.000	0.021	81	407.900	0.001	127	681.100	0.001	173	939.100	0.001
36	103.400	0.001	82	419.800	0.001	128	682.600	0.001	174	942.000	0.001
37	105.300	39.699	83	421.900	0.001	129	687.600	0.001	175	943.700	0.001
38	106.200	2.370	84	425.900	0.001	130	697.400	0.001	176	968.600	0.001
39	107.300	0.139	85	426.800	0.001	131	698.300	0.001	177	978.100	0.001
40	108.500	0.001	86	440.700	0.001	132	699.400	0.001	178	980.200	0.001
41	119.300	0.001	87	442.900	0.001	133	701.300	0.001	179	982.200	0.001
42	120.700	0.001	88	446.800	0.001	134	704.600	0.001	180	984.400	0.001
43	122.000	35.507	89	452.200	0.001	135	708.300	0.001	181	985.900	0.001
44	122.900	2.352	90	466.900	0.001	136	720.000	0.001	182	990.300	0.001
45	123.900	0.225	91	468.200	0.001	137	720.700	0.001			
46	124.800	0.001	92	477.700	0.001	138	723.100	0.001			

Figura 88 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $NbCl_5$ ; T.R.=7.7; Ácido benzóico (continuação)

Anisol com NbCl<sub>5</sub>

<b>Count</b>	255	<b>Data Type</b>	Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 07:34 am
<b>File Name</b>	5_ANISOL COM NBCL5_7-2-2019_1_Centroid	<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	15.410	<b>Scan</b>	417
<b>Total Signal</b>	496808			<b>TIC</b>	386.23



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.200	38.169	49096.996
2	105.700	16.373	21061.000
3	121.800	21.166	27226.000
4	135.500	100.000	128630.992
5	167.600	10.897	14016.998
6	194.600	22.624	29100.998
7	195.400	24.985	32137.998
8	197.200	12.764	16417.998
9	212.000	27.652	35569.000

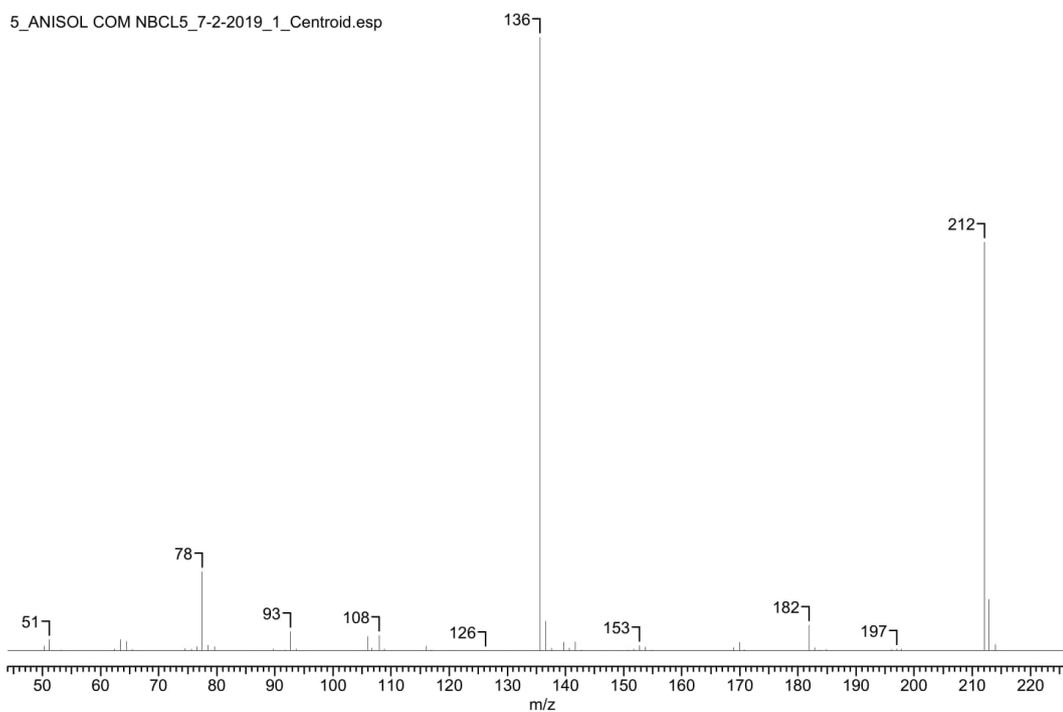
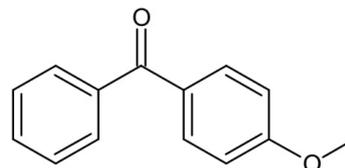
Figura 89 – Espectro de Massas; Reação Anisol com *NbCl*<sub>5</sub>; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	50.000	0.510	66	137.500	0.176	131	411.900	0.001	196	727.700	0.001
2	51.000	1.554	67	138.500	0.024	132	418.800	0.001	197	728.500	0.001
3	52.000	0.084	68	139.600	0.563	133	420.700	0.001	198	743.800	0.001
4	53.100	0.067	69	140.500	0.113	134	429.900	0.001	199	753.800	0.001
5	55.100	0.001	70	141.600	0.412	135	431.300	0.001	200	754.700	0.001
6	57.700	0.010	71	142.600	0.041	136	440.600	0.000	201	756.000	0.001
7	61.100	0.023	72	146.600	0.001	137	445.700	0.000	202	756.700	0.001
8	62.100	0.190	73	149.700	0.004	138	448.600	0.001	203	758.200	0.001
9	63.200	0.826	74	150.600	0.149	139	449.700	0.001	204	759.300	0.001
10	64.200	0.609	75	151.600	0.361	140	452.100	0.001	205	764.500	0.001
11	65.100	0.177	76	152.600	1.099	141	477.200	0.001	206	769.500	0.001
12	66.100	0.008	77	153.600	0.540	142	482.500	0.001	207	770.200	0.001
13	69.100	0.001	78	154.700	0.065	143	483.200	0.001	208	775.100	0.001
14	69.900	0.024	79	155.600	0.114	144	487.100	0.001	209	775.800	0.001
15	71.500	0.001	80	156.600	0.008	145	487.800	0.001	210	777.300	0.001
16	72.700	0.001	81	160.700	0.001	146	489.700	0.001	211	779.800	0.001
17	74.300	0.201	82	163.700	0.025	147	498.000	0.001	212	781.400	0.001
18	75.200	0.225	83	164.700	0.007	148	502.900	0.001	213	791.200	0.001
19	76.300	0.737	84	165.700	1.304	149	508.800	0.001	214	792.600	0.001
20	77.200	9.882	85	166.700	0.406	150	523.800	0.001	215	793.900	0.000
21	78.100	0.988	86	167.600	2.821	151	534.500	0.001	216	794.900	0.001
22	79.200	1.656	87	168.600	0.725	152	537.000	0.001	217	795.900	0.001
23	80.200	0.094	88	169.500	0.738	153	545.400	0.001	218	809.600	0.001
24	81.600	0.009	89	170.600	0.086	154	557.600	0.001	219	811.800	0.001
25	84.200	0.001	90	171.600	0.015	155	560.000	0.001	220	837.400	0.001
26	85.100	0.012	91	177.700	0.052	156	561.100	0.001	221	838.500	0.001
27	86.000	0.044	92	178.700	0.023	157	570.700	0.001	222	839.900	0.001
28	87.200	0.036	93	179.500	0.001	158	572.300	0.001	223	842.300	0.001
29	88.100	0.035	94	180.700	0.082	159	578.800	0.001	224	843.500	0.001
30	89.200	0.143	95	181.600	0.942	160	580.900	0.001	225	855.900	0.001
31	90.300	0.040	96	182.600	0.166	161	582.400	0.001	226	857.500	0.001
32	91.200	0.639	97	183.600	0.437	162	583.900	0.001	227	864.000	0.000
33	92.200	1.893	98	184.600	0.106	163	590.500	0.000	228	867.800	0.001
34	93.200	0.195	99	192.400	0.001	164	591.500	0.001	229	869.600	0.000
35	94.200	0.007	100	194.600	5.858	165	592.800	0.001	230	874.500	0.001
36	95.200	0.023	101	195.400	6.469	166	598.200	0.001	231	876.300	0.001
37	97.400	0.001	102	196.300	1.070	167	600.600	0.001	232	893.800	0.001
38	98.300	0.028	103	197.200	3.305	168	611.900	0.001	233	896.000	0.001
39	99.600	0.016	104	198.200	0.432	169	613.800	0.001	234	897.800	0.001
40	101.100	0.001	105	199.100	0.008	170	614.500	0.001	235	899.800	0.001
41	101.800	0.001	106	210.200	0.008	171	616.000	0.001	236	900.700	0.001
42	102.900	0.005	107	211.300	1.799	172	617.900	0.001	237	915.800	0.001
43	105.700	4.239	108	212.000	7.160	173	618.800	0.001	238	916.500	0.001
44	106.800	0.352	109	213.000	0.945	174	636.200	0.001	239	920.900	0.001
45	107.700	0.757	110	214.000	0.070	175	638.300	0.001	240	921.800	0.001
46	108.700	0.032	111	216.800	0.001	176	639.300	0.001	241	931.700	0.001
47	110.700	0.001	112	218.900	0.001	177	644.600	0.001	242	936.300	0.000
48	113.900	0.065	113	219.500	0.000	178	645.300	0.001	243	938.800	0.000
49	114.900	0.058	114	220.500	0.001	179	654.800	0.001	244	941.400	0.000
50	115.900	0.456	115	222.200	0.001	180	655.700	0.001	245	942.800	0.001
51	116.900	0.047	116	223.600	0.001	181	664.200	0.001	246	956.200	0.001
52	118.300	0.001	117	225.900	0.001	182	666.000	0.001	247	957.500	0.001
53	119.000	0.042	118	227.100	0.001	183	668.000	0.007	248	958.400	0.001
54	119.900	0.055	119	227.900	0.016	184	669.600	0.001	249	960.000	0.001
55	121.800	5.480	120	229.500	0.004	185	671.300	0.001	250	964.000	0.001
56	122.800	0.434	121	231.500	0.001	186	678.400	0.001	251	970.600	0.001
57	124.000	0.001	122	236.600	0.001	187	680.500	0.001	252	972.700	0.001
58	125.800	0.001	123	246.800	0.001	188	691.000	0.001	253	979.000	0.001
59	126.800	0.084	124	247.800	0.001	189	691.900	0.001	254	994.100	0.001
60	127.900	0.050	125	264.000	0.001	190	701.600	0.001	255	1000.000	0.001
61	128.800	0.016	126	284.900	0.001	191	712.100	0.001			
62	130.200	0.001	127	307.300	0.000	192	712.800	0.001			
63	134.000	0.196	128	338.100	0.000	193	717.400	0.001			
64	135.500	25.891	129	373.800	0.001	194	725.200	0.000			
65	136.500	1.856	130	385.500	0.001	195	726.700	0.001			

Figura 90 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $NbCl_5$ ; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona (continuação)

Anisol com NbCl<sub>5</sub>

<b>Count</b>	237	<b>Data Type</b>	Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 07:34 am
<b>File Name</b>	5_ANISOL COM NBCL5 7-2-2019_1_Centroid	<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	17.091	<b>Scan</b>	486
<b>Total Signal</b>	8067829			<b>TIC</b>	228.03



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.500	12.870	455351.656
2	135.600	100.000	3538041.250
3	212.100	66.577	2355538.250

Figura 91 – Espectro de Massas; Reação Anisol com NbCl<sub>5</sub>; T.R.= 17.1; p-metoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)									
1	50.200	0.333	61	134.200	0.003	121	356.000	0.000	181	718.200	0.001
2	51.200	0.786	62	135.600	43.854	122	358.000	0.001	182	726.200	0.001
3	52.200	0.001	63	136.500	2.110	123	398.700	0.001	183	737.400	0.001
4	53.200	0.060	64	137.600	0.203	124	419.200	0.001	184	738.600	0.001
5	54.200	0.001	65	138.900	0.013	125	420.600	0.001	185	742.100	0.000
6	55.100	0.001	66	139.700	0.591	126	421.300	0.001	186	744.600	0.001
7	61.300	0.018	67	140.700	0.204	127	423.200	0.001	187	746.800	0.001
8	62.400	0.105	68	141.700	0.659	128	424.100	0.001	188	748.200	0.001
9	63.400	0.779	69	142.800	0.060	129	425.300	0.001	189	757.500	0.001
10	64.400	0.660	70	145.900	0.001	130	426.200	0.001	190	758.200	0.001
11	65.400	0.091	71	146.900	0.001	131	451.400	0.000	191	760.300	0.001
12	66.400	0.005	72	149.600	0.000	132	457.600	0.001	192	764.100	0.001
13	67.500	0.001	73	150.800	0.049	133	465.100	0.000	193	777.300	0.001
14	70.200	0.001	74	151.700	0.118	134	473.100	0.001	194	779.700	0.001
15	73.600	0.001	75	152.700	0.354	135	475.800	0.001	195	780.400	0.001
16	74.500	0.147	76	153.700	0.254	136	480.600	0.001	196	782.000	0.001
17	75.600	0.114	77	154.800	0.057	137	482.100	0.001	197	783.800	0.001
18	76.600	0.302	78	156.100	0.001	138	502.000	0.001	198	796.600	0.000
19	77.500	5.644	79	165.900	0.004	139	508.500	0.001	199	798.000	0.001
20	78.500	0.405	80	167.500	0.001	140	509.800	0.001	200	799.600	0.001
21	79.600	0.284	81	168.900	0.213	141	510.600	0.001	201	801.400	0.001
22	80.600	0.014	82	169.900	0.608	142	512.500	0.001	202	807.000	0.001
23	81.600	0.005	83	170.800	0.100	143	527.600	0.001	203	808.000	0.001
24	85.900	0.000	84	180.200	0.001	144	528.500	0.001	204	817.200	0.001
25	86.600	0.015	85	181.900	1.840	145	534.100	0.001	205	820.000	0.001
26	87.600	0.024	86	182.900	0.217	146	536.400	0.001	206	841.600	0.001
27	88.600	0.012	87	183.900	0.062	147	554.300	0.001	207	842.600	0.001
28	89.700	0.105	88	184.900	0.098	148	558.400	0.001	208	844.600	0.001
29	90.800	0.001	89	185.800	0.010	149	559.400	0.001	209	859.400	0.001
30	91.700	0.045	90	188.600	0.001	150	560.400	0.001	210	860.100	0.001
31	92.700	1.379	91	196.200	0.094	151	574.700	0.001	211	862.400	0.001
32	93.700	0.119	92	197.000	0.125	152	578.000	0.001	212	870.100	0.001
33	94.700	0.006	93	197.800	0.124	153	580.100	0.001	213	872.500	0.001
34	95.700	0.007	94	198.900	0.032	154	580.900	0.001	214	873.300	0.001
35	97.200	0.001	95	199.900	0.001	155	582.200	0.001	215	875.100	0.001
36	98.000	0.001	96	210.500	0.001	156	592.300	0.001	216	883.600	0.001
37	98.700	0.011	97	212.100	29.197	157	594.900	0.001	217	888.700	0.001
38	99.800	0.001	98	212.900	3.667	158	596.000	0.001	218	896.600	0.001
39	102.700	0.005	99	214.000	0.442	159	606.400	0.001	219	897.700	0.001
40	104.100	0.001	100	215.000	0.031	160	608.000	0.001	220	899.000	0.001
41	104.800	0.031	101	215.900	0.001	161	608.700	0.001	221	900.000	0.001
42	105.900	1.017	102	220.000	0.001	162	616.900	0.001	222	910.100	0.000
43	106.700	0.175	103	235.000	0.001	163	618.600	0.001	223	914.800	0.001
44	107.900	1.105	104	236.500	0.001	164	621.600	0.001	224	915.900	0.001
45	108.900	0.128	105	238.600	0.001	165	622.900	0.001	225	930.500	0.001
46	110.200	0.001	106	239.800	0.001	166	632.900	0.001	226	941.100	0.001
47	113.900	0.020	107	240.900	0.001	167	647.300	0.001	227	950.100	0.001
48	114.900	0.023	108	241.800	0.001	168	651.100	0.001	228	953.200	0.001
49	116.000	0.342	109	256.200	0.001	169	663.800	0.001	229	955.300	0.001
50	117.000	0.056	110	274.000	0.000	170	664.700	0.001	230	958.600	0.001
51	119.800	0.011	111	289.100	0.054	171	669.000	0.001	231	962.000	0.001
52	120.800	0.001	112	290.000	0.012	172	682.400	0.001	232	972.800	0.001
53	124.000	0.000	113	291.100	0.001	173	684.200	0.001	233	984.900	0.001
54	124.800	0.001	114	305.800	0.001	174	685.000	0.001	234	987.900	0.001
55	126.200	0.027	115	311.500	0.000	175	685.700	0.001	235	989.100	0.001
56	127.000	0.025	116	318.900	0.005	176	700.300	0.001	236	992.800	0.001
57	127.900	0.001	117	331.900	0.001	177	701.000	0.001	237	994.000	0.001
58	128.900	0.001	118	339.300	0.001	178	701.900	0.001			
59	130.400	0.001	119	351.700	0.001	179	702.800	0.001			
60	131.200	0.001	120	354.700	0.001	180	715.600	0.001			

Figura 92 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $NbCl_5$ ; T.R.= 17.1; p-metoxibenzofenona (continuação)

### B.1.5 $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$

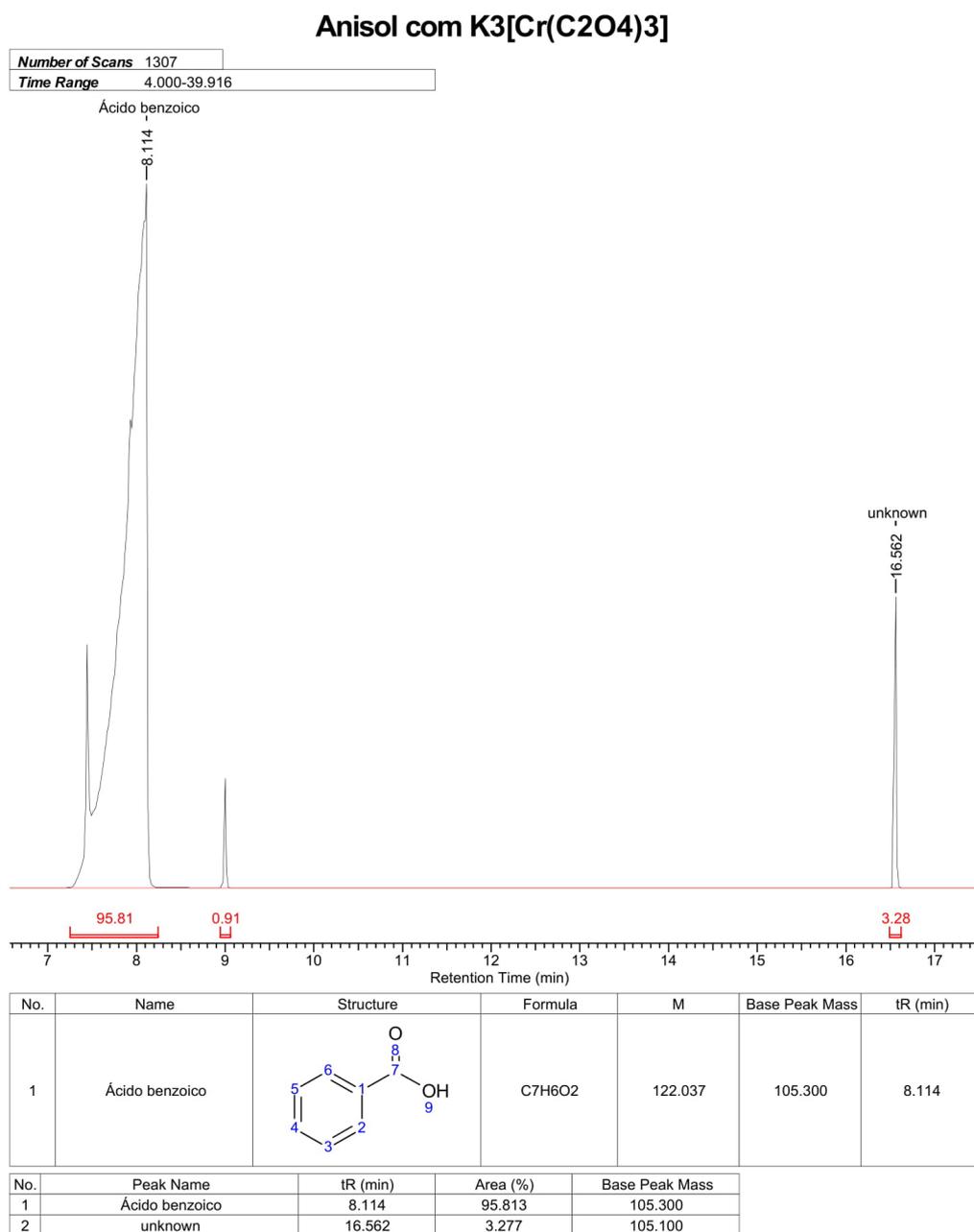
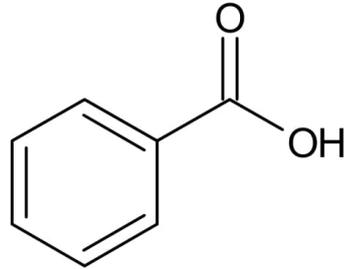


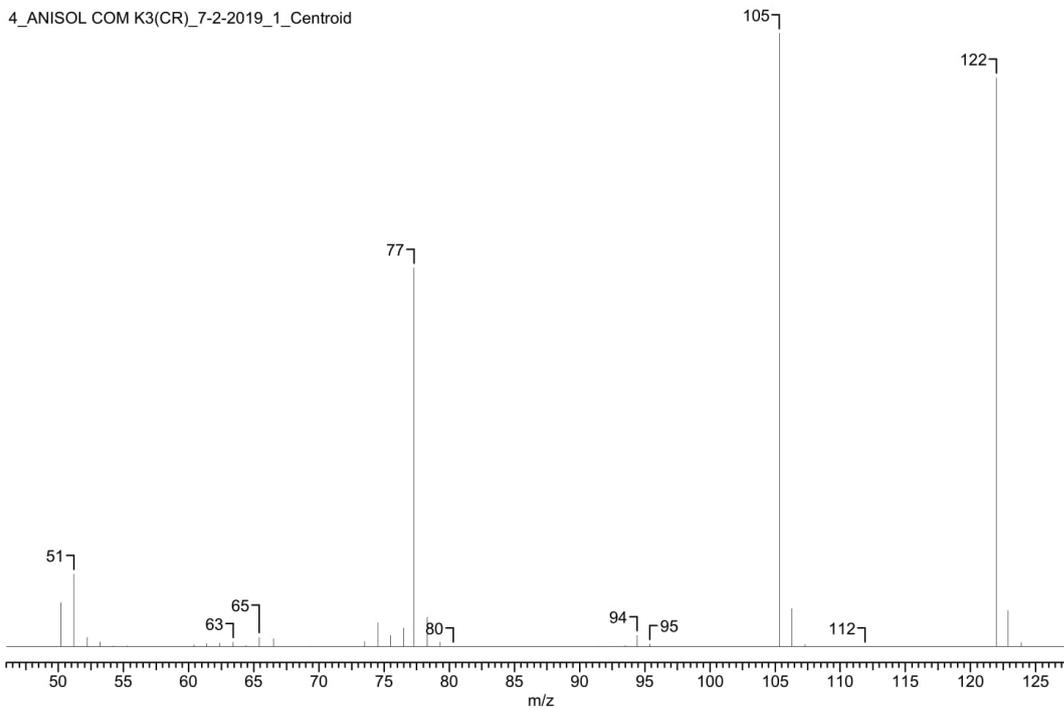
Figura 93 – Cromatograma da reação Anisol com  $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$

Anisol com  $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ 

<b>Count</b>	231	<b>Data Type</b>	Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 06:49 am
<b>File Name</b>	4_ANISOL COM K3(CR)_7-2-2019_1_Centroid	<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	8.114	<b>Scan</b>	169
<b>Total Signal</b>	729763	<b>TIC</b>			312.82



4\_ANISOL COM K3(CR)\_7-2-2019\_1\_Centroid



No.	$m/z$	RI(%)	DI
1	51.200	11.875	27702.102
2	77.300	61.736	144019.531
3	105.300	100.000	233283.859
4	122.000	92.737	216340.813

Figura 94 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ ; T.R.= 8.1; Ácido benzóico

No.	m/z	TIC(%)									
1	50.200	2.301	60	147.600	0.001	119	476.900	0.001	178	741.200	0.001
2	51.200	3.796	61	149.100	0.001	120	480.400	0.001	179	751.200	0.001
3	52.200	0.489	62	150.100	0.001	121	484.700	0.001	180	756.000	0.001
4	53.200	0.241	63	154.900	0.001	122	499.800	0.001	181	770.600	0.001
5	54.200	0.035	64	160.600	0.001	123	508.400	0.001	182	772.100	0.001
6	55.300	0.041	65	166.300	0.001	124	509.100	0.001	183	777.300	0.001
7	57.300	0.000	66	179.000	0.010	125	510.000	0.001	184	797.600	0.001
8	59.100	0.001	67	185.500	0.001	126	511.100	0.001	185	798.600	0.001
9	60.400	0.084	68	194.900	0.001	127	511.800	0.001	186	800.500	0.000
10	61.400	0.154	69	195.900	0.001	128	516.300	0.001	187	802.100	0.001
11	62.400	0.185	70	209.600	0.000	129	524.700	0.001	188	804.100	0.001
12	63.400	0.241	71	211.100	0.001	130	527.500	0.001	189	808.900	0.001
13	64.400	0.056	72	212.200	0.001	131	529.200	0.001	190	811.200	0.001
14	65.400	0.499	73	213.200	0.001	132	529.900	0.001	191	813.000	0.001
15	66.500	0.421	74	215.300	0.001	133	532.300	0.001	192	814.400	0.001
16	67.400	0.015	75	216.700	0.001	134	546.900	0.001	193	818.700	0.001
17	68.400	0.001	76	232.000	0.001	135	552.400	0.001	194	819.800	0.001
18	69.400	0.001	77	232.900	0.001	136	556.800	0.000	195	824.700	0.001
19	71.400	0.001	78	234.300	0.000	137	573.400	0.001	196	833.900	0.001
20	72.300	0.006	79	236.100	0.001	138	583.700	0.001	197	835.700	0.001
21	73.500	0.271	80	237.200	0.001	139	591.900	0.001	198	838.800	0.001
22	74.500	1.257	81	249.700	0.001	140	592.600	0.001	199	839.800	0.001
23	75.500	0.593	82	251.900	0.001	141	594.800	0.001	200	845.700	0.001
24	76.500	0.977	83	262.200	0.001	142	598.600	0.001	201	849.500	0.001
25	77.300	19.735	84	264.600	0.001	143	604.900	0.001	202	853.300	0.001
26	78.300	1.543	85	269.700	0.001	144	609.900	0.001	203	855.800	0.001
27	79.300	0.247	86	274.600	0.001	145	610.700	0.001	204	866.200	0.001
28	80.300	0.019	87	293.000	0.001	146	612.900	0.001	205	875.300	0.001
29	81.300	0.005	88	294.600	0.001	147	614.500	0.001	206	876.800	0.001
30	82.200	0.004	89	296.300	0.001	148	615.300	0.001	207	881.200	0.001
31	84.200	0.001	90	300.800	0.001	149	624.700	0.001	208	881.900	0.001
32	85.400	0.005	91	306.200	0.001	150	626.000	0.001	209	892.600	0.001
33	86.600	0.001	92	326.800	0.001	151	631.300	0.000	210	895.100	0.001
34	87.300	0.001	93	337.400	0.001	152	639.800	0.001	211	897.100	0.001
35	88.600	0.001	94	352.600	0.001	153	641.300	0.001	212	898.400	0.001
36	89.400	0.025	95	353.900	0.001	154	660.800	0.000	213	903.200	0.001
37	90.500	0.001	96	363.300	0.001	155	667.200	0.001	214	908.000	0.000
38	91.500	0.007	97	364.500	0.001	156	675.400	0.001	215	912.000	0.001
39	92.400	0.013	98	379.000	0.001	157	676.500	0.001	216	914.200	0.001
40	93.500	0.069	99	379.900	0.001	158	678.800	0.001	217	924.000	0.001
41	94.400	0.601	100	400.000	0.000	159	688.800	0.001	218	928.900	0.001
42	95.400	0.131	101	410.100	0.001	160	690.800	0.001	219	934.500	0.001
43	96.500	0.001	102	412.300	0.001	161	691.800	0.001	220	946.300	0.001
44	102.000	0.000	103	416.400	0.001	162	692.500	0.001	221	947.500	0.001
45	105.300	31.967	104	417.200	0.001	163	693.200	0.001	222	950.700	0.001
46	106.300	1.980	105	421.800	0.001	164	694.000	0.001	223	955.100	0.001
47	107.300	0.108	106	430.300	0.000	165	697.300	0.001	224	971.100	0.001
48	108.500	0.001	107	431.200	0.001	166	698.200	0.001	225	976.000	0.001
49	111.900	0.001	108	432.300	0.001	167	699.100	0.001	226	981.000	0.000
50	112.800	0.001	109	433.200	0.001	168	713.000	0.001	227	982.000	0.001
51	119.700	0.001	110	437.400	0.001	169	715.500	0.001	228	984.500	0.001
52	122.000	29.645	111	447.700	0.001	170	719.800	0.001	229	994.200	0.001
53	122.900	1.893	112	449.100	0.001	171	725.200	0.001	230	995.300	0.001
54	123.900	0.207	113	450.500	0.001	172	730.500	0.000	231	997.600	0.001
55	125.000	0.004	114	451.200	0.001	173	733.000	0.001			
56	134.900	0.001	115	452.300	0.001	174	734.600	0.001			
57	137.900	0.001	116	453.000	0.001	175	735.800	0.001			
58	145.100	0.001	117	468.500	0.001	176	739.800	0.001			
59	145.900	0.001	118	469.500	0.001	177	740.500	0.001			

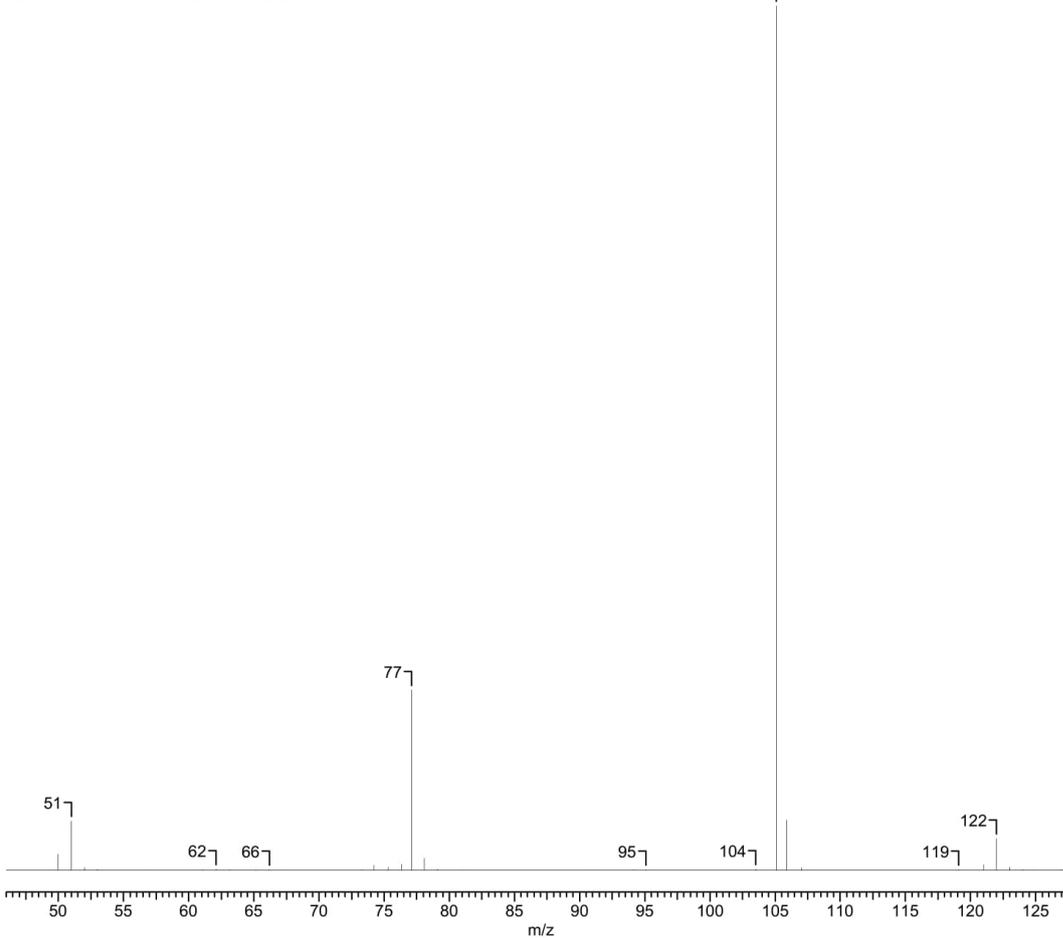
Figura 95 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ ; T.R.= 8.1; Ácido benzóico (continuação)

