



UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO
COORDENADORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA - CPGQuim
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA - CCET

Avenida dos Portugueses, s/n - Bacanga - 65.080-040 São Luís (Ma)
Fone/FAX: (98) 2109.8245 – cpgquim@ufma.br – www.quimica.ufma.br/cpgquim

Disciplina: Métodos de Identificação de Compostos Orgânicos

Docente Responsável: Professora Dra Cláudia Quintino da Rocha

Carga Horária: 60 horas

Créditos: 04

Objetivo: Proporcionar ao mestrando conhecimentos teóricos sobre os métodos usuais necessários para a identificação de compostos orgânicos.

1) Espectroscopia na região do infravermelho (IV).

- a) Vibrações moleculares. Fatores que influenciam as frequências vibracionais.
- b) Instrumentação: fontes de infravermelho, monocromadores, detectores.
- c) Técnicas de preparo de amostras sólidas, líquidas e gasosas.
- d) Absorções características de alcanos, alquenos, alquinos, compostos aromáticos, aldeídos, cetonas, ácidos carboxílicos e derivados, nitrilas, aminas, álcoois, éteres e fenóis.

2) Espectroscopia de massas (EM)

- a) Princípios básicos da espectrometria de massas.
- b) Instrumentação e preparo de amostras.
- c) Íon molecular.
- d) Abundância isotópica.
- e) Processos de fragmentação (Regra de Stevenson, segmentação α , segmentação indutiva, segmentação de duas ligações, Retro Diels-Alder e Rearranjo de McLafferty).
- f) Principais fragmentações de: alcanos, alquenos, alquinos, hidrocarbonetos aromáticos, haletos de alquila e arila, álcoois, fenóis, éteres, aldeídos, cetonas, ácidos carboxílicos e derivados, compostos sulfurados, nitrila.
- g) Índice de Deficiência de Hidrogênio e a Regra do Treze
- h) Principais fontes de ionização (ESI, EI, APCI, MALDI etc) e analisadores (Ion Trap, TOF, Q-TOF, SQ, TQ, FTICR etc)

3) Ressonância Magnética Nuclear (RMN)

- a) Princípios básicos de Ressonância Magnética nuclear.
- b) Deslocamento químico, interação Spin-Spin.
- c) Acoplamento vicinal, geminal e à longa distância.
- d) Análise de espectros de RMN de hidrogênio e de carbono 13.
- e) Técnicas de dupla ressonância e mecanismos de relaxação; desacoplamento homonuclear e heteronuclear; efeito nuclear Overhauser (NOE)
- f) Experimentos avançados de RMN (DEPT, COSY, HETCOR etc)

-Elucidação da estrutura de compostos orgânicos pela análise dos dados de IV, EM e RMN.

Métodos de Avaliação: Prova escrita, seminários e listas de exercícios.

Bibliografia

PAVIA, D.L., LAMPMAN, G.M., KRIZ, G.S. Introduction to spectroscopy. 2nd ed. New York, USA, Saunders College Publishing. 1996. 511 p.

SILVERSTEIN, R.M., MEBSTER, F.X. Spectrometric Identification of Organic Compounds. 6. ed. New York, USA: Jhon Wiley, 1998. 482 p.

WILLIAMS, D. H., FLEMING, I. Spectroscopic Methods in Organic Chemistry. 6. ed. Maidenhead: McGraw-Hill, 1997. 278 p.