



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE QUÍMICA
CURSO DE QUÍMICA INDUSTRIAL

FICHA DE DISCIPLINA

DISCIPLINA: ANÁLISE ESPECTROMÉTRICA DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

CÓDIGO: GQB049		UNIDADE ACADÊMICA: INSTITUTO DE QUÍMICA		
PERÍODO: Sétimo		CH TEÓRICA: 60	CH PRÁTICA: 00	CH TOTAL: 60
OBRIGATÓRIA: (X)	OPTATIVA: ()			
PRÉ-REQUISITOS:		CÓ-REQUISITOS:		

OBJETIVOS

Aplicar as principais técnicas espectrométricas para a identificação e caracterização de estruturas orgânicas.

EMENTA

Espectrometria de Massas; Espectrometria no Infravermelho (IV); Espectrometria no Ultravioleta UV e Vis; *Espectrometria de Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio e Carbono Treze (RMN de ¹H, RMN de ¹³C)*; *Problemas envolvendo todas as técnicas em conjunto; Introdução a Ressonância Magnética Nuclear Por Correlações.*

DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

CAPÍTULO 1

ESPECTROMETRIA DE MASSAS

INTRODUÇÃO
INSTRUMENTAÇÃO
INSTRUMENTOS E O MÉTODO DE SEPARAÇÃO DOS ÍONS
DETERMINAÇÃO DA FÓRMULA MOLECULAR
RECONHECIMENTO DO PICO DO ÍON MOLECULAR
FRAGMENTAÇÕES
ESPECTROS DE MASSAS DAS CLASSES QUÍMICAS PRINCIPAIS
HIDROCARBONETOS SATURADOS
HIDROCARBONETOS INSATURADOS
COMPOSTOS AROMÁTICOS
ÁLCOOIS
FENÓIS
ÉTERES
CETONAS
ALDEÍDOS
ÁCIDOS CARBOXÍLICOS
ÉSTERES
LACTONAS
AMINAS
AMIDAS
NITRILAS
NITROCOMPOSTOS
NITRITOS
NITRATOS ALIFÁTICOS
COMPOSTOS DE ENXOFRE
COMPOSTOS HALOGENADOS
COMPOSTOS HETEROAROMÁTICOS
AMINOÁCIDOS
TRIGLICÉRIDES
MACROMOLÉCULAS
ÍONS MOLECULARES COMUNS
FRAGMENTOS COMUNS ELIMINADOS
SÉRIES DE FRAGMENTOS CARACTERÍSTICOS
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CAPÍTULO 2

ESPECTROMETRIA NO INFRAVERMELHO (IV)

INTRODUÇÃO

ESPECTROS DE "BACKGROUND"

TEORIA

INSTRUMENTAÇÃO

MANIPULAÇÃO DE AMOSTRAS

N-ALCANOS

ALCENOS

ALCINOS E NITRILAS

HIDROCARBONETOS AROMÁTICOS MONONUCLEARES

ÁLCOOIS E FENÓIS

ÉTERES

COMPOSTOS CARBONÍLICOS:

CETONAS

ALDEÍDOS

ÁCIDOS CARBOXÍLICOS

ÉSTERES

ÉSTERES CÍCLICOS - LACTONAS

HALOGENETOS DE ACILA

ANIDRIDOS

AMIDAS

AMIDAS CÍCLICAS - LACTAMAS

AMINAS

ISOCIANATOS

ISOTIOCIANATOS

IMINAS E OXIMAS

NITRO COMPOSTOS

SAIS DE ÁCIDO CARBOXÍLICO

SAIS DE AMÔNIO

AMINOÁCIDOS

COMPOSTOS ORGÂNICOS HALOGENADOS

MERCAPTANAS

OUTROS COMPOSTOS ORGÂNICOS DE ENXOFRE

COMPOSTOS FOSFORADOS

APLICAÇÕES DA ESPECTROMETRIA NO IV

ESTRATÉGIA PARA ANÁLISE DE UM ESPECTRO IV

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

TABELAS

CAPÍTULO 3
ESPECTROMETRIA NO ULTRAVIOLETA UV E VIS

INTRODUÇÃO
EQUIPAMENTO
PRINCÍPIOS DA ESPECTROMETRIA DE ABSORÇÃO
LEI DE LAMBERT-BEER
CONCENTRAÇÃO DE AMOSTRAS
TRANSIÇÃO ELETRÔNICA DE ESPÉCIES CONTENDO $e: p, s, n$
CROMÓFOROS
SISTEMAS CONJUGADOS
ESPECTRO DO AZULENO
COMPOSTOS CARBONÍLICOS CONJUGADOS
ABSORÇÃO DE BENZENO E DERIVADOS
SOLVENTES
REGIÃO DE TRANSPARÊNCIA DE SOLVENTES
ADIÇÃO DE ADITIVOS
REGRAS DE WOODWARD
OUTRAS APLICAÇÕES DE UV/VIS
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CAPÍTULO 4

ESPECTROMETRIA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGÊNIO E CARBONO TREZE (RMN de ^1H , RMN de ^{13}C)

HISTÓRICO
INTRODUÇÃO
OS ESPECTROS
CONCEITOS BÁSICOS E INSTRUMENTOS
O MECANISMO DE ABSORÇÃO (RESSONÂNCIA)
INSTRUMENTAÇÃO
INSTRUMENTOS MODERNOS
MANIPULAÇÃO DA AMOSTRA
DESLOCAMENTO QUÍMICO
O AMBIENTE QUÍMICO E O DESLOCAMENTO QUÍMICO
ELETRONEGATIVIDADE
ANISOTROPIA DIAMAGNÉTICA
LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO
REGIÕES CARACTERÍSTICAS DE DESL. QUIM. DE ^1H
FAIXAS DE DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE ^{13}C
INTEGRAÇÃO DOS PICOS EM RMN
ACOPLAMENTO DE SPINS - HIDROGÊNIO (^1H)
A ORIGEM DOS ACOPLAMENTOS
O MECANISMO DOS ACOPLAMENTOS

TIPOS DE DESDOBRAMENTOS
A FORÇA DO CAMPO MAGNÉTICO
CALCULANDO J E $\Delta\nu$
MAIS SOBRE J
ALGUNS J IMPORTANTES DE SABER
SISTEMAS COM ^1H LIGADO A HETEROÁTOMOS
ACOPLAMENTOS EM RMN DE ^{13}C
DEPT
ALGUNS EXEMPLOS
CONSIDERAÇÕES MAIS AVANÇADAS
EQUIVALÊNCIA MAGNÉTICA
MAIS SOBRE J
QUANDO A REGRA (N + 1) FALHA
ESPECTROS DE SEGUNDA ORDEM
DESLOCAMENTOS QUÍMICOS EM ALCENOS
ANÉIS BENZÊNICOS SUBSTITUÍDOS
GRUPOS ENANTIOTÓPICOS
GRUPOS DIASTEREOTÓPICOS
CONFORMAÇÕES ROTACIONAIS
ACOPLAMENTO À LONGA DISTÂNCIA
DESACOPLAMENTOS DE SPINS
O EFEITO NUCLEAR DE OVERHAUSER
REAGENTES DE DESLOCAMENTO
REAGENTES DE DESLOCAMENTOS QUIRAIS
CÁLCULO DOS TEMPOS DE RELAXAÇÃO T_1 E T_2
CÁLCULOS DE DESLOCAMENTOS QUÍMICOS – RMN de ^1H
CÁLCULO PARA PRÓTONS METILÊNICOS
ALCENOS SUBSTITUÍDOS
AROMÁTICOS SUBSTITUÍDOS
CÁLCULOS DE DESLOCAMENTOS QUÍMICOS – RMN de ^{13}C
ALCANOS LINEARES E RAMIFICADOS
ALCANOS E CICLOALCANOS COM OUTROS SUBSTITUINTES
ALCENOS
AROMÁTICOS SUBSTITUÍDOS
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CAPÍTULO 5

INTRODUÇÃO A RMN POR CORRELAÇÕES

^1H - ^1H COSY

^1H - ^1H COSY COM FILTRO DUPLO-QUÂNTICO (DQF- COSY)

NOESY
HETCOR
HMQC
HSQC
HMBC
INADEQUATE
TOCSY
RMN COM GRADIENTE DE CAMPO
RMN 3D

BIBLIOGRAFIA

BÁSICA:

BARBOSA, L. C. A. Espectroscopia no infravermelho: Caracterização de compostos orgânicos, UFV, 2007.