Anisol com K<sub>3</sub>[Cr(C<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)<sub>3</sub>]

<b>Count</b>	238	<b>Data Type</b>	Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 06:49 am		
<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn		<b>Plot Type</b>	Stick	
<b>Retention Time</b>	16.562	<b>Scan</b>	473	<b>TIC</b>	148.27	<b>Total Signal</b>	301584

4\_ANISOL COM K3(CR)\_7-2-2019\_1\_Centroid

105



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.100	20.810	42327.219
2	105.100	100.000	203395.047

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	50.000	1.221	17	73.300	0.026	33	105.900	3.893	49	149.000	0.008
2	51.000	3.827	18	74.200	0.372	34	107.000	0.191	50	151.000	0.031
3	52.000	0.190	19	75.300	0.223	35	108.000	0.001	51	152.000	0.072
4	53.000	0.064	20	76.300	0.436	36	117.800	0.001	52	153.000	0.047
5	54.000	0.001	21	77.100	14.035	37	119.100	0.011	53	154.100	0.045
6	54.900	0.001	22	78.100	0.884	38	121.000	0.410	54	165.000	0.001
7	57.100	0.001	23	79.100	0.070	39	122.000	2.453	55	166.000	0.001
8	58.200	0.000	24	81.000	0.001	40	123.000	0.224	56	170.500	0.001
9	60.000	0.001	25	91.000	0.001	41	124.000	0.022	57	172.600	0.001
10	61.100	0.024	26	93.300	0.001	42	124.800	0.001	58	174.100	0.001
11	62.100	0.056	27	94.200	0.029	43	126.000	0.001	59	181.000	0.604
12	63.100	0.020	28	95.100	0.035	44	127.000	0.008	60	182.000	0.430
13	63.900	0.001	29	96.100	0.001	45	128.000	0.001	61	183.100	0.028
14	65.200	0.014	30	102.000	0.001	46	138.900	0.001	62	190.200	0.001
15	66.200	0.029	31	103.500	0.052	47	141.000	0.001	63	191.000	0.001
16	67.300	0.001	32	105.100	67.442	48	143.600	0.001	64	192.800	0.001

Figura 96 – Espectro de Massas; Reação Anisol com K<sub>3</sub>[Cr(C<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)<sub>3</sub>]; T.R.= 16.6; Desconhecido

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
65	194.500	0.020	133	562.800	0.001	201	839.700	0.001
66	195.300	0.040	134	563.800	0.001	202	841.500	0.001
67	196.000	0.082	135	573.200	0.001	203	842.300	0.001
68	197.800	1.915	136	574.000	0.001	204	843.900	0.001
69	198.800	0.184	137	575.400	0.001	205	844.600	0.001
70	199.700	0.008	138	577.200	0.001	206	845.500	0.001
71	204.700	0.001	139	577.800	0.001	207	847.000	0.001
72	225.900	0.063	140	579.200	0.001	208	849.100	0.001
73	228.000	0.001	141	580.200	0.001	209	867.800	0.001
74	232.900	0.001	142	581.200	0.001	210	868.500	0.001
75	246.100	0.001	143	584.100	0.001	211	869.600	0.000
76	270.200	0.001	144	597.100	0.001	212	878.400	0.001
77	283.800	0.001	145	598.000	0.001	213	879.200	0.001
78	284.700	0.001	146	604.700	0.001	214	881.500	0.001
79	286.100	0.001	147	614.700	0.001	215	882.500	0.001
80	296.400	0.001	148	616.000	0.001	216	893.300	0.001
81	297.500	0.000	149	625.200	0.001	217	894.200	0.001
82	300.100	0.001	150	627.600	0.001	218	897.100	0.001
83	317.100	0.001	151	631.100	0.001	219	899.100	0.001
84	318.000	0.001	152	646.600	0.001	220	923.500	0.001
85	322.600	0.001	153	647.400	0.001	221	925.100	0.001
86	336.000	0.001	154	658.700	0.001	222	926.400	0.001
87	338.200	0.001	155	660.300	0.001	223	927.900	0.001
88	344.400	0.001	156	674.400	0.001	224	928.800	0.001
89	346.800	0.001	157	676.900	0.001	225	929.500	0.001
90	348.300	0.001	158	686.300	0.001	226	930.800	0.001
91	369.000	0.001	159	687.500	0.001	227	950.900	0.001
92	373.600	0.001	160	688.600	0.001	228	952.000	0.001
93	374.400	0.001	161	692.400	0.001	229	953.200	0.001
94	376.100	0.001	162	708.500	0.001	230	962.500	0.001
95	389.700	0.001	163	710.100	0.001	231	970.700	0.001
96	390.500	0.001	164	711.600	0.001	232	972.600	0.001
97	392.300	0.001	165	713.500	0.001	233	974.000	0.001
98	394.800	0.001	166	714.600	0.001	234	976.300	0.001
99	400.100	0.001	167	715.300	0.001	235	978.400	0.001
100	401.900	0.001	168	716.200	0.001	236	979.600	0.001
101	417.000	0.001	169	717.500	0.001	237	980.700	0.001
102	420.900	0.001	170	718.200	0.001	238	991.500	0.001
103	423.300	0.001	171	719.900	0.001			
104	439.700	0.001	172	734.800	0.001			
105	442.100	0.001	173	735.500	0.001			
106	445.900	0.001	174	741.300	0.001			
107	448.200	0.001	175	742.900	0.001			
108	450.300	0.001	176	744.500	0.001			
109	451.100	0.001	177	753.400	0.001			
110	451.700	0.001	178	754.400	0.001			
111	452.900	0.001	179	755.400	0.001			
112	453.900	0.000	180	756.300	0.001			
113	477.300	0.001	181	757.000	0.001			
114	478.000	0.001	182	757.700	0.001			
115	485.300	0.001	183	759.700	0.001			
116	491.200	0.001	184	761.400	0.001			
117	492.100	0.001	185	772.100	0.000			
118	492.900	0.001	186	779.700	0.001			
119	495.900	0.001	187	783.300	0.001			
120	497.100	0.001	188	784.700	0.001			
121	498.200	0.001	189	787.200	0.001			
122	499.100	0.001	190	788.500	0.001			
123	500.600	0.001	191	790.500	0.001			
124	501.900	0.001	192	792.100	0.001			
125	529.900	0.001	193	792.900	0.001			
126	530.800	0.001	194	810.900	0.001			
127	532.300	0.001	195	811.800	0.001			
128	537.500	0.001	196	814.600	0.001			
129	551.100	0.001	197	816.400	0.001			
130	552.500	0.000	198	824.700	0.001			
131	558.400	0.001	199	825.300	0.001			
132	561.300	0.001	200	826.600	0.000			

Figura 97 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $K_3[Cr(C_2O_4)_3]$ ; T.R.= 16.6; Desconhecido (continuação)

### B.1.6 $Hg[Co(SCN)_4]$

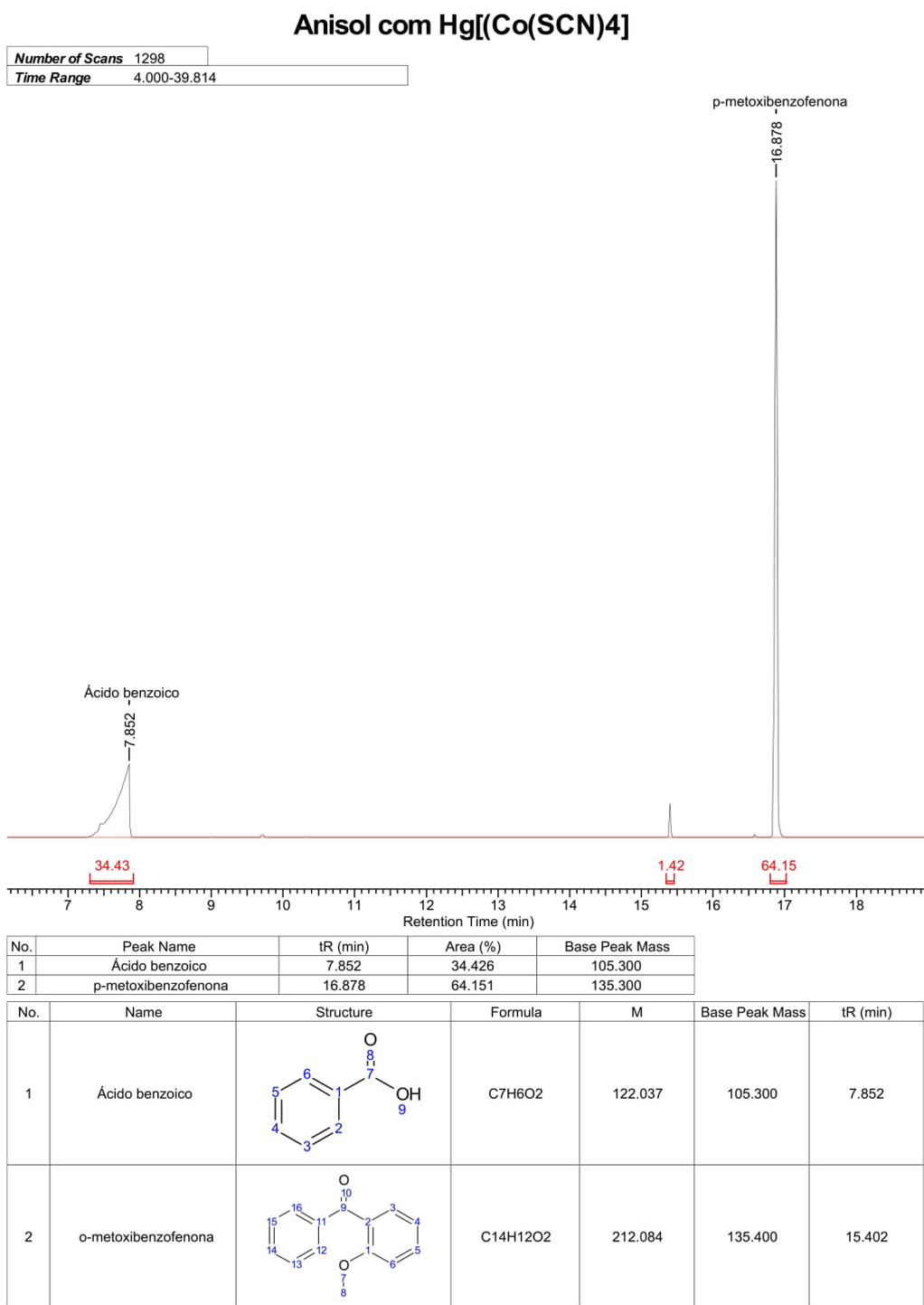


Figura 98 – Cromatograma da reação Anisol com  $Hg[Co(SCN)_4]$

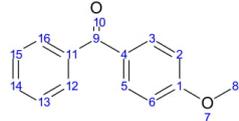
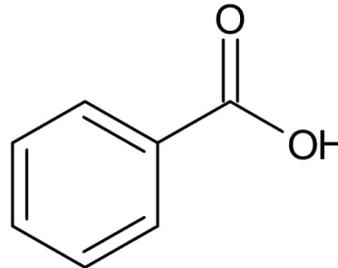
No.	Name	Structure	Formula	M	Base Peak Mass	tR (min)
3	p-metoxibenzofenona		C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	212.084	135.300	16.878

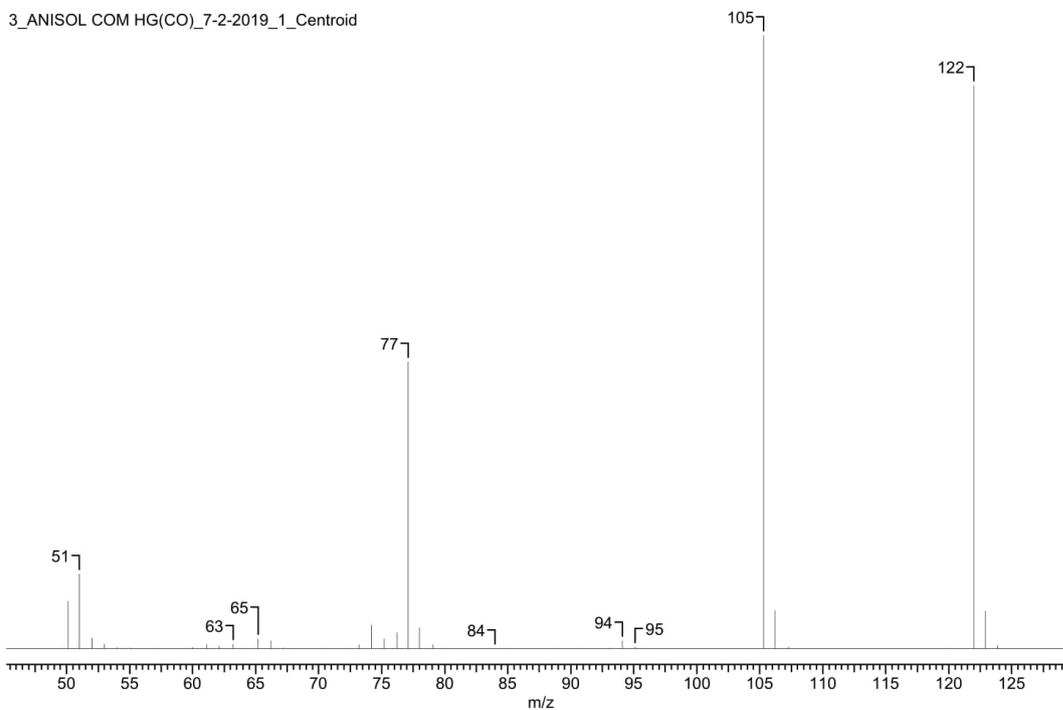
Figura 99 – Cromatograma da reação Anisol com  $Hg[Co(SCN)_4]$  (continuação)

Anisol com Hg[Co(SCN)<sub>4</sub>]

<b>Count</b>	138	<b>Data Type</b>	Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 06:05 am
<b>File Name</b>	3_ANISOL COM HG(CO)_7-2-2019_1_Centroid	<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	7.852	<b>Scan</b>	151
<b>Total Signal</b>	331314	<b>TIC</b>			294.57



3\_ANISOL COM HG(CO)\_7-2-2019\_1\_Centroid



No.	m/z	RI(%)	DI
1	51.000	12.156	13671.999
2	77.100	46.730	52560.000
3	105.300	100.000	112474.992
4	122.000	91.797	103248.992

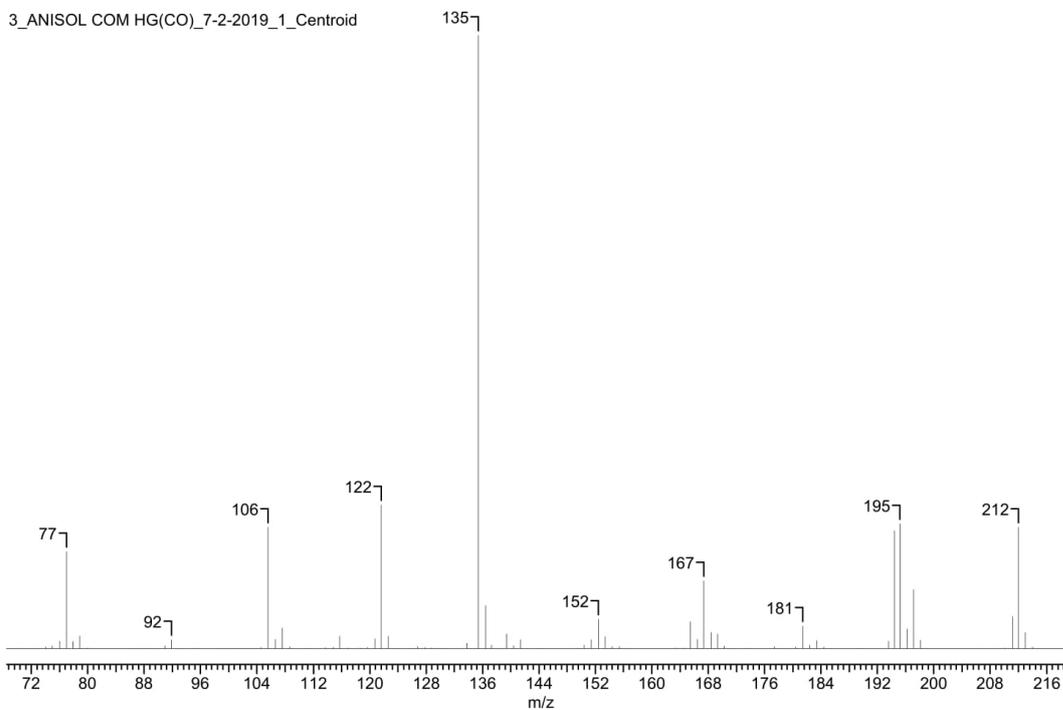
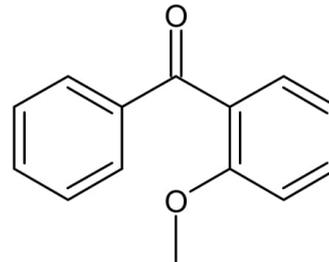
Figura 100 – Espectro de Massas; Reação Anisol com Hg[Co(SCN)<sub>4</sub>]; T.R.= 7.8; Ácido benzóico

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	50.100	2.629	36	101.700	0.001	71	482.200	0.001	106	788.600	0.001
2	51.000	4.127	37	105.300	33.948	72	492.300	0.000	107	797.400	0.001
3	52.000	0.585	38	106.200	2.117	73	506.100	0.001	108	800.500	0.001
4	53.000	0.267	39	107.300	0.103	74	508.000	0.001	109	803.600	0.001
5	54.000	0.064	40	108.200	0.001	75	528.500	0.001	110	804.300	0.001
6	55.100	0.042	41	119.800	0.001	76	534.000	0.001	111	806.100	0.001
7	57.100	0.001	42	122.000	31.163	77	538.600	0.001	112	820.100	0.001
8	60.000	0.065	43	122.900	2.076	78	539.300	0.001	113	821.300	0.001
9	61.100	0.222	44	123.900	0.163	79	548.000	0.001	114	824.100	0.001
10	62.100	0.153	45	124.900	0.001	80	549.400	0.001	115	825.800	0.001
11	63.200	0.242	46	134.900	0.001	81	550.200	0.001	116	836.000	0.001
12	64.200	0.026	47	138.200	0.001	82	562.600	0.001	117	862.800	0.001
13	65.200	0.561	48	153.000	0.001	83	564.300	0.001	118	873.300	0.001
14	66.200	0.453	49	159.400	0.001	84	565.400	0.001	119	874.100	0.001
15	67.200	0.032	50	160.900	0.001	85	570.000	0.000	120	883.200	0.001
16	68.100	0.007	51	162.400	0.001	86	585.800	0.001	121	884.000	0.001
17	70.200	0.001	52	179.000	0.001	87	586.700	0.001	122	894.600	0.001
18	71.300	0.001	53	189.200	0.001	88	606.400	0.000	123	899.600	0.001
19	72.200	0.006	54	228.900	0.001	89	612.400	0.001	124	900.300	0.001
20	73.200	0.240	55	234.700	0.001	90	617.300	0.001	125	919.600	0.001
21	74.200	1.309	56	239.100	0.001	91	622.700	0.001	126	920.400	0.001
22	75.200	0.564	57	240.500	0.001	92	633.500	0.001	127	923.600	0.001
23	76.200	0.895	58	280.800	0.001	93	637.400	0.001	128	924.500	0.001
24	77.100	15.864	59	283.600	0.001	94	647.900	0.001	129	925.200	0.001
25	78.000	1.163	60	304.900	0.001	95	685.400	0.001	130	926.600	0.001
26	79.100	0.216	61	361.600	0.001	96	686.300	0.001	131	942.000	0.001
27	80.000	0.011	62	408.700	0.001	97	694.600	0.001	132	947.400	0.001
28	84.000	0.001	63	418.600	0.001	98	695.500	0.001	133	951.700	0.001
29	85.200	0.000	64	419.400	0.001	99	696.700	0.001	134	952.300	0.001
30	89.000	0.008	65	429.800	0.001	100	711.900	0.001	135	957.000	0.001
31	91.100	0.001	66	442.800	0.001	101	714.100	0.001	136	957.900	0.001
32	93.100	0.043	67	443.800	0.001	102	717.700	0.001	137	962.100	0.001
33	94.100	0.451	68	445.400	0.001	103	743.000	0.001	138	967.200	0.001
34	95.100	0.103	69	455.600	0.001	104	746.700	0.001			
35	96.000	0.001	70	465.200	0.001	105	762.900	0.001			

Figura 101 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $Hg[Co(SCN)_4]$ ; T.R.= 7.8; Ácido benzóico (continuação)

Anisol com Hg[Co(SCN)<sub>4</sub>]

<b>Count</b>	195	<b>Data Type</b>	Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 06:05 am
<b>File Name</b>	3_ANISOL.COM HG(CO)_7-2-2019_1_Centroid	<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	15.402	<b>Scan</b>	422
<b>Total Signal</b>	152810	<b>TIC</b>			325.91



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.000	15.802	7408.991
2	105.600	19.784	9275.988
3	121.600	23.435	10987.986
4	135.400	100.000	46886.941
5	167.400	11.029	5170.994
6	194.400	19.242	9021.988
7	195.200	20.308	9521.988
8	212.000	19.799	9282.987

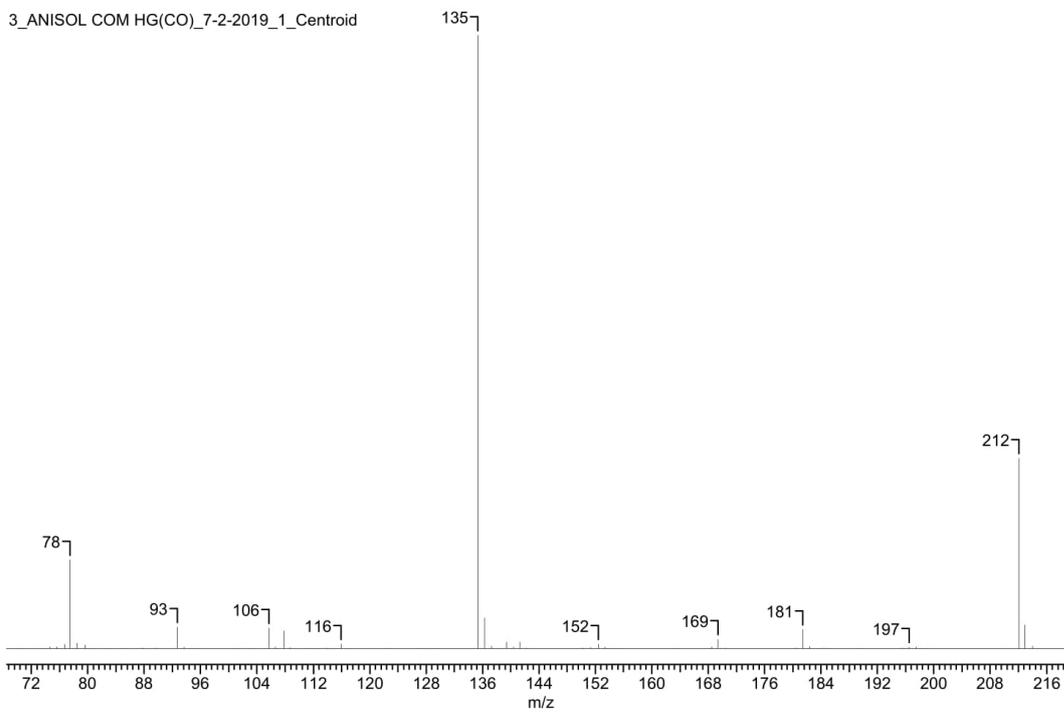
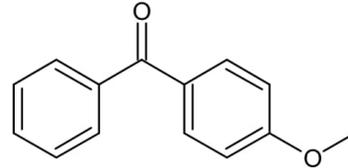
Figura 102 – Espectro de Massas; Reação Anisol com Hg[Co(SCN)<sub>4</sub>]; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	49.900	0.484	51	119.700	0.071	101	193.600	0.382	151	594.500	0.001
2	50.900	1.656	52	120.700	0.494	102	194.400	5.904	152	595.400	0.002
3	51.900	0.099	53	121.600	7.191	103	195.200	6.231	153	613.800	0.001
4	53.000	0.039	54	122.600	0.626	104	196.200	0.979	154	615.100	0.001
5	54.000	0.002	55	123.800	0.001	105	197.100	2.949	155	616.000	0.001
6	55.100	0.001	56	125.700	0.010	106	198.100	0.421	156	618.400	0.002
7	57.500	0.003	57	126.800	0.098	107	199.400	0.001	157	639.900	0.001
8	60.900	0.040	58	127.800	0.058	108	207.200	0.001	158	641.700	0.002
9	61.900	0.099	59	128.800	0.043	109	209.300	0.002	159	658.500	0.002
10	63.000	0.554	60	129.700	0.012	110	210.100	0.030	160	660.300	0.002
11	63.900	0.415	61	130.800	0.001	111	211.200	1.610	161	674.500	0.001
12	65.000	0.128	62	133.200	0.010	112	212.000	6.075	162	681.900	0.001
13	66.000	0.012	63	133.800	0.274	113	213.000	0.819	163	686.200	0.002
14	66.700	0.001	64	135.400	30.683	114	214.000	0.087	164	687.600	0.001
15	69.500	0.012	65	136.400	2.146	115	227.500	0.002	165	709.300	0.001
16	70.600	0.001	66	137.300	0.191	116	228.200	0.002	166	741.000	0.002
17	71.900	0.002	67	138.300	0.002	117	231.800	0.001	167	746.900	0.001
18	73.000	0.002	68	139.400	0.735	118	237.300	0.001	168	761.800	0.002
19	74.000	0.096	69	140.400	0.148	119	349.700	0.001	169	764.700	0.002
20	75.000	0.128	70	141.400	0.461	120	365.700	0.001	170	794.700	0.001
21	76.000	0.382	71	142.400	0.021	121	390.900	0.001	171	796.500	0.002
22	77.000	4.848	72	144.400	0.001	122	391.800	0.001	172	817.100	0.002
23	77.900	0.353	73	149.200	0.002	123	401.100	0.002	173	832.900	0.002
24	78.900	0.633	74	150.400	0.181	124	403.100	0.001	174	840.900	0.001
25	80.000	0.029	75	151.400	0.461	125	404.300	0.001	175	841.900	0.001
26	86.000	0.001	76	152.400	1.461	126	405.100	0.001	176	843.200	0.001
27	87.900	0.001	77	153.400	0.599	127	439.300	0.001	177	844.300	0.001
28	88.900	0.020	78	154.400	0.113	128	441.000	0.002	178	846.500	0.001
29	91.000	0.147	79	155.400	0.104	129	457.100	0.001	179	854.000	0.002
30	91.900	0.457	80	156.500	0.001	130	461.000	0.001	180	874.600	0.001
31	92.900	0.019	81	163.300	0.027	131	462.000	0.001	181	893.300	0.001
32	95.000	0.009	82	164.600	0.044	132	467.600	0.001	182	894.100	0.001
33	96.000	0.001	83	165.500	1.357	133	477.500	0.001	183	895.200	0.001
34	98.300	0.001	84	166.500	0.479	134	480.000	0.001	184	896.100	0.001
35	100.500	0.002	85	167.400	3.384	135	480.800	0.001	185	910.200	0.001
36	101.600	0.002	86	168.400	0.803	136	481.700	0.001	186	910.900	0.002
37	102.600	0.010	87	169.300	0.733	137	489.600	0.001	187	911.600	0.001
38	103.800	0.001	88	170.300	0.122	138	491.400	0.001	188	916.100	0.001
39	104.600	0.051	89	171.300	0.010	139	492.300	0.001	189	917.600	0.001
40	105.600	6.070	90	173.400	0.002	140	493.700	0.001	190	942.300	0.002
41	106.600	0.486	91	177.400	0.098	141	514.000	0.001	191	946.200	0.002
42	107.600	1.043	92	178.300	0.011	142	515.800	0.001	192	947.300	0.001
43	108.600	0.103	93	179.400	0.002	143	556.400	0.001	193	948.000	0.001
44	110.600	0.001	94	180.400	0.082	144	558.700	0.001	194	961.800	0.001
45	111.600	0.021	95	181.400	1.141	145	573.500	0.002	195	1000.000	0.001
46	113.700	0.053	96	182.400	0.173	146	579.300	0.001			
47	114.800	0.050	97	183.400	0.396	147	580.400	0.001			
48	115.700	0.632	98	184.400	0.088	148	582.200	0.001			
49	116.900	0.046	99	185.600	0.005	149	584.200	0.001			
50	118.700	0.027	100	189.500	0.002	150	592.900	0.002			

Figura 103 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $Hg[Co(SCN)_4]$ ; T.R.= 15.4; o-metoxibenzofenona (continuação)

Anisol com Hg[Co(SCN)<sub>4</sub>]

<b>Count</b>	194	<b>Data Type</b>	Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 06:05 am
<b>File Name</b>	3_ANISOL.COM HG(CO)_7-2-2019_1_Centroid	<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	16.878	<b>Scan</b>	477
<b>Total Signal</b>	2984575	<b>TIC</b>			186.41



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.500	14.433	231087.750
2	135.300	100.000	1601116.250
3	212.100	31.037	496942.469

Figura 104 – Espectro de Massas; Reação Anisol com Hg[Co(SCN)<sub>4</sub>]; T.R.= 16.9; p-metoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)									
1	50.200	0.375	50	112.900	0.001	99	252.000	0.001	148	656.700	0.000
2	51.200	0.846	51	113.900	0.043	100	253.600	0.001	149	658.000	0.001
3	52.200	0.031	52	114.900	0.021	101	258.800	0.001	150	678.500	0.001
4	53.200	0.048	53	115.900	0.392	102	269.000	0.001	151	679.300	0.001
5	54.200	0.001	54	116.800	0.037	103	272.700	0.001	152	680.200	0.001
6	56.900	0.001	55	119.700	0.022	104	274.200	0.001	153	684.400	0.001
7	57.800	0.001	56	120.800	0.010	105	275.500	0.001	154	689.400	0.001
8	59.300	0.001	57	122.500	0.001	106	279.100	0.001	155	699.700	0.001
9	60.500	0.001	58	126.600	0.009	107	279.900	0.001	156	700.400	0.001
10	61.300	0.007	59	127.600	0.023	108	300.200	0.001	157	721.000	0.000
11	62.400	0.100	60	128.900	0.001	109	316.000	0.001	158	725.900	0.001
12	63.400	0.787	61	129.600	0.001	110	316.900	0.001	159	727.000	0.001
13	64.400	0.778	62	135.300	53.646	111	336.800	0.001	160	729.400	0.001
14	65.400	0.092	63	136.300	2.705	112	338.800	0.001	161	730.500	0.001
15	66.400	0.007	64	137.300	0.244	113	341.900	0.001	162	732.200	0.000
16	67.500	0.008	65	138.300	0.007	114	346.900	0.001	163	746.600	0.001
17	68.400	0.001	66	139.400	0.571	115	352.700	0.001	164	761.200	0.001
18	70.100	0.007	67	140.400	0.165	116	362.400	0.001	165	762.500	0.001
19	71.100	0.001	68	141.300	0.589	117	363.800	0.001	166	767.500	0.001
20	73.300	0.001	69	142.300	0.056	118	366.900	0.001	167	790.400	0.001
21	74.600	0.143	70	150.300	0.071	119	367.600	0.001	168	791.200	0.001
22	75.600	0.149	71	151.300	0.100	120	368.700	0.001	169	791.900	0.001
23	76.700	0.366	72	152.400	0.418	121	394.400	0.001	170	792.600	0.001
24	77.500	7.743	73	153.400	0.169	122	395.200	0.001	171	794.200	0.001
25	78.500	0.505	74	154.300	0.012	123	398.600	0.001	172	813.200	0.001
26	79.600	0.315	75	155.500	0.004	124	400.100	0.001	173	831.200	0.001
27	80.500	0.007	76	163.300	0.001	125	402.900	0.001	174	845.200	0.001
28	81.700	0.008	77	167.500	0.011	126	463.000	0.001	175	855.400	0.001
29	83.500	0.001	78	168.500	0.160	127	469.800	0.001	176	857.100	0.001
30	84.800	0.001	79	169.400	0.832	128	480.100	0.001	177	882.400	0.001
31	85.500	0.001	80	170.400	0.069	129	485.600	0.001	178	889.100	0.001
32	86.700	0.007	81	180.500	0.070	130	521.900	0.001	179	890.900	0.001
33	87.800	0.043	82	181.400	1.685	131	534.100	0.001	180	892.500	0.001
34	88.800	0.021	83	182.400	0.211	132	553.000	0.001	181	893.200	0.001
35	89.700	0.065	84	183.400	0.022	133	568.400	0.001	182	901.100	0.001
36	92.700	1.874	85	184.400	0.049	134	574.300	0.000	183	902.700	0.001
37	93.700	0.144	86	185.400	0.006	135	584.600	0.001	184	903.700	0.001
38	94.700	0.013	87	188.300	0.001	136	594.800	0.001	185	913.500	0.001
39	95.700	0.031	88	189.700	0.001	137	611.000	0.001	186	916.900	0.000
40	98.500	0.001	89	195.500	0.081	138	614.800	0.001	187	918.400	0.001
41	100.600	0.001	90	196.500	0.146	139	615.800	0.001	188	944.800	0.001
42	102.500	0.013	91	197.500	0.132	140	617.100	0.001	189	961.300	0.001
43	103.700	0.001	92	198.200	0.006	141	621.100	0.001	190	965.700	0.001
44	105.700	1.792	93	199.100	0.000	142	641.800	0.001	191	992.500	0.001
45	106.600	0.165	94	210.200	0.001	143	642.500	0.000	192	995.800	0.001
46	107.800	1.569	95	212.100	16.650	144	645.400	0.000	193	997.100	0.001
47	108.700	0.107	96	212.900	2.049	145	646.600	0.001	194	998.000	0.001
48	110.900	0.001	97	214.000	0.241	146	652.700	0.001			
49	111.900	0.002	98	214.900	0.008	147	654.500	0.001			

