

SEI/UFU - 2829160 - Ficha de Componente Curricular



Ficha de Componente Curricular

CÓDIGO:		COMPONENTE CURRICULAR:	
PQ114		Elucidação Estrutural de Compostos Orgânicos	
UNIDADE ACADÊMICA OFERTANTE:		SIGLA:	
Programa de Pós-Graduação em Química		PPGQUI	
CH TOTAL TEÓRICA:	CH TOTAL PRÁTICA:	CH TOTAL:	
60 horas	0	60 horas	
CATEGORIA:	CURSO(S):		
Optativa	Mestrado e Doutorado		

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

Espectrometria de Massas; Espectroscopia no Infravermelho (IV); Espectroscopia no Ultravioleta e Visível (UV/Vis); Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN); Espectroscopia de RMN em duas

dimensões.

PROGRAMA

1. ESPECTROMETRIA DE MASSAS: Aspectos gerais, inserção da amostra, métodos de ionização, analisadores e registro dos espectros, espectro de massas em alta resolução, determinação da massa exata e massa molar, estudos das fragmentações nos diferentes modos de ionização, padrões de fragmentação, utilização do espectro de massas na elucidação estrutural de compostos orgânicos.

2. ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO: Aspectos gerais, instrumentação, modos de vibrações moleculares, frequências de absorções características de grupos funcionais em moléculas orgânicas, utilização do espectro na região do IV para a elucidação estrutural de compostos orgânicos.

3. ESPECTROSCOPIA NO ULTRAVIOLETA/VISÍVEL: Aspectos gerais, instrumentação, tipos de transições eletrônicas, sistemas conjugados, cromóforos, aplicação de regras empíricas na determinação o comprimento de onda de absorções em sistemas conjugados, utilização do espectro de UV/VIS na elucidação estrutural de compostos orgânicos.

4. ESPECTROSCOPIA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGÊNIO (RMN de ^1H): Aspectos gerais, Instrumentação, 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. Introdução a Imagens por Ressonância Magnética Nuclear (IRMN).

5. ESPECTROSCOPIA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA 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.

6. ESPECTROSCOPIA DE RMN BIDIMENSIONAL

(CORRELAÇÕES): Introdução, teoria, a espectrometria de correlação, principais técnicas de correlações: COSY; DQF-COSY; NOESY; HETCOR; HMQC; HSQC; HMBC; INADEQUATE; TOCSY, introdução a RMN 3D.

7. ELUCIDAÇÃO DE ESTRUTURAS ORGÂNICAS APLICANDO O CONJUNTO DE TODAS AS TÉCNICAS ESTUDADAS.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. BARBOSA, L. C. de A. Espectroscopia no Infravermelho na Caracterização de Compostos Orgânicos. 1a. ed. Viçosa: UFV, 2007.
2. BERGER, S; SICKER, D. Classics in spectroscopy isolation and structure elucidation of natural products. Wiley-VCH, 2009.
3. CONSTANTINO, M. G. Química Orgânica. Rio de Janeiro: LTC, v. 3, 2012.
4. PAVIA, D.L.; LAMPMAN, G.M.; KRIZ, G.S. Introdução à espectroscopia. 4a. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2010.
5. SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. Identificação espectrométrica de compostos orgânicos. 7a. ed. Rio de Janeiro, LTC, 2007.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

1. CLARIDGE. T. D. W. High-resolution NMR techniques in organic chemistry. 2a. ed. Elsevier, 2008.
2. FRIEBOLIN, H. Basic one- and two-dimensional NMR spectroscopy. 2a. ed. Wiley, 1993.

3. HEINZ-HELMUT, P. UV-VIS Spectroscopy and its applications. Springer, 1992.
4. HOFFMANN, E.; STROOBANT, V. Mass spectrometry: principles and applications. 3a. ed. John Wiley & Sons, 2007.
5. WATSON, T.; SPARKMAN, O. D. Introduction to mass spectrometry: instrumentation, applications and strategies for data interpretation. 4a. ed. John Wiley & Sons, 2007.

aprovação

Rodrigo Alejandro Abarza Muñoz Coordenador do PPGQUI	Fábio Augusto do Amaral Diretor do IQUFU
---	---

	Documento assinado eletronicamente por Rodrigo Alejandro Abarza Munoz, Coordenador(a) , em 02/07/2021, às 15:30, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015 .
---	---

	A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0 , informando o código verificador 2829160 e o código CRC D4FE93D7 .
---	--

Referência: Processo nº 23117.036831/2021-41	SEI nº 2829160
--	----------------