



UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE
INSTITUTO DE QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÂNICA

MÉTODOS FÍSICOS DE ANÁLISE ORGÂNICA

CÓDIGO: GQO 00032

CARGA HORÁRIA: 60 horas

CURSOS: Licenciatura e Bacharelado em Química e Química Industrial

GQO 00032 - MÉTODOS FÍSICOS DE ANÁLISE ORGÂNICA

EMENTA

Conceitos e uso de técnicas espectroscópicas para a análise estrutural orgânica: I.V, UV-visível, RMN ¹H e de ¹³C. Espectrometria de massas. Práticas de análise espectral. Introdução a técnicas avançadas.

PROGRAMA DA DISCIPLINA

- Apresentação do Curso. Normas de Avaliação. Calendário de Provas. Bibliografia do Curso. Exercícios Gerais de Revisão.
- Espectro Eletromagnético. Onda Eletromagnética. Análise Espectral. Fatores que governam a Frequência Vibracional. Tipos de Vibrações. Graus de Liberdade.
- Fatores que simplificam e que complicam um espectro de Infravermelho. Exemplo CO₂. Interpretação de um Espectro de IV. Efeitos internos e externos que alteram a absorção dos grupos funcionais.
- Resolução de espectros. Apresentação e discussão. Exercícios.
- Exercícios de IV.
- RMN - Introdução. Números Quânticos de Spin. Momento Magnético. Momento Angular. Orientação do Núcleo em um Campo Magnético. Interação do núcleo com o campo magnético. Aparelhos de RMN. Blindagem eletrônica.
- Deslocamento Químico. Padrão Interno TMS. Acoplamento Spin-Spin. Exercícios.
- Efeitos intramoleculares que afetam o deslocamento químico. Classificação dos Prótons. Equivalência Química (Idênticos, Enantiotópicos), Diastereotópicos e Equivalência Magnética. Exercícios.
- Interpretação de Espectros de RMN.
- Constantes de Acoplamento. Exercícios.
- Introdução a RMN¹³C. RMN ¹H x RMN¹³C.
- RMN¹³C. Resolução de Espectros.
- E.M. - Introdução. Câmara de Vaporização. Câmara de Ionização - Aceleração - Tubo Analisador. Espectro de Massas.
- Intensidade do Pico - Íon Molecular. Facilidade de Ionização. Representação de Cátion Radical. Processos de Quebra. Exercícios.
- Íons Meta Estáveis. Regras Gerais de Fragmentações. Principais Quebras de algumas Classes Químicas.
- Principais Quebras de Classes Químicas - continuação. Exercícios.
- Exercícios de Espectrometria de Massas. Resolução de Espectros.
- Exercícios de E.M.
- Ultravioleta Visível - Introdução. Transições Eletrônicas. Orbitais Moleculares. Regras de Hund. Fluorescência, Fosforescência. Diagrama de Energia para os diferentes tipos de Cromóforos.
- Efeito de Solvente nas Transições n-π* e π-π* em Enonas. Regras de Woodward Fieser para Dienos Acíclicos.
- Regras de Woodward para Dienos Cíclicos continuação. Regras de Woodward para Enonas. Exercícios.
- Regras de Woodward para Compostos Aromáticos. Exercícios.
- Lei de Beer - Problemas.
- Exercícios Gerais.

BIBLIOGRAFIA

- R. M. Silverstein; G. Glayton Bassler; T. C. Morrill; Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, 5ª Edição em português, Guanabara Koogan (1994) e 6ª edição em português.
- D. L. Pavia; G. M. Lampman, G. S. Kriz; Introdução à Espectroscopia, 4ª Edição (tradução), SP Cengage Learning, 2010, 700p..
- D. L. Pavia; G. M. Lampman; G. S. Kriz; Introduction to Spectroscopy, 2ª Edição; Saunders Golden Sunburst Series (1996).
- J. S. Lambert; H. F. Shurvell; D. Lightner; R. G. Cooks; Introduction to Organic Spectroscopy; Macmillan Publishing Company, NY.
- Nelson Angelo de Souza – Métodos Físicos de Análise Orgânica e Introdução à Espectrometria de Massas – Apostilas – Coleção de Material Didático do Departamento de Química Orgânica-UFF – Edição 2009.