Figura 105 – Espectro de Massas; Reação Anisol com  $Hg[Co(SCN)_4]$ ; T.R.= 16.9; p-metoxibenzofenona (continuação)

## B.2 Isopropoxibenzeno

### B.2.1 ZnO

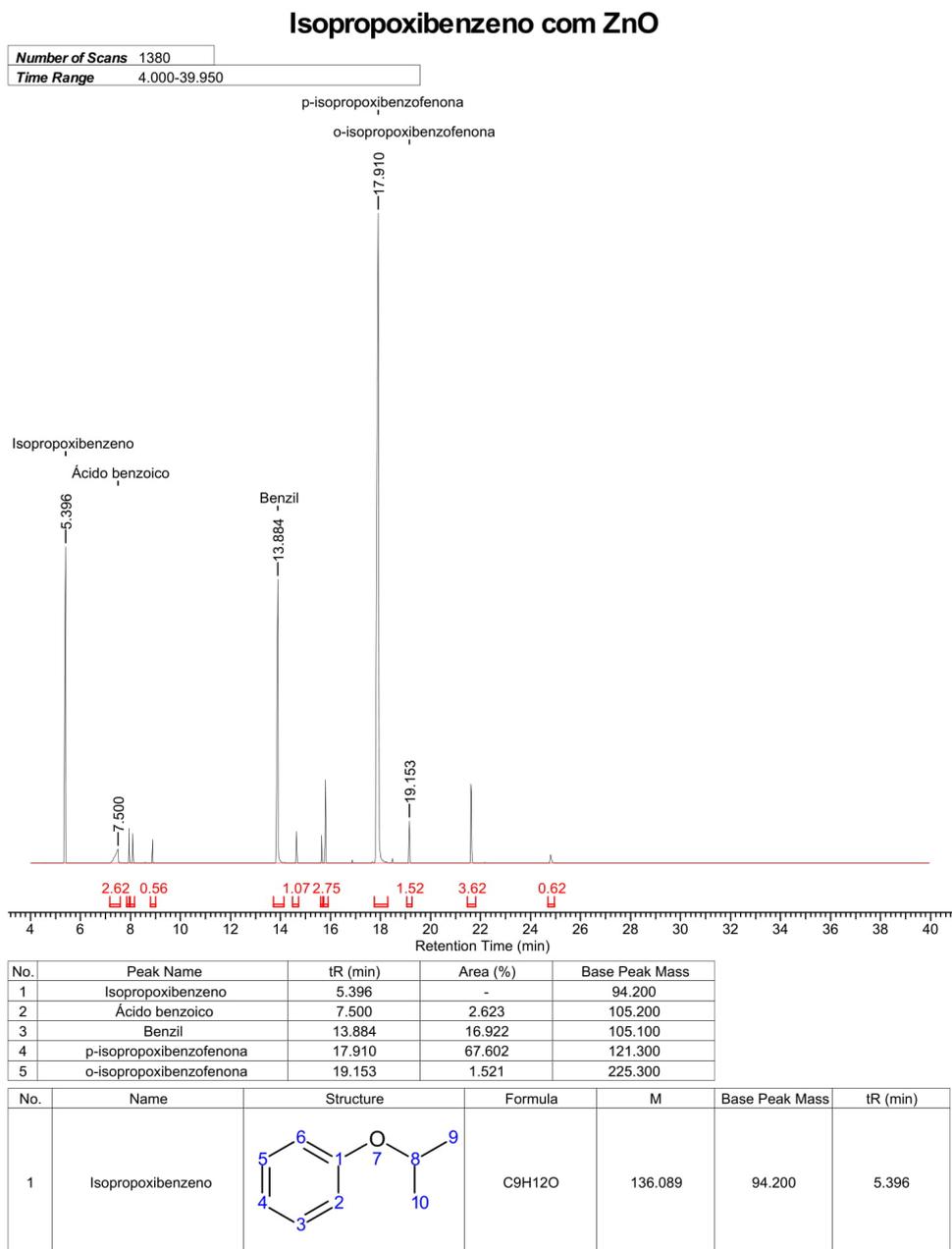


Figura 106 – Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com ZnO

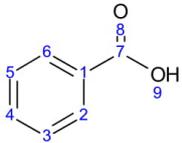
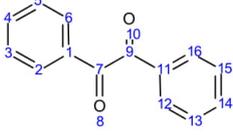
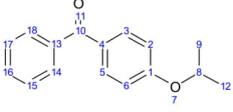
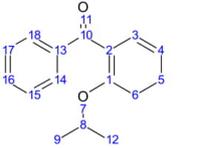
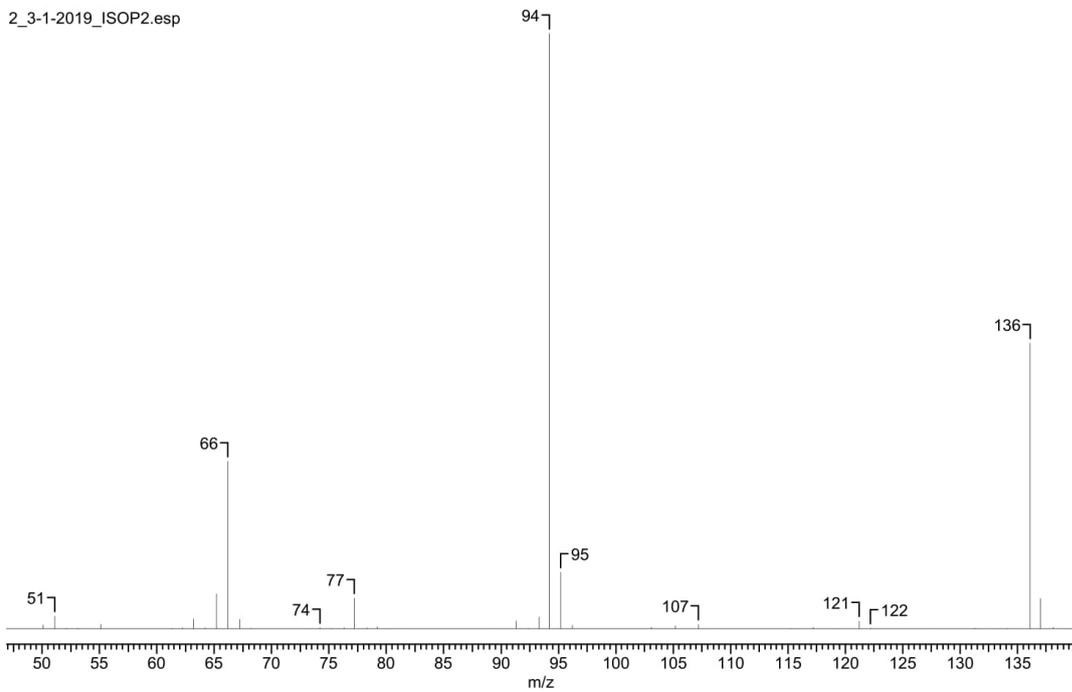
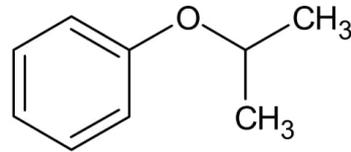
No.	Name	Structure	Formula	M	Base Peak Mass	tR (min)
2	Ácido benzoico		C7H6O2	122.037	105.200	7.500
3	Benzil		C14H10O2	210.068	105.100	13.884
4	p-isopropoxibenzofenona		C16H16O2	240.115	121.300	17.910
5	o-isopropoxibenzofenona		C16H18O2	242.131	225.300	19.153

Figura 107 – Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com ZnO (continuação)

## Isopropoxibenzeno com ZnO

<b>Formula</b>	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	<b>FW</b>	136.1910
<b>Count</b>	62	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	2_3-1-2019_ISOP. ZNO BRUTO 1	<b>Date</b>	01 Mar 19 01:25 pm
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>Total Signal</b>	13664576	<b>Retention Time</b>	5.396
		<b>Scan</b>	54
		<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
		<b>TIC</b>	220.55



No.	m/z	RI(%)	DI
1	66.200	28.165	1745004.125
2	94.200	100.000	6195603.500
3	136.100	48.009	2974477.250

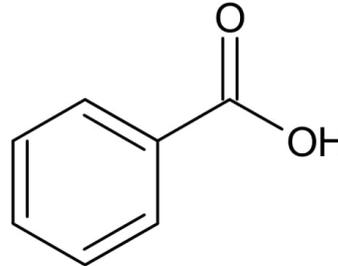
Figura 108 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com ZnO; T.R.= 5.4; Isopropoxibenzeno

No.	m/z	TIC(%)
1	50.100	0.306
2	51.100	0.977
3	52.100	0.069
4	53.100	0.060
5	55.100	0.345
6	61.300	0.071
7	62.200	0.097
8	63.200	0.759
9	64.200	0.104
10	65.200	2.684
11	66.200	12.770
12	67.200	0.719
13	68.200	0.034
14	73.300	0.002
15	74.200	0.080
16	75.200	0.068
17	76.300	0.078
18	77.200	2.355
19	78.300	0.095
20	79.200	0.170
21	80.300	0.011
22	81.400	0.008
23	89.300	0.010
24	91.300	0.624
25	92.400	0.058
26	93.300	0.901
27	94.200	45.341
28	95.200	4.324
29	96.200	0.283
30	97.200	0.001
31	103.100	0.116
32	104.000	0.013
33	105.200	0.229
34	107.200	0.361
35	108.200	0.020
36	115.300	0.069
37	117.200	0.124
38	119.300	0.003
39	121.200	0.603
40	122.200	0.036
41	127.200	0.019
42	131.300	0.053
43	133.200	0.028
44	134.100	0.055
45	136.100	21.768
46	137.000	2.323
47	138.100	0.118
48	139.100	0.005
49	143.100	0.004
50	145.100	0.165
51	146.100	0.018
52	147.100	0.034
53	149.100	0.065
54	153.200	0.047
55	155.100	0.002
56	155.900	0.003
57	159.200	0.069
58	171.100	0.207
59	172.100	0.013
60	197.100	0.006
61	227.300	0.017
62	243.000	0.002

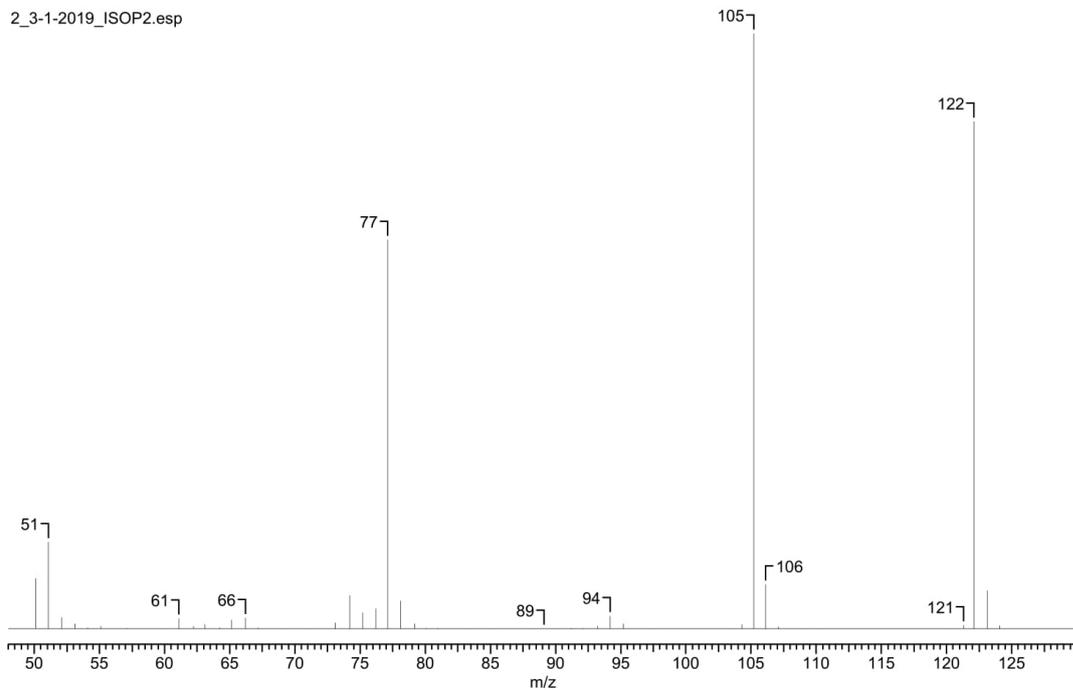
Figura 109 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $ZnO$ ; T.R.= 5.4; Isopropoxibenzeno(continuação)

## Isopropoxibenzeno com ZnO

<b>Formula</b>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	122.1213
<b>Count</b>	62	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	2_3-1-2019_ISOP.ZNO BRUTO 1	<b>Date</b>	01 Mar 19 01:25 pm
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>Total Signal</b>	597045	<b>Retention Time</b>	7.500
		<b>Scan</b>	140
		<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
		<b>TIC</b>	322.73



2\_3-1-2019\_ISOP2.esp



No.	m/z	RI(%)	DI
1	51.100	14.601	27012.002
2	77.100	65.334	120866.008
3	105.200	100.000	184998.016
4	122.100	85.153	157532.000

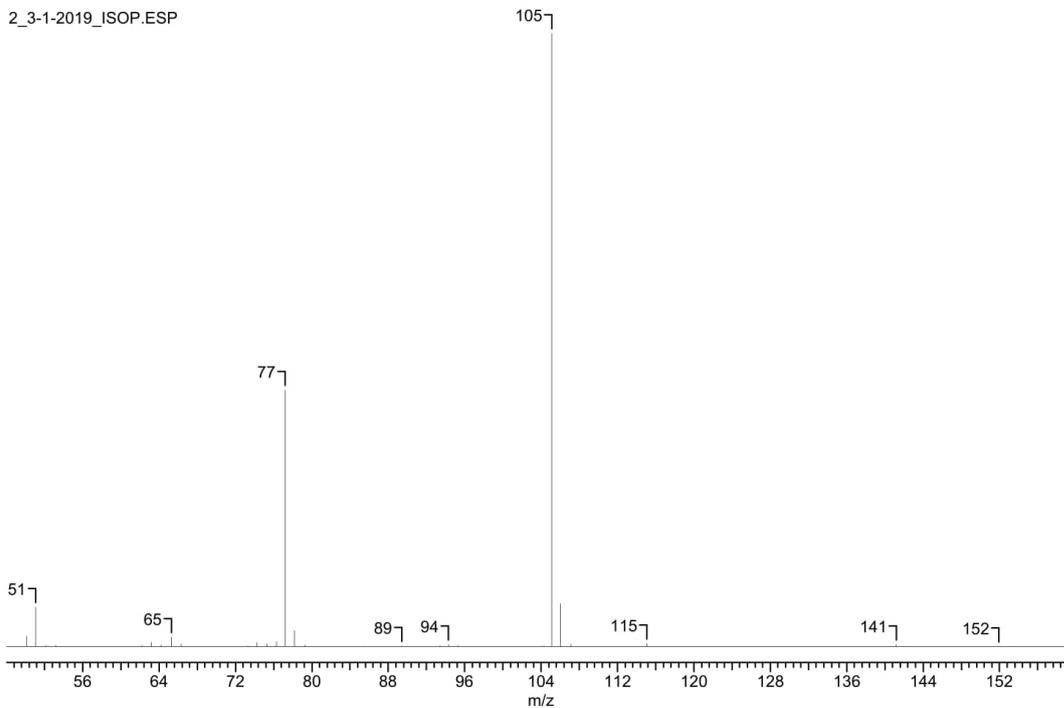
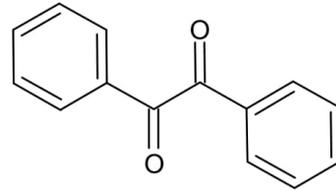
Figura 110 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com ZnO; T.R.=7.5; Ácido benzóico

No.	m/z	TIC(%)
1	50.100	2.625
2	51.100	4.524
3	52.100	0.588
4	53.100	0.263
5	54.100	0.050
6	55.100	0.142
7	57.100	0.030
8	60.000	0.018
9	61.100	0.547
10	62.200	0.128
11	63.100	0.244
12	64.200	0.054
13	65.100	0.463
14	66.200	0.564
15	67.200	0.052
16	68.300	0.000
17	69.300	0.007
18	70.100	0.016
19	71.200	0.001
20	73.100	0.313
21	74.200	1.721
22	75.200	0.845
23	76.200	1.060
24	77.100	20.244
25	78.100	1.447
26	79.200	0.274
27	80.100	0.036
28	81.000	0.041
29	83.200	0.001
30	85.100	0.006
31	86.100	0.000
32	88.100	0.000
33	89.100	0.015
34	90.200	0.010
35	91.200	0.031
36	92.100	0.026
37	93.200	0.149
38	94.200	0.672
39	95.200	0.265
40	97.300	0.001
41	99.200	0.005
42	100.900	0.015
43	103.400	0.001
44	104.300	0.240
45	105.200	30.986
46	106.100	2.307
47	107.100	0.124
48	109.100	0.005
49	110.200	0.012
50	120.200	0.001
51	121.300	0.199
52	122.100	26.385
53	123.100	1.991
54	124.100	0.158
55	125.100	0.001
56	130.000	0.003
57	133.400	0.007
58	135.200	0.016
59	136.000	0.001
60	149.000	0.033
61	150.000	0.014
62	179.100	0.025

Figura 111 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com ZnO; T.R.=7.5; Ácido benzóico (continuação)

## Isopropoxibenzeno com ZnO

<b>Count</b>	64	<b>Data Type</b>	Centroid	<b>Date</b>	01 Mar 19 01:25 pm	
<b>File Name</b>	2_3-1-2019_ISOP_ZNO_BRUTO_1	<b>Centroid</b>	1	<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b> Varian Saturn
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	13.884	<b>Scan</b>	385	<b>TIC</b> 170.40
<b>Total Signal</b>	12263058					



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.200	41.830	3010341.000
2	105.100	100.000	7196556.000

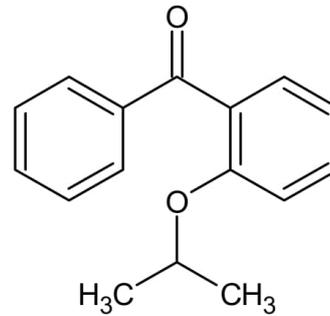
Figura 112 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com ZnO; T.R.= 13.9; Benzil

No.	m/z	TIC(%)
1	50.100	0.986
2	51.100	3.776
3	52.100	0.119
4	53.200	0.098
5	54.200	0.005
6	61.200	0.009
7	62.200	0.132
8	63.200	0.407
9	64.200	0.142
10	65.300	0.902
11	66.300	0.252
12	67.200	0.003
13	73.300	0.046
14	74.200	0.410
15	75.300	0.249
16	76.300	0.504
17	77.200	24.548
18	78.200	1.547
19	79.300	0.164
20	80.200	0.003
21	85.300	0.012
22	89.400	0.086
23	90.200	0.001
24	91.300	0.021
25	92.400	0.006
26	93.400	0.129
27	94.300	0.195
28	95.300	0.133
29	98.500	0.003
30	102.400	0.004
31	104.300	0.050
32	105.100	58.685
33	106.000	4.119
34	107.100	0.240
35	108.000	0.001
36	113.100	0.012
37	114.000	0.001
38	115.100	0.300
39	116.200	0.023
40	121.100	0.010
41	139.100	0.028
42	140.100	0.001
43	141.200	0.204
44	142.100	0.001
45	143.000	0.001
46	151.900	0.012
47	153.200	0.001
48	168.100	0.049
49	169.200	0.019
50	178.200	0.002
51	180.900	0.014
52	182.100	0.001
53	191.500	0.000
54	193.300	0.003
55	195.100	0.023
56	196.300	0.039
57	197.100	0.178
58	197.800	0.819
59	198.900	0.191
60	200.000	0.004
61	202.800	0.003
62	216.000	0.009
63	275.000	0.060
64	276.100	0.009

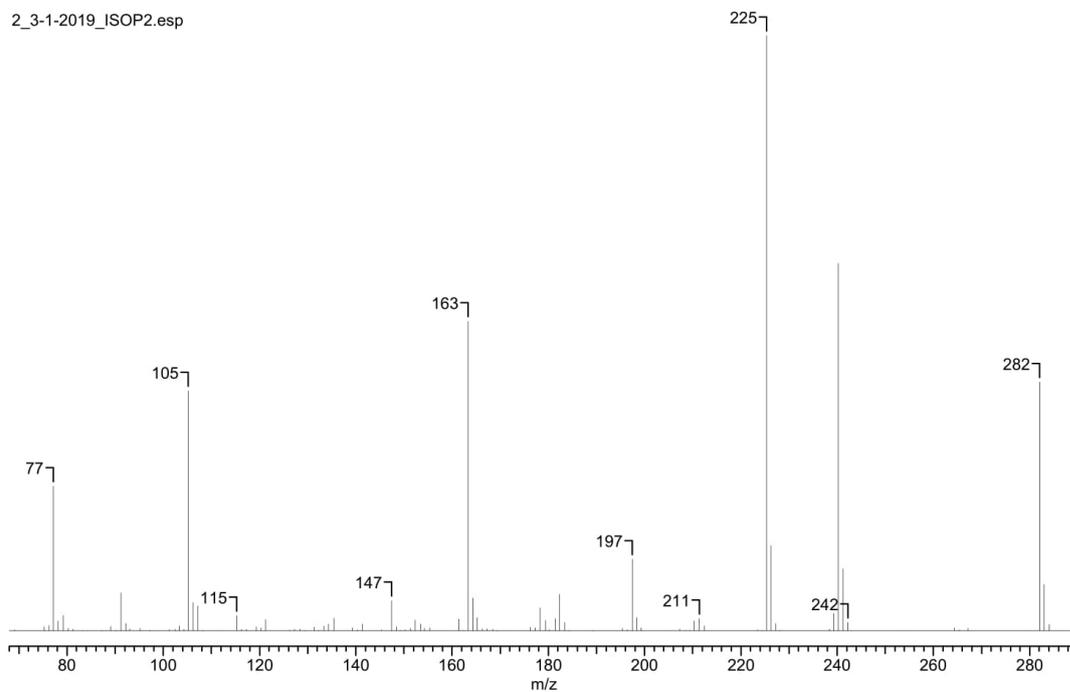
Figura 113 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $ZnO$ ; T.R.= 13.9; Benzil (continuação)

## Isopropoxibenzeno com ZnO

<b>Formula</b>	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	240.2970
<b>Count</b>	147	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	2_3-1-2019_ISOP.ZNO BRUTO 1	<b>Date</b>	01 Mar 19 01:25 pm
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>Total Signal</b>	1826574	<b>Retention Time</b>	19.153
		<b>Scan</b>	622
		<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
		<b>TIC</b>	468.62



2\_3-1-2019\_ISOP2.esp



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.200	24.297	94703.977
2	105.200	40.284	157019.969
3	163.300	51.970	202567.953
4	197.400	12.019	46847.988
5	225.300	100.000	389779.906
6	226.300	14.318	55808.988
7	240.200	61.692	240464.953
8	241.200	10.375	40440.988
9	282.100	41.802	162936.969

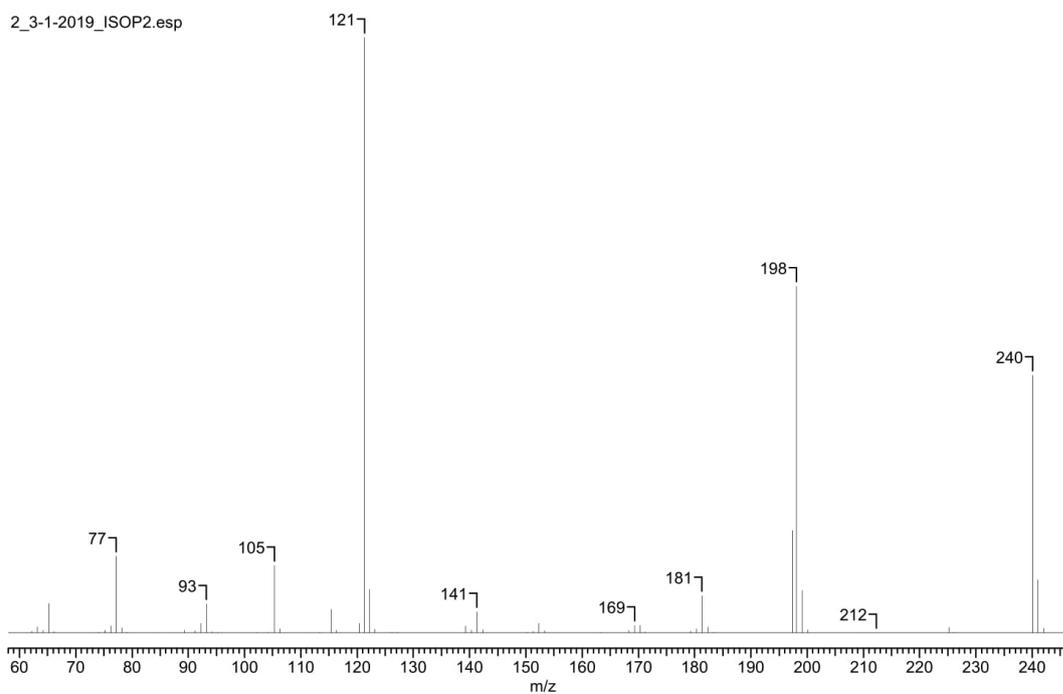
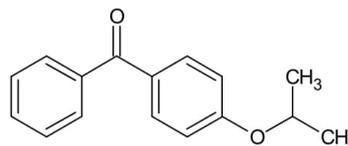
Figura 114 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com ZnO; T.R.= 19.2; o-isopropoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	50.100	0.070	39	101.200	0.040	77	148.400	0.151	115	199.300	0.107
2	51.100	0.558	40	102.400	0.062	78	149.300	0.029	116	200.400	0.001
3	52.100	0.044	41	103.300	0.175	79	150.300	0.040	117	205.500	0.005
4	53.100	0.031	42	104.300	0.051	80	151.300	0.086	118	207.300	0.073
5	55.100	0.191	43	105.200	8.596	81	152.300	0.387	119	208.500	0.029
6	56.000	0.001	44	106.200	1.012	82	153.400	0.258	120	209.400	0.028
7	57.200	0.001	45	107.200	0.895	83	154.300	0.100	121	210.300	0.364
8	62.200	0.000	46	108.200	0.026	84	155.400	0.110	122	211.400	0.449
9	63.200	0.102	47	109.300	0.011	85	157.300	0.005	123	212.400	0.185
10	64.100	0.058	48	111.400	0.014	86	161.400	0.424	124	213.200	0.001
11	65.200	0.394	49	112.300	0.000	87	162.400	0.024	125	223.500	0.042
12	66.100	0.013	50	115.300	0.556	88	163.300	11.090	126	224.400	0.023
13	67.100	0.005	51	116.300	0.062	89	164.300	1.170	127	225.300	21.339
14	69.100	0.037	52	117.300	0.065	90	165.300	0.483	128	226.300	3.055
15	70.200	0.006	53	118.300	0.011	91	166.300	0.076	129	227.300	0.276
16	73.300	0.001	54	119.300	0.147	92	167.200	0.081	130	228.200	0.018
17	74.100	0.006	55	120.300	0.114	93	168.400	0.056	131	238.400	0.057
18	75.200	0.142	56	121.300	0.408	94	169.400	0.016	132	239.300	0.627
19	76.200	0.198	57	122.300	0.006	95	170.300	0.014	133	240.200	13.165
20	77.200	5.185	58	125.300	0.002	96	175.400	0.006	134	241.200	2.214
21	78.200	0.351	59	126.300	0.016	97	176.300	0.130	135	242.200	0.307
22	79.200	0.547	60	127.300	0.053	98	177.300	0.113	136	243.100	0.009
23	80.200	0.095	61	128.400	0.065	99	178.300	0.821	137	254.300	0.004
24	81.200	0.051	62	129.400	0.031	100	179.400	0.368	138	264.300	0.104
25	83.300	0.024	63	131.300	0.131	101	180.200	0.046	139	265.400	0.037
26	84.300	0.005	64	132.300	0.026	102	181.400	0.440	140	267.200	0.103
27	87.200	0.018	65	133.400	0.187	103	182.400	1.311	141	268.200	0.002
28	88.100	0.010	66	134.300	0.257	104	183.400	0.298	142	280.500	0.008
29	89.100	0.158	67	135.400	0.460	105	184.300	0.024	143	282.100	8.920
30	90.200	0.024	68	136.300	0.006	106	189.300	0.026	144	283.000	1.664
31	91.200	1.365	69	139.300	0.115	107	190.400	0.009	145	284.100	0.230
32	92.200	0.269	70	140.300	0.036	108	191.300	0.004	146	285.100	0.002
33	93.100	0.071	71	141.400	0.247	109	193.400	0.007	147	474.400	0.009
34	95.200	0.086	72	142.400	0.002	110	194.300	0.002			
35	96.000	0.009	73	143.300	0.002	111	195.400	0.086			
36	97.200	0.020	74	144.400	0.001	112	196.400	0.036			
37	97.900	0.001	75	145.400	0.041	113	197.400	2.565			
38	99.200	0.004	76	147.400	1.085	114	198.300	0.480			

Figura 115 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com ZnO; T.R.= 19.2; o-isopropoxibenzofenona (continuação)

## Isopropoxibenzeno com ZnO

<b>Formula</b>	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	240.2970
<b>Count</b>	88	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	2_3-1-2019_ISOP_ZNO_BRUTO	<b>Date</b>	01 Mar 19 01:25 pm
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>Total Signal</b>	28075924	<b>Retention Time</b>	17.910
		<b>Scan</b>	555
		<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
		<b>TIC</b>	317.20



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.200	12.885	1140474.125
2	105.300	11.332	1003014.063
3	121.300	100.000	8851110.000
4	197.400	17.212	1523410.125
5	198.100	58.232	5154206.500
6	240.100	43.283	3831030.250

Figura 116 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com ZnO; T.R.= 17.9; p-isopropoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	50.100	0.258	24	92.200	0.506	47	126.200	0.040	70	181.300	1.972
2	51.100	0.705	25	93.200	1.526	48	127.200	0.023	71	182.300	0.313
3	52.100	0.044	26	94.200	0.070	49	137.200	0.002	72	183.400	0.042
4	53.100	0.036	27	95.200	0.039	50	139.300	0.367	73	196.400	0.003
5	54.000	0.001	28	98.200	0.003	51	140.300	0.142	74	197.400	5.426
6	55.000	0.001	29	99.400	0.003	52	141.300	1.110	75	198.100	18.358
7	62.200	0.083	30	101.200	0.001	53	142.300	0.168	76	199.100	2.255
8	63.100	0.332	31	102.300	0.036	54	143.200	0.014	77	200.100	0.178
9	64.200	0.145	32	103.300	0.021	55	150.300	0.039	78	201.200	0.007
10	65.200	1.552	33	104.200	0.037	56	151.300	0.088	79	209.400	0.003
11	66.200	0.050	34	105.300	3.573	57	152.300	0.492	80	211.200	0.003
12	71.000	0.009	35	106.300	0.223	58	153.300	0.113	81	212.300	0.004
13	74.100	0.025	36	107.300	0.004	59	154.400	0.001	82	225.200	0.304
14	75.200	0.131	37	111.300	0.019	60	155.200	0.002	83	226.100	0.038
15	76.200	0.359	38	113.300	0.029	61	161.300	0.019	84	238.500	0.014
16	77.200	4.062	39	114.400	0.008	62	163.300	0.041	85	240.100	13.645
17	78.200	0.271	40	115.400	1.258	63	166.200	0.005	86	241.000	2.811
18	79.200	0.042	41	116.400	0.126	64	168.300	0.140	87	242.100	0.241
19	84.300	0.008	42	119.400	0.012	65	169.300	0.399	88	243.100	0.001
20	87.200	0.018	43	120.400	0.504	66	170.300	0.388			
21	88.200	0.019	44	121.300	31.526	67	171.200	0.059			
22	89.300	0.127	45	122.200	2.306	68	179.300	0.080			
23	91.200	0.126	46	123.200	0.188	69	180.300	0.228			

