



Elucidação Estrutural de Compostos Orgânicos

Código: PQU207

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 75

Créditos: 5

Responsáveis: Prof. Sérgio Antônio Lemos de Moraes
Prof. Marcos Pivatto

Objetivos: A disciplina ELUCIDAÇÃO ESTRUTURAL DE COMPOSTOS ORGÂNICOS tem como objetivo capacitar os alunos na utilização das técnicas espectrométricas e espectroscópicas para a identificação e caracterização estrutural de compostos orgânicos.

Ementa:

APRESENTAÇÃO DO CURSO, CONTEXTO E EXPECTATIVAS.

ESPECTROMETRIA DE MASSAS

Aspectos gerais, espectro de massas, determinação da massa molar, regras de fragmentação, alguns padrões de fragmentação, utilização do espectro de massas na determinação de estrutura de compostos orgânicos.

ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO

Aspectos gerais, modos de vibrações moleculares, frequências de absorções características de grupamentos em moléculas orgânicas, utilização do espectro no IV na determinação de estrutura de compostos orgânicos.

ESPECTROSCOPIA NO ULTRAVIOLETA/VISÍVEL

Aspectos gerais, tipos de transições eletrônicas, sistemas conjugados, cromóforos, aplicação de regras empíricas na determinação do comprimento de onda de absorções em sistemas conjugados, utilização do espectro de IV na determinação de estrutura de compostos orgânicos.

RESSONÂNCIA MAG. NUCLEAR DE HIDROGÊNIO (RMN de ^1H)

Aspectos gerais, deslocamentos químicos, integração dos sinais, acoplamento spin-spin, constante de acoplamento, utilização do espectro de RMN de ^1H na determinação de estrutura de compostos orgânicos.

RESSONÂNCIA MAG. NUCLEAR DE CARBONO 13 (RMN de ^{13}C)

Aspectos gerais; deslocamentos químicos; espectros de RMN de ^{13}C totalmente acoplado e desacoplado; DEPT; utilização do espectro de RMN de ^{13}C na determinação de estrutura de compostos orgânicos. Introdução à RMN de sólido

AULAS DE EXERCÍCIOS ABRANGENDO MASSAS, IV, UV, RMN de ^1H e RMN de ^{13}C .

RMN BIDIMENSIONAL (CORRELAÇÕES).

Introdução; COSY; DQF-COSY; NOESY; HETCOR; HMQC; HSQC; HMBC; INADEQUATE; TOCSY; RMN 3D.



RMN NO ESTADO SÓLIDO

Introdução; ângulo mágico; exemplos.

IMAGEM POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA

Geração do espectro de RMN; fatores que influenciam o espectro; material contendo água; mapeando a região de frequência compilação de um objeto, a imagem 3D; Imagem por RMN do cérebro.

AULAS DE EXERCÍCIOS ENVOLVENDO TODAS AS TÉCNICAS

Bibliografia:

1. Silverstein, R. M.; Webster, F. X.; Kiemle, D. J. Identificação espectrométrica de compostos orgânicos. 7^a edição, Rio de Janeiro, LTC, 2007.
2. Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz, G. S.; Vyvyan, J. R. Introduction to Spectroscopy, 4th edition; Brooks/Cole: Belmont, CA, 2009.
3. Barbosa, L. C. de A. Espectroscopia no Infravermelho na Caracterização de Compostos Orgânicos. 1^a Edição, Editora: UFV - 2007.
4. Friebolin, H. Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy. 2^a ed. VCH Publishers. New York. 1993.
5. Derome, A. E. Modern NMR Techniques for Chemistry Research. Pergamon Press, Oxford, UK, 1987.
6. Lambert, J. B.; Rittner, R. Recent Advances in Organic NMR Spectroscopy, Eds.; Norell: Landisville, NJ, 1987