

PROGRAMA DE DISCIPLINA

Código: QUI-539	Nome: Métodos Físicos em Química Orgânica			
	Teórica	Prática	Total	Unidade: INSTITUTO DE QUÍMICA
Carga Horária	51		51	Departamento:
Créditos	03			Curso(s): MESTRADO / DOUTORADO
Módulo				SEMESTRE: 2014.2

EMENTA

Espectroscopia infra-vermelha. Espectroscopia ultra-violeta. Espectrometria de massa. Utilização conjunta das diversas técnicas abordadas para identificação de substâncias orgânicas. A disciplina tem como objetivos revisar e aprofundar conhecimentos sobre técnicas instrumentais de análise para determinação estrutural de compostos orgânicos. Durante o semestre serão abordados os fundamentos das diferentes técnicas espectrométricas, aplicações. Como fixação serão discutidos exercícios e artigos científicos sobre de identificação estrutural utilizando cada técnica separadamente ou em conjunto.

METODOLOGIA

Aulas expositivas utilizando-se projetor, retroprojetor e quadro negro
Discussões de exercícios em classes
Consulta da base de dados;
Quatro avaliações

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO (TÓPICOS)

1. Espectrometria de Massas:
 - 1.1 fundamentação teórica;
 - 1.2 descrição dos equipamentos;
 - 1.3 Tipos de ionização: impacto de elétrons, química, FAB, Eletronspray, APCI, Dessorção de campo;
 - 1.4 Tipos de analisadores: setor magnético, quadrupolo, íon trap; TOF
 - 1.5 Determinação do íon molecular; contribuição isotópica; espectrometria de massas de alta resolução
 - 1.6 Métodos de fragmentação;
 - 1.7 CLAE-EM; CG-EM
2. Espectroscopia no Ultravioleta
 - 2.1 Fundamentação teórica;
 - 2.2 Instrumentação – tipos de equipamentos
 - 2.3 Absorção e absorvidade molar no Ultravioleta/VIS: cromóforo, efeitos dos solventes e reagentes no máximo de absorção;
 - 2.4 Regras para determinação do máximo de absorção
3. Espectroscopia no Infravermelho
 - 3.1 Fundamentação Teórica
 - 3.2 Instrumentação – tipos de equipamentos: grade e com transformada de Fourier
 - 3.3 Métodos de preparação de amostras sólidas, líquidas e gasosas;
 - 3.4 Absorções de grupos funcionais comuns
4. Ressonância Magnética Nuclear
 - 4.1 Conceitos básicos e mecanismos e absorção

- 4.2 Deslocamento químico em RMN de ^1H ; blindagem
- 4.3 Instrumentação – tipos de equipamentos: onda contínua e pulsado com transformada de Fourier;
- 4.4 Equivalência química e efeito do ambiente no deslocamento químico; cálculos deslocamento químico
- 4.5 Integrais
- 4.6 Acoplamentos e constante de acoplamento: aplicações
- 4.7 Ressonância Magnética Nuclear de ^{13}C : deslocamento químico
- 4.8 Espectro acoplado e desacoplado; Efeito Nuclear Overhauser
- 4.9 Cálculos e aplicações
- 4.9 Aplicações de outros experimentos de RMN de ^{13}C : DEPT, APT

BIBLIOGRAFIA

Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz, G. S.; Vyvyan, J. R. Introduction to Spectroscopy. 4a. ed. Brooks/Cole Cengage Learning, USA, 2009.

Barbosa, L. C. A. Espectroscopia no Infravermelho na Caracterização de compostos orgânicos. 1ª. Ed. Editora UFV, Viçosa, Brasil, 2007.

Crews, P.; Rodriguez, J.; Jaspars M. Organic Structure Analysis (Topics in Organic Chemistry). 2nd. Ed. Oxford University Press, New York, 2009.

Smith, R. M., Bush, K. L. Understanding Mass Spectra – A basic approach. John Willey & Sons, New York, 1999.

Silverstein, R.M., Webster, F. X., Kiemle, D. J. Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos. 7 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.

_____/_____/____

Coordenador