Figura 117 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com ZnO; T.R.= 17.9; p-isopropoxibenzofenona (continuação)

## B.2.2 $Co(acac)_2$

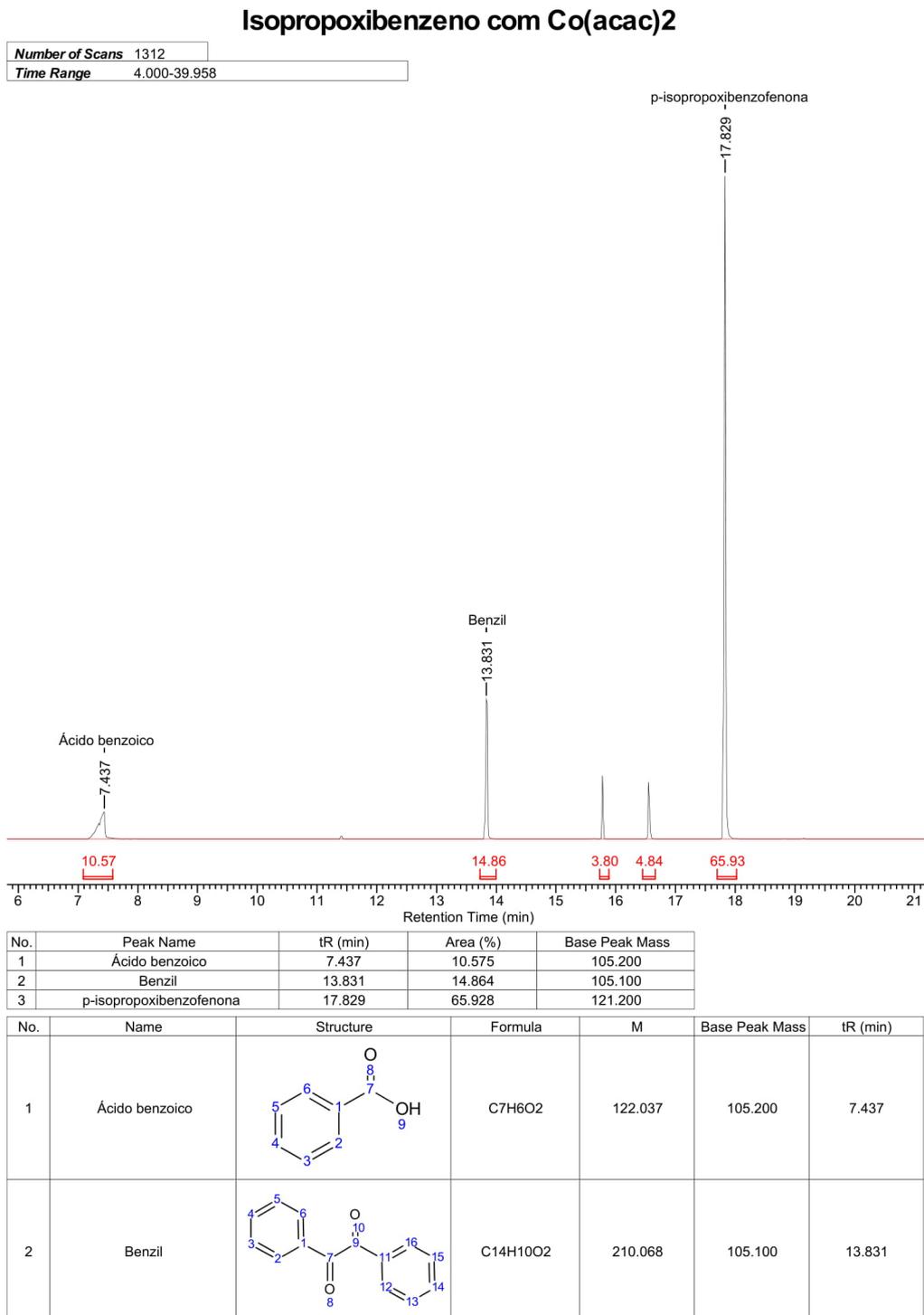


Figura 118 – Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com  $Co(acac)_2$

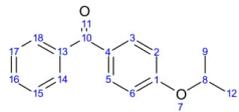
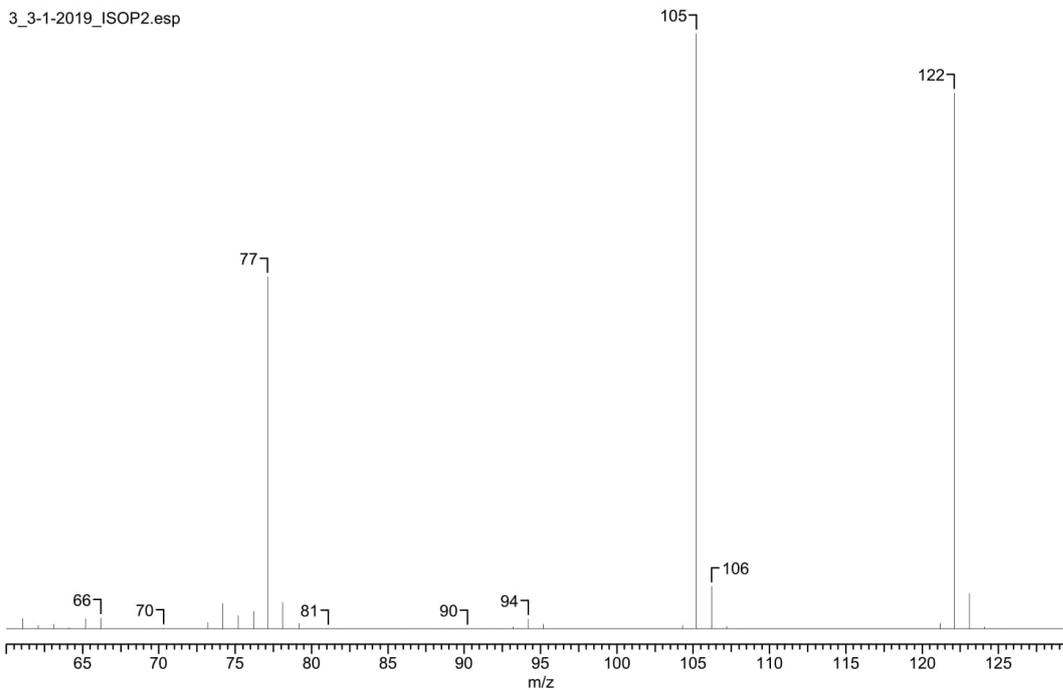
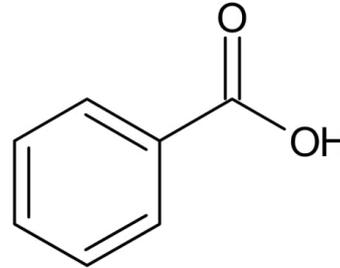
No.	Name	Structure	Formula	M	Base Peak Mass	tR (min)
3	Structure 1		C16H16O2	240.115	121.200	17.829

Figura 119 – Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com  $Co(acac)_2$  (continuação)

## Isopropoxibenzeno com Co(Acac)2

<b>Formula</b>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	122.1213
<b>Count</b>	63	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	3_3-1-2019_ISOP. CO(ACAC)2 BRUTO 1	<b>Date</b>	01 Mar 19 02:10 pm
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>TIC</b>	317.08	<b>Retention Time</b>	7.437
		<b>Scan</b>	130
		<b>Total Signal</b>	428202



No.	m/z	RI(%)	DI
1	51.100	14.225	19209.998
2	77.100	59.134	79856.984
3	105.200	100.000	135043.984
4	122.100	90.034	121584.984

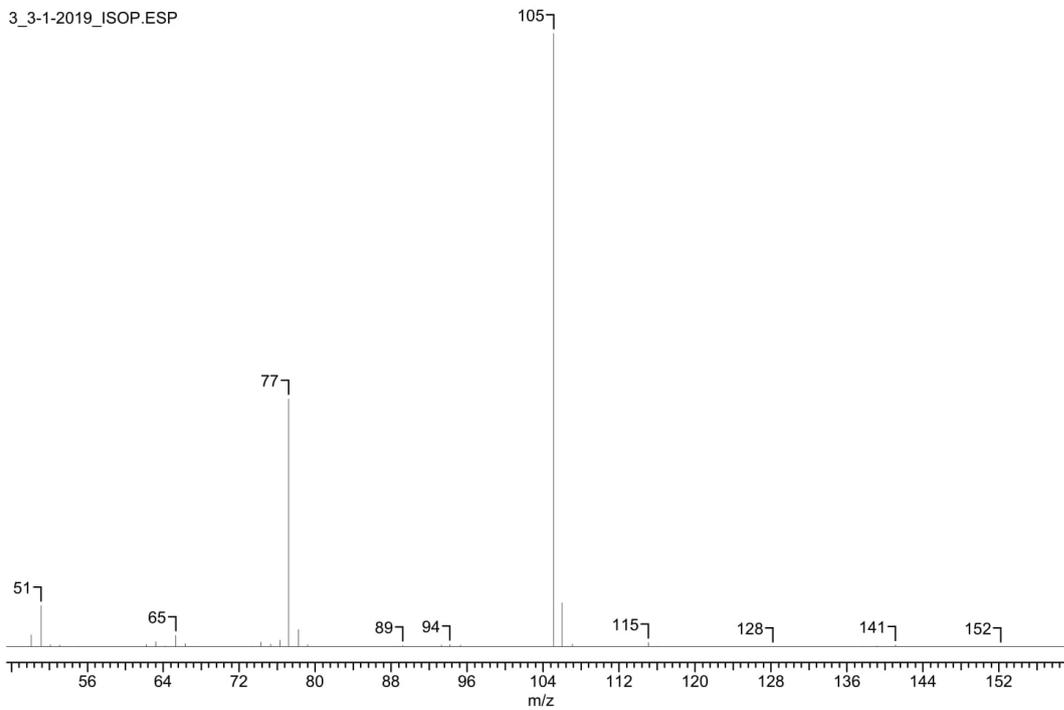
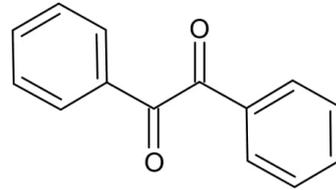
Figura 120 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $Co(acac)_2$ ; T.R.= 7.4; Ácido benzóico

No.	m/z	TIC(%)
1	50.100	2.407
2	51.100	4.486
3	52.100	0.884
4	53.100	0.322
5	54.100	0.041
6	55.100	0.059
7	56.100	0.002
8	57.200	0.016
9	59.200	0.004
10	60.100	0.005
11	61.100	0.563
12	62.100	0.183
13	63.100	0.232
14	64.100	0.062
15	65.200	0.550
16	66.200	0.566
17	67.200	0.007
18	68.100	0.018
19	69.300	0.004
20	70.300	0.038
21	73.200	0.344
22	74.200	1.363
23	75.200	0.694
24	76.200	0.938
25	77.100	18.649
26	78.100	1.412
27	79.200	0.290
28	80.200	0.011
29	81.100	0.016
30	82.100	0.007
31	86.000	0.000
32	88.000	0.001
33	89.100	0.016
34	90.200	0.020
35	91.100	0.005
36	92.200	0.010
37	93.200	0.125
38	94.200	0.514
39	95.200	0.233
40	96.200	0.016
41	97.200	0.003
42	100.000	0.018
43	103.300	0.009
44	104.300	0.178
45	105.200	31.537
46	106.200	2.252
47	107.200	0.134
48	108.100	0.000
49	119.300	0.010
50	121.200	0.294
51	122.100	28.394
52	123.100	1.885
53	124.100	0.121
54	125.100	0.001
55	135.100	0.009
56	148.100	0.000
57	163.100	0.018
58	175.200	0.002
59	179.100	0.012
60	197.000	0.001
61	253.100	0.000
62	281.100	0.004
63	351.100	0.003

Figura 121 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $Co(acac)_2$ ; T.R.= 7.4; Ácido benzóico (continuação)

Isopropoxibenzeno com Co(acac)<sub>2</sub>

<b>Count</b>	53	<b>Data Type</b>	Centroid	<b>Date</b>	01 Mar 19 02:10 pm		
<b>File Name</b>	3_3-1-2019_ISOP_CO(ACAC)2_BRUTO_1_Centroid			<b>Inlet Model</b>	GC		
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	13.831	<b>Scan</b>	365
<b>TIC</b>	170.97	<b>Total Signal</b>	2194004				



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.200	40.366	518004.094
2	105.100	100.000	1283260.125

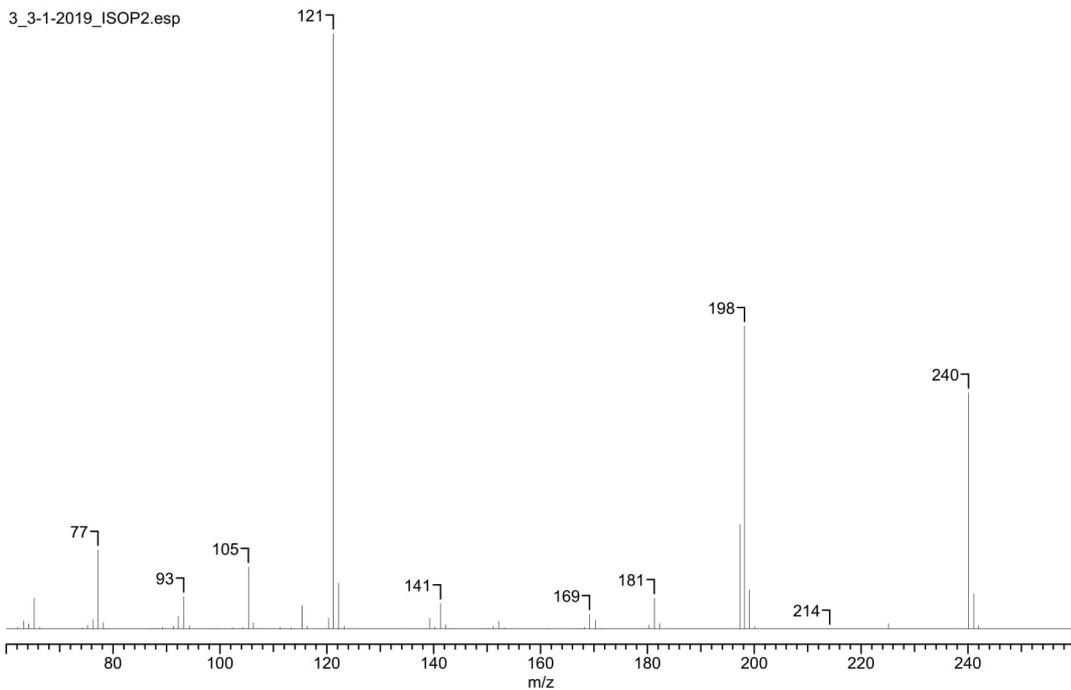
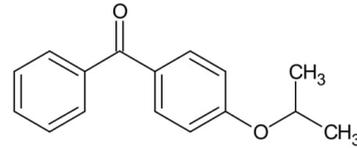
Figura 122 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $Co(acac)_2$ ; T.R.= 13.8; Benzil

No.	m/z	TIC(%)
1	50.100	1.124
2	51.100	3.922
3	52.100	0.204
4	53.100	0.143
5	54.000	0.003
6	55.100	0.031
7	61.100	0.039
8	62.200	0.201
9	63.200	0.480
10	64.200	0.085
11	65.300	1.074
12	66.300	0.315
13	67.200	0.001
14	69.400	0.000
15	73.200	0.030
16	74.300	0.459
17	75.300	0.242
18	76.300	0.616
19	77.200	23.610
20	78.200	1.632
21	79.200	0.196
22	82.200	0.002
23	88.200	0.001
24	89.200	0.093
25	91.300	0.001
26	92.200	0.003
27	93.300	0.148
28	94.200	0.215
29	95.300	0.175
30	97.100	0.002
31	102.200	0.001
32	103.700	0.002
33	105.100	58.489
34	106.000	4.197
35	107.100	0.250
36	112.900	0.000
37	115.100	0.399
38	116.100	0.003
39	121.100	0.001
40	128.200	0.017
41	137.800	0.003
42	139.200	0.081
43	140.000	0.001
44	141.100	0.153
45	142.100	0.011
46	152.200	0.011
47	168.100	0.009
48	169.100	0.007
49	195.900	0.029
50	196.800	0.062
51	197.800	0.969
52	198.900	0.250
53	199.800	0.012

Figura 123 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $Co(acac)_2$ ; T.R.= 13.8; Benzil (continuação)

### Isopropoxibenzeno com Co(Acac)2

<b>Formula</b>	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	240.2970				
<b>Count</b>	87	<b>Data Type</b>	Centroid				
<b>Date</b>	01 Mar 19 02:10 pm						
<b>File Name</b>	3_3-1-2019_ISOP_CO(ACAC)2_BRUTO_1_Centroid		<b>Inlet Model</b>	GC			
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Retention Time</b>	17.829	<b>Scan</b>	516
<b>TIC</b>	307.97	<b>Total Signal</b>	10375324				

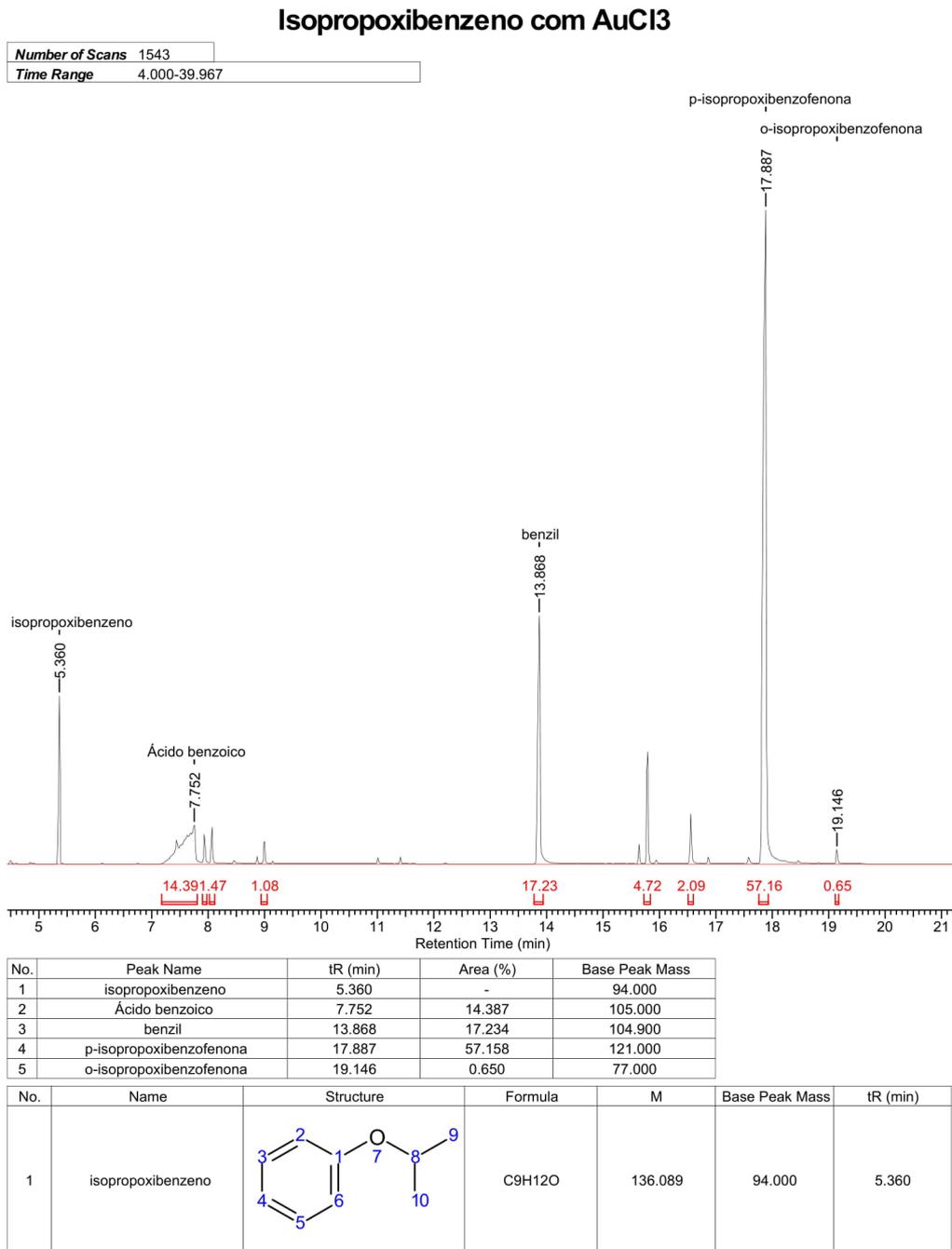


No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.200	13.293	447850.969
2	105.300	10.417	350940.000
3	121.200	100.000	3368981.000
4	197.300	17.543	591004.000
5	198.200	50.819	1712072.000
6	240.100	39.642	1335520.875

Figura 124 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $Co(acac)_2$ ; T.R.= 17.8; p-isopropoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	50.100	0.322	24	91.300	0.151	47	126.200	0.022	70	181.300	1.677
2	51.100	0.732	25	92.200	0.697	48	127.200	0.001	71	182.300	0.298
3	52.100	0.019	26	93.200	1.762	49	128.200	0.014	72	183.300	0.008
4	53.100	0.064	27	94.300	0.169	50	135.300	0.001	73	196.300	0.010
5	55.100	0.004	28	95.300	0.001	51	139.300	0.604	74	197.300	5.696
6	62.100	0.094	29	99.300	0.029	52	140.200	0.107	75	198.200	16.501
7	63.200	0.428	30	102.300	0.069	53	141.300	1.390	76	199.100	2.136
8	64.200	0.278	31	103.300	0.001	54	142.200	0.230	77	200.100	0.141
9	65.200	1.674	32	104.200	0.077	55	143.200	0.005	78	214.100	0.004
10	66.200	0.096	33	105.300	3.382	56	148.900	0.004	79	225.100	0.297
11	67.300	0.001	34	106.200	0.343	57	150.200	0.040	80	226.000	0.012
12	69.100	0.010	35	107.200	0.032	58	151.200	0.131	81	238.100	0.017
13	74.200	0.056	36	111.300	0.099	59	152.200	0.434	82	240.100	12.872
14	75.200	0.205	37	112.200	0.001	60	153.200	0.065	83	241.100	1.927
15	76.200	0.509	38	113.300	0.051	61	154.200	0.022	84	242.000	0.205
16	77.200	4.317	39	114.300	0.022	62	161.200	0.027	85	242.700	0.001
17	78.200	0.350	40	115.400	1.280	63	163.200	0.016	86	276.100	0.004
18	79.200	0.044	41	116.300	0.140	64	167.500	0.004	87	678.700	0.002
19	86.200	0.001	42	119.400	0.012	65	168.300	0.092			
20	87.200	0.049	43	120.400	0.601	66	169.200	0.798			
21	88.200	0.029	44	121.200	32.471	67	170.300	0.495			
22	89.300	0.097	45	122.200	2.499	68	171.300	0.050			
23	90.300	0.006	46	123.200	0.143	69	180.300	0.221			

Figura 125 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $Co(acac)_2$ ; T.R.= 17.8; p-isopropoxibenzofenona (continuação)

B.2.3  $AuCl_3$ Figura 126 – Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com  $AuCl_3$

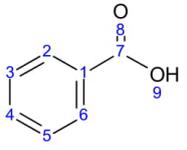
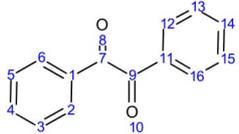
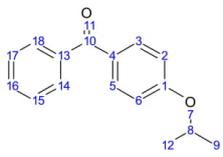
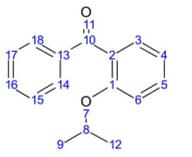
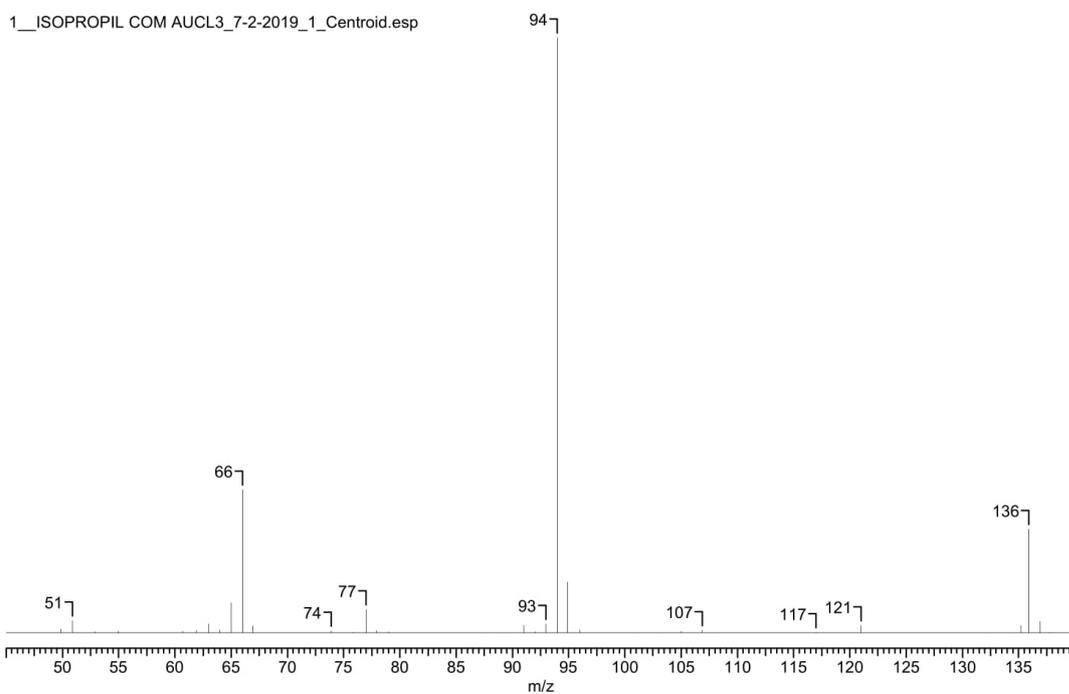
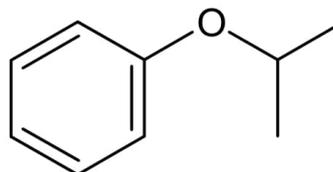
No.	Name	Structure	Formula	M	Base Peak Mass	tR (min)
2	Ácido benzoico		C7H6O2	122.037	105.000	7.752
3	Benzil		C14H10O2	210.068	104.900	13.868
4	p-isopropoxibenzofenona		C16H16O2	240.115	121.000	17.887
5	o-isopropoxibenzofenona		C16H16O2	240.115	77.000	19.146

Figura 127 – Cromatograma da reação Isopropoxibenzeno com  $AlCl_3$  (continuação)

Isopropoxibenzeno com AuCl<sub>3</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	<b>FW</b>	136.1910
<b>Count</b>	166	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	1 ISOPROPIL COM AUCL3 7-2-2019 1 Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 04:36 am
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>TIC</b>	177.99	<b>Retention Time</b>	5.360
		<b>Scan</b>	55
		<b>Total Signal</b>	20333968



No.	m/z	RI(%)	DI
1	66.000	24.057	2748241.000
2	94.000	100.000	11423957.000
3	135.900	17.397	1987423.375

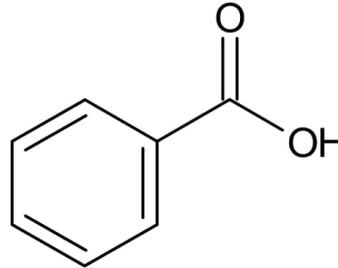
Figura 128 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com AuCl<sub>3</sub>; T.R.= 5,4; Isopropoxibenzeno

No.	m/z	TIC(%)									
1	49.900	0.339	43	114.900	0.031	85	256.100	0.016	127	649.900	0.000
2	50.900	1.144	44	117.000	0.058	86	259.500	0.002	128	665.400	0.009
3	51.900	0.019	45	117.900	0.011	87	306.500	0.006	129	676.000	0.001
4	52.900	0.088	46	119.800	0.006	88	307.500	0.001	130	677.100	0.000
5	54.100	0.038	47	121.000	0.712	89	309.300	0.002	131	681.700	0.000
6	55.000	0.176	48	121.800	0.017	90	322.600	0.031	132	702.000	0.000
7	58.800	0.002	49	128.000	0.002	91	337.900	0.002	133	704.100	0.000
8	60.700	0.153	50	132.300	0.000	92	358.400	0.006	134	710.400	0.000
9	61.900	0.237	51	134.600	0.030	93	373.600	0.002	135	712.700	0.000
10	63.000	0.823	52	135.200	0.713	94	381.800	0.011	136	717.600	0.002
11	64.000	0.302	53	135.900	9.774	95	396.900	0.002	137	720.100	0.007
12	65.000	2.863	54	136.900	1.058	96	414.200	0.021	138	729.900	0.001
13	66.000	13.516	55	137.800	0.063	97	419.900	0.011	139	731.400	0.001
14	66.900	0.649	56	145.000	0.101	98	423.400	0.000	140	734.300	0.001
15	71.700	0.000	57	145.800	0.004	99	424.700	0.000	141	738.500	0.000
16	72.700	0.000	58	146.900	0.006	100	426.500	0.036	142	739.900	0.000
17	73.900	0.199	59	148.100	0.005	101	429.600	0.000	143	753.300	0.021
18	75.000	0.035	60	151.700	0.007	102	430.900	0.000	144	754.000	0.012
19	75.800	0.065	61	152.900	0.008	103	473.800	0.000	145	754.900	0.000
20	77.000	2.225	62	158.800	0.047	104	482.000	0.001	146	755.800	0.000
21	77.900	0.179	63	163.200	0.000	105	484.000	0.008	147	760.300	0.001
22	79.000	0.116	64	164.100	0.000	106	498.600	0.033	148	791.800	0.001
23	81.000	0.012	65	168.900	0.003	107	508.900	0.001	149	804.200	0.000
24	86.500	0.011	66	170.900	0.106	108	518.900	0.001	150	805.500	0.000
25	87.600	0.006	67	171.800	0.002	109	521.900	0.010	151	808.500	0.000
26	89.000	0.001	68	175.900	0.001	110	523.400	0.010	152	849.000	0.002
27	89.700	0.018	69	177.100	0.007	111	540.100	0.003	153	853.100	0.026
28	91.000	0.715	70	178.000	0.000	112	541.300	0.001	154	854.300	0.001
29	92.000	0.091	71	178.700	0.012	113	542.200	0.002	155	864.700	0.000
30	93.000	0.844	72	184.200	0.000	114	547.000	0.006	156	865.600	0.000
31	94.000	56.182	73	202.100	0.006	115	549.700	0.002	157	908.800	0.001
32	94.900	4.806	74	203.600	0.001	116	551.300	0.001	158	911.100	0.001
33	96.000	0.284	75	204.700	0.000	117	567.300	0.001	159	922.300	0.006
34	96.700	0.030	76	205.500	0.000	118	582.700	0.001	160	927.400	0.006
35	98.500	0.000	77	220.700	0.000	119	590.800	0.016	161	961.300	0.000
36	100.900	0.000	78	225.100	0.058	120	592.600	0.000	162	962.500	0.000
37	102.000	0.016	79	226.500	0.019	121	595.300	0.001	163	964.500	0.000
38	103.000	0.028	80	233.600	0.001	122	598.400	0.000	164	969.600	0.001
39	103.800	0.018	81	235.400	0.001	123	602.100	0.014	165	988.800	0.000
40	105.000	0.148	82	236.600	0.013	124	606.400	0.006	166	990.500	0.001
41	106.900	0.245	83	241.900	0.001	125	639.900	0.002			
42	107.900	0.024	84	242.600	0.001	126	645.100	0.082			

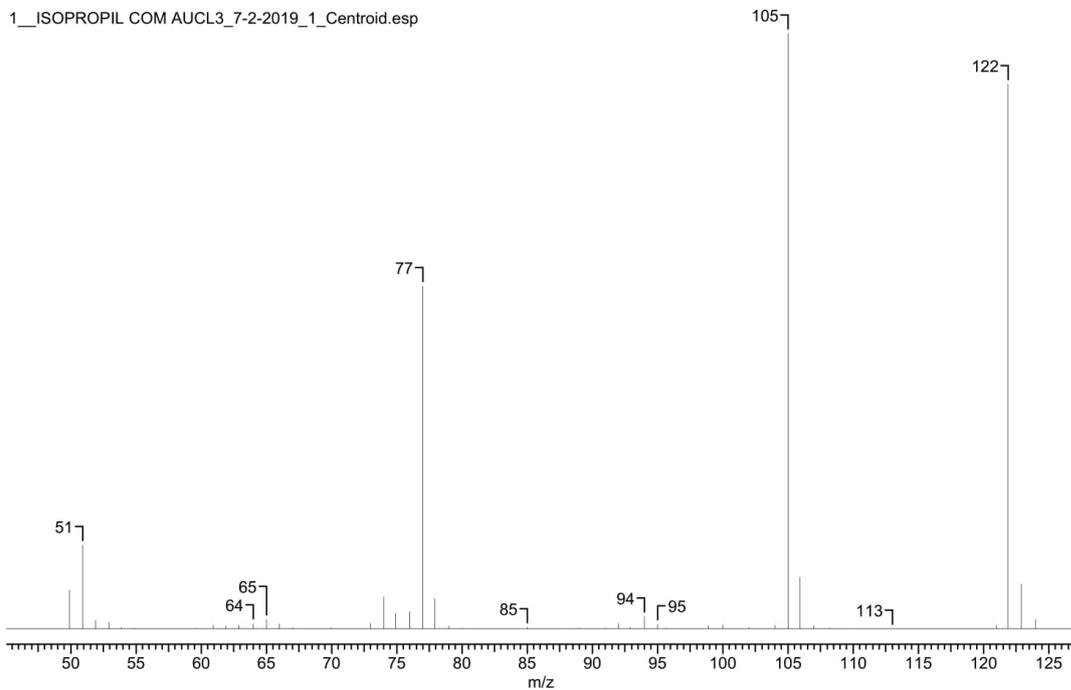
Figura 129 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $AuCl_3$ ; T.R.= 5,4; Isopropoxibenzeno(continuação)

