

		UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS Departamento de Química Av. Fernando Ferrari, 514 - Campus Universitário Goiabeiras 29075-910 - Vitória - ES - Brasil e-mail: dquiufes@gmail.com Telefone: (0xx27) 4009-2486 Fax: (0xx27) 4009-2826	
		PROGRAMA DE DISCIPLINA DEPARTAMENTO DE QUÍMICA	
DISCIPLINA: Métodos Físicos Em Química Orgânica		CÓDIGO: QUI 03847	
CARGA HORÁRIA SEMANAL: 4h	TEORIA: 2h	EXERCÍCIO: 2h	LABORATÓRIO: 0
CARGA HORÁRIA SEMESTRAL: 60		CRÉDITOS: 03	
EMENTA			
<p>Espectrofotometria Visível e Ultravioleta. Espectrofotometria na Região do Infravermelho. Ressonância Nuclear Magnética. Espectrometria de Massa. Métodos Cromatográficos de análise.</p>			
PROGRAMA DA DISCIPLINA			
<p>1. INTRODUÇÃO: espectro eletromagnético</p>			
<p>2. ESPECTROFOTOMETRIA NO ULTRA VIOLETA E VISÍVEL: Introdução teórica à absorção molecular no ultravioleta; Instrumentação; Absorções características dos compostos orgânicos: sistemas contendo somente elétrons σ; Compostos saturados contendo elétrons n; compostos contendo elétrons π; Regras de Woodward: cromóforo dieno e cromóforo carbonila α, β-insaturado; Cromóforos ácido carboxílico e seus derivados; Cromóforo benzeno e derivados; Outros cromóforos contendo nitrogênio e enxofre em ligações múltiplas; Compostos heteroaromáticos.</p>			
<p>3. ESPECTROFOTOMETRIA NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO Introdução teórica; Modos de vibração: deformação axial simétrica e assimétrica; deformação angular no plano simétrica e assimétrica; deformação angular fora do plano simétrica e assimétrica; Interações: ligações de hidrogênio; ressonância de Fermi; Instrumentação e manuseio da amostra; Frequências características de grupamentos em moléculas orgânicas: hidrocarbonetos, aromáticos, álcoois e fenóis; éteres; epóxidos e peróxidos; aldeídos e cetonas; ácido carboxílico e seus derivados; ânion carboxilato; aminas e seus sais; aminoácidos e seus sais; nitrilas; outros compostos de nitrogênio; compostos orgânicos de enxofre; haletos orgânicos; compostos de silício e fósforo.</p>			
<p>4. RESSONÂNCIA NUCLEAR MAGNÉTICA Fenômeno da ressonância magnética nuclear; Instrumentação e manuseio da amostra; Ressonância de Próton: Deslocamento químico, Acoplamento simples spin-spin: espectros de primeira ordem prótons em heteroátomos, Acoplamentos com outros núcleos (^{31}P, ^{13}C, ^{19}F, etc), Acoplamentos spin-spin mais complexos: equivalência de deslocamento químico, equivalência magnética, sistemas do tipo AMX, ABX e ABC, Efeitos de centro assimétrico, Acoplamento vicinal e geminal em sistemas rígidos: equação de Karplus, Acoplamento a grandes distâncias. Ressonância de Carbono: Introdução, interpretação de espectros de carbono 13, Desacoplamento, Deslocamentos químicos de compostos orgânicos: hidrocarbonetos (alcanos, efeito de substituintes nos alcanos, cicloalcanos e heterociclos saturados, alquenos, alquinos e aromáticos); álcoois; éteres; acetais e epóxidos; compostos halogenados; aminas; compostos de enxofre; compostos carbonilados e seus derivados. Acoplamento de spin; Assinalamento de sinais.</p>			
<p>5. ESPECTROMETRIA DE MASSA Introdução; Instrumentação; Espectro de massa; Determinação da fórmula molecular; Reconhecimento do pico íon molecular; Uso da fórmula molecular; Fragmentação; Rearranjos; Fragmentação característica de compostos orgânicos: hidrocarbonetos; compostos hidroxilados; éteres; cetonas; aldeídos; ácidos carboxílicos e derivados; aminas; nitrilas; nitro compostos; nitritos; nitratos; compostos sulfurados; compostos halogenados; compostos heteroaromáticos.</p>			
<p>6. MÉTODOS CROMATOGRÁFICOS DE ANÁLISE Princípios básicos de cromatografia gasosa; Instrumentação; Fases estacionárias; Análises qualitativa e quantitativa; Derivação; Aplicações.</p>			

7. APLICAÇÕES:

Utilização das técnicas individuais e/ou em conjunto na determinação estrutural de compostos orgânicos

Referências bibliográficas:

BÁSICA:

1. Silverstein, Robert M.; WEBSTER, Francis X.; KIEMLE, David J. *Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos*; 7ª edição, Editora LTC, **2007**.
2. Collins, Carol H.; BRAGA, Gilberto L.; BONATO, Pierina S. *Fundamentos de Cromatografia*; 2ª edição, Editora da UNICAMP, **2006**.

SUPLEMENTAR:

1. Pretsch, Erno; BÜHLMANN, Philippe; BADERTSCHER, Martin *Structure Determination of Organic Compounds: Tables of Spectral Data*, 4ª edição, Springer Berlin Heidelberg, **2009**.
2. Schomburg, Gerhard; *Gas Chromatography, A Practical Course*; VHC; 1990.
3. GIL, Victor M. S.; Geraldês, Carlos F. G. C. *Ressonância Magnética Nuclear: Fundamentos, métodos e aplicações*; 2ª edição, Fundação Calouste Gulbenkian, **2002**.
4. LEVY, George C.; *Carbon-13-Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*; second edition; Krieger; 1980.
5. MACLAFFERTY, Fred W.; *Interpretation of Mass Spectra*; fourth edition; University Science Books; 1993.
6. PAVIA, Donaldo L.; LAMPMAN, Gary M.; KRIZ, George S. *Introduction to Spectroscopy: A Guide for Students of Organic Chemistry*; 4ª edição, Editora Thomson, **2008**.

Data/ ___/___/___

Assinatura