

## CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA

### MÉTODOS FÍSICOS DE ANÁLISE I-L

CURSO/SEMESTRE	Química Licenciatura / 7 <sup>o</sup> Semestre
DISCIPLINA	<b>MÉTODOS FÍSICOS DE ANÁLISE I-L</b>
CARÁTER DA DISCIPLINA	Obrigatória
PRÉ-REQUISITO	QUÍMICA ORGÂNICA II L
CÓDIGO	170061
DEPARTAMENTO	Química Orgânica
CARGA HORÁRIA TOTAL	68horas
CRÉDITOS	4
NATUREZA DA CARGA HORÁRIA ANO/SEMESTRE	Teóricas 4-0-0
PROFESSORES E CARGA HORÁRIA	Prof. Dr. Geonir Machado Siqueira
OBJETIVOS	<p><b>Geral:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Ministar ao aluno conhecimentos sobre os principais métodos físicos espectrométricos atualmente aplicados para identificação e/ou determinação estrutural absoluta de compostos orgânicos.</li></ul> <p><b>Específicos:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Ministar ao aluno conhecimentos teóricos sobre Espectrometrias de massas, infravermelho e Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio e Carbono-13;</li><li>• Proporcionar conhecimentos teórico/prático que permitam ao aluno analisar espectros de substâncias inéditas ou não, e identificar a sua estrutura, bem como em alguns casos o seu grau de pureza;</li><li>• Fornecer subsídios ao futuro professor para trabalhar o conhecimento químico, no ensino médio, no reconhecimento estrutural das diferentes substâncias, como consequência da disposição espacial dos átomos envolvidos e tipos de ligações, que determinarão as principais propriedades apresentadas por estas substâncias;</li><li>• Proporcionar subsídio para o entendimento das fórmulas estruturais dos compostos orgânicos, utilizadas de maneira simplificada no processo ensino-aprendizagem do ensino médio, com aqueles desenvolvidos nas diferentes áreas da Química.</li><li>• Apresentação de software educacional que permitam entendimento de modelos aplicados na determinação e reconhecimento de estruturas dos compostos orgânicos.</li></ul>
EMENTA	Espectrometria de massas. Espectrometria no infravermelho. Noções de espectrometria de Ressonância Magnética Nuclear de <sup>1</sup> H e <sup>13</sup> C. Uso de modelos e software didáticos.

PROGRAMA	<p><b>UNIDADE 1 - ESPECTROMETRIA DE MASSAS (MS).</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1.1. Introdução.</li> <li>1.2. Instrumentação.</li> <li>1.3. O espectro de massas.</li> <li>1.4. Interpretação dos espectros.</li> <li>1.5. Determinação da fórmula molecular.</li> <li>1.6. Reconhecimento do pico do íon molecular.</li> <li>1.7. Fragmentações e Rearranjos.</li> <li>1.8. Espectros de referências.</li> </ol> <p><b>UNIDADE 2 - ESPECTROMETRIA NO INFRA-VERMELHO (I.V.).</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>2.1. Introdução.</li> <li>2.2. Instrumentação</li> <li>2.3. Manuseio da amostra.</li> <li>2.4. Interpretação dos espectros.</li> <li>2.5. Freqüências características de grupamentos em moléculas orgânicas.</li> <li>2.6. Espectros de referências.</li> </ol> <p><b>UNIDADE 3 - ESPECTROMETRIA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR (RMN).</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>3.1. Introdução</li> <li>3.2. Instrumentação e manuseio da amostra.</li> <li>3.3. Deslocamento químico. RMN de próton (<math>^1\text{H}</math>), carbono-13 (<math>^{13}\text{C}</math>), e outros isótopos.</li> <li>3.4. Acoplamentos simples spin-spin.</li> <li>3.5. Hidrogênios em heteroátomos.</li> <li>3.6. Acoplamentos de hidrogênio e outro núcleos.</li> <li>3.7. Equivalência de deslocamento químico e equivalência magnética.</li> <li>3.8. Sistemas AMX, ABX e ABC com três constantes de acoplamentos.</li> <li>3.9. RMN de <math>^{13}\text{C}</math>. Interpretação dos espectros.</li> <li>3.10. Deslocamentos químicos. Acoplamentos de Spin.</li> <li>3.11. Análise quantitativa.</li> <li>3.12. Espectros desacoplados.</li> <li>3.13. Novas dimensões em RMN: Correlações homonucleares e heteronucleares.</li> </ol> <p><b>UNIDADE 4 - PARTE EXPERIMENTAL</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>4.1. Análise de espectros de compostos desconhecidos e identificação.</li> <li>4.2. Acompanhamento na obtenção de espectros junto a aparelhos de análise</li> </ol>
BIBLIOGRAFIA BASICA	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Allinger, N. e outros, Química Orgânica, 2a ed., Editora Guanabara Koogan S.A., Rio de Janeiro, 1978.</li> <li>2. Solomons, T.W.G., Química Orgânica, 6a ed., vol.1 e 2, LTC</li> </ol>

	Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 1996
BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR	<ol style="list-style-type: none"> <li>3. McMurry, J., Química Orgânica, 4a ed., vol.1 e 2, , LTC-Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 1997.</li> <li>4. Becker, H.G.O. et all, Organikum -Química Orgânica Experimental, 2a ed., Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1997.</li> <li>5. Silverstein, R.M. Bassler, G.C., Morrill, T.C., Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, 5ª ed., Guanabara Koogan S.A., Rio de Janeiro, 1994.</li> <li>6. Shriner, R.L., Fuson, R.C., Curtin, D.Y. and Morrill, T.C., Identificação Sistemática dos compostos orgânicos, manual de laboratório, 6a ed., Editora Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1978.</li> <li>7. Pavia, D.L., Lampman, G.M., Kriz, G.S., Introduction to Spectroscopy – A guide for students of organic chemistry, Second Edition, Saunders College Publishing, U.S.A. 1996.</li> </ol>