Isopropoxibenzeno com AuCl<sub>3</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	122.1213
<b>Count</b>	153	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	1 ISOPROPIL COM AUCL3 7-2-2019 1 Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 04:36 am
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>TIC</b>	343.82	<b>Retention Time</b>	7.752
		<b>Scan</b>	163
		<b>Total Signal</b>	4670020



1\_\_ISOPROPIL COM AUCL3 7-2-2019 1\_Centroid.esp



No.	m/z	RI(%)	DI
1	50.900	14.087	191338.938
2	77.000	57.599	782361.813
3	105.000	100.000	1358293.625
4	121.900	91.472	1242461.625
5	127.900	13.679	185802.938

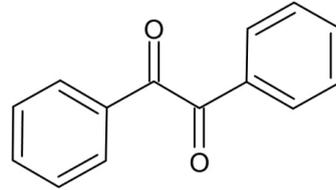
Figura 130 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com AuCl<sub>3</sub>; T.R.=7.8; Ácido benzóico

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	49.900	1.897	40	100.000	0.208	79	234.800	0.003	118	629.000	0.019
2	50.900	4.097	41	100.900	0.014	80	244.000	0.002	119	640.400	0.001
3	51.900	0.407	42	102.000	0.078	81	246.500	0.000	120	669.100	0.001
4	52.900	0.337	43	102.800	0.008	82	260.000	0.000	121	671.200	0.001
5	53.900	0.048	44	104.000	0.170	83	272.600	0.013	122	672.900	0.001
6	54.900	0.026	45	105.000	29.085	84	274.500	0.000	123	680.800	0.003
7	56.300	0.005	46	105.900	2.526	85	300.700	0.001	124	689.700	0.001
8	59.600	0.024	47	107.000	0.161	86	302.800	0.003	125	711.100	0.001
9	60.900	0.188	48	108.200	0.044	87	308.900	0.001	126	717.600	0.008
10	61.900	0.117	49	109.900	0.007	88	309.600	0.001	127	737.300	0.001
11	62.900	0.179	50	113.000	0.019	89	352.800	0.001	128	747.600	0.000
12	64.000	0.280	51	121.000	0.165	90	393.000	0.003	129	786.200	0.001
13	65.000	0.452	52	121.900	26.605	91	402.800	0.000	130	787.700	0.001
14	66.000	0.236	53	122.900	2.185	92	413.800	0.001	131	789.300	0.001
15	67.000	0.057	54	124.000	0.461	93	422.600	0.001	132	802.500	0.001
16	68.800	0.007	55	127.900	3.979	94	423.900	0.001	133	814.400	0.007
17	70.000	0.046	56	129.000	0.312	95	424.600	0.001	134	815.300	0.001
18	71.600	0.001	57	129.900	1.321	96	443.300	0.001	135	816.400	0.001
19	73.000	0.262	58	130.900	0.144	97	444.400	0.004	136	817.700	0.001
20	74.000	1.543	59	138.900	0.008	98	449.900	0.001	137	836.000	0.001
21	74.900	0.757	60	141.000	0.029	99	458.700	0.001	138	836.700	0.001
22	76.000	0.830	61	141.900	0.007	100	464.100	0.001	139	838.900	0.000
23	77.000	16.753	62	142.900	0.004	101	480.000	0.001	140	845.000	0.001
24	77.900	1.482	63	152.300	0.001	102	484.600	0.001	141	860.700	0.001
25	79.000	0.141	64	154.800	0.047	103	485.600	0.001	142	888.700	0.001
26	80.000	0.023	65	156.900	0.017	104	504.300	0.001	143	898.900	0.001
27	81.900	0.007	66	161.000	0.007	105	507.500	0.001	144	909.500	0.001
28	85.000	0.081	67	169.000	0.032	106	510.300	0.001	145	917.500	0.000
29	87.800	0.004	68	169.900	0.181	107	514.700	0.007	146	925.400	0.001
30	89.000	0.037	69	170.900	0.049	108	526.500	0.001	147	932.800	0.017
31	91.000	0.041	70	171.800	0.208	109	531.600	0.007	148	936.000	0.001
32	92.000	0.265	71	173.300	0.007	110	546.600	0.001	149	946.300	0.000
33	92.900	0.079	72	179.000	0.004	111	554.300	0.001	150	965.200	0.001
34	94.000	0.600	73	187.100	0.001	112	604.400	0.019	151	987.700	0.001
35	95.000	0.229	74	197.500	0.001	113	606.700	0.001	152	990.400	0.001
36	95.700	0.042	75	199.400	0.001	114	610.500	0.000	153	993.800	0.002
37	96.500	0.001	76	212.800	0.001	115	617.600	0.013			
38	97.800	0.001	77	215.100	0.001	116	625.900	0.001			
39	98.900	0.153	78	231.100	0.001	117	627.500	0.001			

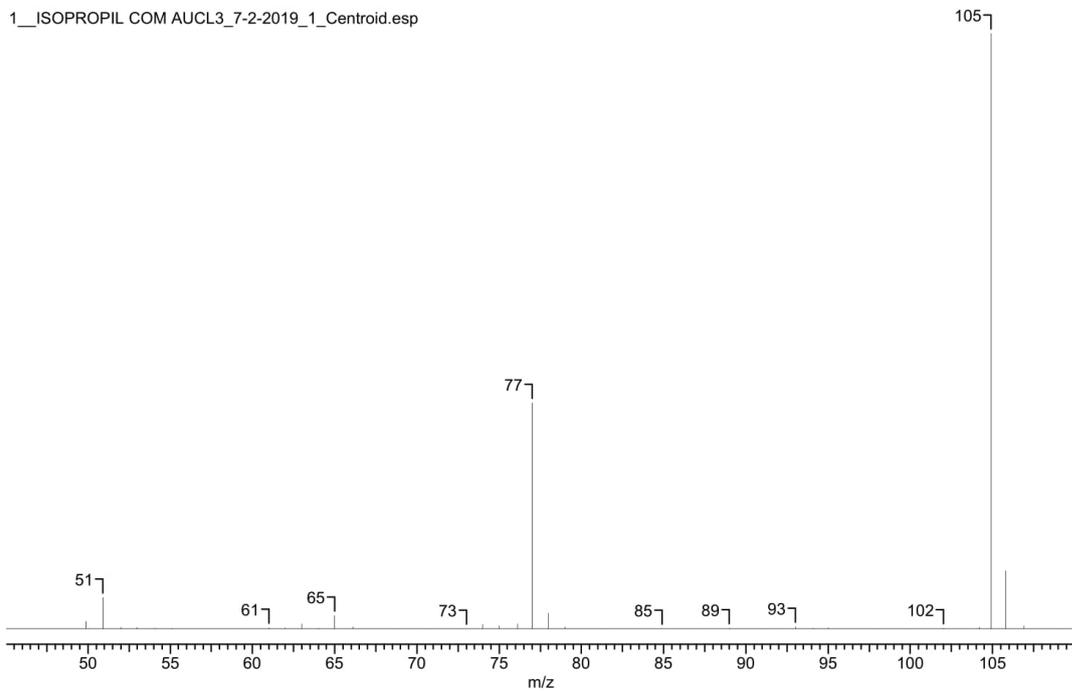
Figura 131 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $AlCl_3$ ; T.R.=7.8; Ácido benzóico (continuação)

Isopropoxibenzeno com AuCl<sub>3</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	210.2280
<b>Count</b>	268	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>Date</b>	02 Jul 19 04:36 am		
<b>File Name</b>	1 ISOPROPIL COM AUCL3 7-2-2019 1 Centroid	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>Retention Time</b>	13.868	<b>Scan</b>	467
<b>TIC</b>	172.21	<b>Total Signal</b>	30032392



1\_ISOPROPIL COM AUCL3\_7-2-2019\_1\_Centroid.esp



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.000	37.925	6614124.000
2	104.900	100.000	17439834.000

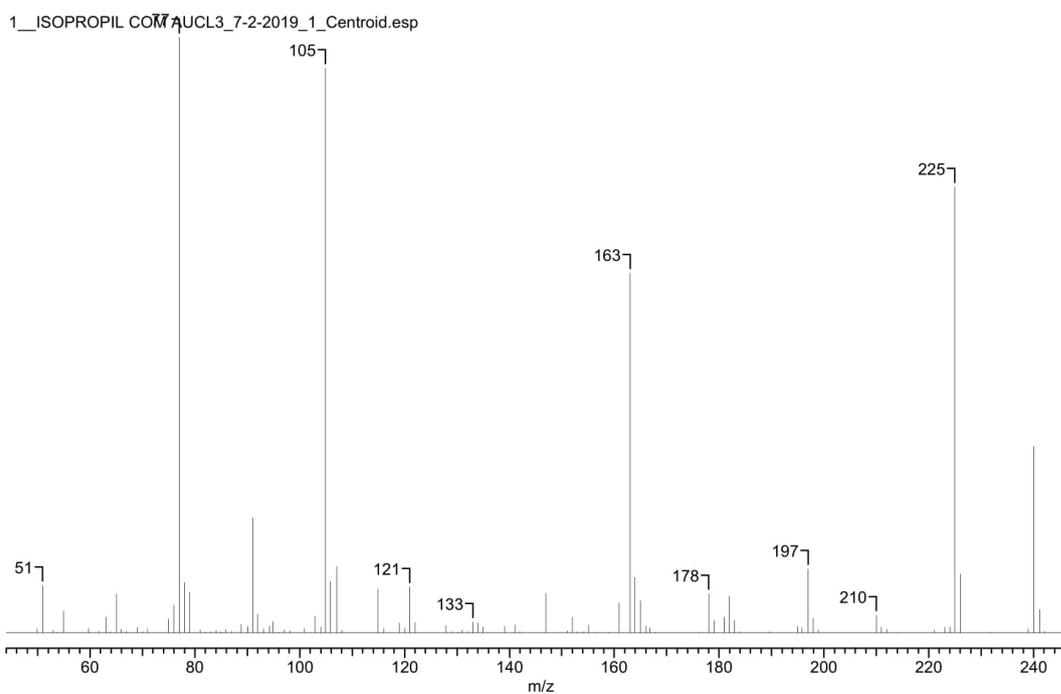
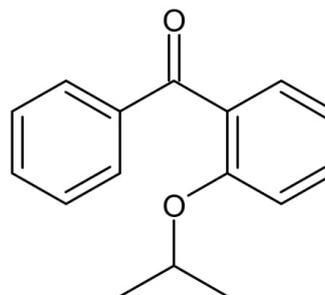
Figura 132 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com AuCl<sub>3</sub>; T.R.= 13.9; Benzil

No.	m/z	TIC(%)									
1	49.900	0.726	69	162.800	0.048	137	446.200	0.000	205	715.500	0.001
2	50.900	3.054	70	167.900	0.014	138	447.000	0.000	206	716.700	0.000
3	52.000	0.147	71	169.100	0.051	139	452.000	0.001	207	718.100	0.000
4	53.000	0.154	72	170.200	0.028	140	457.000	0.000	208	739.100	0.001
5	54.100	0.046	73	177.000	0.000	141	461.200	0.000	209	744.300	0.005
6	55.100	0.056	74	178.900	0.000	142	462.700	0.000	210	749.500	0.001
7	57.100	0.008	75	181.000	0.002	143	466.900	0.001	211	751.500	0.005
8	58.800	0.002	76	182.100	0.008	144	472.800	0.001	212	758.900	0.001
9	61.000	0.130	77	184.400	0.002	145	476.900	0.000	213	759.700	0.000
10	62.000	0.111	78	187.800	0.005	146	478.200	0.000	214	763.800	0.000
11	63.000	0.472	79	188.700	0.000	147	483.400	0.001	215	774.500	0.000
12	64.000	0.074	80	189.400	0.000	148	488.600	0.000	216	775.500	0.000
13	65.000	1.295	81	193.500	0.012	149	498.500	0.000	217	780.700	0.001
14	66.100	0.198	82	195.000	0.063	150	499.200	0.000	218	790.500	0.000
15	68.500	0.004	83	196.000	0.186	151	504.100	0.001	219	791.400	0.008
16	70.500	0.020	84	196.700	0.162	152	509.100	0.000	220	801.500	0.005
17	73.000	0.039	85	197.700	1.444	153	518.200	0.001	221	802.300	0.000
18	74.000	0.467	86	198.800	0.178	154	519.700	0.001	222	803.900	0.000
19	75.000	0.287	87	200.000	0.005	155	528.900	0.000	223	805.100	0.016
20	76.100	0.496	88	204.000	0.004	156	529.800	0.000	224	807.900	0.002
21	77.000	22.023	89	205.000	0.000	157	530.600	0.000	225	813.200	0.002
22	78.000	1.556	90	215.100	0.000	158	535.100	0.000	226	816.200	0.001
23	79.000	0.193	91	218.900	0.002	159	539.100	0.000	227	817.500	0.000
24	80.100	0.008	92	220.900	0.002	160	540.100	0.000	228	821.900	0.000
25	81.600	0.000	93	235.700	0.001	161	541.200	0.000	229	822.800	0.000
26	84.900	0.024	94	253.500	0.008	162	543.300	0.001	230	826.200	0.016
27	87.000	0.003	95	265.400	0.000	163	544.700	0.000	231	827.700	0.000
28	87.900	0.020	96	275.100	0.019	164	550.700	0.000	232	836.900	0.003
29	89.000	0.087	97	280.500	0.000	165	566.000	0.000	233	838.100	0.000
30	91.200	0.016	98	286.000	0.000	166	566.800	0.000	234	840.500	0.011
31	92.300	0.016	99	289.900	0.000	167	570.500	0.000	235	846.800	0.000
32	93.000	0.208	100	291.000	0.000	168	571.600	0.000	236	848.100	0.000
33	94.100	0.086	101	291.700	0.000	169	576.900	0.000	237	852.200	0.012
34	95.000	0.123	102	296.600	0.000	170	577.600	0.000	238	867.000	0.000
35	98.100	0.012	103	300.500	0.009	171	580.000	0.001	239	869.700	0.000
36	99.900	0.001	104	302.000	0.000	172	581.900	0.001	240	879.600	0.000
37	102.000	0.074	105	306.800	0.000	173	594.900	0.000	241	889.400	0.000
38	103.000	0.002	106	317.600	0.000	174	598.500	0.000	242	891.000	0.000
39	104.200	0.174	107	319.800	0.001	175	603.200	0.000	243	895.700	0.001
40	104.900	58.070	108	320.800	0.020	176	616.500	0.001	244	900.800	0.001
41	105.800	5.644	109	323.400	0.000	177	623.600	0.015	245	904.100	0.002
42	106.900	0.302	110	328.000	0.001	178	627.600	0.000	246	905.500	0.005
43	108.000	0.030	111	335.700	0.000	179	629.700	0.000	247	911.500	0.001
44	109.100	0.000	112	336.700	0.005	180	633.800	0.001	248	914.600	0.000
45	111.200	0.000	113	337.500	0.000	181	634.500	0.000	249	915.700	0.000
46	112.900	0.003	114	338.600	0.000	182	639.500	0.000	250	917.500	0.000
47	114.900	0.410	115	342.200	0.000	183	640.800	0.002	251	928.300	0.002
48	116.100	0.033	116	343.700	0.000	184	643.200	0.002	252	941.300	0.001
49	120.900	0.005	117	369.500	0.001	185	649.700	0.001	253	942.000	0.000
50	126.600	0.006	118	374.100	0.000	186	650.500	0.001	254	943.600	0.000
51	129.100	0.012	119	375.500	0.000	187	654.900	0.000	255	947.900	0.000
52	130.400	0.008	120	380.300	0.001	188	655.900	0.000	256	948.700	0.000
53	133.100	0.012	121	385.700	0.001	189	657.700	0.001	257	958.800	0.001
54	136.800	0.016	122	389.100	0.000	190	662.100	0.002	258	963.100	0.000
55	138.100	0.002	123	391.200	0.000	191	665.000	0.000	259	963.900	0.000
56	139.000	0.147	124	396.700	0.012	192	675.200	0.000	260	968.500	0.000
57	139.800	0.027	125	404.800	0.000	193	676.200	0.000	261	969.500	0.002
58	141.000	0.245	126	409.800	0.001	194	681.200	0.000	262	973.700	0.001
59	142.000	0.041	127	414.800	0.001	195	691.000	0.000	263	974.500	0.001
60	146.000	0.016	128	420.200	0.002	196	692.200	0.000	264	988.300	0.000
61	146.900	0.032	129	421.000	0.000	197	694.400	0.000	265	989.600	0.000
62	150.700	0.001	130	427.800	0.003	198	695.500	0.000	266	990.300	0.000
63	151.900	0.009	131	434.700	0.003	199	696.600	0.000	267	994.600	0.000
64	152.800	0.005	132	435.600	0.001	200	697.500	0.000	268	995.200	0.000
65	154.000	0.001	133	437.900	0.005	201	702.200	0.000			
66	155.000	0.009	134	441.100	0.003	202	711.400	0.000			
67	156.800	0.000	135	444.500	0.011	203	712.500	0.000			
68	158.100	0.000	136	445.400	0.003	204	713.500	0.000			

Figura 133 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $AuCl_3$ ; T.R.= 13.9; Benzil (continuação)

Isopropoxibenzeno com AuCl<sub>3</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	240.2970
<b>Count</b>	201	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	1 ISOPROPIL COM AUCL3_7-2-2019_1_Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 04:36 am
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>TIC</b>	590.91	<b>Retention Time</b>	19.146
		<b>Scan</b>	772
		<b>Total Signal</b>	1703445



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.000	100.000	288276.531
2	91.000	19.285	55594.105
3	104.900	94.830	273372.500
4	107.000	11.168	32195.061
5	163.000	60.401	174121.328
6	197.000	10.774	31060.059
7	225.000	74.886	215879.422
8	240.000	31.291	90204.172

Figura 134 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com AuCl<sub>3</sub>; T.R.= 19.1; o-isopropoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	49.900	0.121	69	142.000	0.032	137	481.800	0.011
2	50.900	1.348	70	147.000	1.125	138	494.600	0.003
3	53.000	0.069	71	148.100	0.004	139	496.100	0.001
4	53.700	0.018	72	151.100	0.059	140	514.900	0.001
5	54.900	0.630	73	152.000	0.443	141	516.200	0.001
6	59.700	0.126	74	152.900	0.030	142	523.000	0.003
7	61.700	0.043	75	154.200	0.029	143	541.800	0.049
8	63.000	0.444	76	155.100	0.227	144	549.700	0.003
9	63.900	0.029	77	156.500	0.017	145	554.600	0.001
10	65.000	1.098	78	158.900	0.024	146	564.900	0.001
11	66.000	0.105	79	160.900	0.851	147	565.600	0.001
12	66.900	0.044	80	163.000	10.222	148	580.800	0.001
13	68.000	0.005	81	163.900	1.576	149	595.700	0.065
14	69.100	0.161	82	165.000	0.916	150	596.400	0.001
15	70.000	0.035	83	166.000	0.201	151	606.400	0.001
16	70.900	0.116	84	166.800	0.142	152	607.800	0.001
17	73.900	0.001	85	167.900	0.022	153	609.900	0.001
18	75.000	0.392	86	176.200	0.019	154	610.600	0.001
19	76.000	0.796	87	177.000	0.001	155	617.100	0.001
20	77.000	16.923	88	178.000	1.115	156	631.300	0.001
21	78.000	1.423	89	179.000	0.358	157	632.600	0.003
22	79.000	1.150	90	181.000	0.453	158	633.900	0.003
23	80.100	0.007	91	181.900	1.040	159	638.400	0.016
24	81.000	0.086	92	183.000	0.358	160	652.200	0.001
25	82.000	0.013	93	184.000	0.037	161	674.600	0.003
26	83.000	0.032	94	189.700	0.034	162	675.200	0.004
27	84.000	0.081	95	195.000	0.187	163	683.900	0.001
28	84.900	0.033	96	195.800	0.152	164	699.100	0.028
29	85.900	0.084	97	197.000	1.823	165	705.900	0.001
30	87.000	0.053	98	197.900	0.424	166	714.600	0.003
31	88.800	0.243	99	199.000	0.083	167	716.500	0.001
32	90.100	0.190	100	199.900	0.007	168	731.000	0.042
33	91.000	3.264	101	207.100	0.009	169	731.800	0.003
34	92.000	0.535	102	208.900	0.003	170	740.700	0.001
35	93.100	0.109	103	210.000	0.508	171	743.200	0.001
36	94.200	0.203	104	210.900	0.160	172	745.100	0.001
37	94.900	0.318	105	212.000	0.108	173	778.800	0.001
38	95.900	0.013	106	214.000	0.020	174	798.300	0.133
39	97.000	0.094	107	221.100	0.084	175	800.800	0.001
40	98.100	0.065	108	223.100	0.161	176	802.500	0.001
41	100.900	0.114	109	224.000	0.173	177	803.900	0.003
42	102.100	0.005	110	225.000	12.673	178	831.100	0.001
43	102.900	0.476	111	226.000	1.685	179	831.900	0.001
44	104.000	0.175	112	231.800	0.018	180	835.100	0.001
45	104.900	16.048	113	239.000	0.113	181	836.200	0.001
46	105.800	1.455	114	240.000	5.295	182	845.700	0.003
47	107.000	1.890	115	241.100	0.669	183	876.700	0.001
48	108.100	0.070	116	242.100	0.048	184	889.100	0.003
49	113.900	0.007	117	254.100	0.034	185	903.100	0.001
50	114.900	1.254	118	282.100	0.028	186	903.800	0.001
51	116.000	0.126	119	311.900	0.001	187	920.400	0.003
52	117.100	0.007	120	343.400	0.003	188	922.600	0.003
53	119.000	0.279	121	345.400	0.001	189	924.200	0.001
54	120.000	0.147	122	367.000	0.001	190	928.900	0.003
55	121.000	1.312	123	368.000	0.001	191	933.700	0.011
56	122.000	0.295	124	408.400	0.001	192	941.000	0.001
57	126.800	0.007	125	409.100	0.001	193	944.800	0.001
58	127.900	0.206	126	410.500	0.001	194	951.500	0.001
59	128.900	0.030	127	411.600	0.001	195	977.900	0.001
60	130.100	0.022	128	417.000	0.001	196	987.600	0.001
61	131.000	0.089	129	419.000	0.003	197	988.800	0.001
62	132.000	0.040	130	433.700	0.001	198	990.300	0.001
63	133.000	0.305	131	438.400	0.003	199	991.700	0.001
64	134.000	0.278	132	440.000	0.001	200	992.500	0.001
65	135.000	0.170	133	450.700	0.001	201	994.100	0.003
66	135.800	0.001	134	462.700	0.001			
67	139.100	0.180	135	464.200	0.003			
68	141.100	0.225	136	479.700	0.001			

Figura 135 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $AuCl_3$ ; T.R.= 19.1; o-isopropoxibenzofenona(contínução)

Isopropoxibenzeno com AuCl<sub>3</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	240.2970
<b>Count</b>	232	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>Date</b>	02 Jul 19 04:36 am		
<b>File Name</b>	1 ISOPROPIL COM AUCL3 7-2-2019 1 Centroid	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>Retention Time</b>	17.887	<b>Scan</b>	692
<b>TIC</b>	296.55	<b>Total Signal</b>	79098168

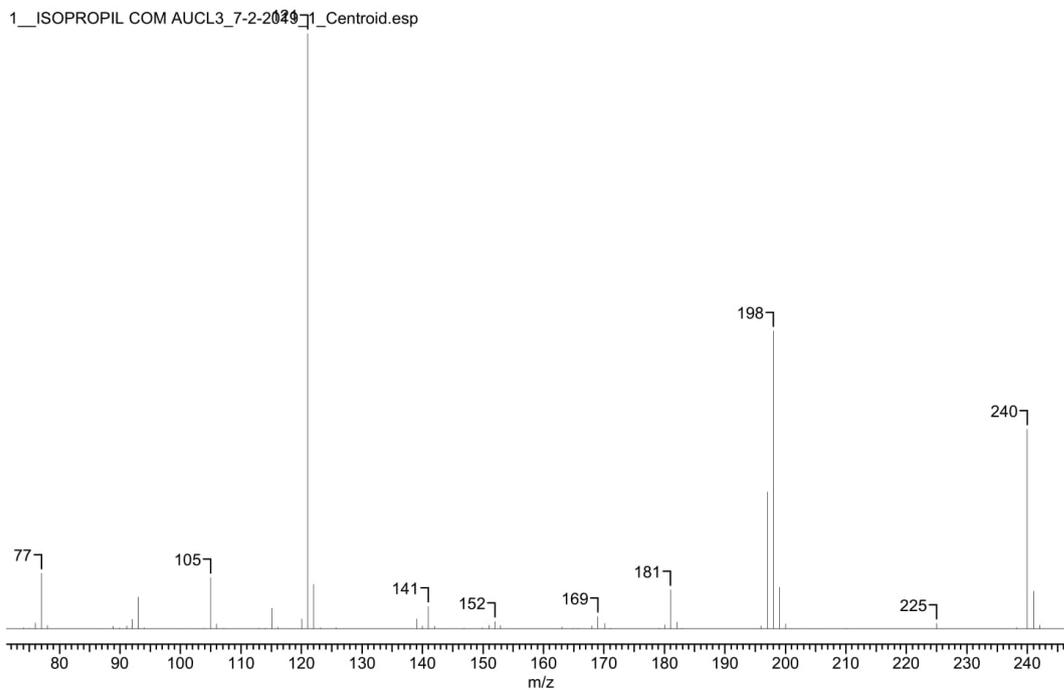
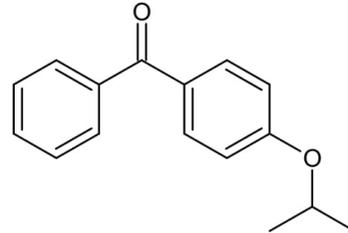


Figura 136 – EEspectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com AuCl<sub>3</sub>; T.R.= 17.9; p-isopropoxibenzofenona

No.	m/z	TIC(%)									
1	50.000	0.293	60	155.000	0.008	119	491.400	0.001	178	756.900	0.000
2	50.900	0.518	61	156.100	0.001	120	494.200	0.000	179	770.700	0.000
3	52.000	0.003	62	161.800	0.001	121	495.300	0.002	180	773.600	0.000
4	53.000	0.042	63	163.100	0.111	122	501.200	0.001	181	776.000	0.001
5	59.000	0.018	64	164.900	0.026	123	509.800	0.000	182	781.700	0.000
6	61.000	0.008	65	165.700	0.028	124	511.100	0.000	183	796.700	0.000
7	61.900	0.028	66	168.000	0.189	125	512.100	0.000	184	798.300	0.000
8	62.900	0.367	67	169.000	0.692	126	512.900	0.001	185	799.200	0.000
9	64.000	0.154	68	170.100	0.312	127	521.900	0.001	186	800.900	0.001
10	65.000	1.004	69	171.000	0.032	128	525.700	0.000	187	802.900	0.001
11	66.000	0.078	70	179.100	0.031	129	527.200	0.001	188	804.900	0.001
12	74.000	0.065	71	180.000	0.245	130	544.000	0.001	189	805.900	0.001
13	75.000	0.041	72	181.000	2.216	131	546.000	0.000	190	818.100	0.000
14	76.000	0.341	73	182.100	0.408	132	547.700	0.000	191	819.300	0.000
15	77.000	3.159	74	182.900	0.025	133	548.700	0.001	192	821.800	0.001
16	78.000	0.212	75	184.700	0.006	134	549.400	0.000	193	823.200	0.000
17	87.000	0.017	76	195.200	0.002	135	550.700	0.000	194	824.000	0.000
18	87.900	0.012	77	196.000	0.168	136	551.700	0.001	195	836.600	0.005
19	88.900	0.145	78	197.000	7.759	137	553.200	0.000	196	837.300	0.000
20	89.900	0.067	79	198.000	16.862	138	556.500	0.002	197	838.800	0.001
21	91.100	0.178	80	199.000	2.356	139	567.200	0.001	198	842.800	0.000
22	92.000	0.543	81	200.000	0.294	140	568.900	0.000	199	844.000	0.000
23	93.000	1.797	82	200.900	0.000	141	579.000	0.002	200	844.900	0.011
24	94.000	0.059	83	201.900	0.000	142	581.500	0.000	201	845.700	0.000
25	94.900	0.024	84	202.800	0.000	143	583.100	0.000	202	846.400	0.000
26	95.900	0.000	85	204.000	0.005	144	584.700	0.000	203	859.200	0.000
27	97.900	0.001	86	205.600	0.001	145	585.500	0.000	204	860.400	0.005
28	100.600	0.012	87	209.000	0.008	146	591.200	0.002	205	862.300	0.009
29	102.000	0.013	88	210.100	0.033	147	603.800	0.000	206	863.800	0.000
30	103.100	0.013	89	213.200	0.023	148	605.700	0.000	207	865.300	0.000
31	103.900	0.037	90	225.000	0.326	149	607.100	0.000	208	866.600	0.000
32	105.000	2.891	91	226.000	0.002	150	609.600	0.001	209	872.400	0.002
33	106.000	0.290	92	228.700	0.001	151	624.600	0.000	210	884.000	0.001
34	107.100	0.026	93	231.300	0.001	152	626.400	0.000	211	885.400	0.000
35	110.900	0.020	94	236.400	0.010	153	631.500	0.006	212	887.300	0.000
36	112.900	0.043	95	238.300	0.060	154	636.800	0.003	213	888.200	0.000
37	114.100	0.040	96	240.000	11.316	155	647.200	0.000	214	897.800	0.000
38	115.100	1.169	97	241.000	2.136	156	648.000	0.000	215	898.700	0.000
39	116.100	0.097	98	242.000	0.195	157	650.700	0.000	216	903.800	0.001
40	118.200	0.010	99	263.300	0.006	158	660.900	0.001	217	918.300	0.000
41	119.100	0.023	100	266.800	0.031	159	663.500	0.002	218	937.600	0.000
42	120.100	0.552	101	291.300	0.000	160	669.900	0.000	219	939.800	0.000
43	121.000	33.721	102	299.600	0.010	161	673.900	0.000	220	941.800	0.001
44	122.000	2.510	103	399.900	0.001	162	678.700	0.004	221	944.000	0.001
45	123.100	0.065	104	402.900	0.000	163	682.100	0.000	222	946.300	0.001
46	125.700	0.063	105	404.300	0.006	164	687.700	0.001	223	948.000	0.001
47	127.100	0.020	106	411.000	0.000	165	692.400	0.000	224	948.800	0.001
48	137.900	0.012	107	411.900	0.000	166	694.400	0.001	225	961.400	0.000
49	139.100	0.550	108	413.000	0.000	167	704.200	0.001	226	965.100	0.000
50	140.000	0.184	109	413.700	0.000	168	713.800	0.000	227	965.900	0.017
51	141.000	1.278	110	421.300	0.000	169	715.000	0.000	228	967.400	0.000
52	142.000	0.152	111	423.900	0.002	170	717.700	0.000	229	969.300	0.000
53	142.800	0.000	112	432.600	0.000	171	719.400	0.000	230	979.200	0.015
54	144.000	0.000	113	433.900	0.000	172	721.400	0.000	231	982.700	0.003
55	146.900	0.033	114	434.600	0.000	173	725.300	0.000	232	992.300	0.001
56	149.900	0.068	115	436.600	0.000	174	726.300	0.000			
57	151.000	0.217	116	441.000	0.000	175	746.500	0.000			
58	152.000	0.417	117	442.900	0.001	176	748.100	0.000			
59	152.900	0.200	118	463.100	0.000	177	755.300	0.001			

Figura 137 – Espectro de Massas; Reação Isopropoxibenzeno com  $AlCl_3$ ; T.R.= 17.9; p-isopropoxibenzofenona (continuação)

