

## Programa Analítico de Disciplina

### QUI 633 - MÉTODOS FÍSICOS DE IDENTIFICAÇÃO DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

Departamento de Química - Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Catálogo: 2025

Número de créditos: 4

Carga horária semestral: 60h

Carga horária semanal teórica: 4h

Carga horária semanal prática: 0h

Semestres: II

#### Ementa

Espectroscopia na região do ultravioleta e do visível (UV-VIS).

Espectroscopia na região do infravermelho

Espectrometria de massas (EM).

Ressonância magnética nuclear (RMN).

Ressonância magnética nuclear (RMN).

#### Conteúdo

Unidade	T	P	To
<b>1. Espectroscopia na região do ultravioleta e do visível (UV-VIS).</b> 1. Introdução. Teoria da espectroscopia eletrônica e leis de absorção de radiação eletromagnética.  Instrumentação, preparo de soluções para análises espectroscópicas.  Efeito dos solventes sobre as absorções de radiação eletromagnética.  Regras de Woodward para polienos, poliinos, compostos carbonílicos $\alpha,\beta$ -insaturados, compostos benzênicos e sistemas heterocíclicos.  Influências de efeitos estereoelétrônicos sobre as adsorções dos compostos orgânicos.	4h	0h	4h
<b>2. Espectroscopia na região do infravermelho</b> 1. Vibrações moleculares. Fatores que influenciam as frequências vibracionais.  Instrumentação: fontes de infravermelho, monocromadores, detectores.  Técnicas de preparo de amostras sólidas, líquidas e gasosas.  Absorções características de alcanos, alquenos, alquinos, compostos	8h	0h	8h

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: XRER.M58T.LZ44

<p>aromáticos, aldeídos, cetonas, ácidos carboxílicos e derivados, nitrilas, aminas, álcoois, éteres, fenóis, compostos halogenados e sulfurados.</p>			
<p><b>3. Espectrometria de massas (EM).</b> 1. Princípios básicos da espectrometria de massas. Instrumentação e preparo de amostras.</p> <p>Íon molecular.</p> <p>Abundância isotópica.</p> <p>Determinação da composição elementar de um composto a partir da massa exata de íon molecular e dos picos M+1 e M+2.</p> <p>Processos de fragmentação; fatores que influenciam nas fragmentações.</p> <p>Principais fragmentações de: alcanos, alquenos, alquinos, hidrocarbonetos aromáticos, haletos de alquila e arila, álcoois, fenóis, éteres, aldeídos, cetonas, ácidos carboxílicos e derivados, compostos sulfurados, nitrila.</p> <p>Técnicas de ionização química e bombardeamento com átomos rápidos (FAB)</p> <p>Cromatografia em fase gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM) e cromatografia líquida de alto desempenho acoplada à espectrometria de massas (HPLC – EM).</p>	12h	0h	12h
<p><b>4. Ressonância magnética nuclear (RMN).</b> 1. Princípios básicos de ressonância magnética nuclear. Deslocamento químico, interação Spin-Spin.</p> <p>Acoplamento vicinal, geminal e à longa distância.</p> <p>Análise de espectros de RMN de hidrogênio e de carbono 13.</p>	16h	0h	16h
<p><b>5. Ressonância magnética nuclear (RMN).</b> 1. Técnicas de dupla ressonância e mecanismos de relaxação; desacoplamento homonuclear e heteronuclear; efeito nuclear Overhauser (NOE). Experimentos de RMN em duas dimensões: aquisição de dados; representação gráfica dos espectros; correlação homonuclear de Spin (H-H COSY – 90 e COSY- 45); Correlação <sup>13</sup>C-<sup>13</sup>C (técnica INADEQUATE).</p> <p>Espectroscopia heteronuclear J-resolvida. Experimentos de correlação heteronuclear (HETCOR, HMQC, HMBC)</p> <p>Ressonância Magnética Nuclear de <sup>31</sup>P, <sup>29</sup>Si, <sup>19</sup>F, <sup>15</sup>N.</p> <p>Elucidação da estrutura de compostos orgânicos pela análise dos dados de UV-VIS, IV, EM e RMN: Exemplos de aplicação dos métodos estudados na identificação de corantes naturais, componentes químicos de alimentos e de madeira.</p>	20h	0h	20h

