



### Informações da disciplina

**Disciplina:** MFQO - Métodos Físicos em Química Orgânica

**Créditos:** 36 horas

**Sala:** PAV-2.08

**Dia/hora:** QUI, 21:00 – 22:50

**Pré-requisitos:** Química Orgânica I

### Informações do professor

**Nome:** Lucas Raposo Carvalho

**Sala:** Sala 3.08, Departamento de Ciência Naturais (DCNAT), Bloco C

**E-mail:** lraposo@ufs.j.edu.br

**Horário de atendimento:** SEG e QUA - 14:00 às 16:00

## Conteúdo

1	Breve descrição da disciplina	1
2	Bibliografia	2
3	Objetivos da disciplina	2
4	Formas de avaliação	3
5	Calendário	3
6	Ementa	5
6.1	Módulo 1. Espectrometria de Massas . . . . .	5
6.2	Módulo 2. Espectroscopia na região do Infravermelho . . . . .	5
6.3	Módulo 3. Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear . . . . .	6

## 1 Breve descrição da disciplina

Pretende-se preparar os alunos dos cursos de Licenciatura em Química em tópicos centrais de elucidação estrutural utilizando técnicas espectroscópicas e espectrométricas – *viz.*, espectroscopia na região do infravermelho (IV), espectrometria de massas (EM) e espectroscopia de

ressonância magnética nuclear (RMN) – que serão úteis em situações acadêmicas e profissionais futuras.

Especificamente, serão abordados fundamentos teóricos sobre (i) a espectrometria de massas, (ii) aspectos básicos de instrumentação de EM, (iii) o íon molecular e regras úteis para análise estrutural, (iv) fragmentações e rearranjos, (v) a espectroscopia na região do infravermelho, (vi) identificação de grupos funcionais e elementos estruturais pertinentes ao IV, (vii) análise de espectros de IV, (ix) a espectroscopia de ressonância magnética nuclear, (x) aspectos básicos de instrumentação de RMN, (xi) análise de espectros unidimensionais de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ .

## 2 Bibliografia

1. PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. **Introdução à espectroscopia**, 2ª ed. Cengage Learning, São Paulo. 733 pp., **2016**;
2. SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J.; BRYCE, D. L. **Identificação espectrométrica de compostos orgânicos**, 8ª ed. LTC, Rio de Janeiro. 454 pp., **2019**.

## 3 Objetivos da disciplina

Ao final da disciplina, espera-se que o aluno possua as seguintes habilidades/competências:

- Saber alguns conceitos básicos do fenômeno da espectrometria de massas;
- Saber os principais modos de ionização na EM;
- Ter domínio de reconhecimento padrões isotópicos e do pico do íon molecular;
- Ter conhecimento dos principais padrões de fragmentação em EM;
- Saber alguns conceitos básicos do fenômeno da espectroscopia na região do infravermelho;
- Saber os principais números de onda de grupos funcionais relevantes e outros padrões estruturais em espectros;
- Ter domínio quanto à análise de um espectro de IV;
- Saber alguns conceitos básicos do fenômeno e da instrumentação da espectroscopia de RMN;
- Ter domínio dos conceitos de deslocamento químico, anisotropia magnética, integração de sinais, acoplamento escalar e padrões de multiplicidade;

- Ter domínio na análise de espectros 1D de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ ;
- Ter conhecimento do efeito nuclear overhauser (nOe) e suas implicações;
- Ter conhecimento da técnica do DEPT e domínio na análise de espectros.

## 4 Formas de avaliação

Os alunos serão avaliados por um total de três provas (P1, P2 e P3). As avaliações P1 e P2 terão nota máxima igual a 3,0 pontos e a P3, 4,0 pontos.

O aluno terá direito a uma avaliação substitutiva, abordando toda a matéria lecionada, caso possua média inferior a 6,0 e presença igual ou superior ao mínimo exigido. A nota da prova substitutiva irá substituir a nota da P1, P2 ou P3, caso seja maior que uma delas. O aluno com média final igual ou superior a 6,0 após a última avaliação será considerado **aprovado**. O aluno com média final inferior a 6,0 após a última avaliação será considerado **reprovado**.

