



ELUCIDAÇÃO ESTRUTURAL DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

Código: PQU207

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 75

Créditos: 5

Responsável: Prof. Dr. Marcos Pivatto

Objetivos: A disciplina ELUCIDAÇÃO ESTRUTURAL DE COMPOSTOS ORGÂNICOS tem como objetivo proporcionar discussões a respeito da utilização das técnicas espectrométricas e espectroscópicas para a identificação e elucidação estrutural de compostos orgânicos.

Ementa:

APRESENTAÇÃO DO CURSO, CONTEXTO E EXPECTATIVAS

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 do comprimento de onda de absorções em sistemas conjugados, utilização do espectro de IV na elucidação estrutural de compostos orgânicos.

RESSONÂNCIA MAGNÉTICA 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 elucidação estrutural de compostos orgânicos.

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 elucidação estrutural 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; HMBC; HSQC; INADEQUATE; TOCSY; RMN 3D.

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

APRESENTAÇÕES DE SEMINÁRIOS (DOS ALUNOS) RELACIONADOS AOS CONTEÚDOS TEÓRICOS

REFERÊNCIAS

1. SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. **Identificação espectrométrica de compostos orgânicos**. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007.
2. PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. **Introduction to spectroscopy**, 4. ed. Belmont: Brooks/Cole, 2009.
3. CONSTANTINO, M. G. **Química orgânica**. v. 3. Rio de Janeiro: LTC, 2012.
4. BARBOSA, L. C. A. **Espectroscopia no infravermelho na caracterização de compostos orgânicos**. Editora: UFV, 2007.
5. FRIEBOLIN, H. **Basic one- and two-dimensional NMR spectroscopy**. 2. ed. New York: VCH Publishers, 1993.
6. DEROME, A. E. **Modern NMR techniques for chemistry research**. Oxford: Pergamon Press, 1987.
7. LAMBERT, J. B.; RITTNER, R. **Recent advances in organic NMR spectroscopy**, Landisville: Norell, 1987.