



**Disciplina:** Métodos Físicos de Identificação de Compostos Orgânicos

**Carga Horária:** 60 horas

**Créditos:** 4 (quatro)

**Docente(s) Responsável(is):**

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Cláudia Quintino da Rocha

Prof. Dr. Breno Almeida Soares

**Objetivos da Disciplina:**

- Apresentar os conceitos teóricos dos três métodos físicos de análise e ensinar como utilizá-los para elucidar estruturas de substâncias orgânicas.
- Dar noções básicas e aplicação de algumas técnicas especiais de RMN e preparação de derivados.

**Ementa:**

1. Espectroscopia no Infravermelho
2. Espectrometria de massas.
3. Ressonância magnética nuclear
4. Aplicação das técnicas em conjunto, incluindo preparação de derivados para determinação estrutural de substâncias orgânicas

**Programa Analítico:**

**Unidade 1 (Espectroscopia no Infravermelho): 12 h.**

1. Introdução
2. Tipos de vibração
3. Teoria de oscilador harmônico
4. Equipamentos de IV – FT
5. Instrumentação e preparo de amostras sólidas, líquidas e gasosas
6. Identificação das funções orgânicas através de espectros no IV
7. Relação entre estrutura e frequência de absorção.
8. Efeitos de solventes
9. Aplicações

**Unidade 2 (Espectrometria de Massas): 18 h.**

1. Desenvolvimento histórico
2. Equipamentos
3. Processamento de amostra no EM.
4. Principais técnicas de ionização/analísadores
5. Informações do espectro de massas
6. Análise de espectros de massas
7. Propostas de mecanismos para identificar íons dos picos de diferentes funções orgânicas presentes no espectro
8. Aplicação CG-EM, CL-EM.
9. Tratamento de dados

**Unidade 3 (Ressonância Magnética Nuclear): 20 h.**

1. Introdução e princípios básicos de ressonância magnética nuclear
2. Técnica de pulso e transformada de Fourier



# UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO

Fundação Instituída nos termos da Lei nº 5.152, de 21/10/1966 – São Luís - Maranhão.

## Programa de Pós-Graduação em Química

3. Deslocamento químico
4. Acoplamento Spin-spin
5. Efeito nuclear Overhauser (NOE)
6. Interpretação de espectros unidimensionais
7. Correlação deslocamento químico/funções orgânicas, feições de sinais.
8. RMN de carbono-13
9. Sequências de multipulsos
10. Técnicas de identificação da multiplicidade do carbono.
11. Introdução à análise de espectros de RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$
12. Técnicas de múltipla irradiação
13. Obtenção de espectros bidimensionais ( $^1\text{H}, ^1\text{H}$  – COSY, NOESY, HETCOSY; COLOC; HMQC, HMBC)
14. Interpretação de espectros bidimensionais

### Unidade 4 (Aplicação de Técnicas em Conjunto): 10 h.

1. Aplicação de métodos físicos: espectrometria, IV, RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  (uni e bidimensionais) e espectrometria de massas em conjunto para a determinação de estruturas de compostos orgânicos
2. Aplicação de métodos químicos (utilização de derivados) para a confirmação de estruturas propostas com base em métodos físicos.

### BIBLIOGRAFIA

1. Robert M. Silverstein and Francis X. Webster, State Univ. of New York 1998. Trad.: Paula Fernandes de Aguiar e Ricardo Bicca de Alencastro Univ. Fed. do Rio de Janeiro, Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, Editora Livros Téc. E Ciet. S.A., 2000.
2. Phillip Crews, Jaime Rodríguez, Marcel Jaspars, Organic Structure Analysis, Univ. of California, Santa Cruz, 1998, Oxford Univ. Press.
3. Lambert, J.B., Shurvell, H.F., Lightner, D. e Cooks, G., "Introduction to Organic Spectroscopy", Macmillan Publ. Co., Nova Iorque, 1987.
4. Sternhell, S. and Kalman, J.R., Organic Structures from Spectra, John Wiley & Sons LTD. NY, 1985.
5. Dudley Williams e Ian Fleming, Spectroscopic Methods in Organic Chemistry, McGraw-Hill, London 1995.
6. Silverstein, R.M., Bassler, G.C. e Morrill, T.C., "Spectrometric Identification Of Organic Compounds", 4ª ed., John Wiley & Sons, Nova Iorque, 1994.
7. Gottlieb, O.R., Braz Filho, R. e Alencar, J.W. e Sanchez, E.L., "Introducción a la Espectrometria de Massas de Substâncias Orgânicas", Ed. Secr. Gen. de la O.E.A., Washington, EUA, 1983.
8. Sanders, J.K.M. e Hunter, B.K., "Modern N.M.R. Spectroscopy", Ottawa Univ. Press, Canadá, 1987.
9. Friebolin, H. Basic One – and Two – Dimensional NMR Spectroscopy, VCH Publishers, Weinheim FRG, 2 and ed. 1993.
10. Richards, S. A. Laboratory guide to Proton NMR Spectroscopy, Blachwell, Scientific Publications. London, England, 1992.
11. Constantin, E and Schnell, A; Mass Spectrometry, Ellis Hor wood Ltd., West Sussex, England, 1990.
12. J. K. M. Sanders, E. Constable e Brian K. Hunter, Modern NMR Spectroscopy A Workbook, Oxford University Press, Oxford, 1989.
13. E. Breitmaier, Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry, Wiley and Sons, New York 1993.