



MEC - UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
DECANATO DE ENSINO DE GRADUAÇÃO
DAARG – DEPARTAMENTOS DE ASSUNTOS ACADÊMICOS E REGISTRO GERAL
DRA - DIVISÃO DE REGISTROS ACADÊMICOS

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

CÓDIGO: IC- 376 CRÉDITOS: 4 (T 2 P 2)	NOME: ANÁLISE ORGÂNICA I CURSOS: 20 e 64 Cada Crédito corresponde a 15h / aula Pré: IC-371
---	--

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÂNICA

INSTITUTO DE QUÍMICA

OBJETIVO DA DISCIPLINA: *Fornecer aos alunos de graduação os conhecimentos básicos e práticos de análise instrumental, para caracterização e identificação de compostos orgânicos.*

EMENTA:

1. Espectrometria na Região do Infravermelho
2. Espectrometria de Ressonância nuclear dos átomos de Hidrogênio e Carbono.
3. Espectrometria de Massas.

PROGRAMA ANALÍTICO:

- 1. Espectrometria na Região do Infra-vermelho** –Espectro eletromagnético, modelos de vibrações, equipamentos óticos e com transformada de Fourier, partes de um equipamento e sua análise: fontes, monocromadores e detectores, preparação de amostras gasosas, líquidas e sólidas, modelo molecular mecânico, momento dipolar, teoria sobre oscilador harmônico linear, oscilador diatômico, Lei de Hook, Energia potencial e cinética, transições quânticas, graus de liberdade, sistemas diatômico lineares e não lineares, vibrações de

grupos funcionais, moléculas simétricas, efeitos eletrônicos e estéricos, efeitos de diluição de amostras, análise quantitativa, uso de tabelas, obtenção e análise de espectros.

- 2. Espectrometria de Ressonância nuclear dos átomos de Hidrogênio e Carbono.** – Propriedades magnéticas dos núcleos, teoria da ressonância magnética do átomo de ^1H , frequência de Lamor, níveis de energia, saturação e relaxação, mecanismos de interação, natureza do sinal, equipamentos e sua análise: probe, campo magnético/semicondutor, detectores, emissão e detecção do sinal, técnica pulsada, transformada de Fourier, preparação de amostras, solventes deuterados, efeito da temperatura, mecanismos de proteção e desproteção, deslocamento químico, interações spin-spin, acoplamento de primeira ordem, regra de $n+1$, acoplamento de segunda ordem, equação de Karplus, sistemas de chaves para núcleos em interação, correlações para núcleos de ^{13}C , introdução as técnicas bidimensionais de COSY/HETEROCOSY, uso de tabelas, obtenção e análise de espectros.
- 3. Espectrometria de Massas.** – História da espectrometria de massas, equipamentos, partes constituintes, classificação dos espectrômetros de massas, métodos de introdução de amostras e análise, métodos de ionização de amostras e análise, tipos de detectores e análise, espectrometria de massas acoplada á cromatografia gasosa e líquida de alta resolução, tipos de interface em CG/MS e CLAE/MS, método MSMS, feição dos espectros de massas, ions positivos e negativos, reações ions-molécula, ions isótopos, identificação do ion molecular e pico base, ions e picos múltiplos, resolução de um espectrômetro, picos meta estáveis, análise mecanística de espectro de massas, classificação dos mecanismos de fragmentação em compostos cíclicos e acíclicos, análise da função C-Z, análise da função C=Z, rearranjo de McLafferty, funções alcano e alceno, rearranjo retro Diels Alder, análise de compostos com caráter aromático, obtenção e análise de espectros.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA:

1. Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos Silverstein, R.M., Bassler, G.C. and Morrill, T.C. Ed. Guanabara Dois, (5 Ed). 1991.
2. NMR Spectroscopy- Essential Theory and Practice. Macomber, R.S. Harcourt Brace Jovanovich College Outline Series, (HBJ) 1988.
3. Espectrometria de Massas O. R. Goblah Ed. A UFRRJ, 1975.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR:

- 1- SHRINER, R. L. et al. Identificação Sistemática dos Compostos Orgânicos – Manual de Laboratório, Rio de Janeiro, Guanabara Dois, 1983.
- 2- PAVIA, D. L. et al. Organic Laboratory Techniques: Small Scale Approach, New York, Saunders College Publishing, 1998
- 3- NETO, C. N. Análise Orgânica Métodos e Procedimentos para caracterização de Organoquímicos, Volumes 1 e 2, Editora UFRJ, 2004.
- 4- SOARES, B. G. et al. Química Orgânica – Teoria e Técnicas de Preparação, Purificação e Identificação de Compostos Orgânicos, Rio de Janeiro, Editora Guanabara, 1988.
- 5- SOLOMONS, T.W.G.; FRYHLE, C.B. Química Orgânica. 10.ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC Editora. Vol 2, 2012.