



DADOS DE IDENTIFICAÇÃO E ATRIBUTOS¹

CÓDIGO							NOME							DEPARTAMENTO OU EQUIVALENTE						
QUI539							MÉTODOS FÍSICOS EM QUÍMICA ORGÂNICA							QUÍMICA ORGÂNICA						
CARGA HORÁRIA (estudante)							MODALIDADE/ SUBMODALIDADE							PRÉ-REQUISITO (POR CURSO)						
T	T/P	P	PP	Ext	E	TOTAL	TEÓRICA							-						
45						45														
CARGA HORÁRIA (docente/turma)							MÓDULO							SEMESTRE DE INÍCIO DA VIGÊNCIA						
T	T/P	P	PP	Ext	E	TOTAL	T	T/ P	P	PP	Ext t	E	2023.2							
45						45	45													

EMENTA

Métodos Espectrométricos e análise orgânica; Espectrometria de Massas: Impacto de elétrons, Ionização química e Eletrospray; Espectroscopia no Ultravioleta; Espectroscopia no Infravermelho; Ressonância Magnética Nuclear: de Hidrogênio, de Carbono-13, DEPT, APT, RMN de C-13 acoplado, RMN bidimensionais.

OBJETIVOS

OBJETIVO GERAL

Habilitar o aluno para uma abordagem sistemática de identificação e elucidação estrutural de compostos orgânicos.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Estudar a teoria das técnicas espectrométricas;

Determinar a Fórmula molecular de compostos orgânicos utilizando as diferentes técnicas espectrométricas em conjunto ou separadamente

Analisar espectros tirando as informações mais importantes de cada uma delas

Determinar estruturas de compostos orgânicos de média complexidade utilizando técnicas espectrométricas em conjunto

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1. Fórmula molecular e seu significado; técnicas para determinar pureza de compostos orgânicos;
2. Espectroscopia no Ultravioleta: teoria, instrumentação, preparação amostra; análise dos espectros, efeito da conjugação, Regras de Woodward-Fieser; aplicações.
3. Espectroscopia no Infravermelho: teoria, instrumentação, preparação amostra; análise dos espectros, bandas/picos (deformação axial e angular) mais características do espectro para as diferentes classes de compostos orgânicos; emprego de bandas de combinação e harmônicas
4. Ressonância Magnética de Hidrogênio: Teoria Geral, Mecanismo de absorção, instrumentação, preparação amostras, deslocamento químico e efeitos de proteção, equivalência química e magnética, acoplamentos spin-spin primeira e segunda ordens; constates de acoplamentos, Equação de Karplus, notação de Pople
5. Ressonância Magnética Nuclear de carbono-13: núcleo de C-13, correlações, cálculos de desacoplamento, análise do espectro de C-13, Espectros de RMN de C-13 desacoplado e acoplados. Técnicas especiais: DEPT, APT
6. Introdução à Ressonância Magnética Nuclear Bidimensional: HOMOCOSY, HSQC e HMBC.
7. Análise de espectros das 4 técnicas integradas.

METODOLOGIA DE ENSINO-APRENDIZAGEM

São empregados recursos audiovisuais tais como: quadro branco, projeção de slides, modelos moleculares, estudos dirigidos além de dinâmica de grupo com exercícios.

AVALIAÇÃO DA APRENDIZAGEM

Os alunos serão avaliados através de pelo menos duas avaliações, podendo ser escritas ou na forma de monografias.

¹ Os "dados de identificação e atributos" devem estar registrados conforme especificado no Programa do Componente Curricular e disponível no site da Superintendência Acadêmica (SUPAC)SIAC. O único campo a ser preenchido nesse tópico do formulário é o que diz respeito ao módulo de vagas ofertadas.

REFERÊNCIAS

Bibliografia Básica

- 1- Pavia, D., Lampman, G., Kriz, G., Vyvyan, J.. Introdução à espectroscopia, 2a. Ed. em Portugues (5a. Ed. Americana) Cengage Learning, 2015.
- 2- Silverstein, R. M., Webster, F. X., Kiemle, D. J. Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, 7ª. ed. LTC Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, 2006;
- 3- Barbosa, L. C. de A. *Espectroscopia no Infravermelho*. Viçosa: Editora UFV, 2007;

Bibliografia Complementar

1. Lambert, J.B.; Shurvell, H.F.; Lightner, D.A.; Cooks, R.G. *Introduction to Organic Spectroscopy*. New York: MacMillan Publishing, 1987
2. Davis, R.; Freason, M. *Mass Spectrometry* –Ed. John Willey & sons, 1989.
3. Crews, P., Rodríguez, J., Jaspars, M. *Organic Structure Analysis* – Ed. Oxford, 1998.

artigos de revisão publicados em periódicos sobre o assunto em estudo.

Aprovado na reunião do Departamento de Química Orgânica em, /2023

Assinatura do Chefe