



UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE  
INSTITUTO DE QUÍMICA  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÂNICA

**MÉTODOS FÍSICOS DE ANÁLISE ORGÂNICA I**  
**CÓDIGO: GQO00064**  
**CARGA HORÁRIA: 54 horas**  
**CURSOS: Farmácia**

## GQO00064 - MÉTODOS FÍSICOS DE ANÁLISE ORGÂNICA I

### EMENTA

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

### PROGRAMA DA DISCIPLINA

- Espectro Eletromagnético; Lei de Beer; Transições Eletrônicas. Orbitais Moleculares. Regras de Hund. Diagrama de Energia para os diferentes tipos de Cromóforos.
- Efeito de Solvente nas Transições  $n \rightarrow \pi^*$  e  $\pi \rightarrow \pi^*$  em Enonas. Regras de Woodward Fieser para Dienos Acíclicos.
- Regras de Woodward para compostos aromáticos. Exercícios.
- Infravermelho. Fatores que governam a frequência vibracional. Tipos de Vibrações. Graus de liberdade.
- Interpretação de espectros de IV. Efeitos internos que alteram a absorção de grupos funcionais. Exercícios
- RMN de  $^1\text{H}$  e de  $^{13}\text{C}$  em uma dimensão. 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.
- Deslocamentos Químicos. Blindagem eletrônica. Acoplamentos Spin-Spin de primeira ordem em RMN de  $^1\text{H}$ . Constantes de Acoplamento e multiplicidade de sinais.
- Efeitos intramoleculares e intermoleculares que afetam os deslocamentos químicos de prótons e carbonos. Equivalência química de hidrogênios e de carbonos.
- E.M. – Introdução; aplicações e conceitos; comparação com outras técnicas; formação de partículas; estabilização de cargas e energia de ligação.
- Definições - Íon Molecular; relação massa carga; Pico Base; representação de cargas. Espectrômetro de Massas – preparo das amostras; câmara de ionização; aceleração; analisadores; representação de Espectro de Massas.
- Técnicas de Ionização; conceitos em Impacto de elétrons.
- Fragmentação – Regras Gerais de Fragmentações; hidrocarbonetos alifáticos e aromáticos; grupo OH; grupo CO; derivados halogenados.
- Efeito isotópico; rearranjo MacLafferty; íon tropílio.
- Exercícios envolvendo conceitos e interpretação de espectros simples.

### BIBLIOGRAFIA

- D. L. Pavia; G. M. Lampman, G. S. Kriz; Introdução à Espectroscopia, 4ª Edição (tradução), SP Cengage Learning, 2010, 700p.
- R. M. Silverstein; G. Glayton Bassler; T. C. Morrill; Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, 5ª Edição em português, Guanabara Koogan (1994).
- R. M. Silverstein; F. X. Webster; Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, 6ª edição em português, LTC (2000).
- R. M. Silverstein; F. X. Webster; D. Kiemle; Spectrometric Identification of Organic Compounds, 7ª edição, Wiley (2005).
- J. S. Lambert; H. F. Shurvell; D. Lightner; R. G. Cooks; Introduction to Organic Spectroscopy; Macmillan Publishing Company, NY.(2005)
- P. Crews; J. Rodríguez; M. Jaspars; Organic Structure Analysis; Oxford University Press, Inc., 1998.
- 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.