

DISCIPLINA: Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos	CÓDIGO: 2QUI.098
--	-------------------------

VALIDADE: Início: **08/2010** Término:

Carga Horária: Total: 60 h/a (50 h) Semanal: 4 h/ a Créditos: 04

Modalidade: Teórica

Classificação do Conteúdo pelas DCN: Específica

Ementa:

Espectroscopia eletrônica UV-Vis. Espectroscopia vibracional no Infravermelho, Espectrometria de RMN. Espectrometria de Massas. Interpretação de espectros e aplicações tecnológicas.

Curso	Período	Eixo	Obrig.	Optativa
Química Tecnológica	5º	Química Orgânica Tecnológica		X

Departamento/Coordenação: Departamento de Química (DEQUI)

INTERDISCIPLINARIEDADES

Pré-requisitos
Química Orgânica
Co-requisitos
Disciplinas para as quais é pré-requisito
Disciplinas para as quais é co-requisito
Transdisciplinaridade (inter-relações desejáveis)

Objetivos: *A disciplina deverá possibilitar ao estudante*

1	Conhecer e compreender a interação da energia com a matéria.
2	Conhecer e compreender os fenômenos envolvidos em diversas técnicas espectrométricas de identificação de compostos orgânicos.
3	Desenvolver a capacidade de empregar técnicas espectrométricas no acompanhamento de reações orgânicas e na caracterização de substâncias orgânicas.

Unidades de ensino		Carga-horária Horas/Aula
1	Espectro eletromagnético. Transições eletrônicas. Interação da energia com a matéria.	2
2	Princípios básicos da espectroscopia UV/Vis: absorção de luz no UV/Vis, lei de Lambert-Beer, terminologia, tipos de transições eletrônicas; Espectrofotômetro de UV/Vis; Espectros de UV/Vis: absorção característica de cromóforos, solventes empregados no UV/Vis, cálculos de absorção de espectros de UV/Vis.	12
3	Aplicações da radiação IV. Espectroscopia na região do IV. Instrumentação: espectrômetros por transformada de Fourier. Preparação das amostras no estado sólido, líquido e gasoso. Modos vibracionais-rotacionais de ligações químicas: descrições clássica e quântica. Lei de Hooke. Espectros de IV: absorções características de grupos funcionais em moléculas orgânicas.	12
4	Espectrometria de Massas. Métodos de Ionização: Ionização por Elétrons - EI, Desorção Espontânea - SD, Ionização por Eletrospray – ESI, Ionização e Desorção por Laser – LDI e MALDI. Analizadores de massa: TOF, Setor Magnético, Quadrupolos, ION TRAP, analisador seqüencial do tipo TOF/TOF. Interpretação de espectros massas EI de diversas classes de moléculas orgânicas. Interpretação de espectros massas ESI e MALDI de moléculas orgânicas, peptídeos e proteínas.	08
5	Espectrometria de RMN de ¹ H. Propriedades magnéticas dos núcleos, spin nuclear. Efeito Zeeman. Instrumentação. Processos de Relaxação: deslocamento químico e acoplamento de Spin. Interpretação de espectros de ¹ H de moléculas orgânicas.	10
5	Espectrometria de RMN de ¹³ C. Deslocamento químico e acoplamento de Spin. Interpretação de espectros de ¹³ C de moléculas orgânicas.	06
6	Espectrometria de RMN bi-dimensional. Técnicas de correlação em duas dimensões para determinação de estruturas tridimensionais de moléculas orgânicas.	10
Total		60

Bibliografia Básica	
1	SILVERSTEIN, R. M. Identificação de Compostos Orgânicos. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2007.
2	BARBOSA, L. C. A. Espectroscopia no Infravermelho na Caracterização de Compostos Orgânicos. 1. ed. Viçosa: Editora da UFV, 2007.
3	MCLAFFERTY, F. W.; TURECEK, F. Interpretation of Mass Spectra. 4. ed. Sausalito: University Science Books, 1993.

Bibliografia Complementar	
1	SIUZDAK, G. The Expanding Role of Mass Spectrometry In Biotechnology. 2. ed. San Diego: MCC Press, 2006.
2	HOFFMANN, E. de; STROOBANT, V. Mass Spectrometry: principles and applications. 2. ed. Nova Iorque: John Wiley & Sons, 2004.
3	JOHNSTONE, R. A. W.; ROSE, M. E. Mass spectrometry for chemists and biochemists. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
4	SOLOMONS, T. W. G.; FRYHLE, C. B. Química Orgânica, v. 1. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2005.
5	SOLOMONS, T. W. G.; FRYHLE, C. B. Química Orgânica, v. 2. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.
6	McMURRY, J. Química Orgânica, v. 1 e 2. 6. ed. São Paulo: Thomson, 2005.