## 5 Calendário

QUINTA-FEIRA	
<b>Data: 21/8</b> Apresentação da disciplina - Ementa, datas e informações	<b>1</b>
Data: 28/8 1. Espectrometria de Massas (EM)	<b>2</b>
<b>Data: 4/9</b> 1. Espectrometria de Massas (EM)	<b>3</b>
Data: 11/9 1. Espectrometria de Massas (EM)	<b>4</b>

QUINTA-FEIRA	
Data: 18/9	5
P1: Módulo 1	
Data: 25/9	6
2. Espectrometria na região do InfraVermelho (IV)	
Data: 2/10	
XII Jornada de Química	
Data: 9/10	7
2. Espectrometria na região do InfraVermelho (IV)	
Data: 16/10	8
2. Espectrometria na região do InfraVermelho (IV)	
Data: 23/10	9
P2: Módulos 1 e 2	
Data: 30/10	10
3. Espectrometria de Ressonância Magnética Nuclear (RMN)	
Data: 6/11	11
3. Espectrometria de Ressonância Magnética Nuclear (RMN)	
Data: 13/11	12
3. Espectrometria de Ressonância Magnética Nuclear (RMN)	

QUINTA-FEIRA	
Data: 20/11	
<b>Dia da Consciência Negra</b>	
Data: 27/11	<b>13</b>
3. Espectrometria de Ressonância Magnética Nuclear (RMN)	
<b>Data: 4/12</b>	<b>14</b>
<b>P3: Módulos 1 a 3</b>	
Data: 11/12	<b>15</b>
<b>Prova substitutiva: Módulos 1 a 3</b>	

## 6 Ementa

### 6.1 Módulo 1. Espectrometria de Massas

Tópicos discutidos incluem (i) aspectos básicos de instrumentação, (ii) métodos de ionização, (iii) analisadores de massas, (iv) espectros de massa, (v) determinação de massa e fórmula molecular, (vi) abundâncias isotópicas, (vii) IDH, regra dos 13 e regra do nitrogênio, (viii) análise estrutural e padrões de fragmentação.

Tópico principal	Duração pretendida	Bibliografia
Métodos de ionização, espectros de massas, abundâncias isotópicas e análise estrutural	Três aulas	Pavia: Cap. 1 e 8 Silverstein: Cap. 1

### 6.2 Módulo 2. Espectroscopia na região do Infravermelho

Tópicos discutidos incluem (i) unidades utilizadas, (ii) o processo de absorção e usos da espectroscopia no IV, (iii) modos de vibração, (iv) propriedades de ligações químicas e seus impactos na espectroscopia no IV, (v) aspectos básicos de instrumentação, (vi) análise de espectros e tabelas de correlação, (vii) padrões espectrais de grupos funcionais específicos.

<b>Tópico principal</b>	<b>Duração pretendida</b>	<b>Bibliografia</b>
Fenômeno da espectroscopia de absorção no IV, modos de vibração e interpretação de espectros de IV	Três aulas	Pavia: Cap. 1 e 2 Silverstein: Cap. 2

### 6.3 Módulo 3. Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear

Tópicos discutidos incluem (*i*) fenômeno da RMN, (*ii*) deslocamento químico e blindagem, (*iii*) aspectos básicos de instrumentação, (*iv*) integração de sinais, (*v*) ambientes químicos, (*vi*) blindagem diamagnética, (*vii*) o acoplamento escalar, triângulo de pascal e padrões de multiplicidade, (*viii*) espectros de  $^1\text{H}$  representativos, (*ix*) deslocamentos químicos de  $^{13}\text{C}$ , (*x*) efeito nuclear Overhauser (nOe), (*xi*) DEPT, e (*xii*) espectros de  $^{13}\text{C}$  representativos.

<b>Tópico principal</b>	<b>Duração pretendida</b>	<b>Bibliografia</b>
Fenômeno da RMN e análise espectral de RMN 1D.	Quatro aulas	Pavia: Cap. 3, 4, 5, 6 e 10 Silverstein: Cap. 3, 4 e 5