
QUI 2640 Tópico Especial de Química Orgânica (Métodos Espectroscópicos em Química Orgânica)

Tipo de Disciplina: Eletiva

Carga Horária Total: 45 horas

Créditos: 3

OBJETIVOS O objetivo desta disciplina é apresentar ao aluno de pós-graduação as técnicas espectroscópicas para a caracterização de compostos orgânicos. Uma orientação para o estudo teórico-prático dos três métodos espectroscópicos mais comumente utilizados em Química Orgânica para elucidar as estruturas das moléculas.

EMENTA Teoria básica, instrumentação e interpretação dos espectros de Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio (RMN- ^1H) e Carbono (RMN- ^{13}C). RMN de correlação espectroscópica homonuclear bidimensional (2D) de hidrogênio e hidrogênio (^1H - ^1H COSY) e de correlação heteronuclear (^1H - ^{13}C HETCOR). Teoria básica, instrumentação e interpretação dos espectros no Infravermelho e RAMAN.

PROGRAMA I - Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear Protônica:
Histórico, teoria básica, instrumentação, técnicas de pulso e transformadas de Fourier, manuseio da amostra, o espectro de ^1H -RMN, deslocamento químico de prótons ligados a carbono, fatores que afetam o deslocamento químico, acoplamento spin-spin, dupla ressonância (desacoplamento), deslocamento químico de prótons ligados a heteroátomos, equivalência química e magnética, exemplos, exercícios e prática em laboratório.

II. Espectroscopia de ^{13}C -RMN:
Diferenças fundamentais entre ^1H -RMN e ^{13}C -RMN: Vantagens e desvantagens, deslocamento químico, acoplamento spin-spin, efeito nuclear de overhauser, aplicações de RMN de carbono-13, exemplos, exercícios. RMN de correlação espectroscópica homonuclear bidimensional (2D) de hidrogênio e hidrogênio (^1H - ^1H COSY) e de correlação heteronuclear (^1H - ^{13}C HETCOR).
Operação do Aparelho de RMN 400 MHz Advance Bruker: Registro de espectro de rotina, integração, expansão de espectros, uso do Lock e shimming.

III - Espectrometria no Infravermelho e Raman:
Teoria básica, instrumentação, procedimento experimental da espectroscopia com Transformada de Fourier (FT-IR). Frequências vibracionais características dos grupos funcionais, exemplos, exercícios e prática em laboratório com o espectrofotômetro FT-IR-ATR (Perkin-Elmer). Discussão de artigos sobre o uso da Espectroscopia FT-IR para matérias de interesse da tese de doutorado ou dissertação de mestrado.

Teoria básica da espectroscopia de espalhamento RAMAN. Princípio e aplicações da espectroscopia RAMAN e Surface Enhancement Raman Spectroscopy (SERS). Atividades práticas para aquisição de um espectro Raman e avaliação dos resultados experimentais. Procedimento para calibração do Microscópio confocal Raman (modelo Xplora-Horiba) e ajuste dos parâmetros de aquisição. Discussão de artigos sobre o uso da Espectroscopia Raman para matérias de interesse da tese de doutorado ou dissertação de mestrado.

AVALIAÇÃO

Avaliação através de provas escritas e seminário.

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

Bibliografia Básica - 1:
PAVIA, D.L.; LAMPMAN, G.M.; KRIZ, G.S.; VYVYAN, J.R. Introdução à Espectroscopia. Cengage Learning 2010, 4^oEd.

Bibliografia Básica - 2:
SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F.X.; KIEMLE, D. J. Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos. 7 ed. Rio de Janeiro; LTC – Livros Técnicos Científicos Editos S.A, 2006.

Bibliografia Básica - 3:

Dudley H. Williams e Ian Fleming, Spectroscopic Methods in Organic Chemistry, McGraw-Hill Book Company, London, 1989.

P. Atkins J. de Paula, Quanta, Matéria e Mudança. Uma abordagem molecular para a Físico-Química.

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTAR**

1. Infrared And Raman Spectroscopy Imaging, Edited by Reiner Salzer and Heinz W. Siesler, Wiley- VCH, 2008.
2. Infrared and Raman Spectroscopy, Method and Applications, edited by Bernhard Scharader, VHC, 1995
3. R. J. Abraham, J. Fisher e P. Loftus, Introduction to NMR Spectroscopy, John Wiley & Sons, 1991