

QMC855 - Disciplina de Métodos Espectroscópicos em Química Orgânica

[90 horas/06 créditos)

Ementa da Disciplina:5q4

Espectrometria de Massa. Espectrometria no Infravermelho. Espectrometria de Ressonância Magnética Nuclear de Prótons e Carbon-13. Teoria básica, instrumentação e procedimento experimental. Interpretação dos espectros, exemplos, exercícios. Noções de técnicas modernas de pulso e transformadas de Fourier e RMN de 2D.

Programa Detalhado:

I. Espectrometria de Massa

Teoria básica, instrumentação, procedimento experimental, interpretação dos espectros, fragmentações típicas de classes representativas de moléculas da química orgânica, exercícios.

II - Espectrometria no Infravermelho:

Teoria básica, instrumentação, procedimento experimental, interpretação dos espectros, frequências características de grupamentos, exemplos, exercícios.

III - Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear Protônica:

Histórico, teoria básica, instrumentação, manuseio da amostra, o espectro de RMN, deslocamento químico, fatores que afetam o deslocamento químico, acoplamento spin-spin, dupla ressonância (desacoplamento), deslocamento químico de prótons ligados a carbono, deslocamento químico de prótons ligados a

heteroátomos, reagentes de deslocamento lantanídico, sistemas de spins, equivalência química e magnética, exemplos, exercícios.

IV. Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear de Carbono-13: Diferenças fundamentais entre RMN de prótons e carbono-13: Vantagens e desvantagens, técnicas de pulso e transformadas de Fourier, deslocamento químico, acoplamento spin-spin, técnicas de dupla ressonância (desacoplamento), efeito nuclear de overhauser, cálculo empírico de deslocamento químico, aplicações de RMN de carbono-13, exemplos, exercícios.

V. Noções Gerais de Técnicas de Pulso e Transformadas de Fourier em RMN DE 2-D:

Spin echo, APT, INEPT, DEPT, COSY homo e heteronuclear, espectroscopia bidimensional da constants de acoplamento, NOESY, INADEQUATE.

LITERATURA:

1. SILVERSTEIN, BASLER & MORRIL, Spectrometric Identification of Organic Compounds, Wiley, 4th ed. NY, 1981.
2. JACKMAN & STERNHELL, Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy in Organic Chemistry, Pergamon Press, 2nd ed., NY, 1969.
3. BREITMAIER & VOELTER, Carbono-13 NMR Spectroscopy, 3rd ed., Verlag, NY, 1987.
4. ATTA-UR-RAHMAN, Nuclear Magnetic Resonance, Verlag, NY, 1986.
5. NAKANISHI & SOLOMON, Infrared Absorption Spectroscopy, 2nd ed., Holden Day, San Francisco, 1977
6. BUDZIKIEWICS, DJERASSI & WILLIAMS, Mas Spectrometry of Organic Compounds, Holden Day, San Francisco, 1967.