## B.3 N,N-dimetilanilina

### B.3.1 ZnO

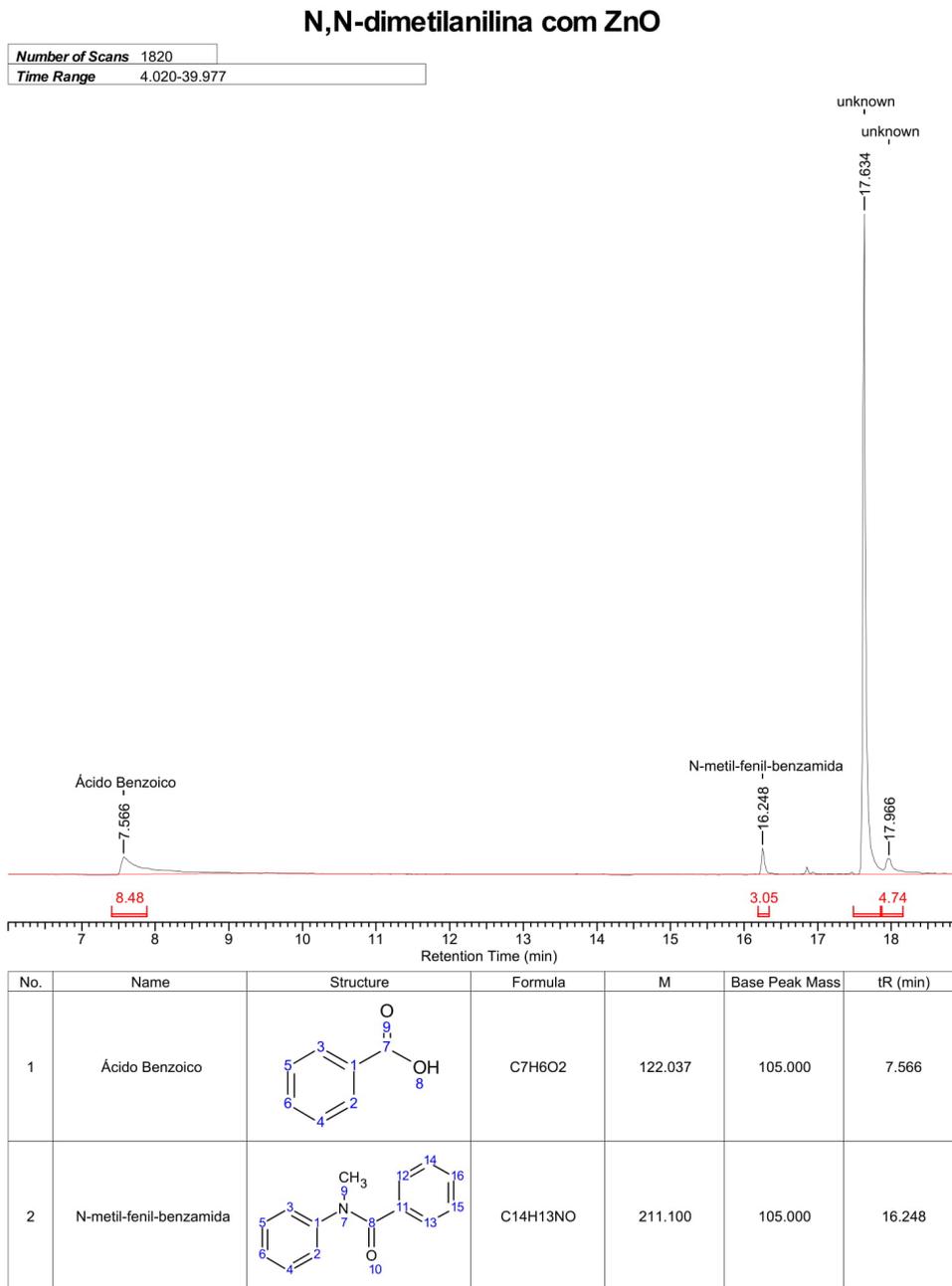


Figura 138 – Cromatograma da reação N,N-dimetilanilina com ZnO

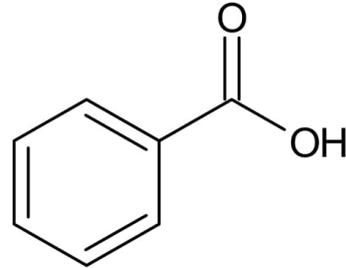
---

No.	Peak Name	tR (min)	Area (%)	Base Peak Mass
1	Ácido Benzoico	7.566	8.475	105.000
2	N-metil-fenil-benzamida	16.248	3.050	105.000
3	unknown	17.634	83.731	105.000
4	unknown	17.966	4.743	135.000

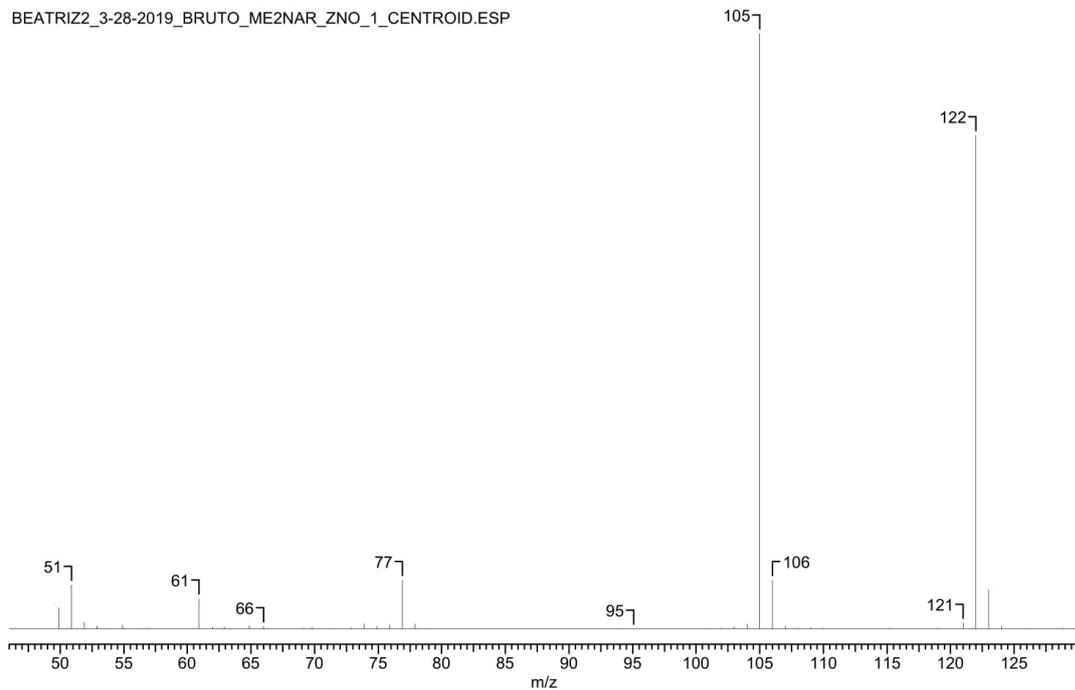
Figura 139 – Cromatograma da reação *N,N*-dimetilanilina com *ZnO* (continuação)

### N,N-dimetilanilina com ZnO

<b>Formula</b>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	122.1213
<b>Count</b>	97	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	BEATRIZ2_3-28-2019_BRUTO_ME2NAR_ZNO_1	<b>Date</b>	28 Mar 19 08:57 pm
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>TIC</b>	238.81	<b>Plot Type</b>	Stick
		<b>Retention Time</b>	7.566
		<b>Scan</b>	180
		<b>Total Signal</b>	20153



BEATRIZ2\_3-28-2019\_BRUTO\_ME2NAR\_ZNO\_1\_CENTROID.ESP



No.	m/z	RI(%)	DI
1	105.000	100.000	8438.999
2	122.000	82.889	6994.999

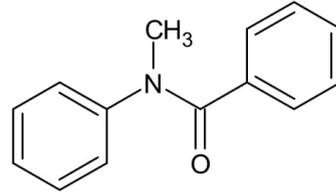
Figura 140 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com ZnO; T.R.=7.6; Ácido benzóico

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	49.900	1.479	26	77.900	0.367	51	131.900	0.015	76	211.900	0.025
2	50.900	3.086	27	79.000	0.025	52	133.200	0.079	77	218.800	0.045
3	51.900	0.481	28	94.000	0.005	53	135.100	0.452	78	231.200	0.010
4	52.900	0.194	29	95.100	0.020	54	136.100	0.015	79	232.200	0.025
5	53.900	0.010	30	100.900	0.020	55	146.100	0.020	80	234.700	0.020
6	54.900	0.278	31	102.000	0.055	56	149.100	0.025	81	236.000	0.030
7	56.100	0.020	32	103.000	0.149	57	149.800	0.025	82	249.900	0.025
8	57.000	0.055	33	104.000	0.313	58	151.200	0.030	83	250.800	0.154
9	59.000	0.005	34	105.000	41.875	59	153.100	0.005	84	251.700	0.114
10	60.100	0.025	35	106.000	3.439	60	154.000	0.025	85	252.900	0.154
11	60.900	2.139	36	107.000	0.223	61	155.000	0.099	86	253.800	0.015
12	62.000	0.129	37	108.000	0.065	62	162.000	0.025	87	265.800	0.005
13	62.900	0.144	38	109.000	0.069	63	162.900	0.025	88	266.800	0.030
14	63.900	0.020	39	110.000	0.035	64	164.000	0.010	89	280.800	0.069
15	64.900	0.228	40	113.900	0.010	65	165.000	0.010	90	282.000	0.025
16	66.000	0.174	41	115.300	0.035	66	168.000	0.084	91	282.700	0.010
17	66.800	0.025	42	118.900	0.040	67	169.900	0.040	92	284.400	0.025
18	69.100	0.060	43	121.000	0.427	68	179.100	0.035	93	311.600	0.035
19	69.800	0.119	44	122.000	34.709	69	191.000	0.020	94	354.500	0.005
20	71.600	0.025	45	123.000	2.764	70	194.900	0.030	95	363.600	0.010
21	72.900	0.069	46	124.000	0.198	71	196.800	0.005	96	384.700	0.010
22	73.900	0.367	47	125.900	0.015	72	199.000	0.015	97	742.700	0.010
23	74.900	0.198	48	128.900	0.040	73	201.800	0.015			
24	75.900	0.293	49	129.800	0.030	74	207.900	0.010			
25	76.900	3.419	50	131.000	0.060	75	209.000	0.015			

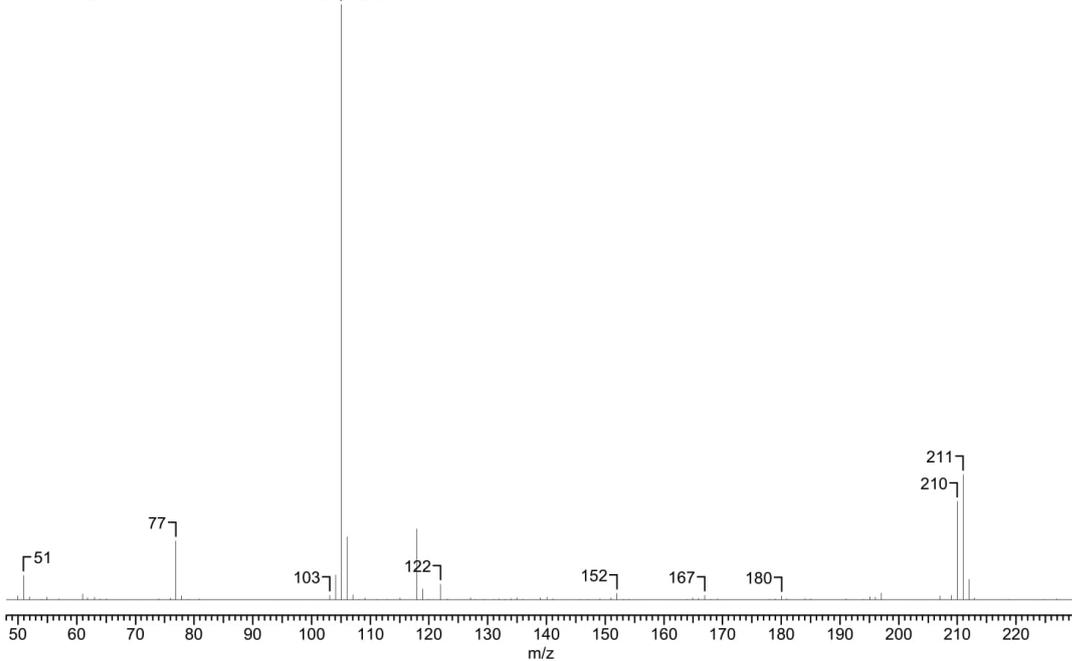
Figura 141 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com ZnO; T.R.=7.6; Ácido benzóico (continuação)

### N,N-dimetilanilina com ZnO

<b>Formula</b>	C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> NO	<b>FW</b>	211.2591
<b>Count</b>	142	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	BEATRIZ2_3-28-2019_BRUTO_ME2NAR_ZNO_1	<b>Date</b>	28 Mar 19 08:57 pm
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>TIC</b>	209.76	<b>Plot Type</b>	Stick
		<b>Retention Time</b>	16.248
		<b>Scan</b>	619
		<b>Total Signal</b>	29352



BEATRIZ2\_3-28-2019\_BRUTO\_ME2NAR\_ZNO\_1\_CENTROID.ESP



No.	m/z	RI(%)	DI
1	105.000	100.000	13993.005
2	106.000	10.555	1477.000
3	118.000	11.949	1672.001
4	210.000	16.537	2314.001
5	211.000	21.053	2946.001

Figura 142 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com ZnO; T.R.= 16.2; N-metil-fenil-benzamida

No.	m/z	TIC(%)									
1	49.900	0.330	37	108.000	0.055	73	152.000	0.504	109	212.000	1.659
2	50.900	1.956	38	109.100	0.170	74	153.100	0.072	110	212.900	0.153
3	51.900	0.266	39	110.100	0.034	75	154.000	0.041	111	214.100	0.003
4	53.000	0.020	40	111.100	0.058	76	155.100	0.007	112	217.000	0.007
5	54.000	0.037	41	112.900	0.051	77	156.100	0.003	113	217.900	0.007
6	54.900	0.211	42	115.000	0.170	78	161.100	0.017	114	218.800	0.051
7	56.900	0.109	43	116.000	0.010	79	162.200	0.007	115	223.900	0.027
8	57.800	0.007	44	118.000	5.696	80	164.000	0.044	116	224.800	0.048
9	59.800	0.024	45	119.000	0.879	81	164.900	0.170	117	226.900	0.082
10	61.000	0.494	46	120.000	0.072	82	165.900	0.143	118	228.900	0.007
11	61.900	0.174	47	122.000	1.278	83	167.000	0.351	119	231.900	0.024
12	63.000	0.218	48	123.100	0.095	84	168.000	0.048	120	232.900	0.020
13	64.000	0.106	49	124.300	0.003	85	169.100	0.112	121	234.900	0.010
14	65.000	0.112	50	125.000	0.017	86	176.900	0.020	122	236.000	0.007
15	66.100	0.014	51	125.700	0.007	87	178.000	0.048	123	239.800	0.003
16	67.100	0.010	52	127.100	0.160	88	179.000	0.075	124	242.800	0.010
17	67.900	0.010	53	128.000	0.055	89	180.100	0.334	125	244.800	0.007
18	68.900	0.017	54	129.400	0.061	90	180.900	0.082	126	247.000	0.007
19	71.200	0.007	55	131.100	0.037	91	182.000	0.010	127	249.400	0.003
20	74.000	0.078	56	132.000	0.078	92	184.100	0.099	128	253.000	0.003
21	74.900	0.031	57	133.000	0.037	93	185.000	0.092	129	264.900	0.014
22	76.000	0.143	58	134.000	0.102	94	191.000	0.109	130	281.000	0.136
23	76.900	4.739	59	135.000	0.191	95	192.100	0.034	131	301.400	0.007
24	77.900	0.341	60	136.000	0.048	96	193.900	0.041	132	354.700	0.003
25	79.000	0.055	61	137.100	0.010	97	195.100	0.245	133	400.600	0.037
26	80.000	0.017	62	139.000	0.181	98	196.000	0.208	134	441.000	0.014
27	80.900	0.075	63	140.100	0.198	99	197.000	0.566	135	443.200	0.003
28	94.000	0.014	64	141.100	0.075	100	197.800	0.024	136	462.900	0.003
29	97.000	0.017	65	142.100	0.007	101	201.900	0.027	137	694.200	0.003
30	101.100	0.020	66	142.900	0.003	102	202.900	0.007	138	825.000	0.027
31	102.100	0.014	67	144.000	0.007	103	204.100	0.007	139	846.700	0.003
32	103.100	0.371	68	145.700	0.048	104	207.000	0.337	140	847.900	0.003
33	104.100	1.990	69	147.100	0.037	105	207.900	0.034	141	862.300	0.003
34	105.000	47.673	70	148.200	0.027	106	209.000	0.382	142	893.500	0.003
35	106.000	5.032	71	149.100	0.092	107	210.000	7.884			
36	107.000	0.422	72	151.000	0.174	108	211.000	10.037			

Figura 143 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com ZnO; T.R.= 16.2; N-metil-fenil-benzamida (continuação)

### B.3.2 $Co(acac)_2$

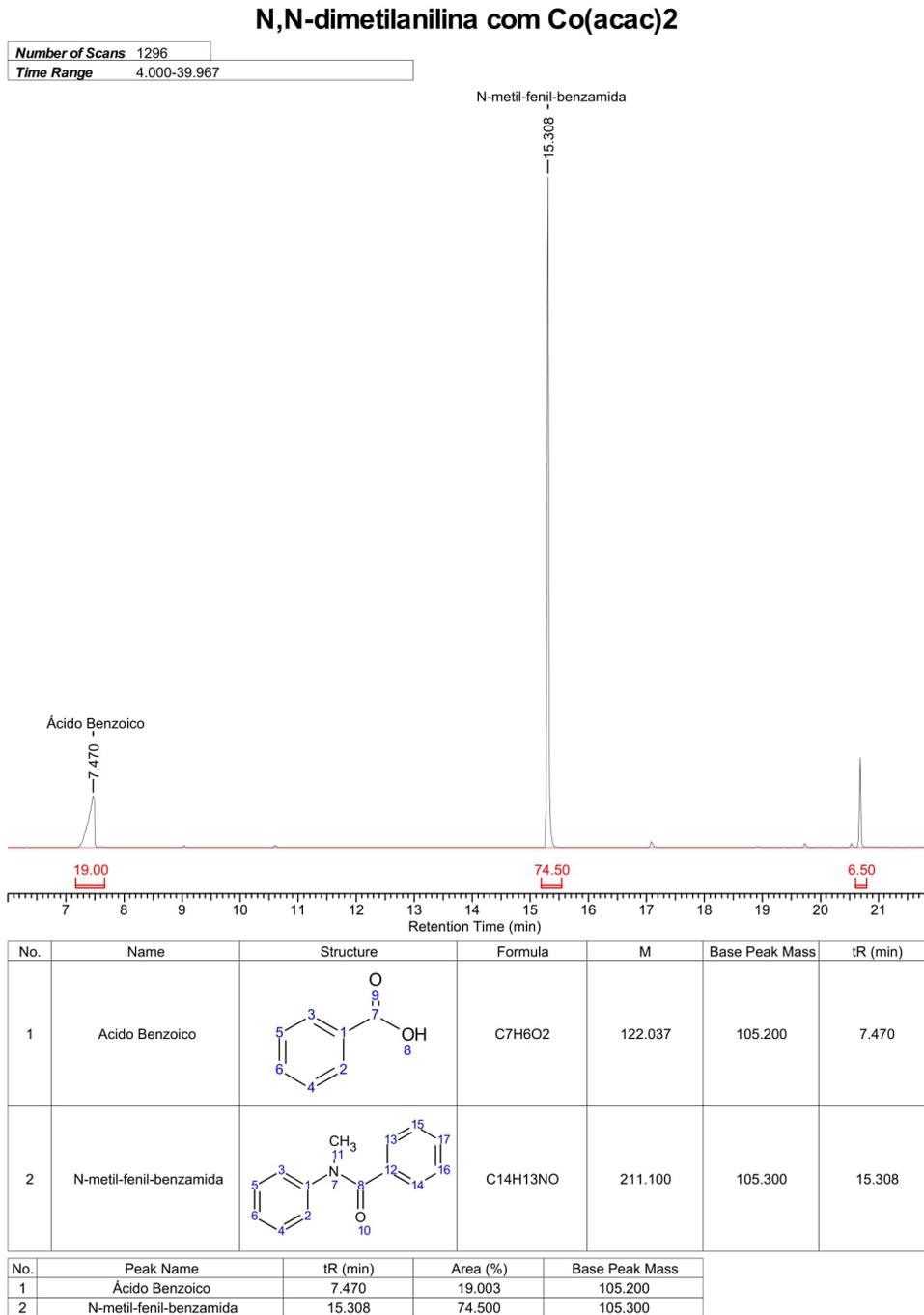
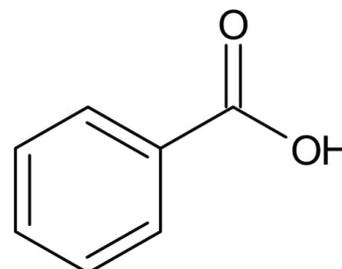


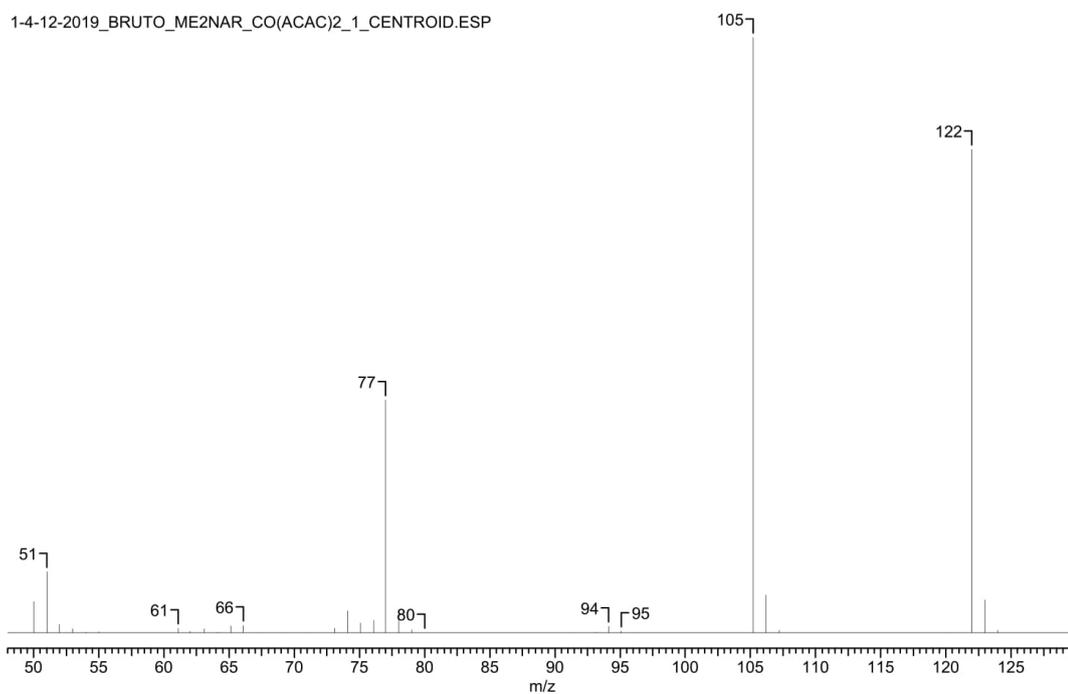
Figura 144 – Cromatograma da reação N,N-dimetilanilina com  $Co(acac)_2$

### N,N-dimetilanilina com Co(acac)<sub>2</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	122.1213
<b>Count</b>	180	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	1-4-12-2019 BRUTO ME2NAR CO(ACAC)2 1	<b>Date</b>	12 Apr 19 12:54 pm
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>TIC</b>	269.41	<b>Retention Time</b>	7.470
		<b>Scan</b>	129
		<b>Total Signal</b>	141985



1-4-12-2019\_BRUTO\_ME2NAR\_CO(ACAC)2\_1\_CENTROID.ESP



No.	m/z	RI(%)	DI
1	51.000	10.233	5393.018
2	77.000	39.055	20583.066
3	105.200	100.000	52702.172
4	122.000	81.211	42800.137

Figura 145 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com Co(acac)<sub>2</sub>; T.R.=7.5; Ácido benzóico

No.	m/z	TIC(%)									
1	50.000	1.958	47	105.200	37.118	93	330.800	0.001	139	686.300	0.001
2	51.000	3.798	48	106.200	2.349	94	354.600	0.001	140	700.300	0.001
3	52.000	0.525	49	107.200	0.172	95	355.900	0.001	141	703.000	0.001
4	53.000	0.250	50	108.200	0.001	96	356.500	0.001	142	717.000	0.001
5	54.000	0.029	51	119.200	0.006	97	357.900	0.001	143	717.700	0.001
6	55.000	0.070	52	120.300	0.001	98	382.000	0.001	144	724.900	0.001
7	56.000	0.001	53	122.000	30.144	99	383.000	0.001	145	725.700	0.001
8	60.100	0.011	54	123.000	2.031	100	384.000	0.001	146	733.100	0.001
9	61.100	0.271	55	124.000	0.155	101	392.100	0.001	147	739.000	0.001
10	62.000	0.106	56	124.900	0.006	102	393.500	0.001	148	739.700	0.001
11	63.100	0.255	57	132.900	0.001	103	398.500	0.001	149	740.700	0.001
12	64.100	0.051	58	136.000	0.001	104	400.100	0.001	150	741.500	0.001
13	65.100	0.443	59	139.200	0.001	105	401.000	0.001	151	774.300	0.001
14	66.100	0.455	60	140.800	0.001	106	413.800	0.001	152	775.400	0.001
15	67.200	0.020	61	150.000	0.006	107	415.700	0.001	153	776.100	0.001
16	68.000	0.021	62	175.200	0.001	108	453.800	0.001	154	790.800	0.001
17	69.200	0.008	63	209.700	0.001	109	470.300	0.001	155	794.400	0.001
18	70.100	0.001	64	211.200	0.001	110	472.200	0.001	156	811.400	0.001
19	71.100	0.001	65	212.600	0.001	111	474.000	0.001	157	828.600	0.001
20	72.000	0.006	66	217.400	0.001	112	491.300	0.001	158	831.800	0.001
21	73.100	0.273	67	218.600	0.001	113	494.600	0.001	159	832.700	0.001
22	74.100	1.364	68	227.000	0.001	114	507.500	0.001	160	848.500	0.001
23	75.100	0.610	69	228.000	0.001	115	508.400	0.001	161	856.000	0.001
24	76.100	0.792	70	232.800	0.001	116	509.300	0.001	162	871.100	0.001
25	77.000	14.497	71	234.900	0.001	117	522.900	0.001	163	877.500	0.001
26	78.000	1.257	72	250.800	0.001	118	541.600	0.001	164	878.700	0.001
27	79.000	0.182	73	251.500	0.001	119	542.300	0.001	165	879.500	0.001
28	80.000	0.011	74	254.700	0.001	120	555.400	0.001	166	887.500	0.001
29	81.000	0.007	75	257.800	0.001	121	559.000	0.001	167	888.400	0.001
30	82.000	0.002	76	271.900	0.001	122	570.900	0.001	168	889.400	0.001
31	84.100	0.001	77	272.800	0.001	123	572.800	0.001	169	902.200	0.001
32	85.000	0.001	78	274.300	0.001	124	573.600	0.001	170	909.900	0.001
33	86.000	0.001	79	280.800	0.001	125	587.100	0.001	171	918.000	0.001
34	87.000	0.002	80	282.000	0.001	126	603.800	0.001	172	920.400	0.001
35	89.000	0.012	81	284.500	0.001	127	604.900	0.001	173	936.400	0.001
36	89.900	0.005	82	285.600	0.001	128	616.700	0.001	174	949.200	0.001
37	91.100	0.019	83	286.400	0.001	129	619.300	0.001	175	958.400	0.001
38	92.100	0.018	84	301.900	0.001	130	620.200	0.001	176	959.100	0.001
39	93.100	0.047	85	302.600	0.001	131	621.800	0.001	177	975.300	0.001
40	94.100	0.403	86	304.100	0.001	132	633.000	0.001	178	976.000	0.001
41	95.100	0.090	87	304.800	0.001	133	653.000	0.001	179	990.600	0.001
42	96.100	0.006	88	306.300	0.001	134	654.000	0.001	180	991.300	0.001
43	99.000	0.001	89	307.000	0.001	135	668.100	0.001			
44	100.900	0.001	90	321.100	0.001	136	670.600	0.001			
45	102.900	0.001	91	321.800	0.001	137	683.700	0.001			
46	103.600	0.007	92	329.100	0.001	138	684.500	0.001			

Figura 146 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com  $Co(acac)_2$ ; T.R.=7.5; Ácido benzóico (continuação)

### N,N-dimetilanilina com Co(acac)<sub>2</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> NO	<b>FW</b>	211.2591
<b>Count</b>	317	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	1-4-12-2019_BRUTO_ME2NAR_CO(ACAC)2_1	<b>Date</b>	12 Apr 19 12:54 pm
<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>TIC</b>	267.05	<b>Retention Time</b>	15.308
		<b>Total Signal</b>	1844386
		<b>Inlet Model</b>	GC
		<b>Scan</b>	411

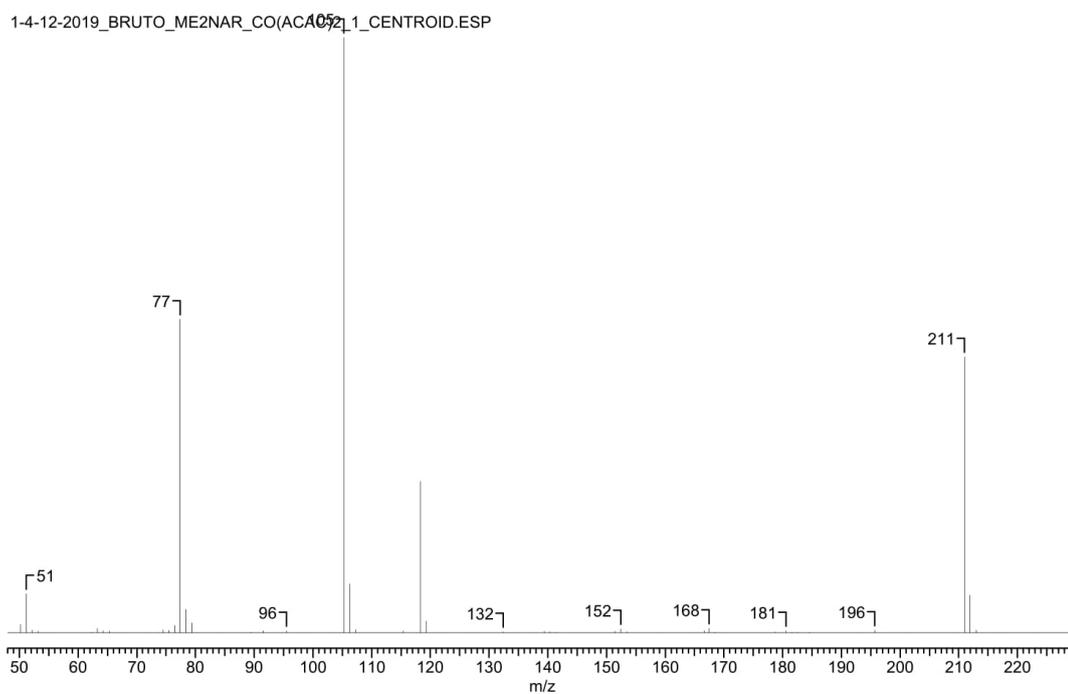
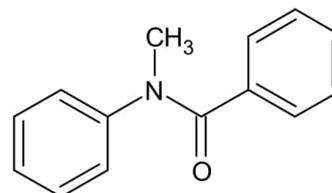


Figura 147 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com Co(acac)<sub>2</sub>; T.R.= 15.3; N-metil-fenil-benzamida

