

Teoria e Interpretação de Espectros

Créditos: 04

Carga Horária: 60 horas

Ementa: Teoria e caracterização de substâncias orgânicas usando métodos espectroscópicos de Ultra-Violeta / Visível(UV), Infravermelho(IV), Ressonância Magnética Nuclear(RMN ^1H e ^{13}C) e Espectrometria de Massa). Identificação de compostos orgânicos usando os métodos espectroscópicos de análise combinados.

Programa:

1. Absorção no ultravioleta e visível

- A natureza das excitações eletrônicas;
- Princípios da espectroscopia de absorção;
- Lei de Beer-Lambert;
- Absortividade molar;
- Coeficiente de absorção molar;
- Cromóforos;
- Efeito de conjugação;
- Orbitais HOMO e LUMO;
- Transições proibidas.
- Aplicações: efeitos da radiação UV sobre a pele, carcinomas de pele, efeitos dos raios-UV sobre os olhos; compostos coloridos, luz emitida, refletida, e transmitida, complementaridade de cores; interpretação de espectros no Visível e no UV.

2. Absorção no infravermelho:

- Processo de absorção no IV;
- O espectrômetro de IV;
- Modos normais de vibração, análise das deformações envolvendo diferentes ligações e grupos químicos (ligações simples, duplas, triplas, aromáticos; alcanos, alcenos, alcinos, ácidos, amidas, ésteres, aldeídos, álcoois, éteres, cetonas, aminas, nitro);
- Tabelas de correlação;
- Análise de espectros.

3. Ressonância Magnética Nuclear (RMN):

- Estados de spin nucleares;
- Momentos magnéticos nucleares;
- Mecanismo de absorção por ressonância;
- Blindagem e deslocamento químico;
- O espectrômetro de RMN, a vizinhança química e o deslocamento químico, características da RMN ^1H e ^{13}C , triângulo de Pascal e constante de acoplamento, tabelas de correlação e interpretação de espectros ^1H e ^{13}C , processos de relaxamento, tempos de relaxamento T1 e T2.

4. Espectroscopia de Massa:

- O espectrômetro de massa;
- O espectro de massa: cátion-radical, pico base, pico molecular, picos isotópicos, intensidade relativa;
- Mecanismos de fragmentação de moléculas simples contendo grupos químicos de base (alcanos, alcenos, alcinos,

hidrocarbonetos aromáticos, álcoois e fenóis, éteres, aldeídos, cetonas, ésteres, ácidos, aminas), compostos com halogênios.

5. Interpretação de espectros usando os métodos de UV / Visível, IV, RMN 1H, RMN 13C e Espectrometria de Massa.

Referências Bibliográficas:

- Pavia D., Lamgman G. M. e Kriz Jr. G. S., **Introduction to Spectroscopy**, 3ª ed., Brooks/Cole-Thomson Learning, New York, 2001.
- Silverstein R.M. e Webster F.X., **Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos**, 6ª ed., LTC Editora, Rio de Janeiro, 2000.
- Hollas J. M. e Jeanne L., **Modern spectroscopy**, 4ª ed., John Wiley & Sons, New York, 2004.
- Jeanne Mchale L., **Molecular Spectroscopy**, Prentice Hall International Inc., New Jersey, 1999.
- Graybeal J. D., **Molecular Spectroscopy**, McGraw-Hill Book Company, New York, 1988.
- Herzberg G., **Molecular Spectra and Molecular Structure**; I, II and III, Krieger Publishing Company, Malabar, Florida, 1989
- RMN: Hore P. J., **Nuclear Magnetic Resonance**, Oxford Univ. Press, 1995.
- UV/VIS: Christian G. D., O'Reilly J. E., **Instrumental Analysis**, 2ª ed., Allyn & Bacon, Boston, 1986; Skoog D. A. e Leary J. J., **Principles of Instrumental Analysis**, 4ª ed., Saunders College Publishers, Philadelphia, 1992.