



MEC-UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
DECANATO DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

CÓDIGO IC – 1303 CRÉDITOS – 6 – 90T	NOME: Determinação Estrutural em Química Orgânica Cada crédito corresponde a 15h / aula
--	---

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA – Programa de Pós-graduação em Química Orgânica
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS - UFRRJ

OBJETIVOS DA DISCIPLINA:

- **Apresentar os conceitos teóricos dos quatro métodos físicos de análise e ensinar como utiliza-las para determinar estruturas substâncias orgânicas.**
- **Dar noções básicas e aplicação de algumas técnicas especiais de RMN e preparação de derivados.**

EMENTA:

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

PROGRAMA ANALÍTICO

Unidade 1 (Espectroscopia no Infravermelho): 10 h.

1. Introdução
2. Tipos de vibração
4. Teoria de oscilador harmônico
5. Equipamentos de IV - FT
6. Preparação de amostra para análise IV
7. Interpretação de espectros IV
7. Identificação das funções orgânicas através de espectros no IV
8. Relação estrutura e frequência de absorção.
9. Efeitos de solventes
10. Aplicações

Unidade 2 (Ressonância Magnética Nuclear): 26 h.

1. Introdução e princípios básicos de ressonância magnética nuclear
2. Técnica de pulso e transformada de Fourier
2. Deslocamento químico
3. Acoplamento Spin-spin
4. Efeito nuclear Overhauser
5. Interpretação de espectros 1D
6. Correlação deslocamento químico/funções orgânicas, feições de sinais.
7. RMN de carbono-13
8. Seqüências de multipulsos
9. Técnicas de identificação da multiplicidade do carbono.
10. Introdução à análise de espectros de RMN de ^1H e ^{13}C
11. Técnicas de múltipla irradiação
12. Obtenção e de espectros bidimensionais ($^1\text{H}, ^1\text{H}$ – COSY, NOESY, HETCOSY; COLOC; HMQC, HMBC)
13. Interpretação de espectros 2D

Unidade 4 (Espectrometria de Massas): 18 h.

1. Desenvolvimento histórico
3. Equipamentos
4. Processamento de amostra no EM.
5. Principais técnicas de ionização e aplicação.
3. Informações do espectro de massas
4. Análise de espectros de massas
5. Propostas de mecanismos para identificar íons dos picos presentes no espectro.
6. Substâncias que contêm as funções: C-C, C=C, C-Z e C=Z e compostos aromáticos em diferentes tipos estruturais.
11. Aplicação CG-EM, CL-EM.

Unidade 2 (Espectroscopia no Ultra-violeta e Visível): 6 h.

1. Absorção de luz
2. Orbitais atômicos e moleculares
3. Espectro de absorção de substâncias simples

4. Espectro de absorção de compostos carbonilados
5. Compostos alfa, beta-insaturados
6. Espectro de absorção de substâncias aromáticas
6. Efeito de solvente com alteração química da espécie.
7. Utilização de aditivos como método de determinação do padrão de oxigenação em compostos aromáticos.

Unidade 5 (Aplicação de Técnicas em Conjunto): 30 h.

1. Aplicação de métodos físicos: espectrometria no UV e visível, IV, RMN de ^1H e ^{13}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 Copostos Orgânicos, Editora Livros Téc. E Ciet. S.A., 2000.
2. Phillip Crews, Jaime Rodríguez, Marcel Jaspars, Orgaic 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. Duddley 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", 4^a 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 Tw – Dimensional NMR Spectroscopy, VCH Publishers, Weinheim FRG, 2 and ed. 1993.
10. Richards, S. A. Laboratory guide to Proton NMR Spectroscopy, Blachwell, Scientific Plublications. 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.