

Programa Analítico de Disciplina

QUI 235 - Química Orgânica IV

Departamento de Química - Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Catálogo: 2019

Número de créditos: 3

Carga horária semestral: 45h

Carga horária semanal teórica: 3h

Carga horária semanal prática: 0h

Semestres: I

Objetivos

Ao final desta disciplina o estudante deverá ser capaz de:

- Ultravioleta: identificar os tipos de cromóforos e as principais transições eletrônicas; calcular usando regras empíricas os valores de comprimento de onda de máxima absorvância para polienos e compostos carbonílicos; explicar as variações dos espectros de UV-vis de compostos orgânicos com a variação do solvente e pH do meio.
- Infravermelho: preparar amostras para a obtenção de espectros no infravermelho por transmitância; explicar a diferença entre os equipamentos de infravermelho por transmitância e refletância; prever através da lei de Hook a posição relativa de absorção de grupos funcionais; prever a intensidade relativa das bandas de absorção de grupos funcionais pela variação do momento de dipolo da ligação; identificar grupos funcionais de compostos orgânicos com e sem o emprego de tabelas de infravermelho.
- Espectrometria de Massas: preparar amostras para obtenção de espectros de massas; identificar o pico base e o pico do íon molecular e determinar a massa molar do composto; representar mecanismos de fragmentação de alcanos, éteres, álcoois, haletos de alquila e demais compostos; representar o mecanismo para a formação do íon tropílio; representar o mecanismo de fragmentação de McLafferty e Retro-Diels-Alder (RDA); explicar a intensidade relativa dos picos com base na estabilidade relativa do íon ou íon-radical formado; determinar a fórmula molecular e estrutural de moléculas simples.
- Ressonância Magnética Nuclear: preparar amostras em meio líquido de baixa viscosidade para obtenção de espectros de RMN; interpretar espectros de RMN de hidrogênio, carbono 13, COSY, NOESY, HMBC, HSQC, DEPT, APT e INADEQUATE; determinar a multiplicidade dos sinais nos espectros de RMN de ^1H e ^{13}C ; representar as multiplicidades dos sinais utilizando o triângulo de pascal; medir e calcular os valores das constantes de acoplamentos; empregar as multiplicidades dos sinais nos espectros de RMN de hidrogênio para determinar as vizinhanças químicas e conectividades das moléculas; prever os deslocamentos químicos relativos dos núcleos com base na vizinhança química e na anisotropia magnética; calcular os deslocamentos químicos dos núcleos com o emprego de tabelas de deslocamentos químicos de RMN de hidrogênio e carbono 13;
- Empregando todas os métodos espectrométricos será capaz de determinar a estrutura de um composto orgânico simples.

Ementa

Espectroscopia na região do Ultravioleta-Visível (UV-Visível). Espectroscopia na região do infravermelho (IV). Espectrometria de massas (EM). Ressonância magnética nuclear (RMN). Elucidação estrutural de compostos orgânicos pela análise dos dados de UV-Visível, IV, EM e RMN.

Pré e co-requisitos	
QUI 232	

Oferecimentos obrigatórios	
Curso	Período
Bioquímica	5
Química - Bacharelado	5

Oferecimentos optativos	
Curso	Grupo de optativas
Licenciatura em Química	Geral
Química - Licenciatura (Integral)	Geral

QUI 235 - Química Orgânica IV

Conteúdo					
Unidade	T	P	ED	Pj	To
1. Espectroscopia na região do Ultravioleta-Visível (UV-Visível) 1. Fundamentos teóricos 2. Instrumentação e preparo de amostras 3. Regras de Woodward - Fischer 4. Aplicações	3h	0h	0h	0h	3h
2. Espectroscopia na região do infravermelho (IV) 1. Fundamentos teóricos 2. Instrumentação e preparo de amostras 3. Absorções características dos diferentes grupos funcionais 4. Aplicações	8h	0h	0h	0h	8h
3. Espectrometria de massas (EM) 1. Princípios da espectrometria de massas 2. Técnicas instrumentais 3. Determinação da fórmula molecular dos compostos 4. Mecanismos básicos de fragmentação de moléculas orgânicas 5. Cromatografia em fase gasosa acoplada a EM (CG - EM)	10h	0h	0h	0h	10h
4. Ressonância magnética nuclear (RMN) 1. Fundamentos da ressonância magnética nuclear 2. Deslocamentos químico de hidrogênio e de carbono 13 3. Acoplamentos vicinal, geminal e à longa distância 4. Análise de espectros de RMN de hidrogênio e de carbono 13	15h	0h	0h	0h	15h
5. Elucidação estrutural de compostos orgânicos pela análise dos dados de UV-Visível, IV, EM e RMN 1. Aplicação conjunta das técnicas de UV, EM e RMN na elucidação da estrutura de compostos orgânicos	9h	0h	0h	0h	9h
Total	45h	0h	0h	0h	45h

(T)Teórica; (P)Prática; (ED)Estudo Dirigido; (Pj)Projeto; Total(To)

Planejamento pedagógico	
Carga horária	Itens
Teórica	Apresentação de conteúdo oral e escrito com o apoio de equipamento (projetor, quadro-digital, TV, outros); Apresentação de conteúdo oral e escrito em quadro convencional; e Apresentação de conteúdo utilizando aprendizado ativo
Prática	Não definidos
Estudo Dirigido	Não definidos
Projeto	Não definidos
Recursos auxiliares	Não definidos

QUI 235 - Química Orgânica IV

Bibliografias básicas

Descrição	Exemplares
SILVERSTEIN, R.M. WEBSTER, F.X. Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos. 7a ed. trad. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2006. 508p.	0
SOLOMONS, T.W.G.; FRYHLE, C.B. Química orgânica. 9a ed. trad. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2009. 1048p. 2v.	0
Introdução à Espectroscopia, Pavia, Donald L. - Lampman, Gary M. - Kriz, George S. - Vyvyan, James R. 716 páginas, 5ª edição, ISBN: 9788522123384, Editora: Cengage Learning Ano: 2016	0

Bibliografias complementares

Descrição	Exemplares
McLAFFERTY, F.W.; FRANTISEK, T. Interpretation at mass spectra. 1ª.ed. Mill Valley: University Science Books, 1993. 371p.	0
WILLIAMS, D.H.; FLEMING, I. Spectroscopic methods in organic chemistry. 6ª.ed. Maidenhead: McGraw-Hill, 1997. 278p.	0