



## ELUCIDAÇÃO ESTRUTURAL DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

**Código:**

**Área de Concentração:** Química

**Carga Horária:** 60

**Créditos:** 4

**Responsável:** Sérgio Antônio Lemos de Moraes

### 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

#### ANÁLISE PRELIMINAR

Histórico (primeiros equipamentos, princípio de funcionamento, interpretação dos dados).

#### 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.

ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO Aspectos gerais, 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

ESPECTROSCOPIA NO ULTRAVIOLETA/VISÍVEL Aspectos gerais, 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 IUV na elucidação estrutural de compostos orgânicos.

#### RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE (RMN de $^1\text{H}$ e de $^{13}\text{C}$ )

Aspectos gerais, deslocamentos químicos, integração dos sinais, acoplamento spin-spin, constante de acoplamento, utilização do espectro de RMN de  $^1\text{H}$  na elucidação estrutural de compostos orgânicos. Deslocamentos químicos, espectros de RMN de  $^{13}\text{C}$  totalmente acoplado e desacoplado, DEPT, utilização do espectro de RMN de  $^{13}\text{C}$  na elucidação estrutural de compostos orgânicos.



AULAS DE EXERCÍCIOS ABRANGENDO EM, IV, UV, RMN de  $^1\text{H}$  e RMN de  $^{13}\text{C}$

RMN BIDIMENSIONAL (CORRELAÇÕES).

Introdução; COSY, HMQC, HSQC, HETCOR, HMBC, NOESY, TOCSY e INADEQUATE

AULAS DE EXERCÍCIOS ENVOLVENDO TODAS AS TÉCNICAS

APRESENTAÇÕES DE SEMINÁRIOS

**Bibliografia:**

1. SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. Identificação espectrométrica de compostos orgânicos. Rio de Janeiro, LTC, 7 ed., 2007.
2. PAVIA, D.L.; LAMPMAN, G.M.; KRIZ, G.S. *Introduction to spectroscopy* 3. Ed Philadelphia. Harcourt Brace College Publishers, 2001.
3. Barbosa, L. C. de A. *Espectroscopia no Infravermelho na Caracterização de Compostos Orgânicos*. Editora: UFV - 1ª Ed, 2007.
4. CONSTANTINO, M. G. Química Orgânica. v. 3. Rio de Janeiro: LTC, 2012.
5. JACOBSEN, NEIL E. NMR spectroscopy explained: simplified theory, applications and examples for organic chemistry and structural biology. Hoboken: Wiley - Interscience, 2007.