No.	m/z	TIC(%)									
1	50.200	0.519	69	147.900	0.000	137	409.700	0.001	205	599.500	0.001
2	51.200	2.472	70	150.400	0.025	138	412.900	0.001	206	600.200	0.001
3	52.200	0.160	71	151.400	0.108	139	414.000	0.001	207	601.200	0.001
4	53.200	0.090	72	152.400	0.259	140	415.400	0.001	208	602.800	0.001
5	54.300	0.001	73	153.500	0.062	141	416.500	0.001	209	604.200	0.001
6	55.300	0.001	74	154.400	0.007	142	418.400	0.001	210	613.000	0.001
7	61.300	0.001	75	158.700	0.001	143	419.800	0.001	211	615.300	0.001
8	62.300	0.046	76	160.000	0.001	144	431.100	0.000	212	621.500	0.001
9	63.300	0.291	77	162.300	0.001	145	433.800	0.001	213	629.600	0.001
10	64.300	0.128	78	164.600	0.014	146	435.200	0.001	214	633.400	0.001
11	65.400	0.100	79	165.600	0.014	147	442.900	0.001	215	635.100	0.000
12	66.400	0.025	80	166.600	0.127	148	446.500	0.001	216	637.900	0.001
13	67.500	0.000	81	167.500	0.279	149	449.700	0.001	217	638.800	0.001
14	72.100	0.001	82	168.500	0.035	150	450.500	0.001	218	648.700	0.001
15	73.600	0.008	83	169.500	0.009	151	452.000	0.001	219	652.300	0.001
16	74.500	0.181	84	170.200	0.001	152	455.400	0.001	220	653.900	0.001
17	75.500	0.156	85	176.400	0.001	153	456.600	0.000	221	662.800	0.001
18	76.500	0.460	86	177.100	0.001	154	466.400	0.001	222	665.300	0.001
19	77.400	19.722	87	178.700	0.062	155	468.600	0.001	223	670.500	0.001
20	78.400	1.490	88	180.600	0.121	156	469.800	0.001	224	674.000	0.001
21	79.400	0.633	89	181.600	0.035	157	470.600	0.001	225	675.200	0.001
22	80.300	0.008	90	182.600	0.036	158	473.700	0.001	226	680.300	0.001
23	84.000	0.000	91	183.500	0.001	159	476.600	0.001	227	682.600	0.001
24	87.500	0.003	92	184.600	0.043	160	487.900	0.001	228	692.700	0.001
25	88.600	0.001	93	185.200	0.001	161	488.900	0.001	229	695.000	0.001
26	89.500	0.045	94	191.100	0.001	162	491.300	0.001	230	696.700	0.001
27	90.400	0.017	95	193.800	0.004	163	496.600	0.001	231	702.900	0.001
28	91.500	0.131	96	195.700	0.157	164	497.800	0.001	232	707.200	0.001
29	92.500	0.009	97	196.700	0.022	165	498.700	0.001	233	708.400	0.001
30	93.400	0.009	98	198.600	0.001	166	500.500	0.001	234	709.300	0.001
31	94.800	0.001	99	200.000	0.000	167	505.100	0.001	235	711.300	0.001
32	95.500	0.145	100	201.200	0.001	168	506.100	0.001	236	712.400	0.001
33	97.200	0.001	101	208.900	0.001	169	507.900	0.001	237	719.300	0.001
34	98.400	0.001	102	211.000	17.359	170	508.600	0.001	238	720.000	0.001
35	99.600	0.001	103	211.900	2.363	171	509.700	0.001	239	721.200	0.001
36	102.100	0.001	104	213.000	0.176	172	514.100	0.001	240	723.000	0.001
37	102.900	0.009	105	213.900	0.010	173	515.700	0.000	241	725.300	0.001
38	103.600	0.026	106	216.900	0.001	174	516.800	0.001	242	730.600	0.001
39	105.300	37.446	107	217.800	0.001	175	524.200	0.001	243	731.400	0.001
40	106.300	3.071	108	222.600	0.001	176	525.100	0.001	244	734.500	0.001
41	107.300	0.203	109	225.200	0.001	177	526.400	0.001	245	735.800	0.001
42	109.100	0.001	110	233.000	0.001	178	527.900	0.001	246	740.000	0.001
43	111.500	0.001	111	234.200	0.001	179	530.400	0.001	247	741.000	0.001
44	113.500	0.009	112	236.000	0.000	180	534.400	0.000	248	741.900	0.001
45	114.500	0.016	113	242.900	0.001	181	535.500	0.001	249	742.900	0.001
46	115.400	0.150	114	244.400	0.001	182	538.000	0.001	250	750.200	0.001
47	116.500	0.017	115	247.100	0.001	183	543.700	0.001	251	754.500	0.001
48	117.700	0.006	116	252.500	0.001	184	545.200	0.001	252	758.700	0.000
49	118.300	9.523	117	254.400	0.001	185	546.600	0.001	253	760.900	0.001
50	119.300	0.751	118	263.000	0.001	186	550.000	0.001	254	762.100	0.001
51	120.400	0.001	119	269.700	0.001	187	554.000	0.001	255	764.600	0.001
52	121.200	0.001	120	270.600	0.001	188	556.600	0.001	256	765.500	0.001
53	122.300	0.001	121	279.000	0.001	189	561.900	0.001	257	766.600	0.001
54	126.400	0.009	122	280.200	0.001	190	563.200	0.001	258	767.300	0.000
55	127.400	0.026	123	289.000	0.001	191	564.100	0.001	259	769.100	0.001
56	128.300	0.017	124	308.200	0.000	192	564.900	0.001	260	778.100	0.001
57	131.300	0.001	125	312.900	0.001	193	566.400	0.001	261	780.100	0.001
58	132.400	0.059	126	327.900	0.001	194	567.400	0.001	262	783.100	0.001
59	133.300	0.022	127	340.400	0.001	195	572.500	0.001	263	785.300	0.001
60	134.400	0.006	128	341.500	0.001	196	574.500	0.001	264	786.600	0.001
61	137.300	0.001	129	347.700	0.001	197	575.300	0.001	265	796.400	0.001
62	138.500	0.001	130	348.500	0.001	198	582.200	0.001	266	799.200	0.001
63	139.400	0.096	131	360.700	0.001	199	582.800	0.001	267	800.300	0.001
64	140.300	0.079	132	362.900	0.001	200	583.700	0.001	268	805.100	0.001
65	141.500	0.047	133	377.000	0.001	201	585.100	0.000	269	806.100	0.001
66	144.700	0.001	134	389.600	0.001	202	591.400	0.001	270	807.000	0.001
67	145.400	0.001	135	390.300	0.001	203	593.400	0.001	271	816.100	0.001
68	146.800	0.001	136	391.800	0.001	204	598.900	0.001	272	817.400	0.001

Figura 148 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com  $Co(acac)_2$ ; T.R.= 15.3; N-metil-fenil-benzamida (continuação 1)

No.	<i>m/z</i>	TIC(%)
273	820.600	0.001
274	821.600	0.001
275	823.700	0.000
276	826.600	0.001
277	829.000	0.001
278	840.100	0.001
279	841.500	0.001
280	843.500	0.001
281	844.400	0.001
282	852.500	0.000
283	856.800	0.001
284	857.800	0.001
285	862.900	0.001
286	863.700	0.001
287	867.000	0.001
288	873.100	0.001
289	880.700	0.001
290	883.100	0.001
291	884.900	0.001
292	886.300	0.001
293	888.500	0.001
294	898.300	0.000
295	902.200	0.001
296	907.200	0.001
297	908.900	0.001
298	915.300	0.001
299	919.400	0.001
300	922.600	0.001
301	924.300	0.001
302	925.800	0.000
303	933.600	0.001
304	935.000	0.001
305	937.000	0.001
306	939.200	0.001
307	952.600	0.001
308	954.200	0.001
309	956.800	0.001
310	957.800	0.001
311	958.700	0.000
312	969.000	0.001
313	973.300	0.001
314	985.700	0.001
315	988.600	0.001
316	989.600	0.001
317	993.600	0.001

Figura 149 – Espectro de Massas; Reação *N,N*-dimetilanilina com  $Co(acac)_2$ ; T.R.= 15.3; *N*-metil-fenil-benzamida (continuação 2)

### B.3.3 $AuCl_3$

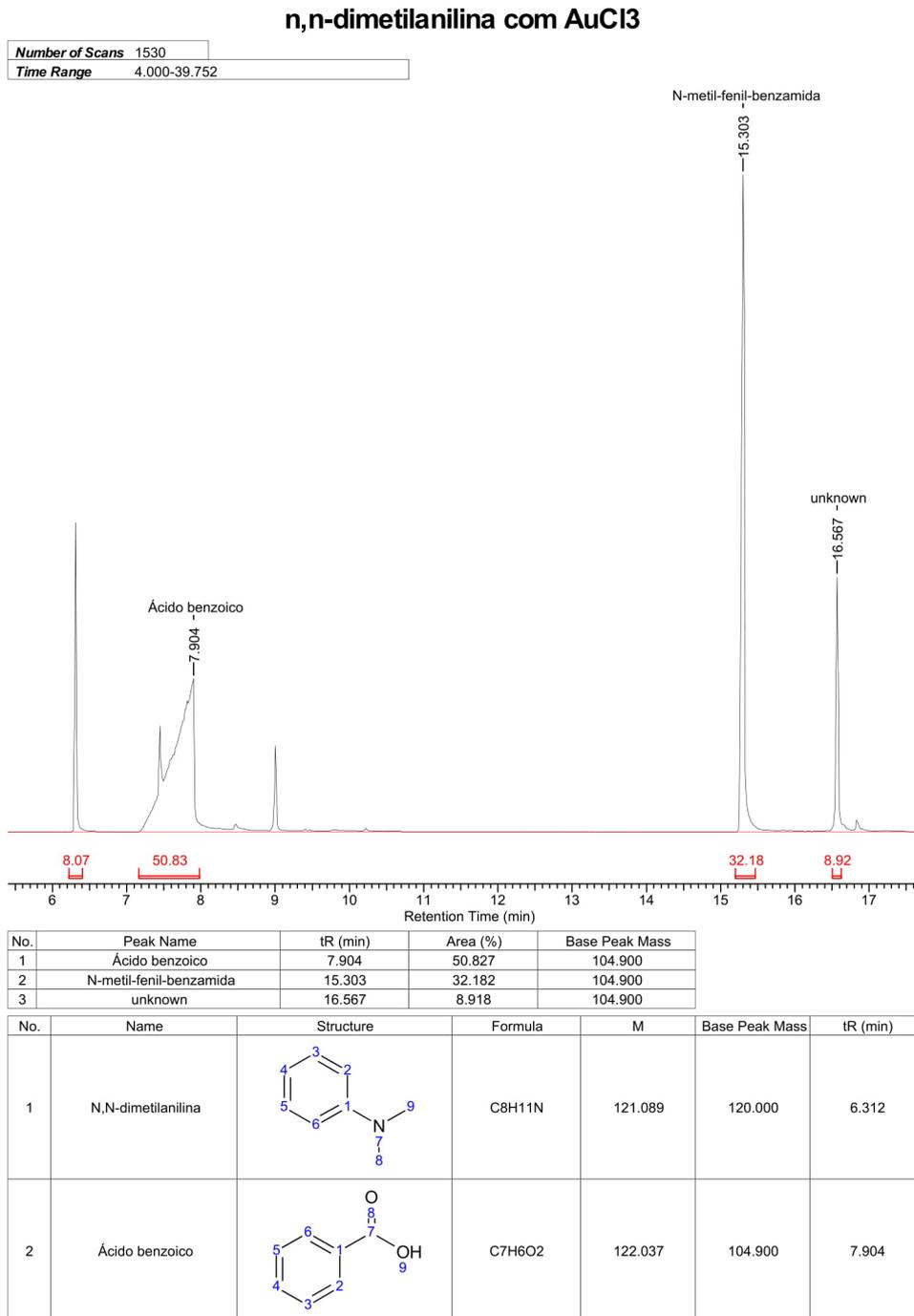


Figura 150 – Cromatograma da reação N,N-dimetilanilina com  $AuCl_3$

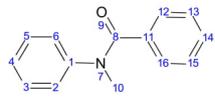
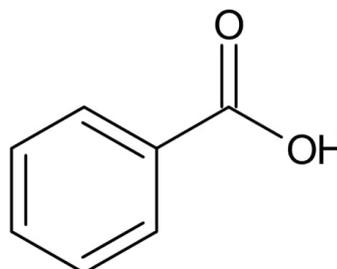
No.	Name	Structure	Formula	M	Base Peak Mass	tR (min)
3	N-metil-fenil-benzamida		C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> NO	211.100	104.900	15.303

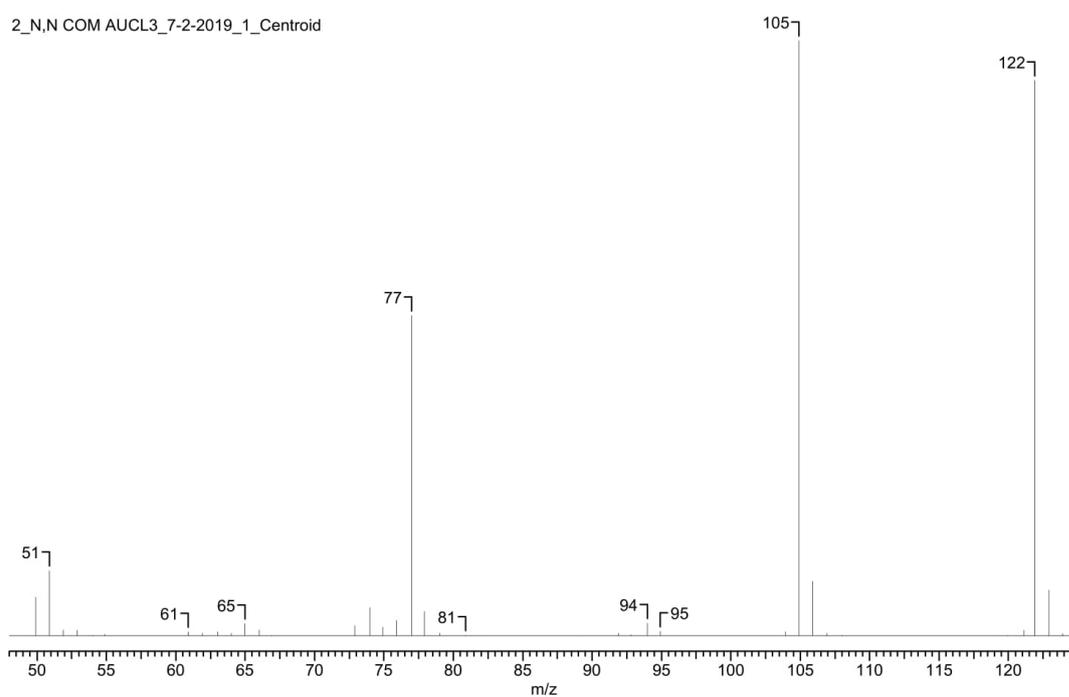
Figura 151 – Cromatograma da reação *N,N*-dimetilanilina com  $AuCl_3$  (continuação)

n,n-dimetilanilina com AuCl<sub>3</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	<b>FW</b>	122.1213
<b>Count</b>	181	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	2_N,N COM AUCL3_7-2-2019_1	<b>Date</b>	02 Jul 19 05:21 am
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>Total Signal</b>	6605105	<b>Retention Time</b>	7.904
		<b>Scan</b>	184
		<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
		<b>TIC</b>	312.49



2\_N,N COM AUCL3\_7-2-2019\_1\_Centroid



No.	m/z	RI(%)	DI
1	50.900	11.015	232833.438
2	77.000	53.831	1137830.125
3	104.900	100.000	2113716.750
4	121.900	93.274	1971550.125

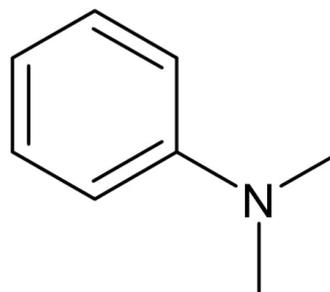
Figura 152 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com AuCl<sub>3</sub>; T.R.=7.9; Ácido benzóico

No.	m/z	TIC(%)									
1	49.900	2.089	47	150.000	0.004	93	521.600	0.001	139	746.600	0.001
2	50.900	3.525	48	160.900	0.003	94	530.000	0.001	140	750.400	0.001
3	51.900	0.331	49	161.900	0.001	95	532.700	0.001	141	751.300	0.001
4	52.900	0.295	50	165.700	0.001	96	537.000	0.001	142	761.300	0.001
5	54.000	0.040	51	171.500	0.001	97	551.400	0.001	143	776.100	0.001
6	54.900	0.091	52	178.800	0.037	98	552.600	0.001	144	777.700	0.006
7	60.900	0.232	53	186.100	0.001	99	559.700	0.001	145	787.700	0.002
8	61.900	0.144	54	212.000	0.001	100	561.400	0.001	146	797.600	0.001
9	63.000	0.217	55	212.700	0.001	101	562.600	0.001	147	799.500	0.033
10	64.000	0.133	56	218.300	0.001	102	566.000	0.009	148	800.200	0.001
11	65.000	0.670	57	233.300	0.001	103	577.600	0.001	149	801.500	0.001
12	66.000	0.320	58	234.800	0.002	104	578.500	0.001	150	810.300	0.001
13	66.900	0.046	59	242.600	0.001	105	579.500	0.000	151	812.500	0.001
14	72.900	0.559	60	244.000	0.001	106	583.600	0.001	152	814.000	0.001
15	74.000	1.538	61	247.900	0.003	107	584.300	0.001	153	816.200	0.001
16	74.900	0.487	62	249.300	0.001	108	596.300	0.000	154	818.200	0.001
17	75.900	0.823	63	262.800	0.001	109	597.100	0.000	155	829.200	0.001
18	77.000	17.227	64	283.200	0.093	110	598.700	0.001	156	835.000	0.001
19	77.900	1.323	65	295.600	0.023	111	599.700	0.001	157	836.300	0.001
20	79.000	0.151	66	318.100	0.001	112	602.600	0.001	158	854.300	0.001
21	80.900	0.044	67	350.000	0.001	113	609.400	0.001	159	855.000	0.001
22	82.000	0.005	68	375.300	0.001	114	619.900	0.001	160	856.000	0.001
23	89.100	0.013	69	376.400	0.001	115	636.200	0.003	161	873.400	0.001
24	91.900	0.129	70	377.100	0.001	116	639.900	0.001	162	875.100	0.001
25	92.800	0.072	71	379.000	0.001	117	641.900	0.001	163	877.900	0.001
26	94.000	0.685	72	393.600	0.003	118	643.500	0.000	164	889.100	0.000
27	94.900	0.259	73	423.800	0.001	119	660.900	0.001	165	890.600	0.001
28	96.000	0.000	74	425.600	0.002	120	662.000	0.001	166	892.800	0.001
29	102.700	0.009	75	432.000	0.003	121	664.000	0.001	167	917.100	0.001
30	103.900	0.219	76	434.400	0.001	122	671.000	0.001	168	918.800	0.001
31	104.900	32.001	77	438.200	0.001	123	672.900	0.001	169	919.900	0.001
32	105.900	2.952	78	442.900	0.001	124	682.600	0.000	170	924.700	0.009
33	106.900	0.147	79	445.100	0.001	125	698.700	0.001	171	948.200	0.015
34	108.000	0.029	80	447.500	0.001	126	699.900	0.000	172	950.100	0.001
35	119.000	0.017	81	448.200	0.014	127	702.300	0.000	173	965.300	0.001
36	119.900	0.025	82	449.500	0.001	128	704.200	0.001	174	974.000	0.016
37	121.100	0.297	83	457.600	0.001	129	710.200	0.001	175	975.400	0.001
38	121.900	29.849	84	458.700	0.001	130	714.300	0.001	176	976.100	0.001
39	122.900	2.461	85	461.000	0.015	131	715.200	0.001	177	979.700	0.000
40	123.900	0.109	86	484.100	0.001	132	716.200	0.001	178	980.600	0.001
41	128.200	0.001	87	491.100	0.006	133	719.300	0.001	179	986.700	0.001
42	133.800	0.001	88	494.500	0.001	134	720.000	0.001	180	992.400	0.001
43	134.700	0.020	89	504.300	0.001	135	730.200	0.003	181	996.900	0.001
44	138.100	0.001	90	505.900	0.001	136	743.400	0.001			
45	142.000	0.009	91	507.500	0.001	137	744.400	0.001			
46	144.900	0.001	92	517.600	0.005	138	745.100	0.001			

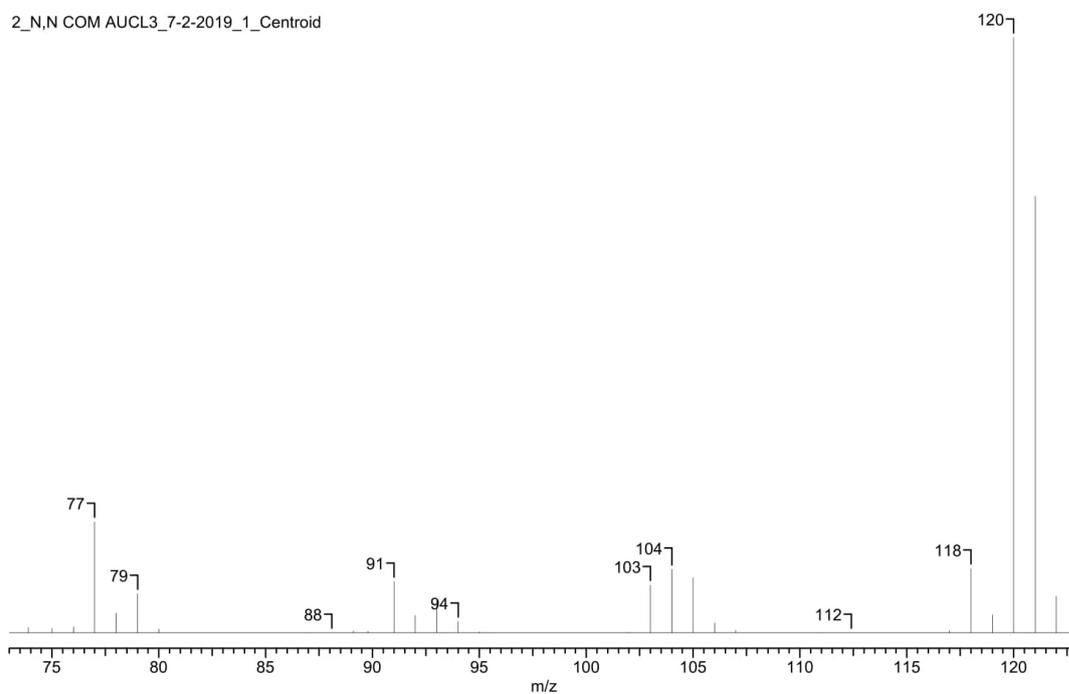
Figura 153 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com  $AlCl_3$ ; T.R.=7.9; Ácido benzóico (continuação)

n,n-dimetilanilina com AuCl<sub>3</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N	<b>FW</b>	121.1796
<b>Count</b>	196	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	2_N,N COM AUCL3_7-2-2019_1	<b>Date</b>	02 Jul 19 05:21 am
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>Total Signal</b>	13340519	<b>Retention Time</b>	6.312
		<b>Scan</b>	93
		<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
		<b>TIC</b>	291.08



2\_N,N COM AUCL3\_7-2-2019\_1\_Centroid



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.000	18.687	856445.188
2	104.000	10.666	488854.563
3	118.000	10.848	497172.500
4	120.000	100.000	4583142.000
5	121.000	73.324	3360522.750

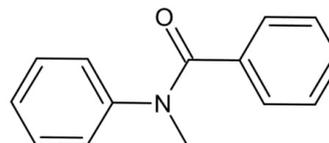
Figura 154 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com AuCl<sub>3</sub>; T.R.= 6.3; N,N-dimetilanilina

No.	m/z	TIC(%)									
1	49.900	0.624	51	118.000	3.727	101	404.700	0.000	151	712.600	0.000
2	50.900	1.542	52	119.000	1.054	102	406.400	0.000	152	713.500	0.007
3	51.800	0.168	53	120.000	34.355	103	411.200	0.000	153	733.800	0.001
4	52.800	0.187	54	121.000	25.190	104	431.500	0.000	154	734.500	0.001
5	53.800	0.097	55	122.000	2.114	105	432.600	0.000	155	745.500	0.000
6	54.500	0.000	56	123.000	0.131	106	441.200	0.000	156	747.800	0.000
7	55.900	0.000	57	131.900	0.056	107	442.700	0.000	157	748.800	0.001
8	57.200	0.000	58	132.900	0.012	108	454.400	0.012	158	750.300	0.000
9	58.400	0.147	59	134.900	0.030	109	455.400	0.001	159	751.100	0.000
10	59.500	0.082	60	149.000	0.015	110	460.600	0.009	160	761.000	0.001
11	60.300	0.075	61	185.500	0.000	111	462.800	0.001	161	766.500	0.001
12	60.900	0.060	62	190.300	0.000	112	468.600	0.000	162	773.500	0.001
13	61.900	0.096	63	191.700	0.001	113	470.600	0.000	163	776.800	0.001
14	63.000	0.511	64	195.500	0.000	114	472.300	0.001	164	786.100	0.000
15	64.000	0.218	65	196.400	0.000	115	474.300	0.001	165	786.800	0.000
16	65.000	0.497	66	202.900	0.034	116	478.800	0.006	166	812.500	0.001
17	65.900	0.218	67	209.900	0.002	117	489.400	0.000	167	825.500	0.000
18	67.000	0.117	68	216.900	0.001	118	498.600	0.000	168	828.500	0.000
19	68.900	0.029	69	237.300	0.000	119	499.900	0.000	169	839.100	0.000
20	70.300	0.001	70	238.300	0.000	120	510.300	0.002	170	844.700	0.001
21	71.200	0.000	71	239.600	0.000	121	519.300	0.001	171	849.900	0.000
22	72.900	0.067	72	248.000	0.000	122	520.700	0.006	172	854.100	0.002
23	73.900	0.316	73	254.900	0.006	123	537.100	0.001	173	855.600	0.007
24	75.000	0.275	74	256.100	0.000	124	539.000	0.002	174	861.100	0.000
25	76.000	0.337	75	259.700	0.007	125	559.000	0.000	175	875.200	0.000
26	77.000	6.420	76	262.400	0.000	126	562.800	0.000	176	885.600	0.000
27	78.000	1.141	77	267.000	0.000	127	564.400	0.001	177	887.100	0.000
28	79.000	2.254	78	282.100	0.000	128	580.100	0.005	178	890.100	0.005
29	80.000	0.213	79	303.800	0.001	129	582.500	0.000	179	904.900	0.004
30	86.900	0.000	80	308.600	0.000	130	583.300	0.000	180	907.300	0.000
31	88.100	0.007	81	315.100	0.002	131	591.000	0.004	181	927.900	0.000
32	89.100	0.137	82	319.400	0.001	132	597.600	0.000	182	937.800	0.000
33	89.800	0.084	83	329.200	0.000	133	599.000	0.000	183	938.700	0.000
34	91.000	2.947	84	329.900	0.000	134	619.500	0.001	184	942.700	0.015
35	92.000	1.027	85	333.900	0.003	135	624.000	0.001	185	944.100	0.000
36	93.000	1.884	86	339.700	0.000	136	624.900	0.000	186	947.600	0.000
37	94.000	0.662	87	346.500	0.007	137	625.800	0.000	187	949.300	0.000
38	95.000	0.071	88	348.700	0.002	138	626.500	0.003	188	950.000	0.000
39	95.700	0.010	89	355.700	0.001	139	629.400	0.001	189	954.700	0.001
40	102.000	0.041	90	360.900	0.004	140	635.300	0.000	190	972.000	0.000
41	103.000	2.758	91	373.100	0.000	141	643.400	0.001	191	975.600	0.000
42	104.000	3.664	92	373.900	0.000	142	644.600	0.000	192	977.800	0.001
43	105.000	3.188	93	376.000	0.000	143	646.600	0.000	193	979.600	0.001
44	106.000	0.578	94	376.800	0.000	144	667.400	0.001	194	980.900	0.000
45	107.000	0.148	95	379.900	0.005	145	671.600	0.036	195	992.700	0.012
46	111.000	0.000	96	386.200	0.000	146	672.500	0.001	196	998.300	0.000
47	112.400	0.000	97	386.900	0.000	147	674.000	0.000			
48	114.800	0.002	98	400.300	0.005	148	676.500	0.001			
49	116.200	0.003	99	401.300	0.000	149	677.200	0.001			
50	117.000	0.130	100	403.000	0.000	150	710.500	0.000			

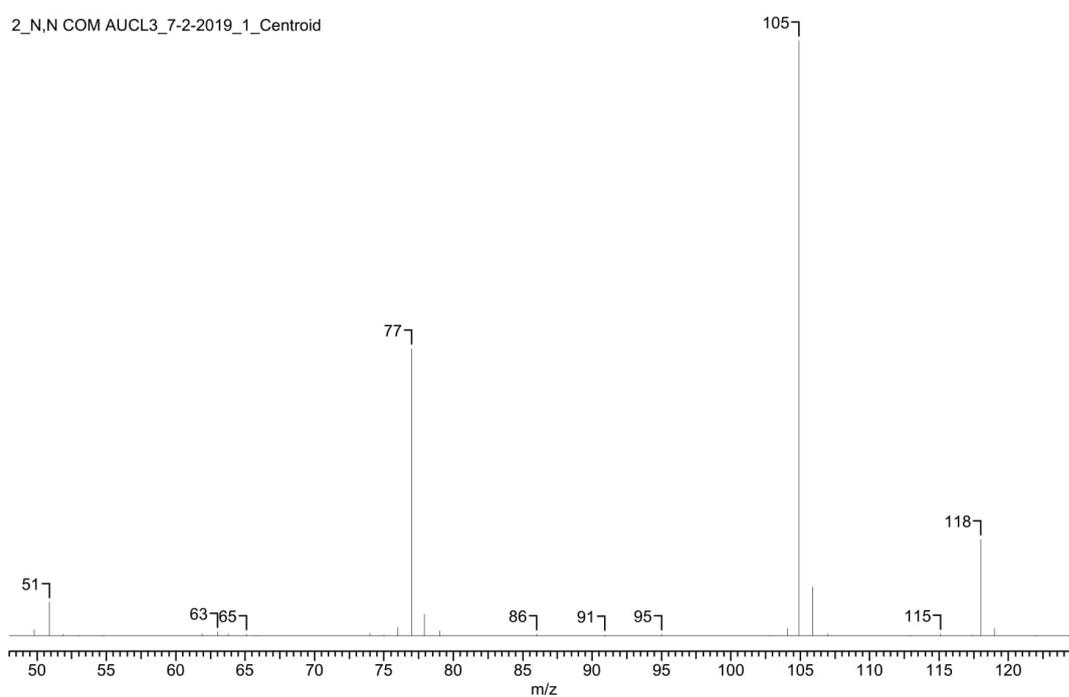
Figura 155 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com  $AlCl_3$ ; T.R.= 6.3; N,N-dimetilanilina (continuação)

### n,n-dimetilanilina com AuCl<sub>3</sub>

<b>Formula</b>	C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> NO	<b>FW</b>	211.2591
<b>Count</b>	193	<b>Data Type</b>	Centroid
<b>File Name</b>	2_N,N COM AUCL3_7-2-2019_1	<b>Date</b>	02 Jul 19 05:21 am
<b>Plot Type</b>	Stick	<b>Inlet Model</b>	GC
<b>Total Signal</b>	28343152	<b>Retention Time</b>	15.303
		<b>Scan</b>	566
		<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn
		<b>TIC</b>	264.80



2\_N,N COM AUCL3\_7-2-2019\_1\_Centroid



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.000	48.210	5160203.500
2	104.900	100.000	10703629.000
3	118.000	16.191	1733037.375
4	210.100	30.036	3214993.750
5	211.000	32.002	3425396.000

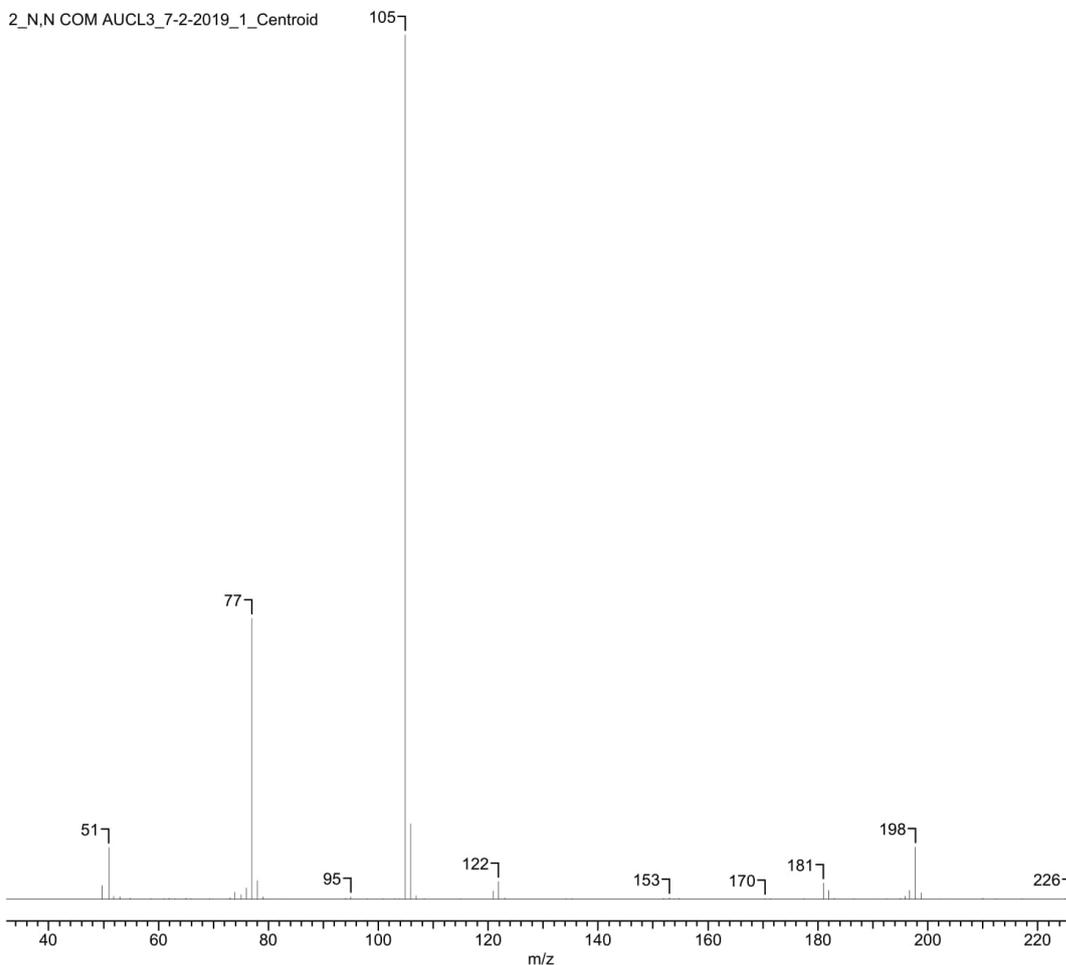
Figura 156 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com AuCl<sub>3</sub>; T.R.= 15.3; N-metil-fenil-benzamida

