



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA



FICHA DE COMPONENTE CURRICULAR

CÓDIGO:	COMPONENTE CURRICULAR: ANÁLISE ESPECTROMÉTRICA APLICADA A IDENTIFICAÇÃO DE COMPOSTOS ORGÂNICOS	
UNIDADE ACADÊMICA OFERTANTE: INSTITUTO DE QUÍMICA		SIGLA: IQUFU
CH TOTAL TEÓRICA: 60 HORAS	CH TOTAL PRÁTICA: 00 HORAS	CH TOTAL: 60 HORAS

1. OBJETIVOS

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

2. EMENTA

Espectrometria de Massas. Espectroscopia no Infravermelho (IV). Espectrometria no Ultravioleta UV e Vis. Espectrometria de Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio e Carbono Treze (RMN de ^1H , RMN de ^{13}C). Problemas envolvendo todas as técnicas em conjunto.

3. PROGRAMA

1. Espectrometria de massas

- 1.1 Instrumentação
- 1.2 Instrumentos e o método de separação dos íons
- 1.3 Determinação da fórmula molecular
- 1.4 Reconhecimento do pico do íon molecular
- 1.5 Fragmentações
- 1.6 Espectros de massas das classes químicas principais
- 1.7 Hidrocarbonetos saturados
- 1.8 Hidrocarbonetos insaturados
- 1.9 Compostos aromáticos
- 1.10 Álcoois
- 1.11 Fenóis
- 1.12 Éteres
- 1.13 Cetonas
- 1.14 Aldeídos
- 1.15 Ácidos carboxílicos
- 1.16 Ésteres
- 1.17 Lactonas
- 1.18 Aminas
- 1.19 Amidas
- 1.20 Nitrilas
- 1.21 Nitrocompostos
- 1.22 Nitritos
- 1.23 Nitratos alifáticos
- 1.24 Compostos de enxofre
- 1.25 Compostos halogenados
- 1.26 Compostos heteroaromáticos
- 1.27 Aminoácidos
- 1.28 Triglicérides
- 1.29 Macromoléculas
- 1.30 Íons moleculares comuns
- 1.31 Fragmentos comuns eliminados
- 1.32 Séries de fragmentos característicos

2. Espectrometria no infravermelho (IV)

- 2.1 Introdução
- 2.2 Espectros de "background"
- 2.3 Teoria
- 2.4 Instrumentação
- 2.5 Manipulação de amostras

- 2.6 N-alcanos
- 2.7 Alcenos
- 2.8 Alcinos e nitrilas
- 2.9 Hidrocarbonetos aromáticos mononucleares
- 2.10 Álcoois e fenóis
- 2.11 Éteres
- 2.12 Compostos carbonílicos
- 2.13 Cetonas
- 2.14 Aldeídos
- 2.15 Ácidos carboxílicos
- 2.16 Ésteres
- 2.17 Ésteres cíclicos - lactonas
- 2.18 Halogenetos de acila
- 2.19 Anidridos
- 2.20 Amidas
- 2.21 Amidas cíclicas - lactamas
- 2.22 Aminas
- 2.23 Isocianatos
- 2.24 Isotiocianatos
- 2.25 Iminas e oximas
- 2.26 Nitro compostos
- 2.27 Sais de ácido carboxílico
- 2.28 Sais de amônio
- 2.29 Aminoácidos
- 2.30 Compostos orgânicos halogenados
- 2.31 Mercaptanas
- 2.32 Outros compostos orgânicos de enxofre
- 2.33 Compostos fosforados
- 2.34 Aplicações da espectrometria no IV
- 2.35 Estratégia para análise de um espectro IV

3. Espectrometria no ultravioleta UV-Vis

- 3.1 Introdução
- 3.2 Transição eletrônica de espécies contendo e-: p, s, n
- 3.3 Cromóforos
- 3.4 Sistemas conjugados
- 3.5 Espectro do azuleno
- 3.6 Compostos carbonílicos conjugados
- 3.7 Absorção de benzeno e derivados
- 3.8 Solventes
- 3.9 Região de transparência de solventes
- 3.10 Adição de aditivos
- 3.11 Regras de Woodward
- 3.12 Outras aplicações de UV-Vis