BREITMAIER, E. Structure elucidation by NMR in organic chemistry: a practical guide, Chichester: John Wiley, 1993.

MACOMBER, R. S. A complete introduction to modern NMR spectroscopy, 2010.

PAVIA, D. L., LAMPMAN, G.M., KRIZ, G.S. Introdução à espectroscopia, LTC, 2010.

SILVERSTEIN, R. G., WEBSTER, FRANCIS, X., KIEMLE, D. J., Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, LTC, Rio de Janeiro, 2006.

SHRINER, R. L. Identificação Sistemática dos Compostos Orgânicos: Manual de Laboratório. 6ª Ed., Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1983.

COMPLEMENTAR:

CHAPMAN, J. R. Practical organic mass spectrometry: a guide for chemical and biochemical analysis. 1995.

CLARIDGE, T. D. W. High resolution NMR techniques in organic chemistry, Amsterdam: Elsevier, Ed. 1999.

CU Boulder Organic Chemistry – IR Spectroscopy Tutorial:
<http://orgchem.colorado.edu/hndbksupport/irtutor/tutorial.html>

Donald L. Pavia, Organic Chemistry:
<http://atom.chem.wvu.edu/dept/facstaff/pavia/paviacourses.shtml>

Dr. Glagovich's UV-visible Spectroscopy:
<http://www.chemistry.ccsu.edu/glagovich/teaching/471/uvvis/uvvis.html>

ERNST, G. B. and WOKAUN, A. Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions, R. R. Oxford University Press, New York, 1987.

HAMMING, M. and FOSTER, N. Interpretation of Mass Spectra of Organic Compounds. New York, NY, Academic Press.

HOFFMANN, E. & STROOBANT, V. Mass spectrometry: principles and applications. 2007.

Joseph P. Hornak, PhD. The Basics de NMR:
<http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/inside.htm>

LEVY, G. C., LICHTER, R. L., NELSON, G. L. Carbon-13 Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, 2ªed., John Wiley & Sons, New York, 1980.

MACARTNEY, D. Methods of Structure Determination.
<http://www.chem.queensu.ca/programs/ug/2004/chem222/Lectures.htm>

MCLAFFERTY, F. W. Interpretation of Mass Spectra. Mill Valley, CA. University Scientific Books, 1993.

Michael K. Denk, NMR Spectroscopy: http://131.104.156.23/Lectures/CHEM_207_NMR.htm

NAKANISHI, K. One-Dimensional and Two-Dimensional NMR Spectra by Modern Pulse Techniques. University Science Books, Mill Valey, CA 1990.

NMR Basic Concepts: <http://web.chem.queensu.ca/FACILITIES/NMR/nmr/webcourse/>

Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy:

<http://www.cem.msu.edu/~reusch/VirtualText/Spectrpy/nmr/nmr1.htm#nmr1>

Organic Compound Identification Using Infrared Spectroscopy:


<http://www.scidiv.bcc.ctc.edu/wv/irsp/eir.html>.

PAVIA, D. L., LAMPMAN, G. M. and KRIZ, G. S. Introduction to Spectroscopy – A Guide for Students of Organic Chemistry. 2ª ed., S. College 1996.

WATSON, J. T. & SPARKMAN, O. D. Introduction to mass spectrometry: instrumentation, applications, and strategies for data interpretation, Ed. 2008.

Virtual Textbook of Organic Chemistry:

<http://www.cem.msu.edu/~reusch/VirtualText/Spectrpy/InfraRed/infrared.htm#ir1>

APROVAÇÃO	
<p>03/12/2010 Universidade Federal de Uberlândia Coordenação do Curso de Química Industrial  Wellington de Oliveira Cruz Coordenador Portaria R nº 715/10 Prof. Dr. Wellington de Oliveira Cruz Coordenador do Curso de Química Industrial Portaria R nº 715/10</p>	<p>03/12/2010 Universidade Federal de Uberlândia Prof. Manuel González Hernández Terrones Prof. Dr. Manuel González Hernández Terrones Departamento de Química Portaria R nº 473/2006</p>