	Total	60h	0h	60h
--	-------	-----	----	-----

Teórica (T); Prática (P); Total (To);

## QUI 633 - MÉTODOS FÍSICOS DE IDENTIFICAÇÃO DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

### 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.	10
SOLOMONS, T.W.G.; FRYHLE, C.B. Química orgânica. 9a ed. trad. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2009. 1048p. 2v.	20
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	10
Espectroscopia no Infravermelho na caracterização de compostos orgânicos, Barbosa, Luiz C. de A., Editora UFV, 2011, 1ª edição, 189 p.	10

### Bibliografias complementares

Descrição	Exemplares
McLAFERTY, F.W.; FRANTISEK, T. Interpretation at mass spectra. 1ª.ed. Mill Valley: University Science Books, 1993. 371p	2
WILLIAMS, D.H.; FLEMING, I. Spectroscopic methods in organic chemistry. 6ª.ed. Maidenhead: McGraw-Hill, 1997. 278p.	2
BREITMAIER, E. Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. 1 ed. Bath: John Wiley, 1993. 265 p.	2
COLEGATE, S.M., MOLYNEUX, R.J. Bioactive Natural Products: Detection, Isolation and Structural Determination. Boca Raton: CRC Press, 1993. 528 p.	2
DUDDECK, H.; DIETRICH, W. Structure Elucidation by Modern NMR. 1 ed. Darmstadt: Springer-Verlag, 1989. 238 p.	2
KEMP, W. Organic Spectroscopy. 3. ed. Hong Kong: McMillan, 1991. 393 p.5. LAMBERT, J.B., SHURVELL,	2
H.F., LIGHTNER, D.A., COOKS, R.G. Organic Structural Spetroscopy. New Jersey, USA. Prentice Hall, 1998. 568 p.	2

# Syllabus

## QUI 633 - PHYSICAL METHODS OF IDENTIFICATION OF ORGANIC COMPOUNDS

Departamento de Química - Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Catalog: 2025

Number of credits: 4

Total hours: 60h

Weekly workload - Theoretical: 4h

Weekly workload - Practical: 0h

Period: II

### Content

Spectroscopy in the ultraviolet and visible region (UV-VIS).

Spectroscopy in the infrared region

Mass spectrometry (MS).

Nuclear magnetic resonance (NMR).

Nuclear magnetic resonance (NMR).

### Course program

Unit	T	P	To
<p><b>1. Spectroscopy in the ultraviolet and visible region (UV-VIS).</b></p> <p>1. Introduction.</p> <p>Electron spectroscopy theory and radiation absorption laws</p> <p>electromagnetic.</p> <p>Instrumentation, preparation of solutions for spectroscopic analysis.</p> <p>Effect of solvents on electromagnetic radiation absorption.</p> <p>Woodward rules for polyenes, polyines, <math>\alpha,\beta</math>-unsaturated carbonyl compounds, benzene compounds and heterocyclic systems.</p> <p>Influences of stereoelectronic effects on adsorption of organic compounds.</p>	4h	0h	4h
<p><b>2. Spectroscopy in the infrared region</b></p> <p>1. Molecular vibrations. Factors that influence vibrational frequencies.</p> <p>Instrumentation: infrared sources, monochromators, detectors.</p> <p>Techniques for preparing solid, liquid and gaseous samples.</p> <p>Characteristic absorptions of alkanes, alkenes, alkynes, aromatic compounds, aldehydes, ketones, carboxylic acids and derivatives, nitriles, amines, alcohols, ethers, phenols, halogenated and sulfur compounds.</p>	8h	0h	8h