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	49.800	0.406	50	113.900	0.021	99	214.900	0.005	148	664.200	0.001
2	50.900	2.136	51	115.100	0.123	100	217.600	0.001	149	665.300	0.006
3	51.900	0.106	52	116.000	0.007	101	219.900	0.001	150	666.500	0.001
4	53.000	0.059	53	117.400	0.071	102	248.800	0.008	151	668.200	0.001
5	53.900	0.018	54	118.000	6.114	103	275.800	0.004	152	670.100	0.001
6	54.800	0.028	55	119.000	0.476	104	279.200	0.000	153	707.600	0.001
7	55.800	0.001	56	120.200	0.006	105	294.100	0.001	154	708.400	0.000
8	57.600	0.001	57	122.000	0.033	106	295.900	0.001	155	711.400	0.000
9	59.200	0.001	58	123.100	0.016	107	300.700	0.001	156	746.600	0.003
10	59.900	0.001	59	126.100	0.010	108	315.000	0.025	157	749.700	0.001
11	61.000	0.008	60	127.000	0.052	109	315.800	0.001	158	752.000	0.001
12	61.900	0.127	61	128.000	0.001	110	316.900	0.001	159	753.600	0.001
13	63.000	0.256	62	131.900	0.002	111	326.400	0.001	160	756.000	0.009
14	63.800	0.122	63	136.900	0.002	112	327.300	0.001	161	758.200	0.016
15	65.100	0.103	64	139.000	0.187	113	328.200	0.001	162	774.600	0.001
16	65.800	0.045	65	140.000	0.041	114	330.700	0.005	163	775.800	0.001
17	67.400	0.003	66	141.000	0.088	115	332.500	0.001	164	779.700	0.012
18	70.600	0.003	67	141.700	0.008	116	346.900	0.001	165	783.900	0.003
19	74.000	0.167	68	149.800	0.039	117	348.500	0.001	166	793.600	0.007
20	75.000	0.088	69	150.800	0.033	118	361.500	0.001	167	795.000	0.001
21	76.000	0.542	70	152.100	0.229	119	363.300	0.006	168	796.900	0.001
22	77.000	18.206	71	152.900	0.061	120	374.800	0.007	169	798.700	0.001
23	77.900	1.382	72	154.100	0.016	121	393.200	0.001	170	800.200	0.001
24	79.000	0.309	73	155.200	0.012	122	394.700	0.001	171	801.100	0.001
25	79.700	0.004	74	157.400	0.006	123	399.400	0.000	172	817.100	0.001
26	83.600	0.008	75	158.400	0.001	124	419.200	0.001	173	827.200	0.004
27	85.000	0.001	76	160.700	0.005	125	425.400	0.001	174	852.400	0.001
28	86.000	0.094	77	164.500	0.029	126	429.600	0.003	175	856.300	0.008
29	86.700	0.001	78	166.000	0.072	127	435.200	0.001	176	862.400	0.001
30	87.900	0.020	79	167.000	0.197	128	436.200	0.001	177	863.200	0.001
31	89.000	0.010	80	168.200	0.015	129	438.800	0.001	178	869.800	0.001
32	90.000	0.005	81	169.400	0.012	130	440.000	0.001	179	904.700	0.006
33	90.900	0.068	82	176.000	0.012	131	441.000	0.001	180	906.200	0.006
34	92.000	0.016	83	178.100	0.067	132	445.500	0.001	181	911.600	0.001
35	94.000	0.008	84	179.000	0.027	133	446.500	0.001	182	926.400	0.016
36	95.000	0.117	85	180.000	0.127	134	477.900	0.001	183	930.600	0.003
37	97.300	0.001	86	181.000	0.041	135	497.900	0.006	184	937.100	0.001
38	98.200	0.012	87	182.200	0.031	136	507.900	0.001	185	952.300	0.001
39	99.200	0.003	88	184.100	0.020	137	543.200	0.003	186	954.300	0.006
40	102.000	0.003	89	193.500	0.041	138	545.100	0.002	187	956.000	0.000
41	102.900	0.034	90	195.000	0.085	139	558.000	0.003	188	960.700	0.001
42	104.100	0.479	91	196.000	0.101	140	561.200	0.001	189	962.400	0.006
43	104.900	37.764	92	197.100	0.003	141	570.600	0.001	190	968.400	0.002
44	105.900	3.105	93	209.100	0.115	142	571.700	0.006	191	980.700	0.001
45	107.000	0.151	94	210.100	11.343	143	587.500	0.001	192	999.300	0.033
46	108.000	0.008	95	211.000	12.085	144	589.500	0.001	193	1000.000	0.001
47	108.900	0.020	96	212.000	1.329	145	592.600	0.001			
48	110.000	0.007	97	213.000	0.196	146	641.800	0.012			
49	113.000	0.042	98	214.100	0.012	147	653.200	0.001			

Figura 157 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com  $AuCl_3$ ; T.R.= 15.3; N-metil-fenil-benzamida (continuação)

n,n-dimetilanilina com AuCl<sub>3</sub>

<b>Count</b>	227	<b>Data Type</b>	Centroid	<b>Date</b>	02 Jul 19 05:21 am
<b>Inlet Model</b>	GC	<b>Mass Spec Model</b>	Varian Saturn	<b>Plot Type</b>	Stick
<b>Retention Time</b>	16.567	<b>Scan</b>	642	<b>TIC</b>	171.00
				<b>Total Signal</b>	11003762



No.	m/z	RI(%)	DI
1	77.000	32.493	2090902.125
2	104.900	100.000	6435013.500

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
1	49.800	0.900	17	73.900	0.453	33	103.000	0.021	49	135.200	0.008
2	50.900	3.466	18	75.000	0.280	34	103.800	0.030	50	140.200	0.002
3	51.800	0.189	19	76.000	0.729	35	104.900	58.480	51	142.300	0.003
4	53.000	0.142	20	77.000	19.002	36	105.900	5.100	52	144.800	0.001
5	54.900	0.061	21	78.000	1.254	37	106.900	0.231	53	151.900	0.057
6	58.600	0.011	22	79.000	0.149	38	108.400	0.017	54	153.000	0.085
7	61.000	0.010	23	82.100	0.003	39	115.100	0.007	55	153.900	0.028
8	61.900	0.057	24	83.200	0.001	40	118.000	0.001	56	154.700	0.042
9	63.000	0.027	25	84.600	0.001	41	118.900	0.001	57	156.800	0.000
10	63.800	0.001	26	89.000	0.001	42	121.000	0.546	58	159.100	0.002
11	65.000	0.041	27	94.000	0.043	43	121.900	1.161	59	170.400	0.009
12	65.900	0.010	28	95.000	0.139	44	123.000	0.088	60	171.400	0.008
13	68.000	0.001	29	96.000	0.002	45	127.000	0.002	61	177.400	0.026
14	69.300	0.010	30	98.000	0.020	46	131.700	0.001	62	181.000	1.061
15	72.400	0.000	31	99.200	0.001	47	132.400	0.001	63	182.000	0.592
16	73.100	0.097	32	100.900	0.015	48	134.200	0.015	64	183.000	0.058

Figura 158 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com AuCl<sub>3</sub>; T.R.= 16.6; Desconhecido

No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)	No.	m/z	TIC(%)
65	184.300	0.003	133	532.300	0.001	201	899.000	0.001
66	186.500	0.026	134	539.200	0.005	202	910.800	0.001
67	189.600	0.002	135	540.100	0.001	203	912.200	0.001
68	190.600	0.003	136	542.500	0.001	204	913.700	0.001
69	191.500	0.003	137	555.000	0.001	205	915.200	0.001
70	192.600	0.004	138	557.600	0.001	206	919.100	0.001
71	195.000	0.059	139	563.700	0.001	207	924.600	0.001
72	195.900	0.184	140	579.200	0.001	208	933.800	0.001
73	196.700	0.574	141	584.100	0.001	209	934.500	0.001
74	197.800	3.526	142	585.100	0.001	210	936.900	0.001
75	198.800	0.432	143	586.800	0.001	211	939.100	0.005
76	202.100	0.001	144	588.600	0.001	212	940.800	0.001
77	210.000	0.040	145	590.000	0.001	213	943.900	0.001
78	212.400	0.020	146	594.900	0.001	214	945.400	0.001
79	217.100	0.005	147	600.300	0.001	215	947.100	0.001
80	219.500	0.001	148	605.300	0.001	216	949.600	0.001
81	220.200	0.001	149	610.900	0.001	217	950.700	0.001
82	222.500	0.001	150	612.400	0.001	218	974.700	0.001
83	223.300	0.001	151	623.100	0.006	219	975.600	0.001
84	225.100	0.019	152	629.800	0.001	220	976.500	0.001
85	225.900	0.096	153	631.700	0.001	221	981.300	0.001
86	228.100	0.001	154	637.000	0.001	222	982.100	0.001
87	230.500	0.001	155	651.700	0.011	223	991.500	0.001
88	231.900	0.001	156	652.600	0.001	224	993.800	0.001
89	248.400	0.000	157	662.800	0.001	225	994.800	0.000
90	251.600	0.001	158	664.900	0.000	226	996.300	0.001
91	255.800	0.001	159	672.700	0.000	227	997.200	0.001
92	256.600	0.001	160	673.400	0.001			
93	262.400	0.001	161	678.400	0.001			
94	271.100	0.007	162	688.800	0.001			
95	277.200	0.001	163	693.700	0.001			
96	278.200	0.001	164	694.500	0.001			
97	297.200	0.001	165	706.900	0.001			
98	299.000	0.001	166	708.000	0.001			
99	314.500	0.001	167	709.000	0.022			
100	322.900	0.001	168	710.100	0.000			
101	332.200	0.012	169	713.900	0.001			
102	335.500	0.001	170	715.300	0.001			
103	372.000	0.001	171	720.900	0.001			
104	400.700	0.001	172	730.900	0.001			
105	401.800	0.001	173	739.700	0.001			
106	403.000	0.001	174	741.700	0.001			
107	405.700	0.009	175	743.500	0.001			
108	427.600	0.001	176	759.000	0.003			
109	433.100	0.001	177	762.400	0.001			
110	436.500	0.009	178	777.600	0.001			
111	438.400	0.001	179	787.000	0.001			
112	442.900	0.001	180	788.400	0.001			
113	455.400	0.001	181	793.600	0.001			
114	456.200	0.001	182	798.900	0.001			
115	457.500	0.001	183	804.400	0.001			
116	459.900	0.001	184	808.000	0.001			
117	464.300	0.001	185	808.900	0.001			
118	482.400	0.001	186	809.700	0.000			
119	483.200	0.001	187	819.300	0.001			
120	485.700	0.007	188	820.400	0.001			
121	489.500	0.001	189	822.600	0.001			
122	490.800	0.001	190	824.600	0.001			
123	510.000	0.001	191	829.300	0.001			
124	511.700	0.002	192	839.100	0.001			
125	516.500	0.001	193	840.800	0.001			
126	524.200	0.001	194	845.300	0.001			
127	525.900	0.007	195	846.000	0.001			
128	527.200	0.007	196	866.400	0.001			
129	528.500	0.001	197	868.400	0.001			
130	529.200	0.001	198	884.500	0.001			
131	530.000	0.001	199	885.200	0.001			
132	531.200	0.001	200	887.600	0.001			

Figura 159 – Espectro de Massas; Reação N,N-dimetilanilina com  $AuCl_3$ ; T.R.= 16.6; Desconhecido (continuação)



## FRAGMENTAÇÕES

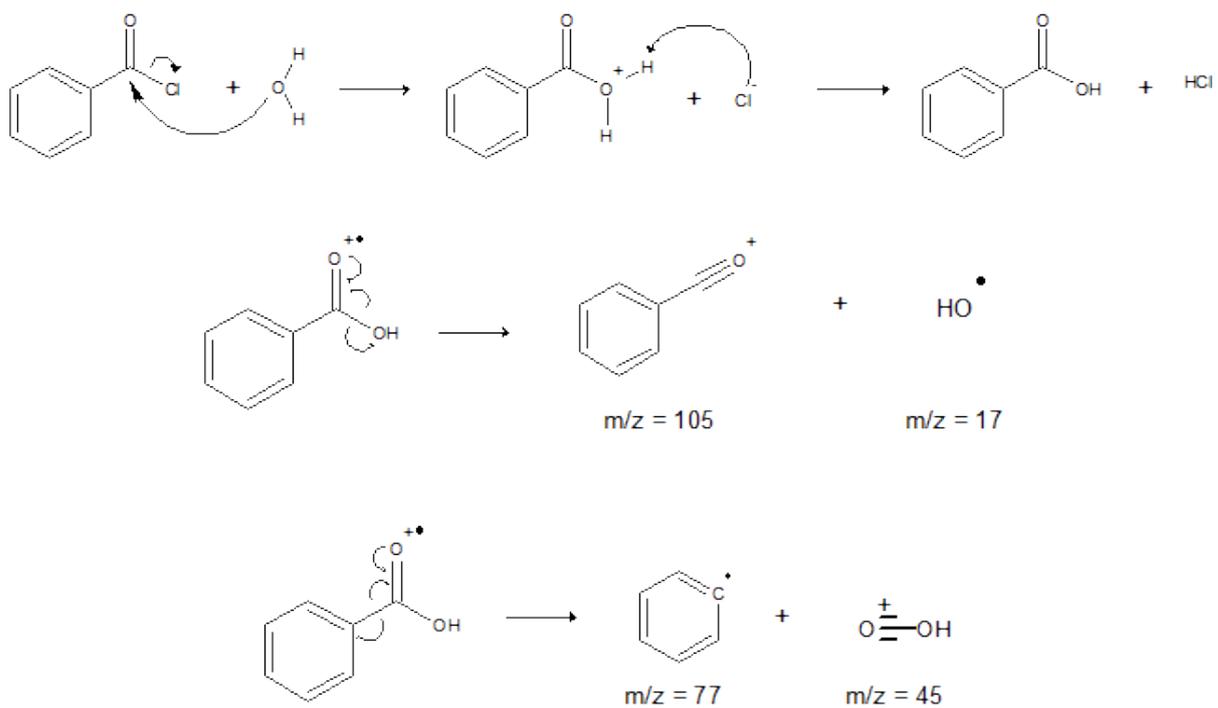


Figura 160 – Fragmentação Ácido benzóico

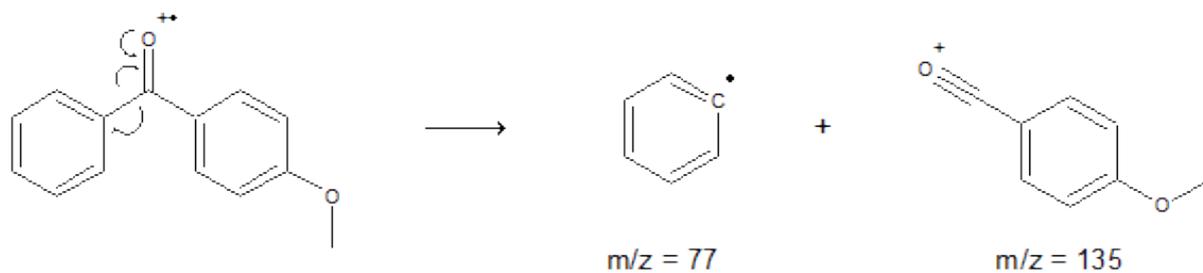


Figura 161 – Fragmentação p-metóxi-benzofenona

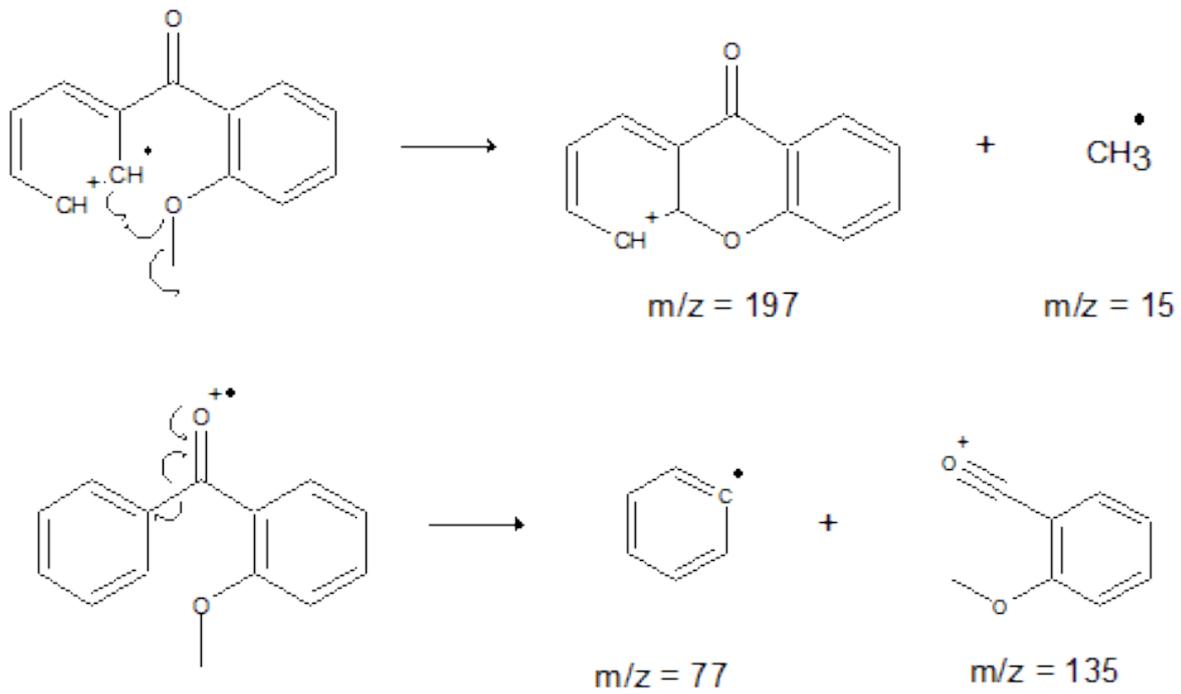


Figura 162 – Fragmentação o-metóxiacetofenona

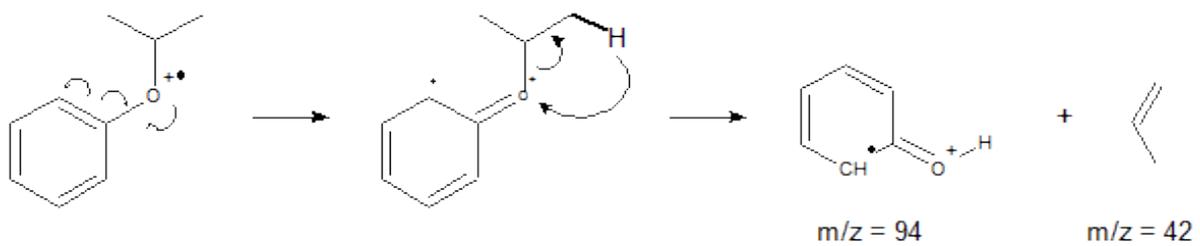


Figura 163 – Fragmentação Isopropoxibenzeno

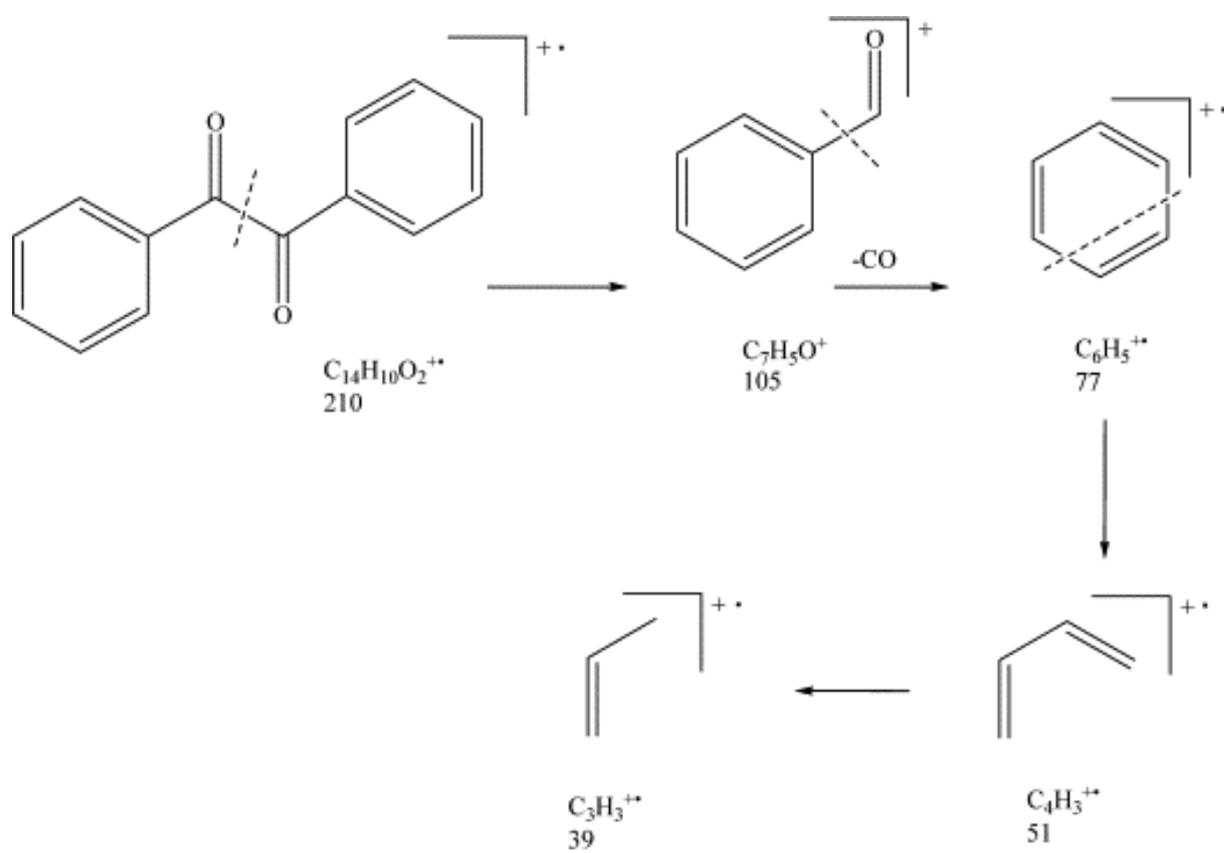


Figura 164 – Fragmentação Benzil

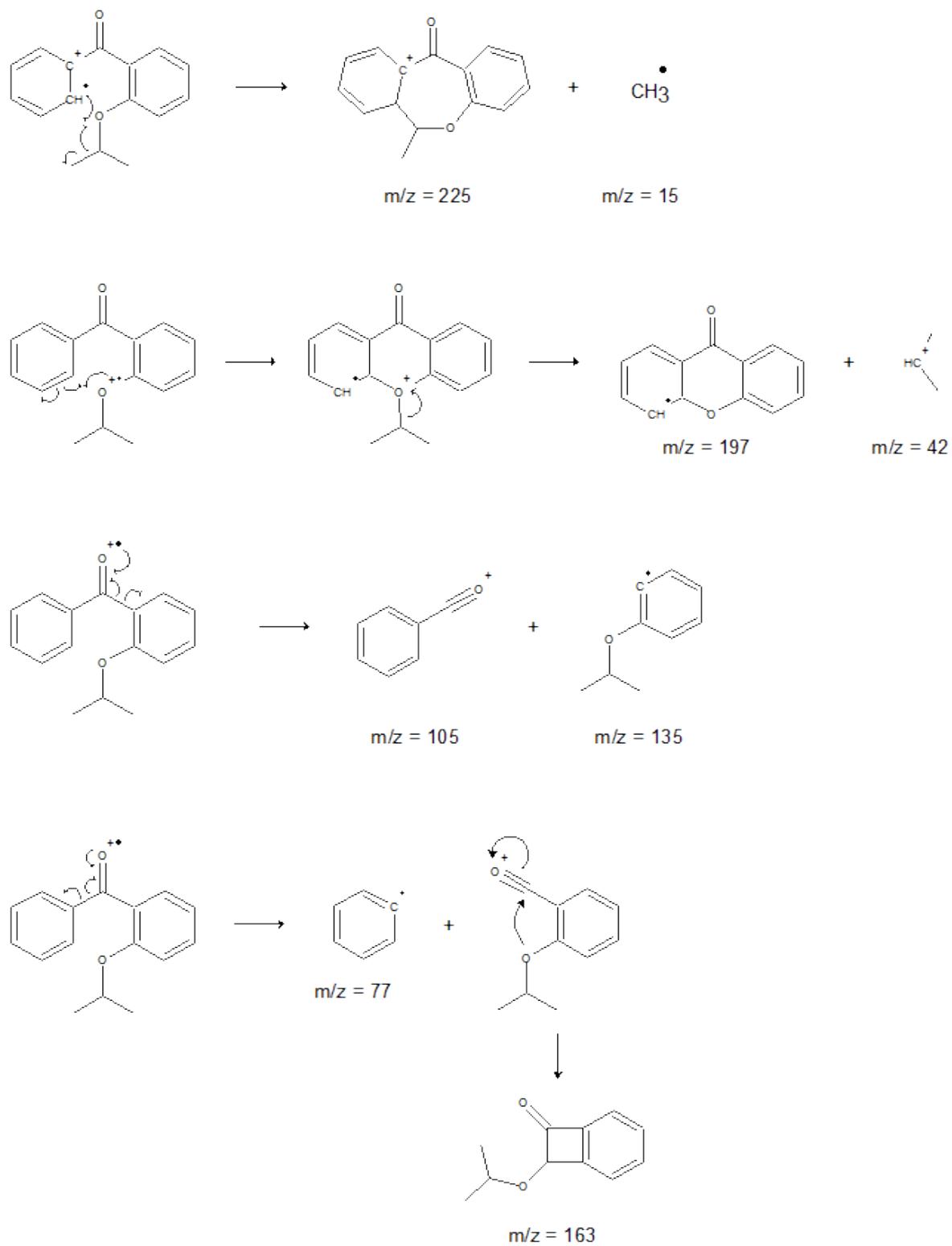


Figura 165 – Fragmentação o-isoproxibenzofenona

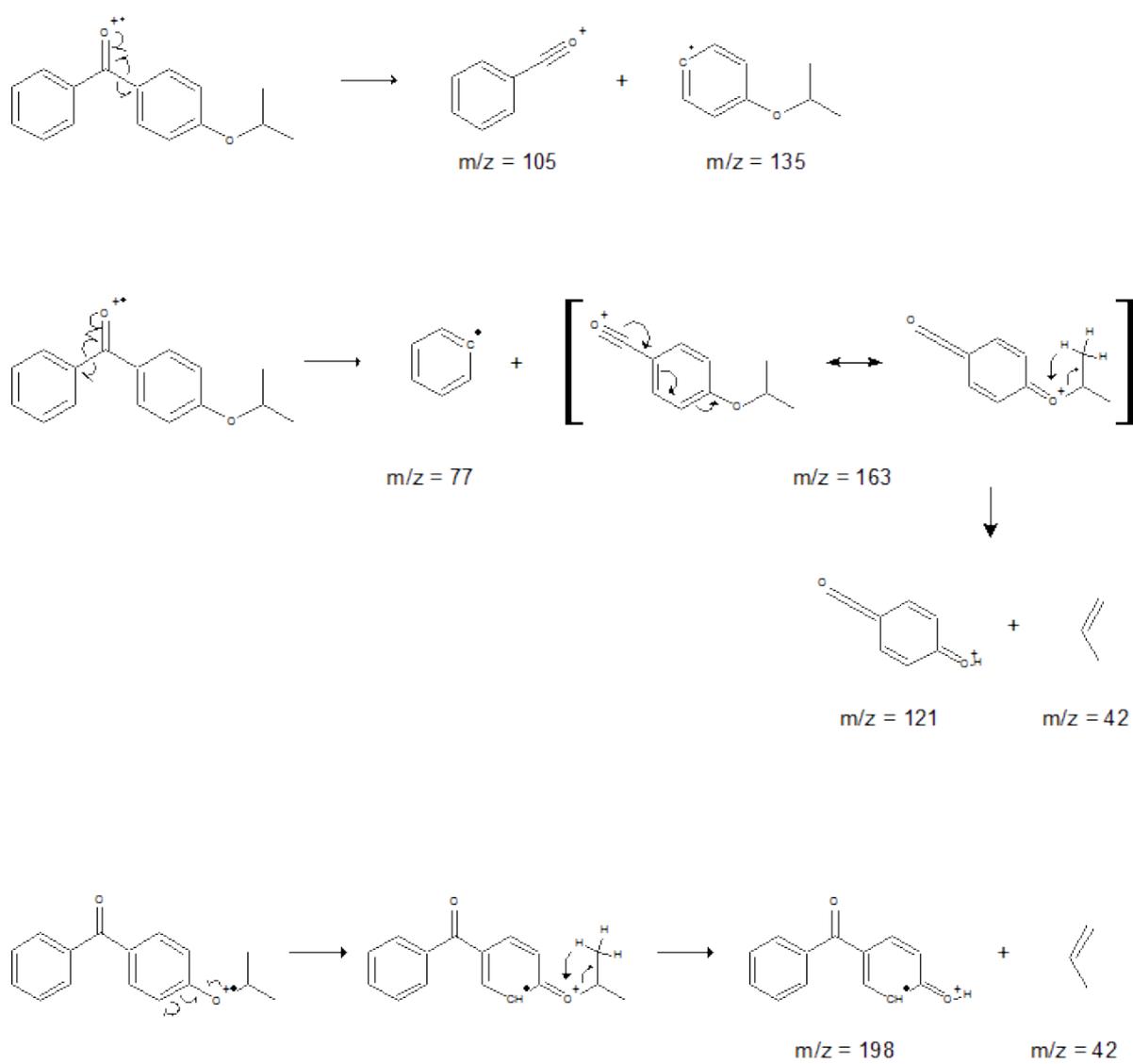


Figura 166 – Fragmentação p-isoproxibenzofenona

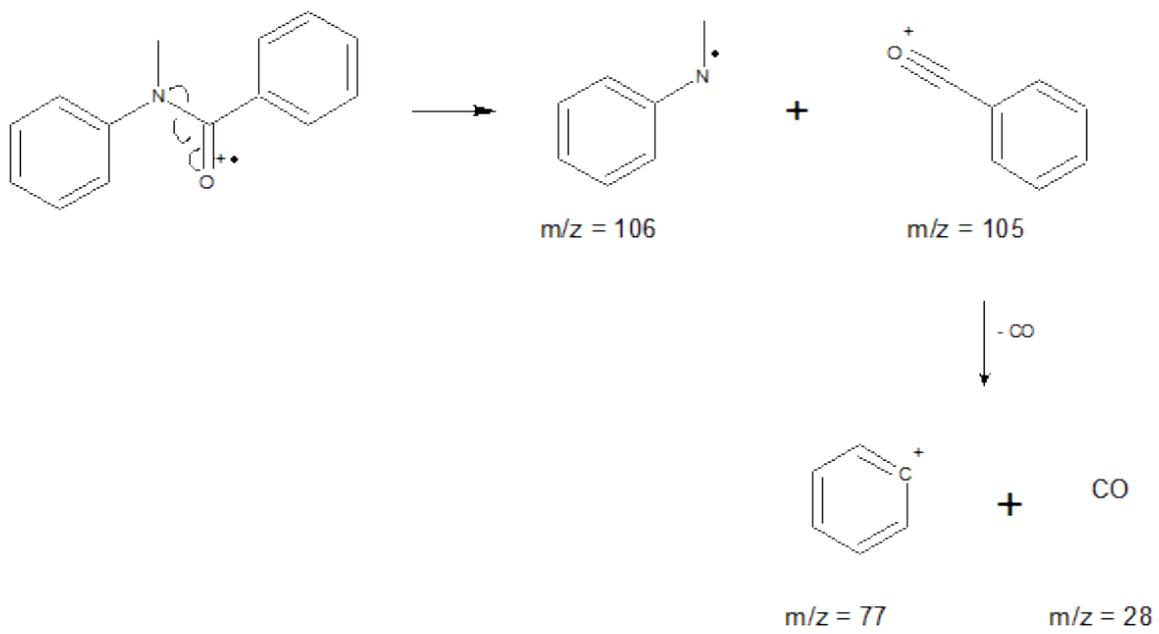


Figura 167 – Fragmentação N-metil-fenil-benzamida