4. Espectrometria de ressonância magnética nuclear de hidrogênio e carbono treze (RMN de ^1H e ^{13}C)

- 4.1 Introdução
- 4.2 Os espectros
- 4.3 Conceitos básicos e instrumentos
- 4.4 O mecanismo de absorção (Ressonância)
- 4.5 Instrumentação
- 4.6 Instrumentos Modernos
- 4.7 Manipulação da amostra
- 4.8 Deslocamento Químico
- 4.9 O ambiente químico e o deslocamento químico
- 4.10 Eletronegatividade
- 4.11 Anisotropia diamagnética
- 4.12 Ligação de Hidrogênio

- 4.13 Regiões características de Desl. Quím. De ^1H
- 4.14 Faixas de deslocamentos Químicos de carbono ^{13}C
- 4.15 Integração dos picos de RMN
- 4.16 Acoplamento de spins – hidrogênio (^1H)
- 4.17 A origem dos acoplamentos
- 4.18 O mecanismo dos acoplamentos
- 4.19 Tipos de desdobramentos
- 4.20 A força do campo magnético
- 4.21 Calculando J e mais sobre J
- 4.22 Alguns J importantes de saber
- 4.23 Sistemas com ^1H ligado a heteroátomos
- 4.24 Acoplamentos em RMN de ^{13}C
- 4.25 Dept
- 4.26 Acoplamento à longa distância
- 4.27 Cálculos de deslocamentos químicos - RMN de ^1H
 - 4.27.1 Cálculo para prótons metilênicos
 - 4.27.2 Alcenos substituídos
 - 4.27.3 Aromáticos substituídos
- 4.28 Cálculos de deslocamentos químicos - RMN de ^{13}C
 - 4.28.1 Alcanos lineares e ramificados
 - 4.28.2 Alcanos e cicloalcanos com outros substituintes
 - 4.28.3 Alcenos
 - 4.28.4 Aromáticos substituídos

5. Problemas envolvendo todas as técnicas em conjunto

4. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

BRUCE, P. Y. **Química orgânica**. 4. ed. São Paulo: Pearson, 2006.

CONSTANTINO, M. G. **Química orgânica**: curso básico universitário. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2008.

MCMURRY, J. **Química orgânica**. 9. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2016.

PAVIA, D. L.; [et al.]. **Introdução à espectroscopia**. 4. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2010.

SILVERSTEIN, R. G.; [et al.]. **Identificação espectrométrica de compostos orgânicos**. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006

5. BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

BARBOSA, L. C. A. **Espectroscopia no infravermelho**: na caracterização de compostos orgânicos. Viçosa: UFV, 2007.

CHAPMAN, J. R. **Practical organic mass spectrometry**: a Guide for chemical and biochemical analysis. 2.ed. Chichester: John Wiley & Sons, 1993.

HOFFMANN, E.; STROOBANT, V. **Mass spectrometry**: principles and applications. 3. ed. Chichester: John Wiley & Sons, 2007.

JACOBSEN, N. E. **NMR spectroscopy explained**: simplified theory, applications and examples for organic chemistry and structural biology. New York: Wiley-Interscience, 2007.

MITCHELL, T. N.; COSTISSELLA, B. **NMR-from spectra to structures**: an experimental approach. 2. ed. Berlin, Heidelberg: Springer, 2007.

PRETSCH, E.; [et al.] **Structure determination of organic compounds**: tables of spectral data. 4. ed. Berlin, Heidelberg: Springer, 2009.

SOLOMONS, T. W. G. **Química orgânica**. 10. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2012.

6. APROVAÇÃO

Fábio Augusto do Amaral
Coordenador do Curso de Licenciatura em Química

Nivia Maria Melo Coelho
Diretora do Instituto de Química



Documento assinado eletronicamente por **Fábio Augusto do Amaral, Coordenador(a)**, em 24/04/2019, às 16:16, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Nivia Maria Melo Coelho, Diretor(a)**, em 29/05/2019, às 10:48, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1121527** e o código CRC **F4F03138**.