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: XRER.M58T.LZ44

<p><b>3. Mass spectrometry (MS).</b></p> <p>1. Basic principles of mass spectrometry. Instrumentation and sample preparation.</p> <p>Molecular ion.</p> <p>Isotopic abundance.</p> <p>Determination of the elemental composition of a compound from the exact molecular ion mass and the M+1 and M+2 peaks.</p> <p>Fragmentation processes; factors that influence fragmentation.</p> <p>Main fragmentations of: alkanes, alkenes, alkynes, aromatic hydrocarbons, alkyl and aryl halides, alcohols, phenols, ethers, aldehydes, ketones, carboxylic acids and derivatives, sulfur compounds, nitrile.</p> <p>Chemical ionization and fast atom bombardment (FAB) techniques</p> <p>Gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS) and high performance liquid chromatography coupled to mass spectrometry (HPLC – MS).</p>	12h	0h	12h
<p><b>4. Nuclear magnetic resonance (NMR).</b></p> <p>1. Basic principles of nuclear magnetic resonance. Chemical shift, Spin-Spin interaction.</p> <p>Vicinal, geminal and long-distance coupling.</p> <p>Analysis of hydrogen and carbon 13 NMR spectra.</p>	16h	0h	16h
<p><b>5. Nuclear magnetic resonance (NMR).</b></p> <p>1. Double resonance techniques and relaxation mechanisms; homonuclear and heteronuclear uncoupling; Nuclear Overhauser effect (NOE). Two-dimensional NMR experiments: data acquisition; graphical representation of spectra; Spin homonuclear correlation (H-H COZY – 90 and COZY- 45); <sup>13</sup>C-<sup>13</sup>C correlation (INADEQUATE technique).</p> <p>J-resolved heteronuclear spectroscopy. experiments of heteronuclear correlation (HETCOR, HMQC, HMBC)</p> <p>Nuclear Magnetic Resonance of <sup>31</sup>P, <sup>29</sup>Si, <sup>19</sup>F, <sup>15</sup>N.</p> <p>Elucidation of the structure of organic compounds by analyzing UV-VIS, IR, EM and NMR data: Examples of application of the methods studied in the identification of natural dyes, chemical components of food and wood.</p>	20h	0h	20h
<b>Total</b>	<b>60h</b>	<b>0h</b>	<b>60h</b>

Theoretical (T); Practical (P); Total (To);

## QUI 633 - PHYSICAL METHODS OF IDENTIFICATION OF ORGANIC COMPOUNDS

### Fundamental references

Description	Copies
SILVERSTEIN, R.M. WEBSTER, F.X. Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos. 7a ed. trad. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2006. 508p.	10
SOLOMONS, T.W.G.; FRYHLE, C.B. Química orgânica. 9a ed. trad. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2009. 1048p. 2v.	20
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	10
Espectroscopia no Infravermelho na caracterização de compostos orgânicos, Barbosa, Luiz C. de A., Editora UFV, 2011, 1ª edição, 189 p.	10

### Complementary references

Description	Copies
McLAFERTY, F.W.; FRANTISEK, T. Interpretation at mass spectra. 1ª.ed. Mill Valley: University Science Books, 1993. 371p	2
WILLIAMS, D.H.; FLEMING, I. Spectroscopic methods in organic chemistry. 6ª.ed. Maidenhead: McGraw-Hill, 1997. 278p.	2
BREITMAIER, E. Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. 1 ed. Bath: John Wiley, 1993. 265 p.	2
COLEGATE, S.M., MOLYNEUX, R.J. Bioactive Natural Products: Detection, Isolation and Structural Determination. Boca Raton: CRC Press, 1993. 528 p.	2
DUDDECK, H.; DIETRICH, W. Structure Elucidation by Modern NMR. 1 ed. Darmstadt: Springer-Verlag, 1989. 238 p.	2
KEMP, W. Organic Spectroscopy. 3. ed. Hong Kong: McMillan, 1991. 393 p.5. LAMBERT, J.B., SHURVELL,	2
H.F., LIGHTNER, D.A., COOKS, R.G. Organic Structural Spetroscopy. New Jersey, USA. Prentice Hall, 1998. 568 p.	2