

**DEPARTAMENTO:** QUÍMICA

**DISCIPLINA:** Espectroscopia Molecular Orgânica

**SIGLA:** EMO

**CARGA HORÁRIA TOTAL:** 60 horas

**TEORIA:** 60 horas

**PRÁTICA:**

**CURSO:** Doutorado Acadêmico em Química Aplicada

**PRÉ-REQUISITOS:**

**PROFESSOR RESPONSÁVEL:** Samuel Rodrigues Mendes e Rogério Aparecido Gariani

#### **EMENTA**

Espectroscopia de absorção de infravermelho, de ressonância magnética nuclear (RMN  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ ) e espectrometria de massas. Técnicas Avançadas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN 2D) e elucidação estrutural de moléculas orgânicas.

#### **CONTEÚDO PROGRAMÁTICO**

##### **UNIDADE 1 – ESPECTROMETRIA NO INFRAVERMELHO (IV)**

- 1.1. Introdução;
- 1.2. Instrumentação;
- 1.3. Manuseio da amostra;
- 1.4. Interpretação dos espectros;
- 1.5. Frequências características de grupamentos em moléculas orgânicas;
- 1.6. Espectros de referências;

##### **UNIDADE 2 – ESPECTROMETRIA DE MASSAS (EM)**

- 2.1. Introdução;
- 2.2. Instrumentação;
- 2.3. O espectro de massas;
- 2.4. Interpretação dos espectros;
- 2.5. Determinação da fórmula molecular;
- 2.6. Reconhecimento do pico do íon molecular;
- 2.7. Fragmentações e Rearranjos;
- 2.8. Espectros de referências;

##### **UNIDADE 3 – ESPECTROMETRIA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR (RMN)**

- 3.1. Introdução;
- 3.2. Instrumentação e manuseio da amostra;
- 3.3. Deslocamento químico. RMN de próton ( $^1\text{H}$ ), carbono-13 ( $^{13}\text{C}$ );

- 3.4. Acoplamentos simples spin-spin;
- 3.5. Hidrogênios em heteroátomos;
- 3.6. Acoplamentos de hidrogênio e outros núcleos;
- 3.7. Equivalência de deslocamento químico e equivalência magnética;
- 3.8. Sistemas AMX, ABX e ABC com três constantes de acoplamentos;
- 3.9. RMN de  $^{13}\text{C}$ . Interpretação dos espectros;
- 3.10. Deslocamentos químicos. Acoplamentos de Spin;
- 3.11. Análise quantitativa;
- 3.12. Espectros desacoplados;

#### UNIDADE 4 – TÉCNICAS AVANÇADAS DE RMN

- 4.1. Intensificação sem distorção por transferência de polarização (*Distortionless enhancement by polarization transfer – DEPT*);
- 4.2. Espectroscopia de correlação  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  (*Correlation Spectroscopy – COSY*);
- 4.3. Espectroscopia de Efeito Nuclear Overhauser – NOESY;
- 4.4. Intensificação Nuclear Overhauser – NOE;
- 4.5. Espectroscopia de correlação  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ ;
  - 4.5.1. *Correlação de Deslocamento Químico Heteronuclear – HETCOR*;
  - 4.5.2. *Correlação Heteronuclear de um único quantum – HSQC*;
  - 4.5.3. *Correlação Heteronuclear de múltiplos quanta – HMQC*;
  - 4.5.4. *Correlação Heteronuclear de longa distância com detecção de hidrogênio – HMBC*;
- 4.6. Espectroscopia de correlação  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$  – INADEQUATE;
- 4.7. Espectroscopia de RMN de outros núcleos.

#### BIBLIOGRAFIA

##### BÁSICA:

1. SILVERSTEIN, R. M.; BASSLER, G. C.; MORRIL, T. C. Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, 7<sup>a</sup> ed., Ed. LCT, 2007.
2. PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. K.; VYVYAN, J. R. Introdução à Espectroscopia, Ed. 1<sup>a</sup> Cengage Learning, 2010.
3. GIL, V. M. S.; GERALDES, C. F. G. C. Ressonância magnética nuclear: fundamentos, métodos e aplicações. 2<sup>a</sup> ed., Ed. Lisboa: Fundação Calouste GulbenKian, 2002.

##### COMPLEMENTAR:

1. SMITH, B. C. Fundamentals of Fourier transform infrared spectroscopy. 2<sup>a</sup> ed., Ed. CRC Press, 2011.
2. LOPES, W. A.; FASCIO, M. Esquema para interpretação de Espectros de substâncias Orgânicas na região do Infravermelho. *Quim. Nova*, Vol. 27, N<sup>o</sup>. 4, 670-673, 2004.
3. BARREIROS, M. L.; DAVID, J. M.; DAVID, J. P. Utilização de RMN de  $^1\text{H}$  na determinação da configuração absoluta de alcoóis. *Quim. Nova*, Vol. 28, N<sup>o</sup>. 6, 1061-1065, 2005.
4. CANEVAROLO JÚNIOR, Sebastião V. Técnicas de caracterização de polímeros. São Paulo: Artliber, 2007.
5. Artigos e Revisões da Literatura.



UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA  
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA – PPGQ

---

Centro de Ciências Tecnológicas – CCT  
Rua: Paulo Malschitzki, 200 – Campus Universitário Prof. Avelino Marcante  
Zona Industrial Norte – CEP: 89219-710  
Fone: (47) 3481-7900  
Joinville – Santa Catarina – Brasil