

## Esquema geral para elucidação de substâncias orgânicas usando métodos espectroscópico e espectrométrico.

Carlos Magno R. Ribeiro (PQ) e Nelson Angelo de Souza\* (PQ)

[ggoneas@vm.uff.br](mailto:ggoneas@vm.uff.br)

Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica. Campus Valonguinho, CEP 24020-150, Centro, Niterói, RJ, Brasil.

Palavras Chave: educação, métodos físicos de análise, fluxograma.

### Introdução

As espectroscopias de IV, RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ , e a EM são ferramentas atuais usadas para a elucidação estrutural de substâncias orgânicas. Devido a este fato, os cursos de graduação têm em sua grade curricular disciplinas que envolvem o ensino deste tema. Diversos livros didáticos e manuais apresentam uma série de tabelas de dados que visam facilitar a análise dos espectros das substâncias.<sup>1a</sup> Outros textos apresentam fluxogramas<sup>1b</sup> que possam conduzir na elucidação estrutural através da interpretação de espectros de IV. Mais recentemente, um esquema para a interpretação de espectros de substâncias orgânicas também no IV foi desenvolvido.<sup>2</sup> Um fator que se deve mencionar é que os esquemas normalmente utilizados para o ensino de elucidação estrutural envolvem apenas o uso do IV, o qual não é um método completo. Por outro lado, outro fator importante no ensino do referido tema está na aplicação articulada destas metodologias de elucidação estrutural. Devido ao nosso interesse no ensino de química<sup>3</sup>, resolvemos contribuir com um método que facilite a tarefa de elucidação estrutural de substâncias orgânicas tendo como ferramenta inicial a interpretação de espectros de IV, ao mesmo tempo em que se aplica a interpretação de espectros de RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ , e de massas para confirmar e/ou auxiliar na elucidação estrutural. Neste sentido, foram elaborados um fluxograma e uma tabela resumida para conduzir o raciocínio do aluno na elucidação estrutural de substâncias orgânicas.

### Resultados e Discussão

O fluxograma e a tabela desenvolvidos vêm sendo utilizados na disciplina Métodos Físicos de Análise, oferecida pelo Departamento de Química Orgânica (GQO) da UFF. Esta disciplina integra a grade de disciplinas obrigatórias para os Cursos de Química Industrial e Bacharelado, assim como a grade de optativas para os cursos de Farmácia Industrial e Engenharia Química. Duas possibilidades podem ser colocadas ao estudante para chegar à estrutura da substância a ser analisada: a) dispor apenas dos espectros de IV, RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  além de EM, sem

30ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

o conhecimento da fórmula molecular. Neste caso inicialmente o aluno deve calcular a fórmula molecular com o auxílio do IV e EM. A seguir, observar as bandas proeminentes no espectro de IV, e correlacionar com o fluxograma, que por sua vez reporta à tabela que contempla os outros métodos, levando à determinação estrutural da molécula. b) envolver o conhecimento prévio da fórmula molecular da substância em questão. Neste caso, o aluno deve utilizar o IV e correlacionar com o fluxograma, que como anteriormente vai reportá-lo à tabela. Visando a aplicação dessa metodologia de ensino, em sala de aula, foram escolhidos aleatoriamente grupos de alunos, onde se determinava que fosse elucidada estruturas de substâncias orgânicas usando-se IV, RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ , e EM. A alguns grupos era permitido o uso do fluxograma e da tabela, já para outros grupos o uso de livros textos. De um modo geral, verificamos que os grupos que utilizavam o fluxograma e a tabela, tiveram um desempenho facilitado, relativo ao tempo gasto para a determinação estrutural, bem como o grau de acerto.

### Conclusões

Neste trabalho foi desenvolvido um fluxograma e uma tabela resumida para conduzir o raciocínio do aluno na elucidação estrutural de substâncias orgânicas, que demonstrou que as metodologias espectrométricas para a elucidação estrutural devem e podem ser aplicadas de uma maneira articulada no ensino deste tema.

### Agradecimentos

CEG – GQO - UFF – Programa de Pós-Graduação em Química Orgânica da UFF.

<sup>1</sup> a) Silverstein, R. M.; Webster, F. X.; *Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos*, 6ª ed., LTC: Rio de Janeiro, 2000. b) Wilcox Jr., C. F.; *Experimental Organic Chemistry – A small-scale approach*, 1ª ed., McMillan Publishing Company: New York, 1997, pág.103-202 e 486

<sup>3</sup> Fascio, M.; *Quím. Nova*, 2004, 27, 670 .

<sup>4</sup> por exemplo: a) Borges, M. N.; Ribeiro, C. M. R.; Souza, N. A.; *Educ.*

*Química* 2005, 16, 586. b) Ribeiro, C. M. R.; Souza, N. A.; *Quím. Nova*, no prelo.